

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики
им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук»

На правах рукописи

Смолина Екатерина Олеговна

**Структура и динамика локализованных состояний в линейных и нелинейных
топологических фотонных решетках**

1.3.4 – Радиофизика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук,
Смирнова Дарья Александровна

Нижний Новгород – 2025

Содержание

Общая характеристика работы	5
Глава 1 Системы и модели топологической фотоники	12
1.1 Топологическая фотоника как современный раздел физики	12
1.2 Основные экспериментальные платформы в топологической фотонике	16
1.2.1 Фотонные решетки на основе волноводов	16
1.2.2 Топологические фотонные метаповерхности	19
1.3 Переход от уравнений Максвелла к эффективным моделям	20
1.4 Примеры модельных Гамильтонианов и топологические инварианты	21
1.4.1 Одномерные модели (модель SSH)	21
1.4.2 Двумерные модели	22
Глава 2 Краевые импульсы в нелинейной модели Дирака	25
2.1 Физическая платформа	25
2.2 Переход к Дираковской модели в линейном случае	26
2.3 Нелинейные краевые волны	28
2.4 Нелинейная динамика краевых импульсов: уравнение для огибающей	31
2.4.1 Эволюционное уравнение для интегральных характеристик	31
2.4.2 Вывод уравнения нелинейной простой волны	32
2.4.3 Асимптотический подход	33
2.5 Эффект градиентной катастрофы	35
2.5.1 Обрушение волнового фронта в рамках Дираковской модели	35
2.5.2 Квазисолитонные краевые импульсы	36
2.5.3 Распространение света в реалистичной фотонной решетке	37
2.6 Модуляционная неустойчивость нелинейных краевых волн	42
2.6.1 Модуляционная неустойчивость в модифицированном НУШ	42
2.6.2 Модуляционная неустойчивость в нелинейных Дираковских уравнениях	43
2.6.3 Модуляционная неустойчивость в дискретных решеточных уравнениях	45
2.6.4 Модуляционная неустойчивость в параксиальных уравнениях	47
2.7 Получение уравнений для огибающих волновых пакетов с помощью методов машинного обучения	49
2.7.1 Подход к восстановлению УЧП на основе анализа данных	49
2.7.2 Описание алгоритма	50
2.7.3 Подготовка данных	51
2.7.4 Линейный случай	54
2.7.5 Нелинейный случай	57
2.8 Выводы по главе	61

Глава 3	Методы определения топологических свойств фотонных систем	62
3.1	Модуляционная неустойчивость в нелинейной квадратной киральной решетке	62
3.1.1	Модель: нелинейная двумерная квадратная киральная решетка	62
3.1.2	Свойства нелинейных Блоховских мод	64
3.1.3	Модуляционная неустойчивость объемных нелинейных мод	67
3.2	Определение топологических фаз Флоке систем	72
3.2.1	Введение: топологические системы Флоке	73
3.2.2	Описание Флоке решетки	74
3.2.3	Топологические характеристики Флоке решетки	77
3.2.4	Свойства нелинейной Флоке системы	79
3.2.5	Модуляционная неустойчивость нелинейных Блоховских волн	80
3.2.6	Определение аномальных фаз Флоке	82
3.3	Применение методов машинного обучения для вычисления топологического инварианта	86
3.3.1	Подготовка данных	86
3.3.2	Методы обучения без учителя	94
3.3.3	Обучение с учителем	96
3.3.4	Сравнение топологической и нетопологической систем	100
3.3.5	Роль беспорядка и перенос обучения	103
3.3.6	Выводы	105
3.4	Выводы по главе	106
Глава 4	Моды топологических дефектов в гибридных метаповерхностях	109
4.1	Структура гибридной топологической метаповерхности	109
4.2	Детали полномасштабного 3D моделирования	110
4.3	Фотонная система	112
4.3.1	Вывод ВНЗ Гамильтониана из метода сильной связи	112
4.3.2	Дираковские базисы	116
4.4	Преобразование базиса в Гамильтониане гибридной системы	120
4.5	Влияние потерь	123
4.6	Локализованные собственные состояния	125
4.6.1	Моды топологического дефекта фотонной метаповерхности	125
4.6.2	Моды топологического дефекта гибридной метаповерхности	128
4.6.3	Топологические характеристики	130
4.6.4	Фотонные краевые состояния	131
4.6.5	Гибридные краевые состояния	133
4.7	Поляризационные свойства	134
4.7.1	Поляризация в ближнем поле	134
4.7.2	Характеристики дальнего поля	135
4.8	Гетерогенные доменные стенки	137
4.8.1	Возбуждение угловых состояний	137

4.9 Выводы по главе	139
Заключение	141
Список публикаций	144
Список литературы	146
A Приложение 1: Свойства димеризованной графеноподобной решетки	160
A.1 Вывод низкоэнергетического эффективного Гамильтониана для димеризованной графеновой решетки	160
A.2 Линейные краевые моды на доменных стенках модели сильной связи	162
B Приложение 2: Основные уравнения фотоники	165
B.1 Стационарное уравнение Максвелла для фотонных кристаллов	165
B.2 Параксиальное уравнение	165
C Приложение 3: Топологические характеристики	167
C.1 Фаза Берри и топологический инвариант	168
C.2 Топологические свойства модели VH	172
C.3 Одномерная модель SSH и её топологические свойства	173
C.4 Топологические свойства SSH решетки	175
D Приложение 4: Некоторые численные методы	176
D.1 Метод операторной экспоненты	176
D.2 Метод распространения лучей	177
D.3 Метод разложения по плоским волнам	177
D.4 Дискретизация по Сасскинду	178

Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертации

С развитием современных технологий фотонные компоненты находят все более широкое применение в различных высокотехнологичных приборах. Интерес к данному разделу физики обусловлен тем, что, в отличие от традиционных электронных систем, фотонные устройства характеризуются высокой пропускной способностью, низким уровнем энергетических потерь и устойчивостью к помехам [1]. Эти свойства делают их незаменимыми в квантовых вычислениях [2], телекоммуникациях [3], биомедицинских приложениях [4] и системах искусственного интеллекта [5]. В частности, оптические элементы служат энергоэффективным, быстродействующим и высокопроизводительным дополнением к повсеместно используемым электронным вычислительным устройствам. Например, компактные фотонно-электронные чипы уже сегодня обеспечивают передачу данных со скоростями около 800 гигабит данных в секунду [6], что на порядки превосходит возможности медных межсоединений [7, 8].

В связи с прикладным потенциалом фотоники возникает ряд актуальных задач, связанных с управлением свойствами электромагнитных волн в фотонных физических системах; в частности, локализацией света. Кроме того, традиционные фотонные устройства сталкиваются с рядом критических проблем, одна из которых – чувствительность к дефектам. Любые неоднородности в структуре вызывают рассеяние света, что нарушает работу систем и приводит к потере данных. Одно из перспективных направлений здесь – исследование локализованных электромагнитных состояний, свойства которых не подвержены мелкомасштабным возмущениям. Такую особенность описывают с применением концепции топологии [9].

После пионерских работ по фотонным топологическим изоляторам в микроволновом диапазоне [10, 11, 12] интерес сместился к субволновым системам для интегральной фотоники. Топологические состояния света, пригодные для интегральных фотонных схем, демонстрируют уникальные свойства: они мало чувствительны к помехам, несовершенствам изготовления систем и рассеянию на дефектах [13, 14], их можно надёжно локализовать в заданных областях фотонной структуры; что особенно важно для развития квантовых технологий нового поколения и миниатюризации оптических схем.

Высокая актуальность проблематики обуславливает большое количество научных разработок, что отражено в растущем количестве публикаций и недавних обзорах [14, 15, 13, 16, 17, 18, 19]. Однако многие работы основаны лишь на результатах, полученных в рамках численного моделирования конкретных систем, что ограничивает понимание физических закономерностей изучаемых явлений. Кроме того, крайне мало исследований, где для анализа больших массивов данных (как полученных при численном моделировании фотонных систем, так и экспериментальных результатов) применяются методы машинного обучения. Настоящее диссертационное исследование направлено на развитие этих отдельных направлений в области топологической фотоники, остающихся недостаточно изученными.

Отдельно отметим, что помимо практических приложений, субволновые топологические фотонные структуры интересны также с точки зрения фундаментальной науки, так как они представляют собой уникальную платформу для изучения взаимодействия света с веществом,

неэрмитовых и нелинейных эффектов [15].

Целью диссертационного исследования являлась разработка теоретического аппарата для описания топологических фотонных систем, включающего аналитический анализ с использованием эффективных нелинейных Дираковских моделей, численное моделирование и применение методов машинного обучения; а также изучение явлений, имеющих место в топологических фотонных системах, с применением разработанного аппарата. Рассмотрены топологические структуры различной конфигурации и функциональности, созданные на основе массивов волноводов и резонансных метаповерхностей, содержащих также включения из двумерных материалов.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Построение эффективных моделей, описывающих топологические решётки, как на основании метода сильной связи, так и в рамках континуального подхода с применением уравнений Дирака.
2. Развитие асимптотических методов для анализа динамики краевых импульсов, распространяющихся вдоль доменных стенок.
3. Аналитическое и численное исследование нелинейных эффектов (модуляционная неустойчивость объёмных и краевых волн, градиентная катастрофа краевых импульсов) в топологических фотонных решётках различной геометрии.
4. Изучение полей связанных состояний топологических дефектов в наноструктурированных метаповерхностях.
5. Разработка нейросети для определения топологического инварианта фотонной системы.
6. Разработка метода вывода приближенных эволюционных уравнений для огибающих краевых импульсов с использованием данных, полученных в рамках полномасштабной модели.

Научная новизна диссертационной работы определяется разработкой разностороннего теоретического подхода к изучению локализованных состояний в топологических фотонных платформах и полученными оригинальными результатами.

Выявлен ряд ранее не описанных свойств, присущих динамике краевых импульсов, каналируемых топологическими доменными стенками, среди которых зависимость групповой скорости волн от интенсивности поля в нелинейном режиме. Это позволяет описать укрупнение профиля краевого импульса по мере распространения, а также устойчивость краевых волн по отношению к длинноволновым возмущениям. Разработан оригинальный алгоритм вывода уравнения распространения краевого импульса вдоль топологической доменной стенки, основанный на методе разреженной регрессии. Данный подход позволяет автоматически восстанавливать динамические уравнения, исходя только из данных численного моделирования или экспериментальных наблюдений.

Впервые предложен и обоснован метод определения топологических фаз посредством анализа инкремента развития модуляционной неустойчивости объёмных мод и нелинейной динамики псевдоспина. Кроме того, впервые изучены возможности классификации топологических фаз фотонных решеток с помощью методов машинного обучения. Реализована

нейросеть, определяющая топологию фотонной решетки на основе только пространственного распределения интенсивности, без необходимости предварительного восстановления фазового профиля.

Впервые развито аналитическое описание свойств локализованного углового состояния в гибридной фотон-фононной системе, представляющей собой кремниевую метаповерхность с Кекуле-структурой, интегрированной с тонким слоем гексагонального нитрида бора. Это описание базируется на решении уравнений Дирака и согласуется как с результатами численного решения уравнений Максвелла методом конечных элементов, так и с экспериментальными данными.

Методы исследования

В рамках диссертации для комплексного теоретического изучения топологических фотонных платформ использованы как аналитические, так и численные подходы. Среди них, например, построение эффективных моделей, описывающих оптические системы, как с помощью метода сильной связи, так и в рамках континуальной модели, основанной на уравнениях Дирака. Этот общий подход позволяет аналитически решить как стационарные, так и эволюционные задачи, в том числе описать нелинейные процессы, среди которых модуляционная неустойчивость и градиентная катастрофа волновых импульсов в оптических решетках. Особенное внимание уделено развитию асимптотических методов для анализа эволюции локализованных волновых пакетов вдоль топологических доменных стенок. Численная верификация также проведена путём полномасштабного моделирования в рамках уравнений Максвелла конкретных реалистичных физических систем. В исследовании симметрии мод топологических решеток с разной геометрией применены общие методы теории групп.

Кроме того, для анализа больших массивов данных и выявления последующих закономерностей в них применены методы искусственного интеллекта. Так, разработана нейросеть, определяющая топологические свойства системы по измерению интенсивности. Кроме того, регрессионные алгоритмы применены в дополнение к реализованному асимптотическому подходу вывода уравнений эволюционной динамики огибающих краевых импульсов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Краевой импульс, распространяющийся вдоль доменной стенки в топологической фотонной решетке, представляет собой нелинейную простую волну с укрупняющимся по мере распространения задним фронтом при пренебрежении пространственной дисперсией.
2. Нелинейная поправка к скорости в эволюционных уравнениях для краевых волн в топологических фотонных решетках приводит к их устойчивости по отношению к длинноволновым возмущениям.
3. Применение алгоритма разреженной регрессии позволяет вывести корректные уравнения распространения для краевого импульса вдоль топологической доменной стенки.
4. Анализ инкремента развития модуляционной неустойчивости объёмных мод и нелинейной динамики псевдоспина позволяет определить топологию фотонных решеток, описываемых двухзонным Гамильтонианом.
5. Классификация топологических фаз в фотонных системах с радиационными потерями

возможна с использованием методов машинного обучения на основе только пространственного распределения интенсивности, без необходимости предварительного восстановления фазового профиля.

6. Топологические дефекты в форме Y-образного соединения трёх доменов в кремниевой метаповерхности с Кекуле-структурой, покрытой тонким слоем гексагонального нитрида бора, эффективно локализуют фонон-поляритоны среднего ИК-диапазона.

Научная и практическая значимость

Развитый комплексный теоретический анализ топологических систем охватывает как фундаментальные аспекты поведения электромагнитных волн в фотонных материалах, так и прикладные методы их описания и классификации. Рассмотренные аналитические модели и численные подходы позволяют более глубоко понять нелинейные эффекты в топологических фотонных структурах. Кроме того, результаты этого исследования могут быть также полезны для описания нелинейных динамических явлений в других экспериментально реализуемых топологических системах, сконструированных на базе метаматериалов [20], оптических решеток [21, 22] и экситон-поляритонного конденсата [23] в силу общности развитого в диссертации аналитического подхода.

Предложенные устройства, а также разработанные программы применимы и в научных лабораториях, и на предприятиях электронной промышленности. Например, алгоритм машинного обучения, позволяющий определить топологическую фазу материала, исходя из распределения интенсивности, максимально адаптирован для использования в реальных лабораторных условиях.

Изученные топологические фотонные платформы в дальнейшем могут стать функциональными элементами интегральных фотонных схем (соединительные линии, модовые конвертеры, переключатели, резонаторы, наноразмерные излучатели и т.д.), использованы для повышения эффективности уже существующих фотонных интегральных схем, а также для создания новых функциональных элементов, основанных на топологических устройствах. В частности, топологическая метаповерхность, рассмотренная в диссертации, может быть применена в интегральной оптике для создания компактных источников излучения с заданной поляризационной структурой, а также в высокочувствительных сенсорах.

Достоверность результатов

Полученные результаты обладают высокой степенью достоверности и являются обоснованными. Подтверждением этого служит хорошее качественное и количественное согласование аналитических выводов с эффектами, наблюдаемыми при численном моделировании конкретных фотонных платформ, таких как волноводные решетки и метаповерхности. В исследованиях использовались хорошо апробированные аналитические и численные методы, широко применяемые в электродинамике и физике твердого тела, в том числе метод сильной связи, метод конечных элементов и другие. Положения и результаты диссертации опубликованы в научных статьях в журналах первого квартиля по базе Scopus, проходили рецензирование независимыми международными экспертами. Экспериментальные подтверждения аналитических результатов главы 4 приведены в [A6].

Апробация результатов и публикации

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях и научных школах: XIX научная школа «Нелинейные волны – 2020», февраль 2020, Бор; XXIX научная сессия Совета РАН по нелинейной динамике, декабрь 2020, онлайн; международная конференция SPb-РОЕМ, май 2021, онлайн; XXX научная сессия Совета РАН по нелинейной динамике, декабрь 2021, онлайн; школа-конференция с международным участием SpbOPEN, май 2022, Санкт-Петербург; школа-конференция AIRI по искусственному интеллекту, июль 2022, Сириус; конференция «Енисейская фотоника», сентябрь 2022, Красноярск; XX научная школа «Нелинейные волны – 2022», ноябрь 2022, Бор; форум молодых учёных - участников СНГ «Наука без границ», ноябрь 2022, Нижний Новгород; школа-конференция с международным участием SpbOPEN, май 2023, Санкт-Петербург; всероссийская конференция «Невская фотоника», октябрь 2023, Санкт-Петербург; XXI научная школа «Нелинейные волны – 2024», ноябрь 2024, Бор.

Результаты работы также обсуждались на научных семинарах в Институте прикладной физики РАН и в Институте физики микроструктур РАН. Материалы диссертации были опубликованы в ведущих зарубежных научных журналах: Physical Review Letters, Nature Communications, Nanophotonics, Physical Review B, Physical Review A, Physical Review Research; а также в материалах российских и международных конференций. Всего по теме исследования опубликовано 7 статей в рецензируемых журналах [A1] – [A7] (из них 7 – в журналах, рекомендованных ВАК для публикации основных материалов), 13 тезисов докладов в сборниках трудов всероссийских и международных конференций [A8] – [A20].

Личный вклад

Результаты, изложенные в настоящей диссертации, получены лично автором либо при его непосредственном участии под руководством научного руководителя.

Благодарность

Автор выражает глубокую благодарность и признательность зав. НИЛ «Искусственного интеллекта и обработки больших массивов данных» Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского Смирнову Льву Александровичу. Результаты, представленные в разделах 2.6, 2.7, 3.3, получены в рамках работы в данной лаборатории.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из вводной части, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 180 страниц с 70 рисунками. Дополнительная информация изложена в 4 приложениях (содержат 6 рисунков). Список публикаций автора по теме диссертации включает 20 наименований. Список литературы содержит 172 наименования.

Первая глава диссертации носит вводный характер. В ней представлен обзор современного состояния исследований в области топологической фотоники, отражена степень разработанности темы с особым акцентом на работы, посвящённые нелинейным эффектам. Рассмотрены основные экспериментальные платформы, подходящие для демонстрации топологических свойств. Дано описание эффективных моделей, которые в дальнейшем используются

при теоретическом анализе топологических решёток в данной диссертационной работе. Также представлены ключевые топологические понятия, характеризующие такие системы.

Вторая глава диссертации посвящена основной части проведённого исследования – изучению особенностей нелинейной динамики волновых пакетов, распространяющихся вдоль топологических доменных стенок в фотонных решётках, составленных из одномодовых диэлектрических волноводов, записанных в кварцевом стекле. Показано, что в случае малой пространственной дисперсии волновой пакет, локализованный на доменной стенке, представляет собой нелинейную простую волну, характеризующуюся укрупнением заднего фронта по мере распространения. Эффект объясняется спецификой уравнения, описывающего динамику краевых импульсов, которое отличается от традиционного нелинейного уравнения Шрёдингера зависимостью групповой скорости от интенсивности поля. Затем исследована модуляционная неустойчивость стационарной краевой моды относительно малоамплитудных длинноволновых возмущений. Получены условия, при которых решение остаётся устойчивым. Этот эффект ранее не был отмечен в аналогичных моделях, поскольку их анализ ограничивался рамками классического нелинейного уравнения Шрёдингера без учёта нелинейной групповой скорости. Рассмотренные эффекты описаны аналитически в рамках упрощенной модели и подтверждены прямыми численными расчётами на основе параксиальных уравнений. Кроме того, продемонстрировано применение методов машинного обучения, в частности, линейной регрессии, для автоматизированного вывода уравнений в частных производных, описывающих эволюцию огибающей волновых пакетов. Подход применим к системам как с малой, так и с сильной пространственной дисперсией.

В *третьей главе* мы фокусируемся на методах определения топологических инвариантов фотонных систем. Было исследовано развитие модуляционной неустойчивости Блоховских мод в двумерной киральной квадратной решётке с Керровской нелинейностью, что позволило выявить чувствительность инкремента неустойчивости к топологии зонной структуры. Для определения аномальных фаз Флоке предложен метод, основанный на анализе нелинейной динамики псевдоспина и идентификации динамических точек обращения симметрии. Альтернативно рассмотрен подход к классификации топологических фаз в неэрмитовых решётках с использованием методов машинного и глубокого обучения, применённых к распределению интенсивности на выходе периодического массива волноводов. Найдены условия, при которых сконструированная полносвязная нейросеть работает наиболее эффективно. Полученные результаты подтверждены численным моделированием с учётом реалистичных шумов и технологических дефектов.

В заключительной, *четвёртой главе* исследуются ближнее и дальнее поля фотон-фононных мод топологических дефектов в виде Y-образного соединения трёх доменов в кремниевой метаповерхности с Кекуле-структурой, интегрированной с тонким слоем гексагонального нитрида бора. С помощью численного моделирования методом конечных элементов найдено спектрально изолированное угловое состояние, локализованное в центре соединения, с интенсивностью, экспоненциально убывающей при удалении от дефекта; его частота находится в запрещённой зоне частотного спектра объемных волн. В дальней зоне поле моды

имеет трёхлепестковую диаграмму направленности с нетривиальной спиральной поляризацией, содержащую сингулярность в нормальном направлении, причём направление кручения связано с коэффициентом Кекуле кластеризации. Аналитическое описание проведено в рамках системы уравнений Дирака. Найденная форма локализованной моды согласуется как с результатами численного моделирования, так и с собственной функцией Гамильтониана решётки в приближении сильной связи. Поляризационная структура дальнего поля подтверждена аналитическим переходом к базису дипольных и квадрупольных мод, где наблюдается суперпозиция правой и левой циркулярной поляризаций с фазовым сдвигом $\pi/2$.

В *заключении* еще раз перечислены основные результаты работы.

Глава 1

Системы и модели топологической фотоники

1.1 Топологическая фотоника как современный раздел физики

Топологическая фотоника представляет собой сравнительно новое направление современной физики: первый небольшой обзор по данной тематике вышел в 2014 году [13]. Развитие этой области стало возможным благодаря успешному переносу ключевых концепций, сформированных в рамках физики твёрдого тела, на электромагнитные системы, такие как фотонные кристаллы, волноводные решётки и метаматериалы.

Один из ключевых примеров проявления топологических свойств в конденсированных средах – квантовый эффект Холла (КЭХ) [24]. Он наблюдается в двумерном электронном газе, помещённом в сильное перпендикулярное магнитное поле при низких температурах. Экспериментально измеряемая поперечная холловская проводимость σ_{xy} принимает дискретные значения $\nu \frac{e^2}{h}$, где ν – целочисленный топологический инвариант (число Черна). Эта величина оказалась непосредственно связанной с *топологией зонной структуры* системы [25].

Квантование холловской проводимости обусловлено возникновением однонаправленно распространяющихся вдоль границы краевых состояний, количество которых определяется целочисленным инвариантом ν . Каждое из этих состояний вносит квант $\frac{e^2}{h}$ в общую проводимость, что приводит к дискретизации σ_{xy} даже в присутствии примесей и неоднородностей [25]. Краевые состояния характеризуются линейным бесщелевым спектром и являются устойчивыми к рассеянию на дефектах и примесях.

Концепции, возникшие при изучении КЭХ, привели к открытию нового класса материалов, *топологических изоляторов* [9], представляющих собой объёмные изоляторы, которые, однако, обладают проводящими состояниями на поверхности или краях. Эти состояния возникают из-за нетривиальной топологии зонной структуры, характеризуемой ненулевыми топологическими инвариантами [26].

Для понимания физического механизма, обеспечивающего устойчивость краевых состояний к рассеянию на дефектах, можно рассмотреть упрощённую одномерную квантовомеханическую модель. Рассмотрим ситуацию, когда плоская волна падает на потенциальный барьер, частично отражаясь от него, а частично проходя. Однонаправленное распространение вдоль границы при наличии дефектов ("моделируемых" потенциальным барьером) подразумевает, что отраженные волны отсутствуют. Это связано с тем, что в таких системах отсутствуют доступные состояния, соответствующие движению в противоположном направлении, что делает обратное рассеяние невозможным. Между тем известно, что квантовомеханическое уравнение Шрёдингера удовлетворяет симметрии обращения времени, то есть для любой волны, распространяющейся в некотором направлении, найдётся волна, распространяющаяся точно в противоположном направлении, что и соответствует обращению времени. Тем не менее, если симметрия обращения времени нарушена, указанное условие перестаёт выполняться,

и отражённые волны отсутствуют. Одним из наиболее известных и практически реализуемых способов нарушения симметрии обращения времени является введение внешнего магнитного поля, которое и используется в системах, демонстрирующих квантовый эффект Холла. *В общем случае, топологические свойства тесно связаны с наличием или отсутствием определённых фундаментальных симметрий системы.*

Для электромагнитных волн впервые экспериментально подобную идею реализовали исследователи из Массачусетского технологического института [12] в 2009 году. Была создана двумерная периодическая структура — фотонный кристалл, состоящий из ферритовых стержней, который затем помещали во внешнее постоянное магнитное поле. Это позволило индуцировать гиромангнитный отклик материала, приводящий к эффективному нарушению симметрии обращения времени для распространяющихся электромагнитных волн. Были зарегистрированы киральные краевые состояния, распространяющиеся односторонне и огибающие дефекты. Эти наблюдения демонстрировали прямой аналог краевых состояний, характерных для квантового эффекта Холла в электронных системах. Существенное ограничение данной платформы состоит в том, что все эффекты наблюдались в микроволновом диапазоне электромагнитного излучения, период решётки составлял порядка 4 сантиметров.

В современной технике наблюдается тенденция к миниатюризации приборов, чему отвечают более короткие длины волн, соответствующие оптическому диапазону спектра электромагнитного излучения. Однако применяемые ранее в микроволновом диапазоне методы реализации топологических состояний, основанные на магнито-оптических эффектах, становятся малоприменимыми в оптическом диапазоне из-за значительного ослабления этих эффектов при увеличении частоты. Это делает невозможным прямое перенесение известных подходов на субволновые системы, используемые в интегральных фотонных платформах.

Таким образом, возникает необходимость разработки альтернативных физических механизмов, позволяющих обеспечить топологическую защиту мод в оптических устройствах. Такие исследования стимулируют активное развитие как теоретических концепций, так и их экспериментальной реализации. В связи с этим топологическая фотоника в настоящее время занимает одну из лидирующих позиций среди направлений фундаментальных исследований в фотонике.

Есть многочисленные примеры топологических фаз, предложенных теоретически, и затем продемонстрированных экспериментально в фотонных системах, среди которых квантовые аномальные изоляторы Холла [27], топологические изоляторы Флоке [28, 29, 30], топологические изоляторы высокого порядка [31, 32] и топологические изоляторы Андерсона [33]. Более того, явления, присущие только фотонным системам, такие как нелинейные эффекты и усиление в активных оптических средах, открывают новые возможности и следствия топологической физики в нелинейных [15] и неэрмитовых [34] средах.

Помимо фундаментальных вопросов, оптические нелинейности открывают новые возможности для потенциальных приложений. Совсем недавно были продемонстрированы первые лазеры и нелинейные излучатели на базе топологических структур, обладающие повышенной устойчивостью к возмущениям [35, 36]. Особое место занимают эффекты нелинейного взаи-

модействия и самовоздействия волновых полей, лежащие в основе реализации нелинейной перестраиваемости и невзаимности, и приводящие к формированию солитонов. Наконец, сформировался специфичный для фотоники раздел – *нелинейная топологическая фотоника*.

Нелинейность в фотонных системах проявляется в зависимости показателя преломления от интенсивности распространяющегося света. Это приводит к специфическим физическим явлениям, характерным для топологических фотонных структур, где нелинейные эффекты могут существенно влиять как на свойства краевых состояний, так и на глобальную топологическую структуру спектра. Среди нелинейных явлений, наблюдаемых в фотонных топологических изоляторах, можно выделить следующие: топологические солитоны [15], генерация третьей гармоники [37], четырёхволновое смешение [38], параметрическое усиление [39], топологические фазовые переходы, индуцированные нелинейностью [40], а также модуляционная неустойчивость как краевых, так и объемных мод и другие. Далее мы приведём обзор наиболее значимых работ, посвящённых некоторым из упомянутых нелинейных явлений в топологических системах, релевантных для данной диссертационной работы.

В последние годы интерес к нелинейностям в топологических фотонных системах привёл к активному изучению поведения солитонов в различных типах фотонных решёток. Одними из первых были работы, в которых численно продемонстрировано существование вращающихся солитонов в топологической Флоке-решётке, состоящей из спиралевидных волноводов [41]. Такие солитоны интерпретировались как самоиндуцированные замкнутые доменные стенки, аналогичные тем, которые наблюдаются в линейных средах с нетривиальной топологией. В статье [42] была исследована модуляционная неустойчивость краевых волн в нелинейной топологической решётке: численно показано, что при малой нелинейности волновые пакеты распадаются на локализованные солитоны, в которых слабая нелинейность компенсирует небольшую дисперсию спектра краевых мод. В случае сильной нелинейности модулированная краевая мода распадается на несколько изолированных образований, сильно локализованных в одном волноводе. В работе [43] исследованы краевые солитоны в квадратной решётке закрученных спиралевидных волноводов. Устойчивые локализованные моды, возникающие при достижении пороговой интенсивности, найдены как в тривиальной, так и в нетривиальной фазе исходной линейной системы. В исследовании [44] в Черновском фотонном изоляторе были обнаружены устойчивые топологические объёмные солитоны. Они проявляют себя как полувихревые структуры, характеризующиеся нулевым вихрем лишь у одной из псевдоспиновых компонент электромагнитного поля.

Солитоны находят и в других системах, теоретически описываемых аналогично фотонным решеткам. Например, в [45] анализировали непрерывную модель для поляритонного конденсата в периодическом потенциале. Задача описывается системой уравнений Гросса-Питаевского для спинорной волновой функции. Численно показано, что добавление широкополосного шума малой амплитуды к нелинейной краевой волне приводит к образованию солитоноподобных структур.

Хотя исследования, связанные с поиском локализованных квазисолитонных решений в различных топологических структурах, являются актуальными на сегодняшний день

и проводятся научными группами по всему миру, аналитические модели, описывающие механизмы формирования краевых топологических солитонов, практически отсутствуют – все обсужденные ранее результаты получены численно.

Одним из важных направлений исследования нелинейных явлений в топологических фотонных системах, помимо формирования солитонов, является анализ модуляционной неустойчивости, которая уже упоминалась ранее как один из механизмов формирования солитонов. Модуляционная неустойчивость – это явление, присущее множеству нелинейных систем, возникающее в результате конкуренции нелинейности и дисперсии. Процесс развития неустойчивости сопровождается резким экспоненциальным ростом амплитуды малых возмущений к стационарному состоянию.

Хотя краевые импульсы в топологических системах защищены от обратного рассеяния, такие волны могут становиться неустойчивыми в нелинейной системе и распадаться на локализованные структуры. Как уже было сказано, модуляционная неустойчивость играет важную роль в формировании краевых солитонов, и в ряде исследований [42, 45, 46, 47] отмечали, что нелинейные краевые моды в оптических системах с самофокусирующей нелинейностью подвержены модуляционной неустойчивости. При этом анализ таких явлений в основном ограничивался рамками нелинейного уравнения Шрёдингера (НУШ) [48, 49, 42, 45, 50, 51], без учёта специфики уравнений в частных производных, характерных для конкретных физических платформ. Вместе с тем остаётся малоизученным вопрос о модуляционной неустойчивости объёмных мод в топологических системах. Исследование особенностей этого процесса может предоставить новые инструменты для диагностики топологических фаз и выявления различий между ними на основе нелинейной динамики, что обсуждается в данной работе.

По мере усложнения топологических фотонных платформ возрастает важность разработки эффективных численных и теоретических приёмов, включающих как классические подходы, так и более современные способы численного решения задач, среди которых набирают популярность методы машинного обучения [52]. На данный момент техника глубокого обучения применялась к фотонным структурам в основном без анализа их топологических свойств [53]. Дальнейшее развитие техник машинного обучения применительно к задачам топологической фотоники является перспективным направлением.

Между тем известно, что методы машинного обучения перспективны для решения широкого класса электромагнитных задач. В отличие от традиционного моделирования систем из первых принципов (например, путём решения уравнений Максвелла), методы машинного обучения позволяют воспроизводить ключевые характеристики системы путём оптимизации параметризованных моделей на основе обучающих данных [54]. Обученные модели часто способны предсказывать свойства устройств быстрее, чем классические методы численного моделирования [55, 56]. Кроме того, машинное обучение может быть использовано для решения обратных задач: проектирования нанофотонных структур с заданными свойствами [57, 58] и восстановления параметров фотонных систем по косвенным измерениям [59, 60, 61].

Вместе с развитием методов анализа и проектирования топологических фотонных систем возрастает интерес к новым проявлениям топологических эффектов. Если ранее исследования

в основном ограничивались топологией зонной структуры в импульсном пространстве [14], то сейчас всё большее внимание уделяется топологическим дефектам и сильнолокализованным состояниям в реальном физическом пространстве [62].

Только в последние годы начало формироваться понимание роли топологии в реальном пространстве, связанной с наличием кристаллографических дефектов в периодических фотонных структурах [63, 64, 65]. Такие дефекты могут поддерживать возникновение локализованных нуль-мерных спектрально-изолированных мод. Эти моды, в свою очередь, интересны с точки зрения контроля пространственных степеней свободы электромагнитного излучения, что особенно перспективно в контексте разработки квантовых излучателей, нанолазеров и других элементов фотонных чипов, свойства которых топологически устойчивы к беспорядку. Кроме того, использование таких мод обладает потенциалом для увеличения существующей оптической пропускной способности: новые каналы передачи информации могут быть созданы путем её кодирования, например, в структуре дальнего поля [66].

Наконец, актуальной задачей современной топологической оптики остаётся интеграция фотонных платформ с материалами, поддерживающими фононное или экситонное возбуждение. Это связано с тем, что гибридизация света и материи позволяет реализовать дополнительные степени свободы для управления квантовыми и классическими состояниями [67, 68], а также открывает возможности для моделирования квантовых эффектов в классических условиях. Особенно перспективны здесь двумерные материалы, такие как гексагональный нитрид бора (hBN), который поддерживает фононные резонансы в среднем инфракрасном диапазоне. Интеграция таких материалов в топологические фотонные структуры позволяет создавать новые типы поляритонных возбуждений.

Таким образом, развитие топологической фотоники охватывает широкий спектр задач — от исследования нетривиальной топологии зонной структуры до изучения локализованных состояний на топологических дефектах в реальном пространстве, от анализа нелинейных эффектов, таких как модуляционная неустойчивость и формирование солитонов, до разработки современных численных методов, основанных на искусственном интеллекте. Эти направления открывают новые возможности для создания устойчивых к беспорядку фотонных устройств, способных работать в реальных оптических чипах.

1.2 Основные экспериментальные платформы в топологической фотонике

1.2.1 Фотонные решетки на основе волноводов

Фотонные решётки на основе волноводов стали одной из ключевых экспериментальных платформ для реализации и исследования топологически защищённых состояний [30, 69], а также особенностей нелинейного отклика топологических систем.

Решетки волноводов в кварцевом стекле

Массивы волноводов, изготовленные с помощью фемтосекундной лазерной записи, являются одной из самых распространенных платформ в интегральной фотонике [70, 71, 72]. В ходе лазерной записи возникает оптический пробой, индуцируемый в объеме диэлектрического материала посредством фокусировки ультракоротких лазерных импульсов. Взаимодействие

высокоинтенсивного лазерного излучения с веществом приводит к образованию микроплазмы, инициирующей каскад процессов, вызывающих необратимые изменения в его микроструктуре. В частности, для материалов, таких как плавленый кварц и боросиликатное стекло, наблюдается локальное повышение плотности в зоне воздействия, следствием которого является увеличение показателя преломления.

Перемещение образца поперек фокального пятна приводит к формированию волновода, при этом его форма будет повторять траекторию перемещения. Параметры получившейся структуры можно легко варьировать с высокой степенью точности с помощью изменения расстояния между элементами и возмущения показателя преломления, что позволяет точно настраивать систему. Таким образом могут быть реализованы различные конфигурации волноводных решёток в 1D и 2D: от полностью периодических (как однородных [73], так и неоднородных [74]) структур с резкими границами [75, 76, 77, 78], до систем с одиночными дефектами [79, 69], беспорядком [80, 81], и даже пересечениями волноводов [82, 83]. Кроме того, распространение света в структуре может быть непосредственно визуализировано с помощью флуоресцентной микроскопии [84, 85].

Стоит отметить, что возмущение показателя преломления достаточно мало (типичные значения $\Delta n \approx 10^{-3}$) по сравнению с фоновым ($n_0 \approx 1.45$ для плавленого кварца). Следовательно, радиусы изгиба волноводов должны быть достаточно большими для минимизации радиационных потерь. Кроме того, данные структуры обладают высоким отношением продольного размера (несколько сантиметров) к поперечному (несколько микрометров). Наконец, для наблюдения нелинейных эффектов в таких системах требуются интенсивные фемтосекундные лазерные импульсы, которые могут повредить материал. Несмотря на перечисленные недостатки, данные решетки волноводов представляют собой универсальную платформу для реализации и наблюдения различных явлений в интегральных фотонных структурах.

Платформы волноводов, изготовленные с помощью литографии

Также перспективной платформой являются решетки, изготовленные с помощью литографии [86]. Данный метод является максимально универсальным и пригодным для создания не только волноводных платформ, но и фотонных метаповерхностей.

Процесс изготовления начинается с формирования структур заданной геометрии на кремниевой пластине. Именно данный этап связан с использованием электронно-лучевой литографии [87] или оптической литографии [88] в зависимости от требуемой точности и масштаба схем. Электронно-лучевая литография обеспечивает высокое разрешение, что подходит для создания сложных систем, в то время как оптическая литография является более экономичным и доступным решением.

В обоих случаях на кремниевую пластину наносится светочувствительный материал – фоторезист, который облучают через специальную оптическую систему [89] и фотошаблон (маску). Маска представляет собой увеличенный трафарет проецируемого рисунка. После обработки фоторезиста на пластине формируется заданный рисунок.

Регистрируют распространение света в данных структурах с помощью обычной оптической микроскопии [90].

Главным преимуществом этой платформы является то, что элементы могут быть активными и сильно нелинейными [91]. Среди недостатков выделяют исключительную планарность и невозможность изготовить систему, в которой нарушается симметрия обращения времени.

Массивы полимерных волноводов

Волноводы сложной геометрии микроскопических размеров можно создать с использованием технологии двухфотонной полимеризации, при этом выделяют два различных подхода.

Первый предполагает образование отверстий в материале фоторезиста [92, 93]; затем для создания волноводов полую структуру пропитывают другим полимером, затвердевающим при нагревании (таким как SU8-2). В результате показатель преломления внешнего материала составляет величину порядка $n_0 \approx 1.54$, а для сердцевины волновода – $n_{\text{core}} \approx 1.59$. Во втором подходе просто используют разные мощности лазера для записи самих волноводов и окружающей их среды [94]. Это позволяет контролировать геометрию и оптические свойства структур без дополнительных этапов заполнения.

Среди преимуществ этой платформы выделяют возможность точного регулирования формы волноводов с заранее заданными свойствами; исключительную компактность образцов; большой диапазон изменения разницы показателей преломления волноводов и фоновой среды ($\Delta n = [8 \cdot 10^{-3}; 5 \cdot 10^{-2}]$); малые радиационные потери в криволинейной геометрии, обусловленные высоким показателем преломления волноводов. Однако существуют и недостатки, основным среди которых является отсутствие флуоресценции при распространении света, так что интенсивность может быть измерена только на торцах конструкции. Более того, если использовать двухэтапный метод, включающий последующее заполнение полимером, все волноводы будут иметь одинаковый показатель преломления; а индивидуальная настройка параметров каждого отдельного элемента невозможна.

Индукцированные волноводы в фоторефрактивных средах

Для записи волноводов в фоторефрактивных средах используют несколько монохроматических лазерных пучков, в результате интерференции которых получившееся распределение интенсивности преобразуется в соответствующую модуляцию показателя преломления светочувствительного нелинейного материала, которым обычно является фоторефрактивный кристалл стронция-бария-ниобата (SBN) [95, 96]. Приложенное к кристаллу электрическое поле смещения регулирует величину модуляции показателя преломления (контраст в данном методе обычно составляет $\Delta n \approx 10^{-3}$).

К преимуществам данной технологии можно отнести возможность одновременного создания протяженных решеток, состоящих из сотен волноводов. Кроме того, применяемая техника позволяет динамически менять конфигурацию решетки за короткое время. Также в данных платформах можно наблюдать эффекты, возникающие при значительных нелинейностях, к которым относятся, например, формирование солитонов [97, 98]. Среди недостатков выделяют то, что необходимые интерференционные картины имеют сложную пространственную структуру; к тому же размер используемого кристалла ограничен, поэтому можно исследовать динамику лишь на небольших расстояниях; наконец, такие волноводы существуют

только до тех пор, пока включены устройства, создающие плоские волны, формирующие интерференционную картину.

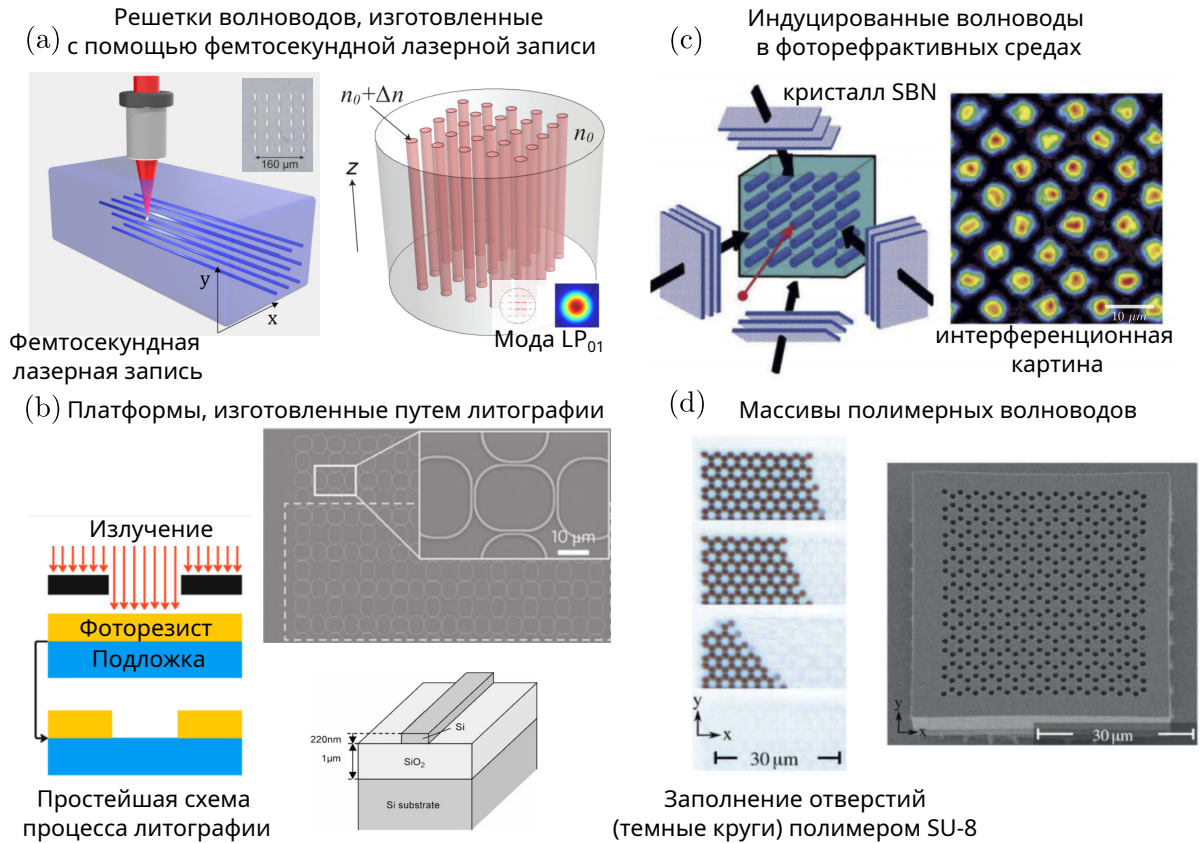


Рисунок 1: Фотонные платформы на основе волноводов и методы их изготовления. (а) слева: иллюстрация фемтосекундной лазерной записи (вставка – пример экспериментально изготовленной структуры из работы [99]); справа: схематическое изображение получившейся структуры (вставка – распределение электрического поля и его интенсивности для нижней моды LP_{01} круглого диэлектрического волновода). (б) слева: иллюстрация процесса литографии. Справа: примеры систем, изготовленных данным методом (кольцевые резонаторы [88, 86]). (с) слева: фоторефрактивный эффект в кристалле стронция-бария-ниобата, справа: пример индуцированной решетки [97]. (д): полимерные волноводы, сформированные лазерной записью. Слева: незаполненные участки (тёмные области) последовательно заполняются фоторезистом SU8 под действием капиллярных сил. Микрофотографии получены с временными интервалами в несколько секунд [100].

Основные волноводные платформы представлены на рис. 1.

1.2.2 Топологические фотонные метаповерхности

Фотонные топологические метаповерхности представляют собой одну из ключевых платформ для реализации топологических эффектов в нанофотонике, сочетающую возможность субволнового управления светом с топологической защитой [101, 102].

Например, в работах [37, 103] описаны метаповерхности, представляющие собой периодические массивы кремниевых наностолбиков или треугольных отверстий в кремниевых мембранах, изготовленные методами электронно-лучевой литографии. Такие структуры, характерные размеры элементов которых составляют несколько сотен нанометров, обеспечи-

вают работу в ближнем инфракрасном диапазоне, что соответствует телекоммуникационным стандартам, и могут быть встроены в интегральные фотонные схемы.

Сегодня особый интерес вызывают разработки в области гибридных топологических метаповерхностей, объединяющих фотонные наноструктуры с двумерными материалами.

Например, интеграция переходных металлдихалькогенидов (TMDCs) и гексагонального нитрида бора (hBN) [67, 68] позволяет реализовать сильную связь топологических краевых состояний с экситон-поляритонами, что приводит к формированию гибридных мод с контролируемой спиновой и долиной поляризацией. Другой подход включает внедрение перовскитных квантовых точек или полупроводниковых гетероструктур [104], обеспечивающих возникновение нелинейных эффектов и электрическую настройку топологических режимов.

Эти исследования открывают перспективы для создания топологических лазеров с ультранизкими порогами накачки, квантовых источников света с защитой от обратного рассеяния и гибридных оптоэлектронных устройств, где топологические фотонные моды управляют переносом заряда в двумерных материалах.

Примеры топологических метаповерхностей приведены на рис. 2.

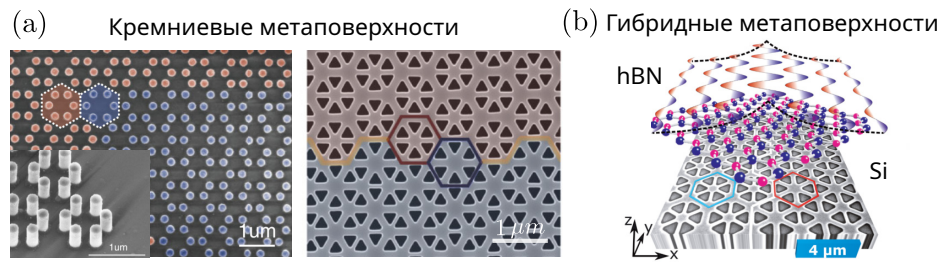


Рисунок 2: (a): топологические метаповерхности, представляющие собой массив кремниевых наноцилиндров [37](слева) и кремниевую мембрану [103](справа), структурные элементы которых расположены в узлах решетки геометрии пчелиные соты. (b): схематическая иллюстрация гибридной метаповерхности – фотонный слой Si (снизу) и тонкий слой двумерного hBN.

1.3 Переход от уравнений Максвелла к эффективным моделям

В задачах теоретического описания фотонных систем ключевым этапом является переход от уравнений Максвелла В.1 (или параксиальных уравнений В.2) к эффективным моделям, позволяющим анализировать свойства электромагнитных волн в периодических средах. Одним из широко применяемых подходов для такого перехода является *теория связанных мод* (Coupled Mode Theory, CMT), аналогичная *методу сильной связи* (МСС, Tight Binding Model, TBM) из физики твердого тела [105]. Данный алгоритм позволяет учесть взаимодействие локальных электромагнитных мод, возникающих в элементарных ячейках структуры, и построить эффективный Гамильтониан, описывающий коллективные свойства системы. Стационарные решения исходных уравнений при этом отображаются на собственные моды эффективного Гамильтониана, обеспечивая прямую связь между микроскопическими и макроскопическими свойствами среды. Теория связанных мод позволяет написать уравнения

вида

$$\omega a_n = \sum_{m \neq n} C_{nm} a_m + \delta_n a_n,$$

где $a_n(z)$ – амплитуда n -ой моды (для одномодовых решеток волноводов, например, это будет собственная мода n -ого элемента), C_{nm} коэффициент связи между модами n и m , δ_n – отстройка частоты n -ой моды от нуля, ω – частота коллективной моды системы.

Для периодических решеток можно применить преобразование Фурье с волновым вектором $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. При анализе длинноволновых возмущений в окрестности выделенных точек зоны Бриллюэна $\mathbf{k}^s$: ($\mathbf{k} = \mathbf{k}^s + \delta\mathbf{k}$) осуществляется переход к континуальному пределу $\delta\mathbf{k} \rightarrow 0$. Тогда пространственные уравнения пишутся для медленно меняющихся огибающих $\Psi(x, y, z)$ амплитуд мод, а дискретные операторы связи аппроксимируются дифференциальными операторами $k_{x,y} = -i\partial_{x,y}$. Таким образом, мы схематично описали, как осуществляется переход к уравнениям Дираковского типа [106, 107], свойства которых будут подробно описаны в следующем разделе.

1.4 Примеры модельных Гамильтонианов и топологические инварианты

Рассмотрим общий вид двухзонного Гамильтониана в импульсном пространстве:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Delta(\mathbf{k})\sigma_0, \quad (1.1)$$

где $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – вектор матриц Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

σ_0 – единичная матрица, а вектор $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ и скаляр $\Delta(\mathbf{k})$ определяют дисперсионные свойства системы. Топологические характеристики системы зависят от структуры функции $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ (см. Приложение С).

В данном разделе представлены основные фотонные системы, а также модельные Гамильтонианы, позволяющие построить аналитическое описание эффектов, рассмотренных в данной работе, присущих упомянутым ранее физическим системам.

1.4.1 Одномерные модели (модель SSH)

Одномерные (и квазиодномерные) топологические системы достаточно просты для аналитического изучения. Доступная теория в сочетании с развитием технологий производства, позволяющим создавать устройства, которые можно моделировать как одномерные массивы с топологическими свойствами, сделала такие системы ключевой платформой для глубокого понимания топологических особенностей [108].

Наиболее распространенным примером здесь является модель Су-Шриффера-Хигера (SSH) С.3: так описывают цепочку димеров с чередующимися коэффициентами связи. Гамильтониан в приближении сильной связи имеет вид:

$$\mathcal{H}_{\text{SSH}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & J_1 + J_2 e^{-ik} \\ J_1 + J_2 e^{ik} & 0 \end{pmatrix} = (J_1 + J_2 \cos k) \sigma_x + J_2 \sin k \sigma_y, \quad (1.2)$$

где J_1, J_2 – коэффициенты связи внутри и между димерами. В окрестности границ зоны Бриллюэна $k = \pi + \delta k$ мы можем ввести эффективный Гамильтониан Дираковского вида

$$H_D(\delta k) = -|J_1 - J_2| \hat{\sigma}_x + \sqrt{J_1 J_2} \hat{\sigma}_y \delta k. \quad (1.3)$$

Топологический инвариант – фаза Зака:

$$\varphi_n^z = i \int_{-\pi}^{\pi} \langle u_n(k) | \partial_k | u_n(k) \rangle dk,$$

также вводят число оборотов (winding number $\mathcal{W}$), $\varphi_n^z = \pi \mathcal{W}$, эта величина характеризует полное число оборотов псевдоспина при изменении волнового вектора вдоль замкнутой траектории в пределах зоны Бриллюэна.

Топологический переход в нетривиальную фазу происходит при $J_2 > J_1$ ($\mathcal{W} = 1$), что приводит к возникновению краевых состояний с нулевой энергией С.З.

1.4.2 Двумерные модели

Описание большинства двумерных решеток в окрестности точек высокой симметрии зоны Бриллюэна может быть сведено к Дираковскому Гамильтониану вида

$$i \partial_t \psi = \begin{pmatrix} M - g |\psi_1|^2 - \beta [\partial_x^2 + \partial_y^2] & -i \partial_x - \partial_y - \eta (-i \partial_x + \partial_y)^2 \\ -i \partial_x + \partial_y - \eta (i \partial_x + \partial_y)^2 & -M - g |\psi_2|^2 + \beta [\partial_x^2 + \partial_y^2] \end{pmatrix} \psi,$$

здесь M – эффективная масса, g – коэффициент нелинейности, η, β – коэффициент эффективной дисперсии второго порядка. В зависимости от соотношения параметров выделяют разные модели.

Модель BHZ (Bernevig-Hughes-Zhang)

Для систем с аналогом квантового спинного эффекта Холла Гамильтониан приобретает вид:

$$\mathcal{H}_{\text{BHZ}}(\mathbf{k}) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + (M - \beta k^2) \sigma_z, \quad (1.4)$$

где β, M определяются свойствами материала. Топологический инвариант – число Черна

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{zB}} \Omega^n(\mathbf{k}) d^2 \mathbf{k},$$

где $\mathbf{zB}$ обозначает зону Бриллюэна, $\Omega^n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_n(\mathbf{k}) | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle$ – кривизна Берри для n -й зоны [9], а u_n – n -е собственное состояние. В данном случае число Черна $C_{\pm} = \pm \frac{1}{2} (1 + \text{sgn}(M\beta))$ (sgn – функция знака). Система топологически нетривиальная, когда $M\beta > 0$ и топологически тривиальная, когда $M\beta < 0$.

В рамках данной модели описывают краевые состояния с линейным бесщелевым законом

дисперсии, однонаправленно распространяющиеся вдоль границы, что является следствием нарушения симметрии обращения времени.

Модель BHZ (Bernevig-Hughes-Zhang) для двух псевдоспинов

Применима для систем с аналогом квантового спинного эффекта Холла. Данная модель может быть интерпретирована как две копии BHZ модели для каждого псевдоспина:

$$\mathcal{H}_{\text{BHZ } 2}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{\text{BHZ}}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{H}_{\text{BHZ}}^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$

Число Черна, рассчитанное для определённого направления псевдоспина, имеет ненулевое значение при сохранении симметрии обращения времени:

$$C_{\uparrow} = -C_{\downarrow} \neq 0,$$

где $C_{\uparrow}$ – число Черна для частиц с псевдоспином вверх, а $C_{\downarrow}$ – для частиц с псевдоспином вниз. В данных системах вместо числа Черна вводят **спиновое число Черна**:

$$C_{\text{спин}} = \frac{C_{\uparrow} - C_{\downarrow}}{2}.$$

Фаза квантового спинного эффекта Холла характеризуется $\mathbb{Z}_2$ -инвариантом, который связан со спиновым числом Черна соотношением $\mathbb{Z}_2 \equiv C_{\text{спин}} \pmod{2}$. Инвариант $\mathbb{Z}_2$ принимает только два целочисленных значения: 0 для топологически тривиальных случаев, 1 для нетривиальных.

Модель VH (Valley-Hall)

Как обсуждалось в предыдущих разделах, открытые границы топологических сред могут поддерживать возникновение локализованных краевых мод. Однако в фотонных системах, в которых реализуется аналог долинного эффекта Холла, ситуация существенно отличается – краевые моды не могут формироваться на открытых границах. Для их возникновения необходимо наличие интерфейса между областями с различными значениями эффективной массы M .

В подобных системах нарушена симметрия обращения координаты для подрешеток. Наиболее простой способ нарушения симметрии подрешёток заключается во введении ступенчатого потенциала в эффективной массе. Соответствующий Гамильтониан системы имеет вид:

$$\mathcal{H}_{\text{VH}}(\mathbf{k}) = (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y) + M \sigma_z. \quad (1.5)$$

Топологический переход происходит при $M = 0$, что сопровождается изменением долинного числа Черна $C_K = \frac{1}{2} \text{sgn}(M)$. Согласно принципу объёмно-граничного соответствия, на интерфейсе между областями с противоположными знаками параметра M обязательно возникает киральная краевая мода.

Важно отметить, что для долин K и K' выполняется соотношение $C_K = -C_{K'}$, что является прямым следствием симметрии относительно обращения времени. Данная симметрия

гарантирует выполнение условия квантования полного числа Черна. Хотя полное число Черна в системе равно нулю, разность чисел Черна, связанных с кривизной Берри в окрестностях долин K и K' , остаётся конечной и квантованной величиной [109]. Это принципиальное отличие позволяет реализовать топологически защищённые краевые состояния даже в системах с нулевым полным числом Черна.

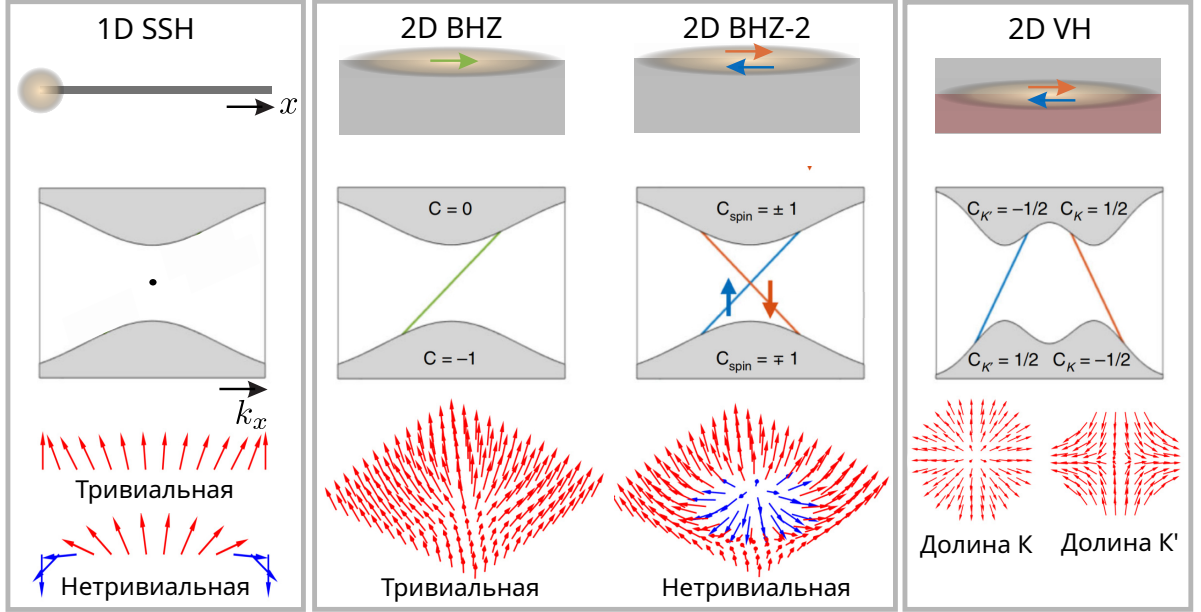


Рисунок 3: Различные топологические модели. Верхний ряд – пространственное распределение локализованных краевых состояний (обозначены желтыми овалами) на границе материала (серые области). Средний ряд – схематическое изображение зонной структуры объемных мод (серый) и краевых состояний в щели. Нижний ряд иллюстрирует распределение вектора $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ вдоль зоны Бриллюэна для тривиальной и нетривиальной решеток. Слева: одномерная SSH модель. По центру и справа: двумерные модели. По центру слева: свойства модели BHZ. Справа: модель, соответствующая квантовому спиновому эффекту Холла (модель VH).

В ходе диссертационного исследования мы изучали различные физические эффекты, описываемые с помощью указанных моделей. Так, глава 2 посвящена модели VH, в главе 3 рассматриваются модели SSH и BHZ, наконец, заключительная глава 4 посвящена модели BHZ для двух псевдоспинов.

Каждая из указанных моделей позволяет описывать широкий круг физических явлений и используется для изучения различных аспектов фотонных топологических систем. В главе 2 анализировались особенности нелинейной динамики краевых состояний. В главе 3 методы определения топологических свойств с помощью машинного обучения и исследования модуляционной неустойчивости. Наконец, в главе 4 представлены результаты исследования гибридных систем, сочетающих фотонные и фононные компоненты.

Полученные результаты имеют общий характер и применимы к широкому классу физических систем, описываемых рассматриваемыми моделями. Однако для демонстрации практической значимости описываемых эффектов они были промоделированы в рамках уравнений Максвелла для конкретных фотонных платформ. В главах 2 и 3 в качестве основных платформ выступали волноводные структуры, а в 4 была рассмотрена метаповерхность.

Глава 2

Краевые импульсы в нелинейной модели Дирака

Мы начнем с изучения нелинейных эффектов в фотонных системах, в континуальном пределе описываемых моделью ВН 1.4.2 с учётом пространственной дисперсии и Керровской нелинейности. Такие системы характеризуются нарушением инверсионной симметрии (что формально отвечает ненулевой диагональной эффективной массе в Дираковских уравнениях), приводящей к формированию энергетических долин в зонной структуре и возникновению топологически защищённых краевых состояний [110, 111].

Одной из подходящих экспериментальных платформ для реализации данной модели являются оптические решётки волноводов 1.2.1, включающие доменные стенки. Такие фотонные решётки обладают рядом преимуществ, среди которых – простота конструкции и отсутствие необходимости в сложной модуляции структуры. Благодаря топологической защите такие системы обеспечивают устойчивость к обратному рассеянию и влиянию беспорядка, одновременно усиливая нелинейные эффекты за счёт замедления света [112, 113, 114, 115].

Обычно при анализе подобных систем ограничиваются классическим нелинейным уравнением Шрёдингера (НУШ), описывающим эволюцию огибающей волнового пакета. В данной главе показано, что в случае решёток со слабой дисперсией необходимо учитывать также зависимость групповой скорости от интенсивности поля — эффект, который можно интерпретировать как введение нелинейной Дираковской скорости. Её наличие приводит к опрокидыванию пространственно локализованных краевых импульсов, наблюдавшемуся в ряде экспериментальных работ [116, 117, 118, 119]. Кроме того, возникает эффект стабилизации нелинейных краевых волн с относительно высокой амплитудой, что можно исследовать при изучении модуляционной неустойчивости.

2.1 Физическая платформа

Фотонная топологическая решётка, рассматриваемая в настоящей работе, состоит из одномодовых диэлектрических волноводов, ориентированных вдоль продольной оси z (ось волноводов), аналогично 1.2.1. В поперечной плоскости xy такая система образует периодическую гексагональную решётку, схематически изображённую на рис. 4. Геометрия данной структуры часто именуется как "димеризованный графен".

Димеризованный графен характеризуется наличием двух треугольных подрешёток, элементы которых отличаются значениями собственных постоянных распространения. На рисунке эти различия условно показаны кружками разного цвета. В рассматриваемой нами системе такая димеризация может быть реализована за счёт изменения радиуса волноводов или введения различных значений показателя преломления для разных подрешёток. Каждая элементарная ячейка содержит два элемента. Доменная стенка формируется как инверсия параметров элементарной ячейки вдоль линии интерфейса.

Для описания распространения света в данной системе используется параксиальное приближение В.2. Мы рассматриваем параметры, когда фотонную решетку можно рассматривать в рамках МСС, а затем перейти к Дираковской модели 1.4.2.

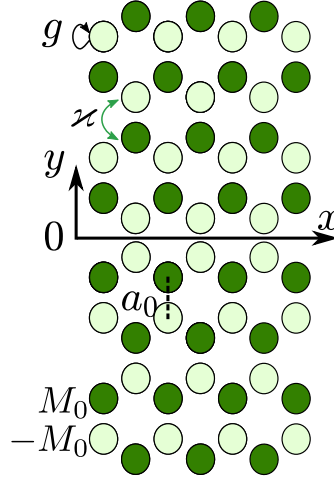


Рисунок 4: Схематическое изображение фотонной решетки, состоящей из одномодовых волноводов, расположенных в узлах гексагональной графеновой решетки. На рисунке κ обозначает коэффициент туннельной связи между волноводами, a_0 — расстояние между центрами волноводов, круглая стрелочка g иллюстрирует нелинейность самовоздействия. Димеризация за счет различия собственных постоянных распространения обозначена отличными цветами кружочков, соответствующим двум подрешеткам. Доменная стенка располагается на линии $y = 0$ (см. уравнение (2.5)).

2.2 Переход к Дираковской модели в линейном случае

Эту систему мы будем формально характеризовать волновой функцией, которая из-за бипартитности решетки является двухкомпонентной (спинорной) (см. вывод в Приложении А.1).

Вблизи спектральных особенностей (около точек $\mathbf{K}_+, \mathbf{K}_-$) в континуальном пределе эволюцию огибающей спинорной волновой функции $\Psi = [\Psi_1, \Psi_2]$ по координате z можно описать с помощью уравнений Дирака, вывод которых приведен в Приложении А.1. Запишем эти уравнения в операторной форме, положив эволюционную координату $z \equiv t$:

$$i\partial_t \Psi = \hat{H}_D(\delta \mathbf{k}) \Psi. \quad (2.1)$$

Здесь $\hat{H}_D(\delta \mathbf{k})$ — двумерный Гамильтониан Дирака

$$\hat{H}_D(\delta \mathbf{k}) = \delta k_x \hat{\sigma}_x + \delta k_y \hat{\sigma}_y + M \hat{\sigma}_z, \quad (2.2)$$

где $\delta \mathbf{k} = (\delta k_x, \delta k_y) \equiv -i(\partial_x, \partial_y)$ безразмерный импульс, $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ — матрицы Паули. Мы перешли к безразмерным переменным, положив скорость Дирака $v_D = \sqrt{3}\kappa/2a$, выражаемую через параметры решетки (константу связи $\kappa > 0$ и пространственный период $a = \sqrt{3}a_0$), равной единице. Расстройка постоянных распространения входит в уравнения как эффективная масса

M – диагональный член Гамильтониана. Отметим, что для корректности континуального подхода эффективная масса должна быть много меньше коэффициента связи, $\varkappa \gg |M|$. Замена $\delta k_x \rightarrow -\delta k_x$ в (2.2) соответствует противоположному несущему вектору $\mathbf{K}_- = -\mathbf{K}_+$, или, в терминах зонной структуры, другой долине (см. А.1).

Подставив $\delta k_{x,y} = -i\partial_{x,y}$ в (2.1), мы получим явный вид $(2+1)$ -мерной модели Дирака, содержащей пространственные производные:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} &= -(i\partial_x + \partial_y) \Psi_2 + M\Psi_1; \\ i\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= -(i\partial_x - \partial_y) \Psi_1 - M\Psi_2. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Для распространяющихся объемных мод вида $\Psi_{1,2} \propto e^{-i\omega t + i\delta k_x x + i\delta k_y y}$ в однородной среде с постоянной эффективной массой $M = \text{const}$ из системы (2.3) получается гиперболическое дисперсионное соотношение с двумя ветвями:

$$\omega_{\pm}(\delta \mathbf{k}) = \pm \sqrt{\delta k^2 + M^2}, \quad (2.4)$$

где $\delta k^2 = \delta k_x^2 + \delta k_y^2$. Между ветвями имеется спектральная щель, ширина которой определяется димеризацией и при $\delta k = 0$ равна $2M$.

В рамках непрерывной модели Дирака мы можем получить дисперсию краевых состояний, локализованных на доменной стенке, образованной инверсией знака эффективной массы. Доменная стенка расположена на линии $y = 0$, при переходе через которую эффективная масса меняет знак:

$$M(y) = \begin{cases} M_0, & y > 0; \\ -M_0, & y < 0. \end{cases} \quad (2.5)$$

Используя симметрию задачи, мы найдем эффективное граничное условие, связывающее компоненты спинора на оси $y = 0$. Вследствие трансляционной симметрии вдоль оси x импульс δk_x можно зафиксировать, эта величина является "хорошим" квантовым числом. Используя подстановку $\Psi_{1,2} = \psi_{1,2}(y)e^{-i\omega t + i\delta k_x x}$, мы перепишем систему (2.3) в виде

$$(-\omega + M(y))\psi_1(y) + (\delta k_x - \partial_y)\psi_2(y) = 0; \quad (2.6)$$

$$(\omega + M(y))\psi_2(y) + (-\delta k_x - \partial_y)\psi_1(y) = 0. \quad (2.7)$$

Полупространства $y > 0$ и $y < 0$ отличаются заменой $M \rightarrow -M$. Из симметрии уравнений следует, что $\psi_1(y < 0) = \psi_2(-y)e^{i\varphi}$, $\psi_2(y < 0) = \psi_1(-y)e^{i\varphi}$. Условия непрерывности $\psi_{1,2}(-0) = \psi_{1,2}(+0)$ приводят к $\psi_1(0)e^{-i\varphi} = \psi_2(0)$, $\psi_2(0)e^{i\varphi} = \psi_1(0)$, $e^{2i\varphi} = 1$, то есть $\varphi = [0, \pi]$. Поэтому мы можем ограничить наше рассмотрение верхней полуплоскостью $y > 0$, накладывая эффективное граничное условие, связывающее спинорные компоненты

$$\psi_1(0) = \pm \psi_2(0), \quad (2.8)$$

где знаки $+/-$ соответствуют положительному/отрицательному значению массы M_0 . Усло-

вие (2.8) означает, что волновые функции могут быть либо симметричными, либо антисимметричными, что есть следствие глобальной симметрии задачи относительно доменной стенки. Иными словами, Гамильтониан коммутирует с оператором пространственной инверсии.

Выбрав верхнюю полуплоскость $y > 0$, мы можем подставить в (2.6) $\psi_{1,2} \propto \exp(i\delta k_x x - \alpha y)$, $\delta k_y = i\alpha$, $\alpha > 0$ для краевых мод, прижатых к доменной стенке, и воспользоваться эффективным граничным условием (2.8) на линии $y = 0$. В итоге получим

$$\frac{\psi_1(0)}{\psi_2(0)} = \frac{\pm \delta k_x + \alpha}{\omega - M_0} = \pm 1, \quad (2.9)$$

где декремент затухания, описывающий степень локализации полей, $\alpha = \sqrt{\delta k_x^2 + M_0^2 - \omega^2}$. Дисперсия краевых состояний вблизи точки Дирака является линейной, а декремент $\alpha = |M_0|$ постоянен. Для положительной эффективной массы $M_0 > 0$ из (2.9) находятся собственная частота $\omega_{K\pm} = \mp \delta k_x$ (противоположные знаки в разных долинах означают противоположные групповые скорости) и собственный вектор $[1, \mp 1]$. Для отрицательной массы $M_0 < 0$ получаем $\omega_{K\pm} = \pm \delta k_x$ и ортогональный спинор $[1, \pm 1]$.

Таким образом, в линейном случае доменная стенка поддерживает краевые волны с линейной дисперсией, экспоненциально локализованные по поперечному сечению y . При этом импульс распространяется вдоль доменной стенки без искажения (вследствие отсутствия дисперсии).

2.3 Нелинейные краевые волны

Введём в модель Дирака (2.1) локальную нелинейность Керровского типа (2.11) в виде диагонального оператора:

$$\hat{H}_{NL} = -g \begin{pmatrix} |\Psi_1|^2 & 0 \\ 0 & |\Psi_2|^2 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

соответствующего учету оптической нелинейности самовоздействия в волноводах, из которых составлена фотонная решётка. Эволюционные уравнения принимают вид:

$$i\partial_t \Psi = (\hat{H}_D(\delta \mathbf{k}) + \hat{H}_{NL})\Psi. \quad (2.11)$$

Будем искать решение (2.11) в однородной среде с $M = \text{const}$ в виде бегущей вдоль оси x нелинейной волны $\Psi_{1,2} = \psi_{1,2}(y, t) e^{ikx}$.

С использованием (2.11) мы получили аналитическое выражение для компонент $\psi_{1,2}$ покоящегося локализованного Дираковского солитона:

$$\begin{pmatrix} \psi_1(y) \\ \psi_2(y) \end{pmatrix} = \sqrt{2\varrho_s(y)} e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} \cos \alpha_s(y) \\ -\sin \alpha_s(y) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

в этой записи были использованы переменные интенсивности ϱ_s и спинового угла α_s [106]

$$\begin{aligned}\varrho_s(\alpha_s(y)) &= \frac{2(\Omega \cos(2\alpha_n) - \omega)}{g(1 + \cos^2(2\alpha_s))}, \quad \alpha_s = \alpha_n - \delta/2, \\ \alpha_n(y + y_0) &= \arctan \left[\frac{\Omega - \omega}{\sqrt{\Omega^2 - \omega^2}} \tanh \left(\sqrt{\Omega^2 - \omega^2} (y + y_0) \right) \right], \\ \delta &= \arctan \frac{k}{M_0}, \quad \Omega = \sqrt{M_0^2 + k^2}, \quad \sin \delta = \frac{k}{\Omega}, \quad \cos \delta = \frac{M_0}{\Omega}.\end{aligned}\tag{2.13}$$

Опираясь на это решение, мы можем также найти профили нелинейных краевых волн, поддерживаемых доменной стенкой (2.5).

Следующее из симметрии уравнений Дирака граничное условие на интерфейсе $\psi_1(y = 0) = \pm \psi_2(y = 0)$ перепишем в терминах спинового угла

$$\alpha_s(0) = \pm \pi/4, \tag{2.14}$$

где знаки $+/-$ соответствуют положительным/отрицательным значениям M_0 .

Мы можем получить дисперсионное соотношение для краевых волн, используя (2.13) и граничное условие (2.14). Мы получили, что для нелинейных краевых волн, в отличие от линейного случая, дисперсия зависит от интенсивности:

$$\omega = -\frac{g}{2}\varrho_s(\alpha_s = \pm \pi/4) \mp k = -\frac{g}{2}|\psi_{1,2}(0)|^2 \mp k = -\frac{g}{2}I_1 \mp k, \tag{2.15}$$

что соответствует смещению линейной дисперсии или нелинейной перестройке частоты.

Рис. 5, 6 иллюстрируют пространственное распределение нелинейной краевой волны. По сравнению с линейным случаем изменилось поперечное распределение. Оно достаточно сложным образом зависит от параметров задачи, в частности, от эффективной массы, волнового числа и частоты.

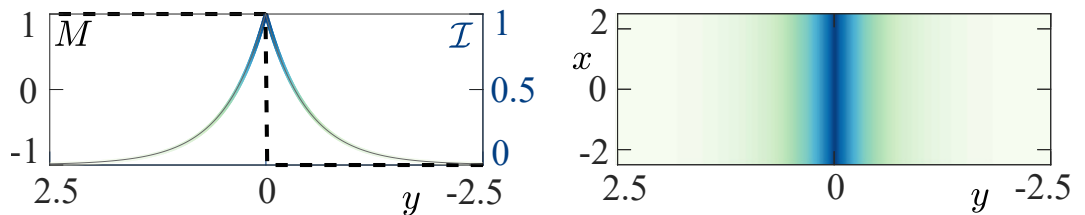


Рисунок 5: Поперечный профиль (слева) и распределение модуля интенсивности $\mathcal{I} = |\psi_1(y)|^2 + |\psi_2(y)|^2$ в плоскости фотонной решетки (справа) для нелинейной краевой волны, распространяющейся вдоль оси x и прижатой к доменной стенке, расположенной на линии $y = 0$, где эффективная масса M (изображено черным пунктиром посередине) меняет знак. Параметры $M_0 = 1$; $I_1 = 0.5$; $g = 0.75$.

Введём интегральные характеристики нелинейной краевой волны – мощность $2\mathcal{P}$ и спин $2\langle S_x \rangle$. Посчитаем *интегральную мощность* солитонного решения в верхней полуплоскости

$y > 0$:

$$\mathcal{P} = \int_0^\infty (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) dy = \frac{\pi}{g\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{2}}{g} \arctan \left(\frac{-k\omega + M_0\sqrt{\Omega^2 - \omega^2}}{\sqrt{2}[M_0\omega + k\sqrt{\Omega^2 - \omega^2}]} \right). \quad (2.16)$$

Аналогично найдем *интегральный спин* солитонного решения в верхней полуплоскости:

$$\langle S_x \rangle = \int_0^\infty S_x dy = \frac{1}{2} \int_0^\infty \langle \psi | \hat{\sigma}_x | \psi \rangle dy = \frac{1}{g} \arctan \left(\frac{M_0\omega + k\sqrt{\Omega^2 - \omega^2}}{\Omega^2} \right). \quad (2.17)$$

Используя уравнения (2.17) и (2.16), мы можем получить

$$\begin{aligned} \cos \left(\left(\mathcal{P} - \frac{\pi}{g\sqrt{2}} \right) \frac{g}{\sqrt{2}} \right) &= \cos \left(\arctan \frac{-k\omega + M_0\sqrt{\Omega^2 - \omega^2}}{\sqrt{2}(M_0\omega + k\sqrt{\Omega^2 - \omega^2})} \right) = \\ &= \frac{\sqrt{2}|M_0\omega + k\sqrt{\Omega^2 - \omega^2}|}{\sqrt{\Omega^4 + (M_0\omega + k\sqrt{\Omega^2 - \omega^2})^2}} = \frac{\sqrt{2}|\tan g\langle S_x \rangle|}{\sqrt{1 + (\tan g\langle S_x \rangle)^2}} = \sqrt{2}|\sin g\langle S_x \rangle|, \end{aligned} \quad (2.18)$$

то есть между спином и мощностью существует функциональная связь:

$$\cos \left(\left(\mathcal{P} - \frac{\pi}{g\sqrt{2}} \right) \frac{g}{\sqrt{2}} \right) = \sqrt{2}|\sin g\langle S_x \rangle|. \quad (2.19)$$

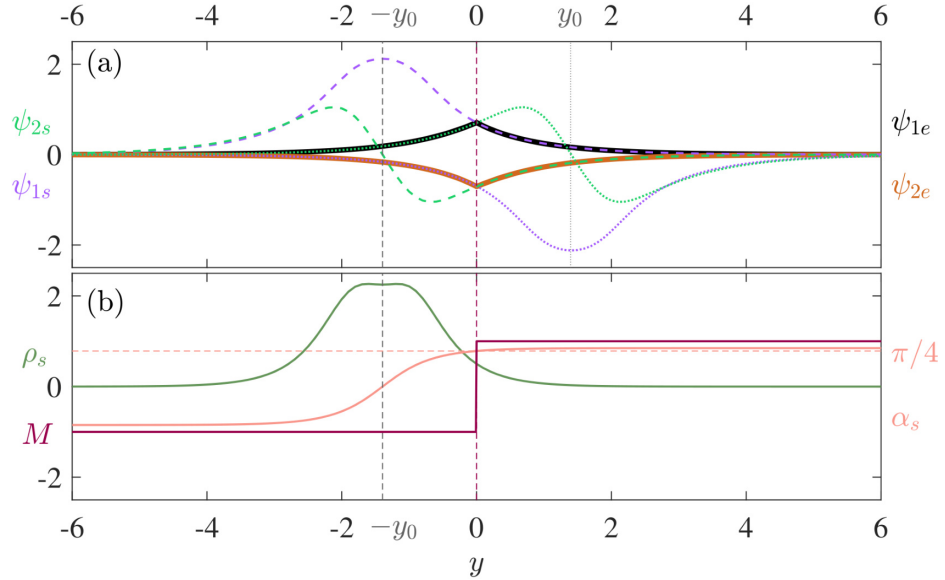


Рисунок 6: Профили компонент нелинейного краевого состояния (верхняя панель) ψ_{1e} (сплошная черная линия) и ψ_{2e} (сплошная коричневая линия), прижатого к доменной стенке, расположенной вдоль прямой $y = 0$. Также построена поперечная структура покоящегося солитона (2.12), смещенного на расстояние $(-/+y_0)$ относительно $y = 0$ и имеющего компоненты ψ_1 (фиолетовый) и ψ_2 (зеленый), определяющего структуру нелинейного краевого состояния в положительной/отрицательной полуплоскости. На нижней панели построен спиновый угол $\alpha_s(y)$ (розовый) и интенсивность $\rho(\alpha_s(y))$, смещенные на $(-y_0)$ влево от доменной стенки. Мы использовали следующие параметры: $M_0 = 1$, $|\psi_{1e}(0)|^2 = |\psi_{2e}(0)|^2 = 0.5$, $g = 0$, $k = 0$.

В случае слабой нелинейности, когда $gI_1/2 \ll |M_0|$ и $|\omega| \ll |M_0|$, $|k| \ll |M_0|$, что соответствует $g\mathcal{P} \ll 1$, соотношение (2.19) упрощается к виду:

$$\mathcal{P} = \frac{\pi}{g\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}}{g} \arccos \left(-\sqrt{2} \sin g \langle S_x \rangle \right), \quad \langle S_x \rangle = -\frac{1}{g} \arcsin \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \left(\mathcal{P} \frac{g}{\sqrt{2}} \right) \right]. \quad (2.20a)$$

При этом для $g\mathcal{P} \rightarrow 0$ мы получаем асимптотический переход к случаю линейной краевой волны, рассмотренной в разделе 2:

$$\mathcal{P} = \frac{I_1}{M}, \quad \langle S_x \rangle = -\frac{1}{2}\mathcal{P}. \quad (2.21a)$$

2.4 Нелинейная динамика краевых импульсов: уравнение для огибающей

2.4.1 Эволюционное уравнение для интегральных характеристик

Из определения интегральной мощности следует, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(\psi_1^* i \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \psi_2^* i \frac{\partial \psi_2}{\partial t} + \psi_1 i \frac{\partial \psi_1^*}{\partial t} + \psi_2 i \frac{\partial \psi_2^*}{\partial t} \right) = i \partial_t \mathcal{P}, \quad (2.22)$$

а пространственная производная от интегрального спина:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(-\psi_1^* i \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \psi_2^* i \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \psi_1 i \frac{\partial \psi_2^*}{\partial x} - \psi_2 i \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right) = -2i \partial_x \langle S_x \rangle. \quad (2.23)$$

Кроме того, мы учтем, что для локализованных решений $\psi_{1,2}$ типа краевых волн, прижатых к доменной стенке, расположенной на оси $y = 0$,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(-\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial y} + \psi_2^* \frac{\partial \psi_1}{\partial y} + \psi_1 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial y} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial y} \right) = \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(\psi_2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial y} - \psi_1 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial y} + \psi_1 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial y} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial y} \right) = 0. \end{aligned}$$

С использованием этих выражений и системы уравнений Дирака можно получить эволюционное уравнение для интегральных характеристик локализованных по поперечной координате решений:

$$\partial_t \mathcal{P} = -2 \partial_x \langle S_x \rangle. \quad (2.24)$$

Если между интегральной мощностью и спином существует функциональная связь, то данное уравнение описывает динамику нелинейной простой волны. Её характерной особенностью является эффект обрушения волнового фронта конечных импульсов по мере распространения.

В линейном пределе $g\mathcal{P} \rightarrow 0$ связь тривиальна: $\mathcal{P} = -2\langle S_x \rangle$, и после её подстановки в (2.24) получим, что интенсивность компонент спинора на доменной стенке $\mathcal{I}_1 \equiv |\psi_{1,2}(y=0)|^2$ удовлетворяет уравнению

$$\partial_t \mathcal{I}_1 + \partial_x \mathcal{I}_1 = 0, \quad (2.25)$$

из которого видно, что линейный краевой импульс любой формы распространяется вдоль x

с групповой скоростью $v = -1$. Заметим, что если $M_0 < 0$, то групповая скорость краевого импульса положительна, $v = 1$, и импульс бежит в противоположную сторону.

2.4.2 Вывод уравнения нелинейной простой волны

Однако и при наличии нелинейности соотношение (2.24) позволяет вывести уравнение, описывающее в рамках континуальной модели нелинейную динамику краевых импульсных сигналов с плавно изменяющимся во времени и в пространстве распределением. В таких импульсах локально структура спинора на протяженных трассах распространения слабо отличается от рассмотренной в предыдущем разделе краевой волны. При этом для $\mathcal{P}$ и $\langle S_x \rangle$ можно приближенно использовать выражения (2.16), (2.17), согласно которым они являются функциями локальной мгновенной частоты $\omega(t, x)$ и локального мгновенного волнового числа $k(t, x)$:

$$\omega = -\frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad k = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (2.26)$$

где $\varphi(t, x)$ – распределение фазы импульса на доменной стенке $y = 0$. Из (2.26) следует соотношение

$$\partial_x \omega = -\partial_t k. \quad (2.27)$$

Найдем входящие в (2.24) производные $\partial_t \mathcal{P}$, $\partial_x \langle S_x \rangle$ от функций

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}(\omega(t, x), k(t, x)), \quad \langle S_x \rangle = \langle S_x \rangle(\omega(t, x), k(t, x)).$$

Используя (2.17), мы получаем

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \frac{4}{g[1 + \cos^2(2\alpha_s(\infty))]} \left(\frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial t} \right); \quad (2.28a)$$

$$\frac{\partial \langle S_x \rangle}{\partial x} = -\frac{2}{g[1 + \cos^2(2\alpha_s(\infty))]} \left(\frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial \omega} \frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial k} \frac{\partial k}{\partial x} \right). \quad (2.28b)$$

Теперь подставим (2.28) в (2.24):

$$\frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial \omega} \left(\frac{\partial \omega}{\partial t} - \frac{\partial \omega}{\partial x} \sin 2\alpha_s(\infty) \right) + \frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial k} \left(\frac{\partial k}{\partial t} - \frac{\partial k}{\partial x} \sin 2\alpha_s(\infty) \right) = 0, \quad (2.29)$$

где $\alpha_s(\infty) \equiv \alpha_s(y = \infty, \omega, k) = -\frac{\delta}{2} + \arctan \left[\frac{\sqrt{\Omega - \omega}}{\sqrt{\Omega + \omega}} \right]$. Если учесть (2.13), то можно все три величины $\frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial \omega}$, $\frac{\partial \alpha_s(\infty)}{\partial k}$, $\sin 2\alpha_s(\infty)$ выразить через ω и k и в итоге получить уравнение

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \left(\frac{M_0 \sqrt{M_0^2 + k^2 - \omega^2} - \omega k}{M_0^2 + k^2} \right) \left(-\frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{\partial k}{\partial t} - \frac{\partial k}{\partial x} \frac{M_0 \sqrt{M_0^2 + k^2 - \omega^2} - \omega k}{M_0^2 + k^2} \right) = 0. \quad (2.30)$$

В слабо нелинейном режиме, когда $k^2, \omega^2 \ll M_0^2$, мы можем упростить уравнение, разлагая коэффициенты в ряд Тейлора по степеням k/M_0 и ω/M_0 . Используя соотношение (2.27), мы получим, что это разложение с квадратичной точностью дает уравнение нелинейной

простой волны для $\omega + k = -g\mathcal{I}_1/2$:

$$\partial_t (\omega + k) - \left(1 - \frac{(\omega + k)^2}{M_0^2}\right) \partial_x (\omega + k) = 0, \quad (2.31)$$

или

$$\partial_t \mathcal{I}_1 - (1 - g^2 \mathcal{I}_1^2 / (4M_0^2)) \partial_x \mathcal{I}_1 = 0. \quad (2.32)$$

Таким образом, мы показали, что динамика краевого импульса при наличии слабой фокусирующей ($g > 0$) Керровской нелинейности описывается уравнением нелинейной простой волны (2.32). По мере распространения его задний фронт будет укрущаться.

Решением (2.32) является функция вида $\mathcal{I}_1 = f(x - v(f)t)$, профиль f находится из начального условия $f(x, t = 0) = f_0(x)$. Данное решение справедливо до момента обрушения волнового фронта, происходящего при пересечении характеристик уравнения. Характеристиками называют семейство кривых $x = x' + v(f_0(x'))$, где штрихованная координата x' — это точки, в которых было задано начальное распределение. Амплитуда распределения по мере распространения сохраняется на характеристиках. Так как скорость зависит от координаты, найдется точка, в которой характеристики пересекаются.

В случае заданного начального распределения $\mathcal{I}_1(x, t = 0) = f_0(x)$, решая уравнение методом характеристик, мы найдем время обрушения t^* :

$$t^* = \min_x \left[-\frac{1}{(\partial_{\mathcal{I}_1} v)(\partial_x f_0)} \right]. \quad (2.33)$$

Если начальное распределение имеет Гауссов профиль $f_0(x) = F_0 e^{-x^2/\Lambda_0^2}$, то в случае выведенного нами выражения групповой скорости $v = 1 - g^2 \mathcal{I}_1^2 / (4M_0^2)$ для времени обрушения справедливо выражение:

$$t^* = 2\sqrt{e} \frac{M_0^2}{g^2 F_0^2} \Lambda_0. \quad (2.34)$$

2.4.3 Асимптотический подход

В этом разделе уравнение (2.32) будет получено с использованием асимптотических методов для случая слабой нелинейности. При этом мы учтем дисперсию (вторые производные по пространственным координатам) в Дираковской модели:

$$i\partial_t \Psi = \begin{pmatrix} M - g|\psi_1|^2 & -i\partial_x - \partial_y - \eta(-i\partial_x + \partial_y)^2 \\ -i\partial_x + \partial_y - \eta(i\partial_x + \partial_y)^2 & -M - g|\psi_2|^2 \end{pmatrix} \Psi, \quad (2.35)$$

где коэффициент $\eta = \kappa a^2/8$ (см. Приложение А.1).

Для упрощения выкладок введём новые функции

$$\Phi_1 = \frac{\Psi_1 + \Psi_2}{\sqrt{2}}, \quad \Phi_2 = \frac{\Psi_1 - \Psi_2}{\sqrt{2}}. \quad (2.36)$$

Тогда, с учетом замены переменных $x + t \equiv \xi$, система (2.35) переписывается в виде:

$$i\partial_t\Phi_1 + 2i\partial_\xi\Phi_1 = \partial_y\Phi_2 + M\Phi_2 - \frac{g}{2}F\Phi_1 - \frac{g}{2}G\Phi_2 + \eta(-\partial_{yy}\Phi_1 + \partial_{\xi\xi}\Phi_1 - 2i\partial_{\xi y}\Phi_2); \quad (2.37a)$$

$$i\partial_t\Phi_2 = -\partial_y\Phi_1 + M\Phi_1 - \frac{g}{2}F\Phi_2 - \frac{g}{2}G\Phi_1 + \eta(\partial_{yy}\Phi_2 - \partial_{\xi\xi}\Phi_2 + 2i\partial_{\xi y}\Phi_1), \quad (2.37b)$$

где $F = |\Phi_1|^2 + |\Phi_2|^2$ и $G = \Phi_1\Phi_2^* + \Phi_1^*\Phi_2$. При $g = 0$ и $\eta = 0$ решение (2.37) записывается как:

$$\begin{pmatrix} \Phi_1^{(0)} \\ \Phi_2^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2}\sqrt{\mathcal{I}_1}e^{i\omega_0\xi}e^{-M_0|y|} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ a(\xi)e^{-M_0|y|} \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Для описания систем с малой нелинейностью ($g\mathcal{I}_1 \ll M_0$) мы строим асимптотический ряд на основании решения в линейном случае (2.38). Мы вводим малый параметр $\mu \sim g\mathcal{I}_1/M_0$. Вклад пространственной дисперсии учитывается в асимптотике второго порядка, то есть $\eta M_0 \sim \mu^2$.

$$\Phi_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \mu^n \Phi_1^{(n)}(y; \xi; \tau_1, \tau_2 \dots); \quad \Phi_2 = a(\xi; \tau_1, \tau_2 \dots)e^{-M_0|y|} + \sum_{n=1}^{\infty} \mu^n \Phi_2^{(n)}(y; \xi; \tau_1, \tau_2 \dots). \quad (2.39a)$$

В итоге мы получаем эволюционное уравнение для краевого импульса с точностью до членов порядка $\sim \mu^2$:

$$i\frac{\partial a}{\partial t} \approx -\eta\frac{\partial^2 a}{\partial \xi^2} + M_0^2\eta a - \frac{g}{4}|a|^2 a - i\frac{g^2}{32M_0^2}|a|^2\frac{\partial |a|^2}{\partial \xi}a, \quad (2.40)$$

которое полностью соответствует ранее полученному уравнению (2.32) для интенсивности $\mathcal{I}_1 = |a|^2/2$ в случае пренебрежения пространственной дисперсией.

Затем мы можем найти солитонные решения данного уравнения вида $\tilde{a} = \mathcal{A}(\zeta)e^{-i\omega_s t + i\varphi(\zeta)}$, где $\zeta = \xi - vt$, $\mathcal{A}(\zeta \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ действительная функция, уравнение для которой:

$$\mathcal{A}'' = -\left(\frac{\omega_s}{\eta} - M_0^2\right)\mathcal{A} - \frac{g}{4\eta}\mathcal{A}^3 + \frac{g^4}{96^2\eta^2 M_0^4}\mathcal{A}^9. \quad (2.41)$$

Интегрируемость уравнения (2.41) обусловлена его представлением в виде $\mathcal{A}'' = -\frac{\partial U(\mathcal{A})}{\partial \mathcal{A}}$, где U имеет смысл потенциала (рис. 7):

$$U = \left(\frac{\omega_s}{\eta} - M_0^2\right)\frac{\mathcal{A}^2}{2} + \frac{g}{4\eta}\frac{\mathcal{A}^4}{4} - \frac{g^4}{96^2\eta^2 M_0^4}\frac{\mathcal{A}^{10}}{10}. \quad (2.42)$$

Солитонным решениям отвечают сепаратрисы на фазовой плоскости $(\mathcal{A}', \mathcal{A})$, соединяющие седловую точку $(0, 0)$, которая существует при $(\omega_s/\eta - M_0^2) < 0$.

В рамках сделанных приближений при выводе (2.41) вклад последнего нелинейного слагаемого оказывается малым. В результате, форма солитонных решений (2.41) близка к

решениям, известным для уравнения Шрёдингера:

$$\mathcal{A}'' = -\left(\frac{\omega_s}{\eta} - M_0^2\right)\mathcal{A} - \frac{g}{4\eta}\mathcal{A}^3; \quad \mathcal{A} = \frac{\sqrt{8(M_0^2\eta - \omega_s)/g}}{\cosh\left(\zeta\sqrt{M_0^2 - \omega_s/\eta}\right)}. \quad (2.43)$$

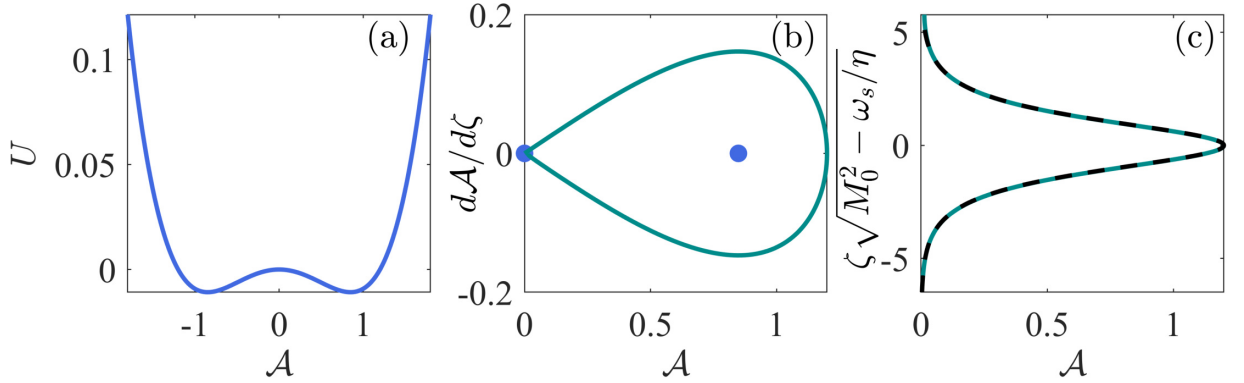


Рисунок 7: (а): нелинейный потенциал $U(\mathcal{A})$. (b): сепаратрисная траектория, проходящая через седловую точку на фазовой плоскости в переменных $(\mathcal{A}', \mathcal{A})$. Синие кружочки соответствуют двум точкам равновесия: седлу с координатами $(0, 0)$ и центру $(0, 0.8)$. (с): пространственная структура $\mathcal{A}_s = \mathcal{A}_s(\zeta)$ солитона, соответствующая сепаратрисе (b) изображена сплошной синей линией, черный пунктир – солитон уравнения Шрёдингера. Параметры: $\kappa = 1$, $M_0 = \kappa/3$, $v_D = 1$, $\omega_s = M_0^2\eta - 0.01$; малые параметры: $g(\max(\mathcal{A}_s))^2/M_0 = 0.24 \sim \mu \ll 1$, $\eta M_0 = 0.05 \sim \mu^2$.

2.5 Эффект градиентной катастрофы

2.5.1 Обрушение волнового фронта в рамках Дираковской модели

Рассмотрим, как в численном моделировании эволюции в рамках системы Дираковских уравнений реализуется процесс опрокидывания.

Зададим в качестве начального распределения при $t = 0$ функцию ψ_0 – нелинейную краевую волну, определённую с помощью (2.13) и граничных условий (2.8) (рис. 6). Пусть исходный профиль интенсивности $\mathcal{I}_1(x, y = 0)$ на доменной стенке задан в виде Гауссовой функции, тогда волновое число k и частота ω , фигурирующие в (2.13), являются функциями координаты x . Для численного моделирования эволюции в рамках Дираковских уравнений мы будем применять *метод операторной экспоненты*, описанный в Приложении D.1.

На рис. 8 представлен результат численного моделирования динамики краевого импульса: его укручение, нарастание асимметрии переднего и заднего фронта, то есть типичная иллюстрация процесса опрокидывания. Обрушение происходит на заднем фронте, как и ожидалось из вида групповой скорости, уменьшающейся при увеличении амплитуды. Как мы видим из рис. 8, динамика интенсивности на доменной стенке хорошо описывается уравнением простой волны вплоть до значительного укручения профиля.

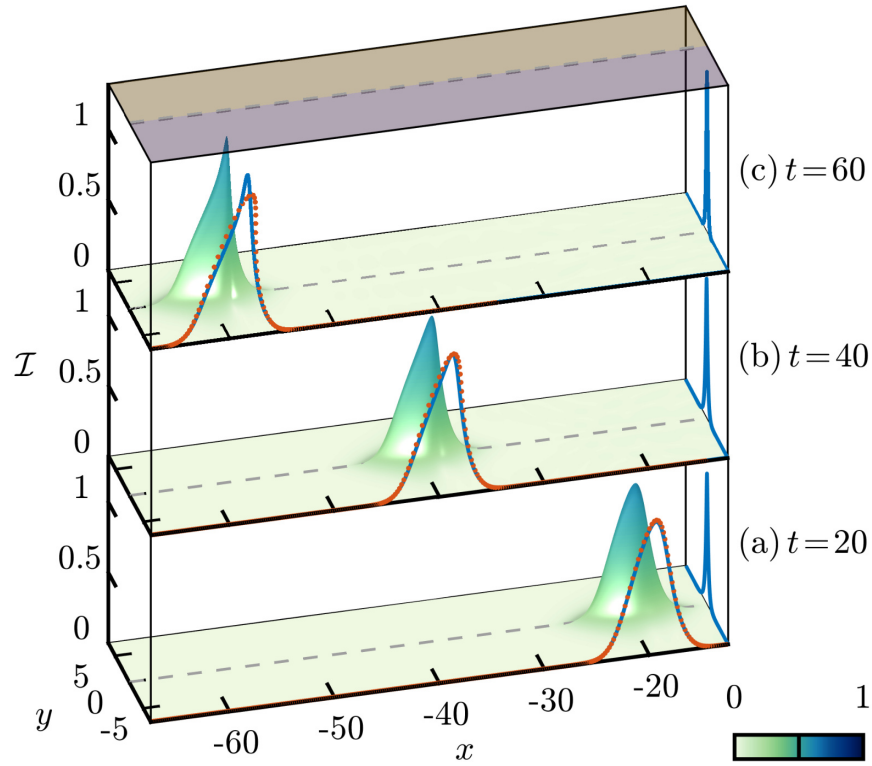


Рисунок 8: Профиль интенсивности $\mathcal{I}(x, y) = |\psi_1(x, y)|^2 + |\psi_2(x, y)|^2$ для различных моментов времени $t = 20; 40; 60$. В проекциях на плоскость $(x, \mathcal{I})$ оранжевый пунктир изображает решение, соответствующее аналитическому решению уравнения простой волны (2.32), а синие линии – численному моделированию с использованием метода операторной экспоненты. Параметры: $M_0 = 1$; $g = 0.75$; $F_0 = 0.5$; $\Lambda_0 = 3.5/\sqrt{2}$.

Затем было оценено значение времени t , когда происходит опрокидывание волнового фронта в рамках системы Дираковских уравнений. Для этого мы учли, что максимальное значение производной интенсивности вдоль доменной стенки $\Delta = \max_x \left[\frac{\partial \mathcal{I}_1}{\partial x} \right]$ резко возрастает при обрушении фронта, а именно – в 3 раза превышает начальное значение. Мы получили, что теоретическая зависимость (2.34) корректно, с точностью, превышающей 70 %, описывает поведение времени опрокидывания от ширины распределения – чем больше поперечный масштаб, тем медленнее профиль будет укручаться.

2.5.2 Квазисолитонные краевые импульсы

В дальнейшем мы численно регуляризовали опрокидывание, учтя пространственную дисперсию, что соответствует введению в систему нелинейных уравнений Дирака вторых производных по пространственным координатам, как в исследованной с помощью асимптотических методов системе (2.35).

Численное моделирование показало формирование квазисолитонных краевых импульсов в области обрушения заднего фронта на больших временах. Эволюция начального Гауссова профиля с учетом дисперсии представлена на рис. 9. Сильно локализованные квазисолитонные импульсы формируются в результате дробления начального распределения и по мере дальнейшего распространения вдоль доменной стенки практически не меняют свою форму.

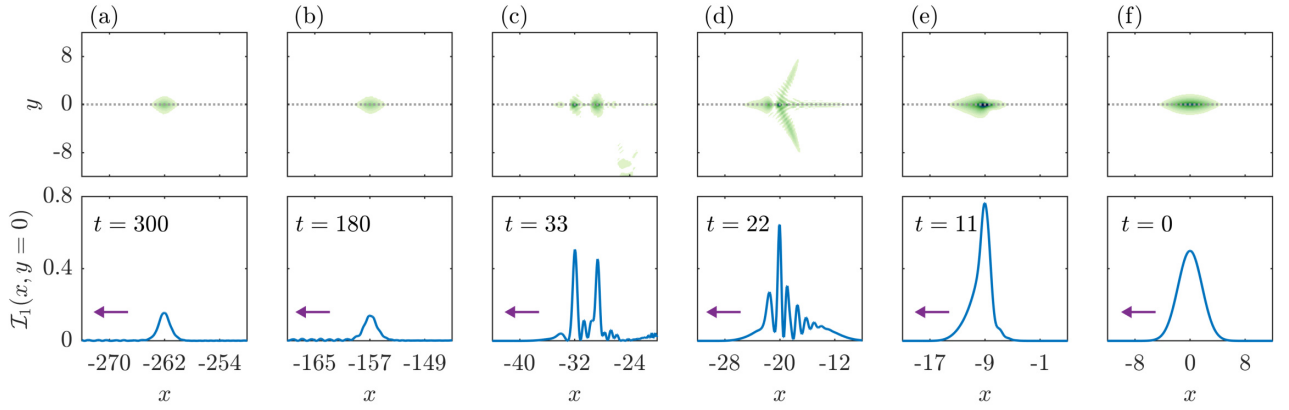


Рисунок 9: Формирование квазисолитонных локализованных краевых импульсов. Верхний ряд – распределение $|\psi_1(x, y)|^2$ в плоскости фотонной решетки, нижний ряд – распределение вдоль доменной стенки при $y = 0$. Параметры $M_0 = 1$; $g = 1$; $\Lambda_0 = 3.5/\sqrt{2}$; $F_0 = 0.5$; $\eta = 0.05$.

Далее мы рассмотрели эволюцию квазисолитонных краевых импульсов, вид которых был получен с помощью асимптотических методов, описанных в разделе 2.4.3. В случае слабых нелинейности g и пространственной дисперсии η нам удалось получить приближенное уравнение, напоминающее нелинейное уравнение Шрёдингера, и найти квазианалитически профиль солитонного импульса, не меняющего форму по мере распространения.

Эволюция начального распределения, соответствующего квазисолитонному профилю, представлена на рис. 10. Видно, что форма его не меняется на достаточно протяженных интервалах времени. Даже в случае деформации доменной стенки в виде загиба, что схематично изображено серым пунктиром, импульс следует точно вдоль нее и сохраняет солитонный профиль, что показывает его устойчивость.

2.5.3 Распространение света в реалистичной фотонной решетке

В предыдущих разделах мы обсудили результаты, полученные в рамках уравнений Дирака, соответствующих модельной задаче. Теперь перейдем к рассмотрению реалистичной решетки эллиптических волноводов, изготовленной с помощью лазерной записи в стекле, для описания которой с хорошей степенью точности можно использовать *параксиальное уравнение* (Приложение В.2) с параметрами, представленными в таблице 1, близкими к экспериментальной работе [120].

Доменная стенка в данной структуре вводится путем изменения показателей преломления в разных подрешетках на границе, обозначенной пунктиром, как схематично изображено на рис. 11(b).

Для начала мы численно нашли пространственную структуру краевой моды с помощью метода разложения по плоским волнам (D.3). Для этого мы применили указанную численную схему для прямоугольной области, изображенной на рис. 11(b) (суперячейки). Периодичность структуры, составленной из ряда подобных прямоугольников вдоль оси x , гарантируется выбором размера суперячейки $\mathcal{L}_x = \sqrt{3}a_0$, $\mathcal{L}_y = \frac{3}{2}a_0$, соответствующему пространственному периоду вдоль осей абсцисс и ординат бесконечной решетки на основе графена.

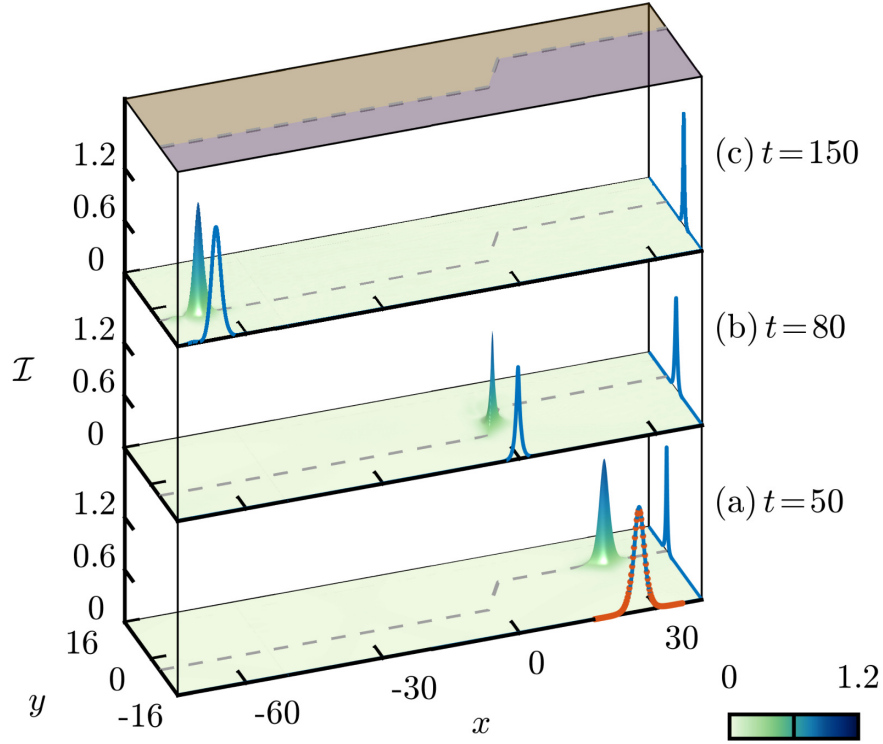


Рисунок 10: Эволюция начального распределения, соответствующего квазисолитонному профилю, являющемуся решением уравнения 2.41. Параметры: $M_0 = 1$; $g = 0.125$; $\eta = 0.05$; $\omega_s = 0.02$. Обозначения, как на рис. 8.

На рис. 11(a) представлена численно полученная зонная диаграмма. Как мы видим, особенностью зависимости $\beta = \beta(k)$ является наличие краевых состояний, имеющих бесщелевой линейный спектр около точки $k = K_+$ (выделено красной звездочкой на рисунке). Исходя из данного вида зонной структуры, мы можем заключить, что фотонная решетка с такими параметрами, как в таблице 1, хорошо соответствует теоретической модели, построенной в континуальном пределе. А именно, данной решетке волноводов соответствует модель сильной связи с параметрами $\kappa = 3.47 \text{ см}^{-1}$, $M_0 = 1.73 \text{ см}^{-1}$ (коэффициенты подобраны так, чтобы зонные структуры соответствовали) и коэффициентом нелинейности $g = n_2 k_0 / n_0$.

Среди собственных мод данной системы нами было выделено решение в виде краевой волны, прижатой к интерфейсу, его поперечная структура $u(x, y)$ изображена на рис. 11(c).

Далее мы промоделировали распространение волнового пучка вдоль оси z . В начальный момент времени его пространственная структура в направлении вдоль оси y соответствует линейной краевой моде $u(x, y)$, а по оси x мы задали Гауссову огибающую:

$$\mathcal{E}(z = 0, x, y) = F_0 e^{-x^2/\Lambda_0^2} e^{iK_+ x} u(x, y). \quad (2.44)$$

Для численного моделирования нами был использован *метод распространения лучей (beam propagation method, BPM)*, который описан в Приложении D.2.

Эволюция исходного распределения вида (2.44) представлена на рис. 12. Как и ожидалось, в линейном случае импульс распространяется без искажения профиля. В нелинейном же наблюдается укрупнение профиля, нарастает асимметрия переднего и заднего фронтов, что

Параметр	значение
L_x	3.2 мкм
L_y	4.9 мкм
a_0	19 мкм
a	$\sqrt{3}a_0$
n_0	1.47
n_A	2.6×10^{-3}
n_B	2.8×10^{-3}
n_2	$3 \times 10^{-20} \text{ м}^2/\text{Вт}$
λ	1650 нм
I_0	$10^{16} \text{ Вт}/\text{м}^2$
w_0	10 мкм
z_0	$2k_0w_0^2 = 0.0011 \text{ м}$

Таблица 1: Параметры реалистичной фотонной решетки, используемой в моделировании (основано на [120]).

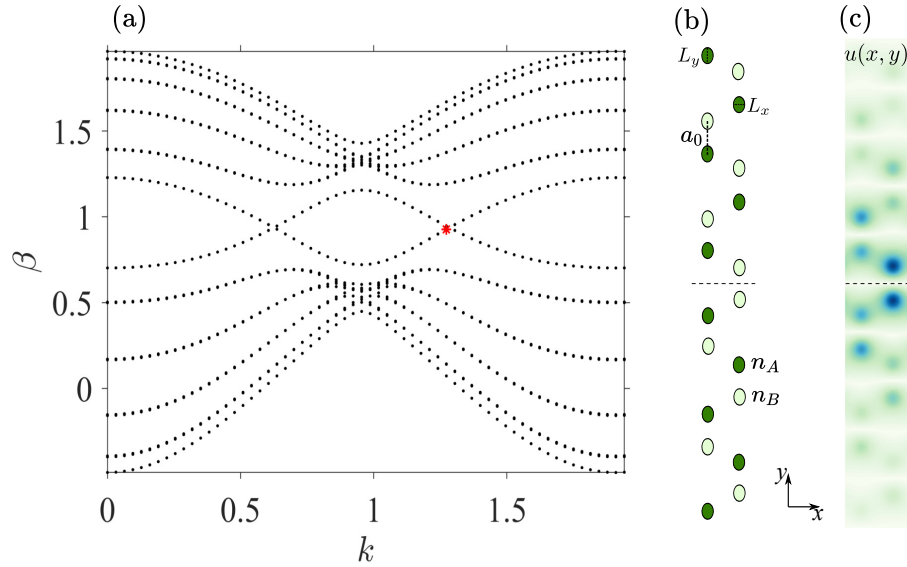


Рисунок 11: Зонная структура (a) и соответствующая геометрия (b) фотонной решетки, состоящей из эллиптических волноводов с полуосями L_x ; L_y , на основе графена с пространственным периодом $\sqrt{3}a_0$. На (c) изображен профиль краевой моды $u(x, y)$, возникающей около точки $k = K_+$, соответствующий красной звездочке на (a). Серые пунктирные линии на (b,c) демонстрируют расположение доменной стенки, темно-зеленым и светло-зеленым цветам волноводов соответствуют разные возмущения показателя преломления n_A , n_B .

соответствует развитию градиентной катастрофы и подтверждает наше ожидание, выведенное на основании Дираковской модели.

Затем мы провели сравнение динамики импульса, полученной в моделировании параксиального уравнения (рис. 13 слева) и уравнения Дирака (рис. 13 справа). Построена интенсивность в плоскости xz , где z – эволюционная координата.

Как мы видим, максимум распределения поля (обозначенный оранжевым цветом) демонстрирует качественно схожее поведение, демонстрируя эффект опрокидывания. Это доказывает применимость нашего описания нелинейной динамики краевого импульса к реалистичным топологическим системам.

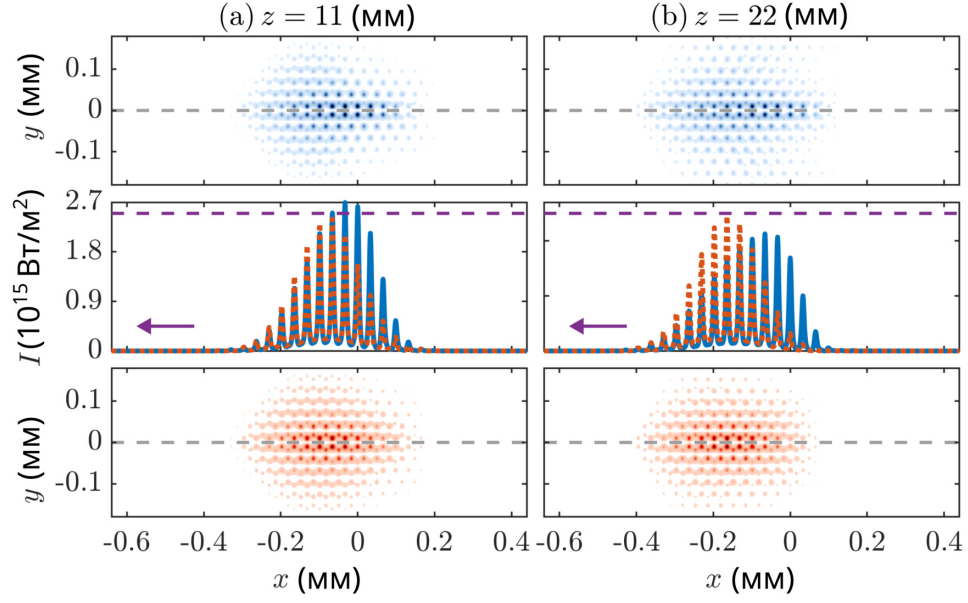


Рисунок 12: Решение параксиального уравнения с начальным распределением, заданным в форме уравнения (2.44). Здесь красный цвет соответствует линейному случаю ($n_2 = 0$), а синий – нелинейному. В верхней и нижней строках изображено распределение интенсивности в плоскости фотонной решетки xy , в средней строке – профиль интенсивности вдоль доменной стенки. Параметры Гауссова распределения: $\Lambda_0 = 5a/\sqrt{2}$; $F_0 = 0.25I_0$ (также см. таблицу 1).

В параксиальном приближении мы можем проверить зависимость координаты обрушения от параметров (2.34) (с заменой $z^* = v_D t^*$). На рис. 14 изображен вид z^* как функции начальной интенсивности, полученный численно и теоретически. Точка опрокидывания, найденная в численном моделировании, рассчитывается следующим образом. Определим огибающую волнового пакета как функцию, значения которой заданы в центрах волноводов. Тогда резкое изменение соседних значений нормированной огибающей (производной) означает развитие градиентной катастрофы. На рисунке синими крестиками показаны координаты, при которых производная превышает начальное значение в 1,3 раза.

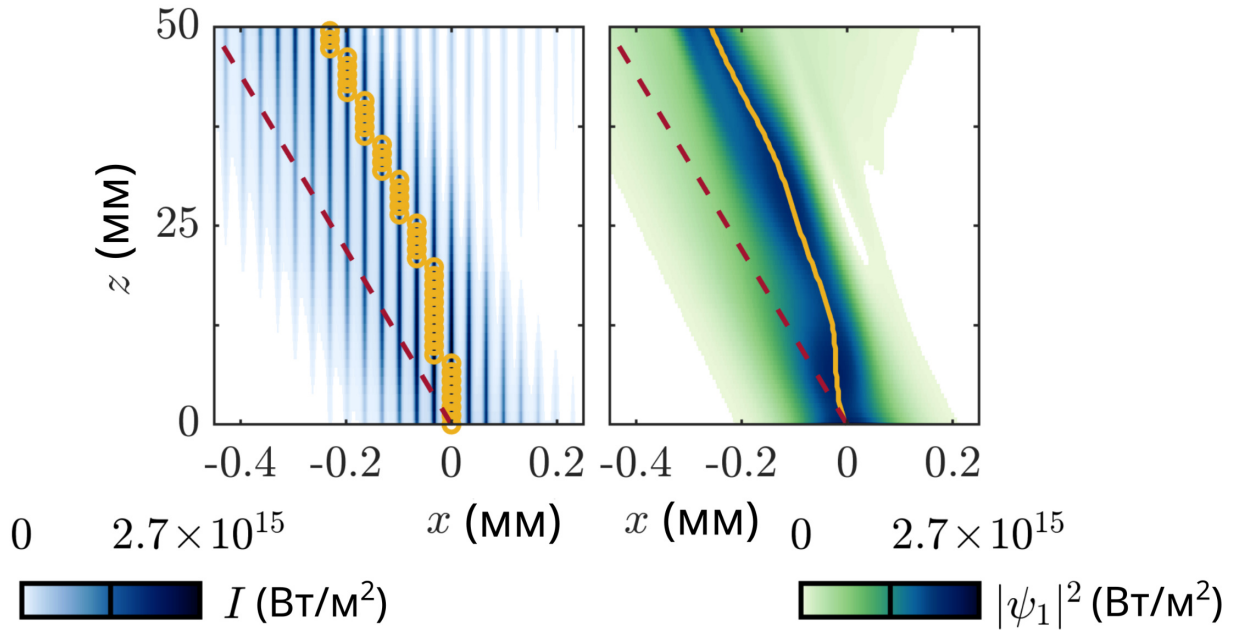


Рисунок 13: Сравнение динамики импульса (построена интенсивность в плоскости (x, z)), полученной в моделировании параксиального уравнения (на панели слева) и уравнений Дирака (справа). Параметры как на рис.12. Красные пунктирные линии показывают эволюцию положения максимума распределения поля в линейном случае, а желтым цветом обозначены результаты, соответствующие нелинейной ситуации.

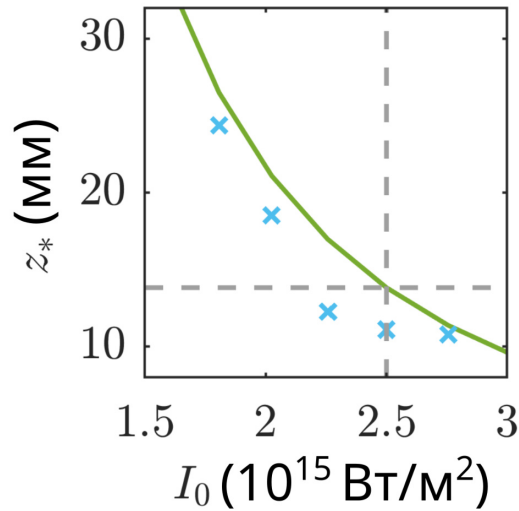


Рисунок 14: Сравнение зависимости координаты обрушения z^* от начальной интенсивности I_0 , вычисленной теоретически (уравнение (2.34), $z^* = v_D t^*$, построено зелеными сплошными линиями) и полученной численно в рамках параксиального уравнения (построено синими крестиками). Вертикальная пунктирная серая линия соответствует значению начальной интенсивности, как на рис. 13, 12.

2.6 Модуляционная неустойчивость нелинейных краевых волн

В данном разделе мы изучим модуляционную неустойчивость нелинейных краевых мод к длинноволновым низкоамплитудным возмущениям.

2.6.1 Модуляционная неустойчивость в модифицированном НУШ

Для начала мы исследуем на неустойчивость стационарное решение выведенного нами уравнения (2.40) в виде нелинейной краевой волны, локализованной на доменной стенке $y = 0$:

$$a = \mathcal{A}_0 e^{i(g\mathcal{A}_0^2/4 - \eta M_0^2)t}. \quad (2.45)$$

К этому решению мы добавим малоамплитудное возмущение $\delta\mathcal{A}_0 \equiv U + iV \sim \mu^1$ и будем искать решение уравнения (2.40) в виде:

$$a = (\mathcal{A}_0 + \delta\mathcal{A}_0) e^{i(g\mathcal{A}_0^2/4 - \eta M_0^2)t}. \quad (2.46)$$

Далее подставим (2.46) в уравнение (2.40) и получим систему уравнений для действительной и мнимой части возмущений в первом порядке малости:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{g^2 \mathcal{A}_0^4}{16 M_0^2} \frac{\partial U}{\partial \xi} + \eta \frac{\partial^2 V}{\partial \xi^2} = 0; \quad (2.47a)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} - \eta \frac{\partial^2 U}{\partial \xi^2} - \frac{g \mathcal{A}_0^2}{2} U = 0. \quad (2.47b)$$

Далее мы рассмотрим возмущения вида простых волн $[U, V] \equiv \text{Re}([C_U, C_V]e^{-i\lambda t + i\kappa \xi})$, тогда из уравнения (2.47) следует система для $C_{U,V}$:

$$\begin{pmatrix} -i\lambda + i\frac{\bar{\mu}^2 \kappa}{4} & -\eta \kappa^2 \\ \eta \kappa^2 - \bar{\mu} M_0 & -i\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_U \\ C_V \end{pmatrix} = 0, \quad (2.48)$$

где мы ввели $\bar{\mu} = gI_1/M_0 \equiv g\mathcal{A}_0^2/(2M_0)$. Приравнявая детерминант системы к нулю, мы получаем выражение

$$\lambda(\kappa) = \frac{\bar{\mu}^2 \kappa}{8} \pm i \sqrt{\eta \kappa^2 (\bar{\mu} M_0 - \eta \kappa^2) - \frac{\bar{\mu}^4 \kappa^2}{64}}. \quad (2.49)$$

В случае без дисперсии $\eta = 0$ нелинейная краевая волна устойчива. Положительное подкоренное выражение $\eta \kappa^2 (\bar{\mu} M_0 - \eta \kappa^2) > \bar{\mu}^4 \kappa^2 / 64$ означает развитие неустойчивости, поэтому условие возникновения неустойчивых решений принимает вид $-\eta^2 \kappa^2 + \bar{\mu} M_0 \eta > \bar{\mu}^4 / 64$. Чтобы данное неравенство было справедливо для всех значений волновых векторов κ , необходимо установить соотношение между параметрами M_0 , η , $\bar{\mu}$. Так как максимальное значение $-\eta^2 \kappa^4$ равно 0, условие неустойчивости может быть записано как

$$\bar{\mu} \eta > \frac{\bar{\mu}^4}{64 M_0} = \frac{1}{4 M_0^5} \left(\frac{g I_1}{2} \right)^4. \quad (2.50)$$

Данный анализ предсказывает неожиданное явление: *волны с большой амплитудой могут оставаться устойчивыми* при параметрах, удовлетворяющих условию (2.50). Это означает, что при учёте нелинейной поправки к скорости в модифицированном НУШ область неустойчивости отличается от таковой в классическом НУШ, где этот вклад не учитывается. Это наглядно иллюстрируется на рис. 15(a,b). Таким образом, нелинейная скорость оказывает стабилизирующее влияние на краевую моду и снижает вероятность обрушения её фронта. Примеры эволюции неустойчивых и устойчивых краевых волн, смоделированных в рамках нелинейной модели Дирака, представлены на рис. 15(c-f).

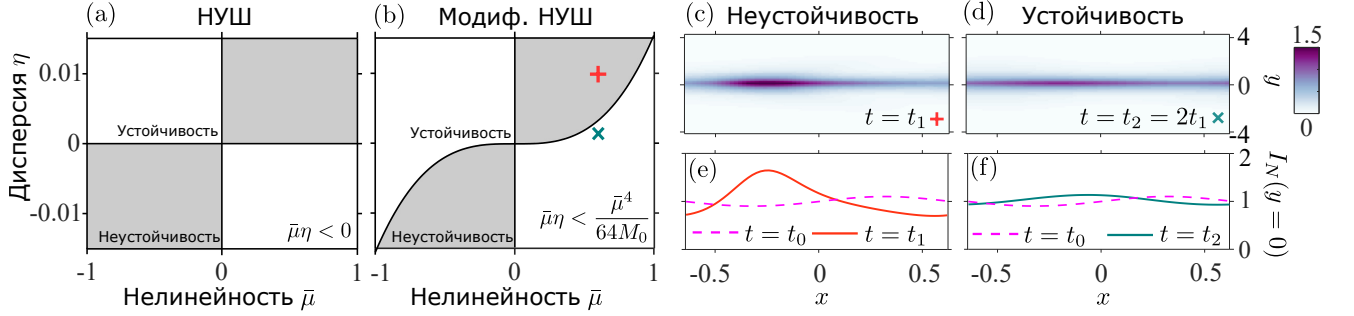


Рисунок 15: (a,b): анализ модуляционной неустойчивости в рамках уравнения (2.40). На карте отмечены области устойчивости (белый цвет) и неустойчивости (серый цвет) нелинейных краевых мод в случаях, когда (a) член, отвечающий нелинейной групповой скорости, опущен (стандартное нелинейное уравнение Шрёдингера, НУШ), и (b) корректно учтён в модифицированном нелинейном уравнении Шрёдингера (модиф. НУШ) (2.40). (c,d): нормированное распределение интенсивности $I_N = (|\Psi_1(x, y)|^2 + |\Psi_2(x, y)|^2) / I_1$ в плоскости xu для (c) неустойчивых (маркер "+") и (d) устойчивых (маркер "x") краевых волн, полученное путём численного моделирования эволюционной задачи в рамках нелинейной Дираковской модели, описываемой уравнением (2.35), в моменты времени $t_1 = 8$ и $2t_1$, соответственно. (e,f): профили интенсивности вдоль доменной стенки, расположенной при $y = 0$, в начальный момент времени $t = 0$ (пунктирные розовые линии) и после эволюции системы (сплошная зеленая линия для устойчивого случая и сплошная красная линия для неустойчивого случая) до моментов времени, соответствующих панелям (c,d). Параметры моделирования: $M_0 = 1$, $g = 0.6$, $k = 0$, волновой вектор возмущения $\kappa = 4.9$, $I_1 = 1$, $\eta = (\bar{\mu}^3/64M_0)/3$ (устойчивый режим), $\eta = (\bar{\mu}^3/64M_0) \times 3$ (неустойчивый режим), где $\bar{\mu} = (gI_1)/M_0$ (см. уравнение (2.50)).

2.6.2 Модуляционная неустойчивость в нелинейных Дираковских уравнениях

Для проверки наших аналитических предсказаний мы рассчитали спектры возмущений непосредственно в системе нелинейных уравнений Дирака (2.35). Стационарное решение $(\psi_1^s(y), \psi_2^s(y))^T e^{ikx - i\omega_s t}$ этой системы может быть получено численно. Для этого мы сначала находим линейную собственную моду уравнения (2.35) при $g = 0$, а затем используем её в качестве начального приближения для решения нелинейной системы методом Ньютона. Поперечные профили компонент нелинейной краевой моды изображены на рис. 16(c,e) черным цветом. Видно, что профиль волны с большей интенсивностью (устойчивый случай) сильно асимметричен относительно доменной стенки.

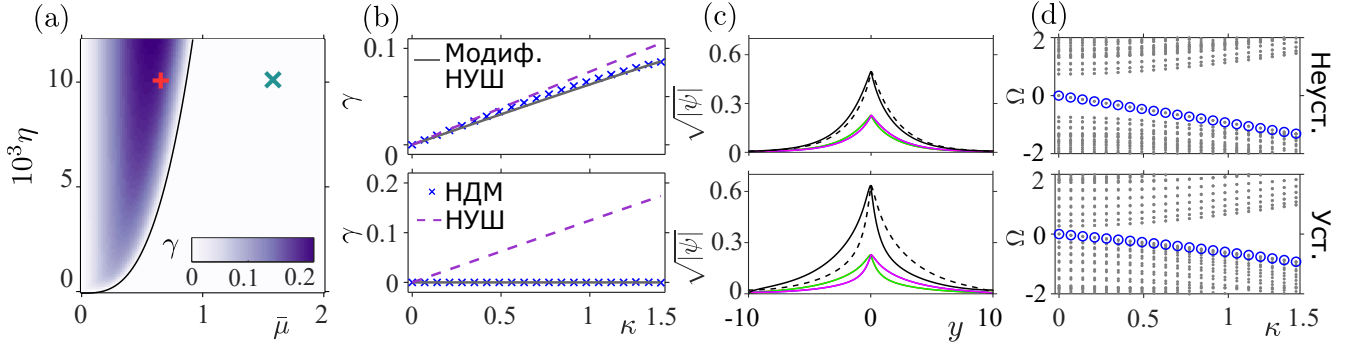


Рисунок 16: Анализ модуляционной неустойчивости в рамках уравнений (2.35) (нелинейная Дираковская модель, НДМ), (2.40) (модиф. НУШ). (a): распределение инкремента неустойчивости в плоскости параметров дисперсии η и нелинейности $\bar{\mu}$, рассчитанная с использованием уравнения (2.49). (b): сравнение инкремента неустойчивости для поперечно локализованных возмущений в устойчивом и неустойчивом случаях, полученных в рамках: нелинейной модели Дирака (2.35) (синие кресты), модифицированного НУШ (2.40) (черная сплошная линия), классического НУШ (фиолетовая пунктирная линия). (c): профили поля и (d) вещественная часть собственной частоты возмущения $\Omega \equiv \text{Re } \lambda$ в устойчивом (нижний ряд на (d)) и неустойчивом (верхний ряд на (d)) случаях, рассчитанные с использованием уравнения (2.35). Серые точки соответствуют возмущениям, локализованным в объеме. (c): профили спинорных компонент в нелинейной краевой моде: $\psi_1^s(y)$ (черная сплошная линия) и $\psi_2^s(y)$ (серая пунктирная линия). Цветные линии: профили собственного вектора возмущения $\delta\psi_1$ (зеленая) и $\delta\psi_2$ (розовая). Параметры: $M_0 = 1$, $g = 10$, $\eta = 0.01$, амплитуды $\sqrt{I_1} = 0.25$ (неустойчивый случай), $\sqrt{I_1} = 0.4$ (устойчивый случай).

Как и ранее, мы рассмотрим возмущённую нелинейную краевую волну:

$$\Psi_{1,2} = (\psi_{1,2}^s(y) + \delta\psi_{1,2}(x, y, t))e^{ikx - i\omega_s t} \quad (2.51)$$

и подставим это выражение в (2.35). Учитывая, что $\psi_{1,2}^s(y)$ являются точным решением стационарной задачи, мы получим следующую систему уравнений для комплексных амплитуд возмущения:

$$\begin{aligned} \omega_s \delta\psi_1 + i\partial_t \delta\psi_1 = & k\delta\psi_2 - i\partial_x \delta\psi_2 - \partial_y \delta\psi_2 + M\delta\psi_1 - g(2\delta\psi_1(\psi_1^s)^2 + \delta\psi_1^*(\psi_1^s)^2) \\ & - \eta[\delta\psi_2 k^2 - \partial_{xx} \delta\psi_2 - 2i\partial_{yx} \delta\psi_2 + 2k\partial_y \delta\psi_2 + \partial_{yy} \delta\psi_2]; \end{aligned} \quad (2.52a)$$

$$\begin{aligned} \omega_s \delta\psi_2 + i\partial_t \delta\psi_2 = & k\delta\psi_1 - i\partial_x \delta\psi_1 + \partial_y \delta\psi_1 - M\delta\psi_2 - g(2\delta\psi_2(\psi_2^s)^2 + \delta\psi_2^*(\psi_2^s)^2) \\ & - \eta[\delta\psi_1 k^2 - \partial_{xx} \delta\psi_1 + 2i\partial_{yx} \delta\psi_1 - 2k\partial_y \delta\psi_1 + \partial_{yy} \delta\psi_1]. \end{aligned} \quad (2.52b)$$

Затем мы рассмотрим следующий вид возмущений:

$$\delta\psi_{1,2}(x, y, t) = \delta\varphi_{1,2}(y)e^{ikx - i\lambda t} + \delta\tilde{\varphi}_{1,2}^*(y)e^{-ikx + i\lambda^* t}, \quad (2.53)$$

подставим его в систему уравнений (2.52) и линеаризуем их относительно возмущений. Нако-

нец, мы получим Гамильтониан $\hat{H}_d$, действующий на вектор возмущений $[\delta\varphi_1, \delta\tilde{\varphi}_1, \delta\varphi_2, \delta\tilde{\varphi}_2]$:

$$\begin{pmatrix} M(y) - \omega_s - 2g|\psi_1^s(y)|^2 & -g(\psi_1^s(y))^2 & k + \kappa - \partial_y & 0 \\ (g(\psi_1^s(y))^2)^* & -M(y) + \omega_s + 2g|\psi_1^s(y)|^2 & 0 & -k + \kappa + \partial_y \\ -\eta(k^2 + \kappa^2 - 2\kappa\partial_y - 2k\partial_y + \partial_{yy}) & 0 & -M(y) - \omega_s - 2g|\psi_2^s(y)|^2 & -g(\psi_2^s(y))^2 \\ 0 & -\eta(-k^2 - \kappa^2 - 2\kappa\partial_y + 2k\partial_y - \partial_{yy}) & g((\psi_2^s(y))^2)^* & M(y) + \omega_s + 2g|\psi_2^s(y)|^2 \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Для дальнейшего исследования стационарных решений на неустойчивость необходимо получить действительную и мнимую часть собственных чисел Гамильтониана $\hat{H}_d$. Для получения спектра данного Гамильтониана $\hat{H}_d$ мы применяем схему дискретизации, описанную в Приложении D.4.

Полученный спектр возмущений, прижатых к доменной стенке, изображен на рис. 16. В дальнейших расчетах мы зафиксируем дисперсию η и рассмотрим два значения нелинейности $\bar{\mu}$, отвечающих устойчивому и неустойчивому случаю.

Мы получили, что уравнение (2.49) обеспечивает более точное приближение для инкремента неустойчивости по сравнению с классическим НУШ. Более того, эффект подавления неустойчивости наблюдается только в рамках полученного нами модифицированного уравнения, тогда как в классическом НУШ он полностью отсутствует. Однако следует отметить, что мы можем корректно предсказать инкремент неустойчивости только до тех пор, пока вещественная часть частоты возмущения, смещаемая под действием нелинейности, не пересекает зону объемных состояний. В этот момент приближенный аналитический подход перестает работать, так как возмущения перестают быть локализованными вблизи доменной стенки.

2.6.3 Модуляционная неустойчивость в дискретных решеточных уравнениях

Как было показано ранее, Дираковская модель в континуальном пределе описывает решетку димеризованного графена в рамках метода сильной связи.

Мы рассмотрим конфигурацию, как на рис. 17(a), и напишем решеточные уравнения для такой дискретной системы. Мы предполагаем, что каждый элемент взаимодействует с тремя ближайшими соседями с коэффициентом связи $\varkappa$:

$$i\partial_t\psi_a(n, m) = M(m)\psi_a(n, m) - \varkappa(\psi_b(n, m) + \psi_b(n, m - 1) + 0.5[(1 + (-1)^m)\psi_b(n + 1, m) + (1 - (-1)^m)\psi_b(n - 1, m)]) - g|\psi_a(n, m)|^2\psi_a(n, m); \quad (2.55a)$$

$$i\partial_t\psi_b(n, m) = -M(m)\psi_b(n, m) - \varkappa(\psi_a(n, m) + \psi_a(n, m + 1) + 0.5[(1 + (-1)^m)\psi_a(n - 1, m) + 0.5(1 - (-1)^m)\psi_a(n + 1, m)]) - g|\psi_b(n, m)|^2\psi_b(n, m). \quad (2.55b)$$

Здесь набор целых чисел (n, m) нумерует димер вдоль направлений x (как n) и y (как m) (обозначено на рис. 17(a)), индексами a, b отмечены две различные подрешетки, и мы ввели нелинейность g .

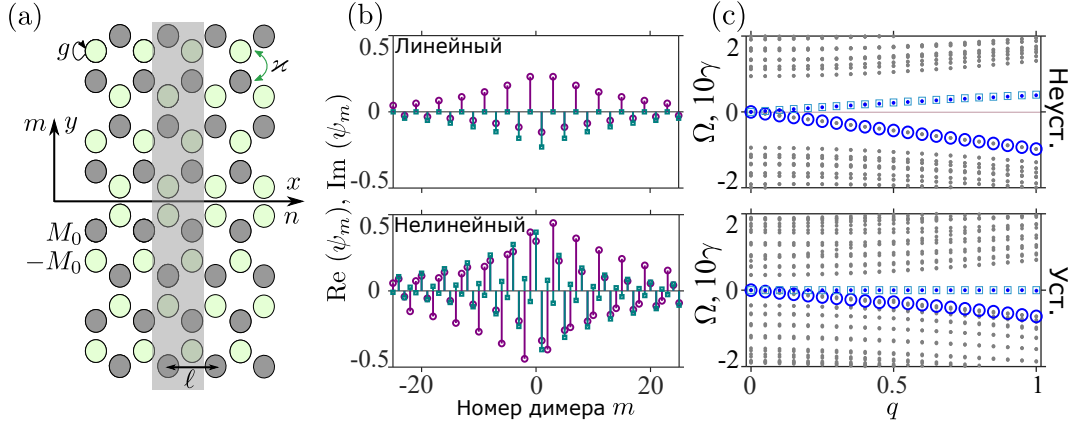


Рисунок 17: Модуляционная неустойчивость в модели сильной связи. (а): схематическое изображение суперячейки с доменной стенкой при $y = 0$. Здесь κ обозначает коэффициент связи между элементами, ℓ — пространственный период вдоль горизонтальной оси, а нелинейный эффект самовоздействия обозначен круговой стрелкой g . (b): действительная (фиолетовый цвет) и мнимая (зеленый) часть профиля краевой моды в линейном ($g = 0$, верхняя панель) и нелинейном (нижняя панель) режимах. (c): вещественная Ω (серые точки в кружках) и мнимая γ (синие точки) части собственных значений для локализованных возмущений вблизи доменной стенки в неустойчивом (слева) и устойчивом (справа) случаях. Синие квадраты: теоретический результат, полученный из уравнения (2.49). Параметры: $M_0 = 1$, $\kappa = 7$, $g = 5$, амплитуды $\sqrt{I_1} = 0.15$ (неустойчивый случай), $\sqrt{I_1} = 0.5$ (устойчивый случай).

Мы рассмотрим систему, периодическую вдоль оси x , и изучим неустойчивость численно найденного стационарного состояния $\psi_{a,b}(K, m)$ около точки $K = K_+ = 4\pi/3\ell$, для этого будем искать решение в виде:

$$\psi_{a,b}(n, m) = (\psi_{a,b}(K, m) + \varphi_{a,b}(n, m)) e^{iKn\ell - i\omega_s t}, \quad (2.56)$$

здесь функции $\varphi_{a,b}(n, m)$ обозначают малое возмущение к амплитуде. Период ℓ выбран таким образом, чтобы Дираковская скорость, являющаяся коэффициентом перед первой производной в соответствующих континуальных уравнениях (2.35), была равна единице. Отметим, что система (2.35) может быть непосредственно получена из (2.55) путем разложения Гамильтониана вблизи точки высокой симметрии зоны Бриллюэна $\mathbf{K}_{\pm}$ (см. Приложение А.1).

Далее мы учтем возмущения в первом порядке малости и перепишем уравнения (2.55) как:

$$\begin{aligned} i\partial_t \varphi_a(n, m) + \omega_s \varphi_a(n, m) = & M(m) \varphi_a(n, m) - \kappa(\varphi_b(n, m) + \varphi_b(n, m-1) + \\ & + 0.5[(1 + (-1)^m) \varphi_b(n+1, m) e^{iK\ell} + (1 - (-1)^m) \varphi_b(n-1, m) e^{-iK\ell}]) - \\ & - 2g|\psi_a(K, m)|^2 \varphi_a(n, m) - g\psi_a(K, m)^2 \varphi_a^*(n, m), \end{aligned} \quad (2.57a)$$

$$\begin{aligned} i\partial_t \varphi_b(n, m) + \omega_s \varphi_b(n, m) = & -M(m) \varphi_b(n, m) - \kappa(\varphi_a(n, m) + \varphi_a(n, m+1) + \\ & + 0.5[(1 + (-1)^m) \varphi_a(n-1, m) e^{-iK\ell} + (1 - (-1)^m) \varphi_a(n+1, m) e^{iK\ell}]) - \\ & - 2g|\psi_b(K, m)|^2 \varphi_b(n, m) - g\psi_b(K, m)^2 \varphi_b^*(n, m). \end{aligned} \quad (2.57b)$$

Рассмотрим возмущения в виде плоских волн:

$$\varphi_a(m, n) = \delta\varphi_a(m)e^{iqn\ell - i\lambda t} + \delta\tilde{\varphi}_a^*(m)e^{-iqn\ell + i\lambda^*t}, \quad (2.58a)$$

$$\varphi_b(m, n) = \delta\varphi_b(m)e^{iqn\ell - i\lambda t} + \delta\tilde{\varphi}_b^*(m)e^{-iqn\ell + i\lambda^*t}. \quad (2.58b)$$

Затем мы подставим уравнения (2.58) в уравнения (2.57):

$$\lambda\delta\varphi_a(m) + \omega_s\delta\varphi_a(m) = M(m)\delta\varphi_a(m) - \varkappa(\delta\varphi_b(m) + \delta\varphi_b(m-1)) - \quad (2.59a)$$

$$- \varkappa/2(1 + (-1)^m)\delta\varphi_b(m)e^{iq\ell + iK\ell} - \varkappa/2(1 - (-1)^m)\delta\varphi_b(m)e^{-iq\ell - iK\ell} - \\ - 2g|\psi_a(K, m)|^2\delta\varphi_a(m) - g\psi_a(K, m)^2\delta\tilde{\varphi}_a(m);$$

$$\lambda\delta\tilde{\varphi}_a(m) - \omega_s\delta\tilde{\varphi}_a(m) = -M(m)\delta\tilde{\varphi}_a(m) + \varkappa(\delta\tilde{\varphi}_b(m) + \delta\tilde{\varphi}_b(m-1)) + \quad (2.59b)$$

$$+ \varkappa/2(1 + (-1)^m)\delta\tilde{\varphi}_b(m)e^{iq\ell - iK\ell} + \varkappa/2(1 - (-1)^m)\delta\tilde{\varphi}_b(m)e^{-iq\ell + iK\ell} + \\ + 2g|\psi_a(K, m)|^2\delta\tilde{\varphi}_a(m) + g(\psi_a(K, m)^2)^*\delta\varphi_a(m);$$

$$\lambda\delta\varphi_b(m) + \omega_s\delta\varphi_b(m) = -M(m)\delta\varphi_b(m) - \varkappa(\delta\varphi_a(m) + \delta\varphi_a(m+1)) - \quad (2.59c)$$

$$- \varkappa/2(1 + (-1)^m)\delta\varphi_a(m)e^{-iq\ell - iK\ell} - \varkappa/2(1 - (-1)^m)\delta\varphi_a(m)e^{iq\ell + iK\ell} - \\ - 2g|\psi_b(K, m)|^2\delta\varphi_b(m) - g\psi_b(K, m)^2\delta\tilde{\varphi}_b(m);$$

$$\lambda\delta\tilde{\varphi}_b(m) - \omega_s\delta\tilde{\varphi}_b(m) = M(m)\delta\tilde{\varphi}_b(m) + \varkappa(\delta\tilde{\varphi}_a(m) + \delta\tilde{\varphi}_a(m+1)) - \quad (2.59d)$$

$$+ \varkappa/2(1 + (-1)^m)\delta\tilde{\varphi}_a(m)e^{-iq\ell + iK\ell} + \varkappa/2(1 - (-1)^m)\delta\tilde{\varphi}_a(m)e^{iq\ell - iK\ell} - \\ + 2g|\psi_b(K, m)|^2\delta\tilde{\varphi}_b(m) + g(\psi_b(K, m)^2)^*\delta\varphi_b(m)$$

и, аналогично предыдущему разделу, проанализируем действительную и мнимую часть λ .

Отметим, что для установления корректного соответствия между волновым вектором возмущений в Дираковской модели (2.53) κ и в модели сильной связи (2.58) q мы должны учесть, что в Дираковской модели, записанной в виде (2.35), предполагалось, что Дираковская скорость равна 1. Между тем известно, что Дираковская скорость, множитель перед пространственными производными первого порядка, выражается через коэффициенты (2.58) как: $v_D = \frac{\sqrt{3}}{2}\varkappa\ell$, поэтому $\frac{\sqrt{3}}{2}\varkappa\ell q = \kappa$.

2.6.4 Модуляционная неустойчивость в параксиальных уравнениях

В данном разделе в качестве возможной экспериментальной платформы, как и ранее, рассматриваются решетки волноводов с доменной стенкой. Конкретные параметры решетки перечислены в таблице 2. Отметим, что данная система описывается также моделью сильной связи с коэффициентом связи $\varkappa \approx 3 \text{ см}^{-1}$ и эффективной массой $M_0 \approx 1 \text{ см}^{-1}$.

Мы решали эволюционную задачу в рамках параксиального уравнения. Для этого мы промоделировали динамику в параксиальном уравнении для электрического поля $\mathcal{E}$. В качестве начального условия задается краевая мода, близкая к плоской волне $e^{iK+x}u(x, y)$, амплитуда которой модулирована крупномасштабным возмущением с амплитудой 5% (рис. 18(а,е)). Затем проводится моделирование её динамики на больших трассах распространения вдоль оси

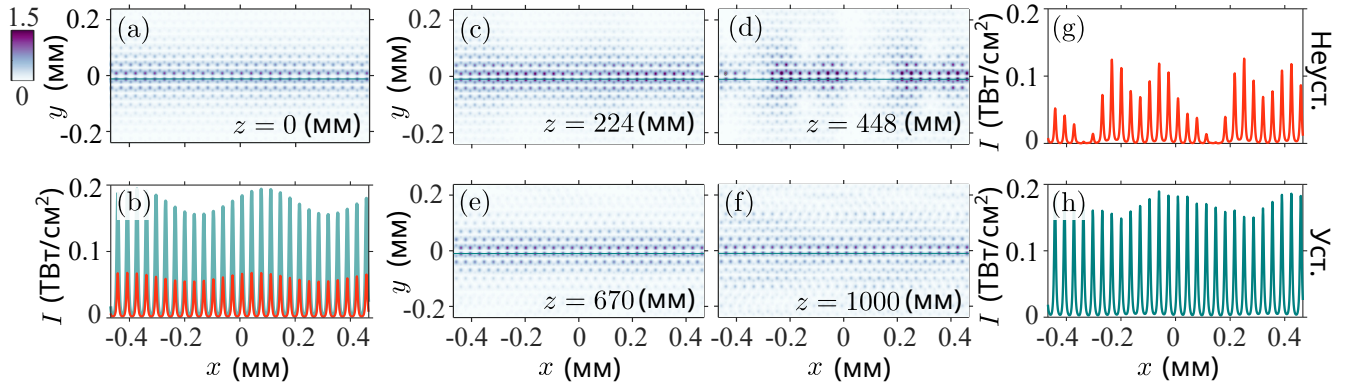


Рисунок 18: Модуляционная неустойчивость нелинейных краевых мод в рамках параксиального приближения. (a,c,d,e,f): распределение амплитуды волновой функции в плоскости xy , нормированной на начальное значение при $z = 0$, для различных $z > 0$. На (c,d) показано развитие неустойчивости для волны с меньшей начальной амплитудой; на (e,f) – стабилизация волны с большей начальной амплитудой. Распределение интенсивности вдоль доменной стенки при $z = 0$ (b); результат его эволюции в устойчивом случае (h) при $z = 1000$ мм и в неустойчивом (g) при $z = 448$ мм.

z , которая является эволюционной координатой, аналогичной переменной t в уравнении (2.35). Моделирование выполняется для двух различных амплитуд волн, соответствующих неустойчивой и устойчивой областям в пространстве параметров. Характерные картины развития неустойчивости представлены на рис. 18.

Неустойчивое краевое состояние распадается на серию солитоноподобных локализованных распределений. Напротив, в устойчивом случае, как на рис. 18(e,f,h), видно, что возмущенная краевая мода остаётся неизменной на больших расстояниях, что указывает на эффект подавления неустойчивости.

Следует отметить, что помимо возмущений, локализованных вблизи доменной стенки и хорошо описываемых уравнением (2.40), амплитуда нелинейной волны в реалистичной решетке может также испытывать флуктуации, вызванные объемными возмущениями или связью с другими интерфейсами. Это может смещать переход либо в неустойчивый, либо в устойчивый режим.

Параметр	Значение
L_x	3.2 мкм
L_y	4.9 мкм
a_0	20 мкм
n_0	1.47
n_a	2.6×10^{-3}
n_b	2.8×10^{-3}
n_2	3×10^{-20} м ² /Вт
λ	1650 нм
I_0	$\sim 10^{16}$ Вт/м ²

Таблица 2: Параметры моделирования для рис. 18.

2.7 Получение уравнений для огибающих волновых пакетов с помощью методов машинного обучения

2.7.1 Подход к восстановлению УЧП на основе анализа данных

В последние годы наблюдается активное развитие направления, связанного с восстановлением математических моделей физических систем на основе анализа наблюдаемой динамики [121, 122]. Основная идея заключается в том, чтобы вместо ручного вывода уравнений или подбора параметров использовать алгоритмы, способные автоматически находить наиболее подходящее описание системы — точный вид дифференциальных уравнений, которые соответствуют наблюдаемой динамике.

Одним из ключевых подходов является применение регрессионных алгоритмов при обработке данных, полученных из экспериментов или численного моделирования. Эти данные могут включать пространственно-временную эволюцию полей, характерных для изучаемой системы. Предполагается, что динамика системы описывается некоторым уравнением в частных производных (УЧП). Алгоритм строит разреженное представление динамики в базисе возможных функциональных зависимостей (например, полиномов, тригонометрических функций, производных различных порядков и т.п.) и выбирает набор членов, который наилучшим образом согласуется с данными при минимальной сложности модели.

Этот подход показал высокую эффективность при работе с известными фундаментальными моделями физики. Например, были успешно восстановлены нелинейные уравнения Бюргерса и Кортевега–де Вриза [123], а также для модели реакции Белоусова–Жаботинского [123, 124]. Эти исследования показали, что УЧП известного типа могут быть точно восстановлены по численным данным [125]. При этом подход основан на стандартных регрессионных алгоритмах, которые также относят к методам классического машинного обучения.

В области символьной регрессии значительный прогресс связан с развитием специализированных алгоритмов, таких как реализованные в библиотеке PySR [126]. Данные методы автоматизируют процесс поиска эмпирических зависимостей, исследуя пространство возможных аналитических выражений вместо традиционной параметрической подгонки. Особого внимания заслуживает программный пакет DISCOVER, который сочетает методы глубокого обучения с подкреплением и символьные представления, что позволяет выявлять фундаментальные физические законы непосредственно из экспериментальных данных [125].

Перенос упомянутых подходов на реальные физические системы представляет собой важную научную задачу. Первые успешные примеры таких исследований включают определение уравнений, описывающих процесс деградации перовскитных плёнок под воздействием факторов окружающей среды [127], а также оптимизацию параметров процесса четырёхволнового взаимодействия в оптических волокнах [128].

Методы понижения размерности находят широкое применение при анализе сложных физических систем. Яркими примерами являются сведение уравнений Навье–Стокса к системе обыкновенных дифференциальных уравнений типа системы Лоренца [129] и понижение размерности нелинейного уравнения Шрёдингера через метод моментов [130]. Однако для топологических решёток с учётом нелинейных эффектов построение адекватных редуциро-

ванных моделей остаётся трудоёмкой задачей. Стандартный подход, основанный на теории возмущений, как правило, приводит к кубическому нелинейному уравнению Шрёдингера и не учитывает вклады высших порядков нелинейности, что ограничивает его применимость. В этом контексте методы машинного обучения предлагают принципиально новый подход к решению указанных проблем.

Целью данного раздела является применение алгоритма линейной регрессии для получения эволюционного УЧП, описывающего динамику комплексной огибающей краевого импульса, локализованного поперечно к топологической доменной стенке и распространяющегося вдоль неё. Предложенный подход схематически представлен на рис. 19 и позволяет существенно упростить анализ волновых процессов в сложных топологических системах.

2.7.2 Описание алгоритма

Мы начинаем с численного решения стандартного параксиального уравнения, описывающего эволюцию электрического поля $\mathcal{E}(x, y, z)$ при распространении света в оптических решётках (см. Приложение В.2)

$$i\partial_z \mathcal{E}(x, y, z) = \hat{H}_{\text{par}}(x, y, |\mathcal{E}(x, y, z)|^2) \mathcal{E}(x, y, z) \quad (2.60)$$

и ставим задачу получить уравнение для медленно меняющейся огибающей $\mathcal{A}(x, z)$ волнового пакета, локализованного на доменной стенке. Здесь $\hat{H}_{\text{par}}(x, y, |\mathcal{E}|^2)$ представляет собой сложный параксиальный оператор, включающий дифракцию, пространственный профиль показателя преломления (рис. 19(a)), а также нелинейность.

Целью является вывод уравнения вида (например, как уравнение (2.40))

$$i\partial_z \mathcal{A}(x, z) = \hat{U}_{\text{PDE}}(\mathcal{A}(x, z), |\mathcal{A}(x, z)|^2, \dots) \mathcal{A}(x, z), \quad (2.61)$$

где $\hat{U}_{\text{PDE}}$ описывает УЧП, составляющие элементы которой схематически представлены на рис. 19(c) [A1, 131].

Для получения УЧП, которое эффективно воспроизводит динамику волнового поля вдоль интерфейса, введён подход, прежде всего основанный на разделении физических процессов на линейные и нелинейные эффекты. Это разделение связано с настройкой начального значения интенсивности краевой волны. При этом для решения задачи в нелинейном случае мы предполагаем, что линейная часть модели известна. В целях удобства анализа комплекснозначная функция $\mathcal{A}$ представляется либо через свои вещественную и мнимую части, либо через интенсивность и фазу (рис. 19).

Для подготовки данных мы численно решаем параксиальное уравнение и извлекаем значение поля в центрах волноводов, образующих доменную стенку – то есть значение огибающей в точках (z_j, x_j) . Мы учли, что для выявления общих, не зависящих от начальных условий УЧП и установления соответствующей эффективной модели численные симуляции проводились для нескольких различных ширин пучка $\mathcal{L}$ в линейном случае, а затем — для ряда значений начальной интенсивности в нелинейном режиме.

Мы объединяем данные, представляющие собой профили, полученные при эволюции волновых пакетов со всеми ширинами пучков (и всеми интенсивностями), случайным образом выбираем точки (z_j, x_j) и вычисляем матрицы $\mathbf{Y}$ и $\mathbf{X}$. Для построения библиотеки функций, представленной матрицей $\mathbf{X}$, используются пространственно-зависимые (x, z) данные $\mathcal{A}$, а также их производные по координате x . Правая часть УЧП, $\partial_z \mathcal{A}$, обозначена как $\mathbf{Y}$ на рис. 19.

Исходная библиотека $\mathbf{X}$ содержит расширенный набор потенциально возможных функций, однако предложенная схема позволяет эффективно фильтровать отсутствующие или несущественные вклады, сохраняя только те физические эффекты, которые действительно значимы для исследуемых систем. Нелинейные члены в искомом УЧП для режима высоких интенсивностей получаются как уточнение линейного дифференциального оператора, первоначально восстановленного в низкоинтенсивном линейном режиме. В этом концептуальное сходство с методом операторной экспоненты (split-step) и алгоритмом бустинга (ML boosting) в машинном обучении, где итеративное уточнение позволяет последовательно улучшать предсказательную способность модели [132].

При выборе точек (z_j, x_j) мы учитываем только те из них, в которых интенсивность превышает определённый пороговый уровень, фиксированный для всей процедуры. Включение всех доступных точек, особенно тех, где интенсивность крайне мала, может вносить неопределённость и неточности в расчёты фазы, а также приводить к некорректным оценкам производных.

Случайно перемешанные данные разделяются на обучающую выборку (80%) и тестовую (20%). Коэффициенты $\mathbf{c}$ определяются по обучающей выборке путём минимизации величины $\|\mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{Y}\|^2$ (стандартная линейная регрессия), после чего найденные коэффициенты тестируются на независимом наборе данных. Дополнительно коэффициенты верифицируются путём сравнения численных решений, полученных на основе параксиального уравнения и восстановленной модели УЧП, для наборов данных, не использовавшихся на этапе обучения.

2.7.3 Подготовка данных

Мы рассмотрели топологические доменные стенки двух типов, изображённые на рис. 20, см. также Приложение В.2.

Для подготовки данных мы решали параксиальное уравнение (В.8) с двумя различными наборами параметров, представленными в таблице 3.

Эти наборы параметров имеют принципиальные отличия. Решетки, параметры которых соответствуют набору I (аналогичен тому, что был упомянут в разделе 2.5.3), хорошо описываются в рамках традиционной континуальной Дираковской модели. Вдоль поперечной оси y краевая мода имеет достаточно большой пространственный масштаб. В пределах запрещенной зоны дисперсионная кривая краевого состояния близка к линейной, а её кривизна – мала. Напротив, для набора параметров II (аналогичен, например, [133]) пространственный масштаб локализации краевой моды вдоль y становится сравним с периодом решётки. Кривизна дисперсионной кривой становится существенной – это говорит о том, что в эволюционных уравнениях для краевых импульсов необходимо учитывать высшие пространственные про-

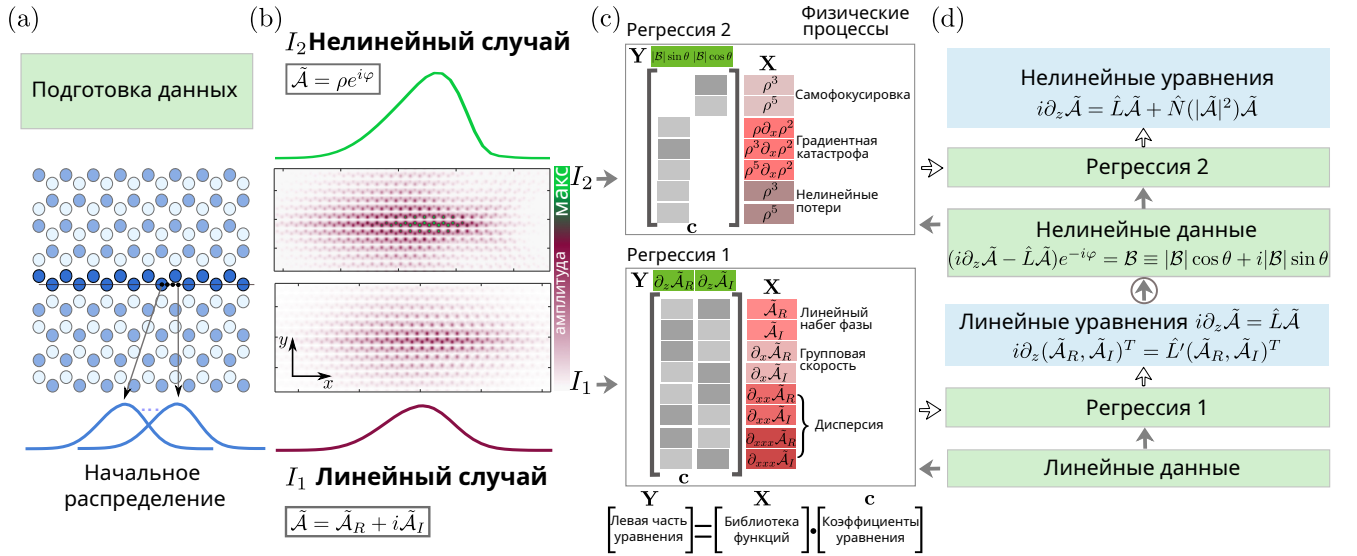


Рисунок 19: Схема методики определения УЧП, воспроизводящего динамику волнового поля вдоль интерфейса, с помощью метода линейной регрессии. (a): распределение показателя преломления в плоскости (x, y) . Возмущения показателя преломления n_A и n_B показаны разными оттенками синего. Волноводы, составляющие доменную стенку (интерфейс при $y = 0$), выделены тёмно-синим цветом (для них возмущение показателя преломления равняется n_B). (b): профили краевых импульсов для $z > 0$ в плоскости xu , локализованные на интерфейсе $y = 0$, полученные численно в рамках моделирования динамики в параксиальном уравнении. Их огибающие вдоль x на доменной стенке визуализированы в виде графиков. Внизу: линейное распространение (малая начальная интенсивность). Вверху: нелинейное распространение (высокая начальная интенсивность). (c): схема регрессионных алгоритмов для линейного (внизу) и нелинейного (вверху) режимов. На схеме показаны: библиотека функций ($\mathbf{X}$), соответствующих возможным физическим процессам; правая часть УЧП (целевые функции) ($\mathbf{Y}$); и искомые коэффициенты уравнений ($\mathbf{c}$). (d): последовательность процедуры. Этапы включают: подготовку данных в рамках численного решения параксиального уравнения при малых входных мощностях (Линейные данные), восстановление слагаемых линейного оператора $\hat{L}$ (Регрессия 1), анализ данных, рассчитанных при больших входных мощностях (Нелинейные данные), и решение регрессионной задачи для выражения $(i\partial_z \tilde{A} - \hat{L} \tilde{A}) e^{-i\varphi}$ (Регрессия 2) с уточнением УЧП путём включения нелинейных членов. Закрашенные стрелки обозначают загрузку данных, незакрашенные стрелки представляют определение коэффициентов (т.е. идентификацию подходящей библиотеки функций), а обведённая стрелка обозначает переход от линейного к нелинейному случаю, где линейный оператор предполагается известным при переходе к нелинейной части задачи.

изводные. Важным является то, что наборы параметров соответствуют пределу слабой и сильной дисперсии.

Таким образом, в общем случае возникает четыре различные конфигурации (два типа доменных стенок и два набора параметров).

Как и в разделе 2.5.3, мы рассмотрели распространение вдоль доменной стенки краевых импульсов с несущим волновым вектором k_0 ,

$$\mathcal{E}(z = 0, x, y, \bar{x}_0) = f(x, \bar{x}_0) u(x, y) e^{ik_0 x},$$

Параметр	I	II
L_x	3.2 мкм	4.9 мкм
L_y	4.9 мкм	3.2 мкм
a_0	20 мкм	18.5 мкм
n_0	1.47	1.47
n_A	2.6×10^{-3}	7.5×10^{-4}
n_B	2.8×10^{-3}	12.4×10^{-4}
n_2	3×10^{-20} м ² /ВТ	3×10^{-20} м ² /ВТ
λ	1650 нм	1045 нм
I_0	10^{16} Вт/м ²	10^{16} Вт/м ²

Таблица 3: Два набора (I, II) параметров, используемых при моделировании в рамках параксиального уравнения.

где $f(x, \bar{x}_0) = f_0 e^{-(x-\bar{x}_0)^2/(2\mathcal{L}^2)}$ имеет Гауссову форму. Здесь $u(x, y)$ – численно найденная пространственная структура линейной краевой моды.

Для описания эволюции в терминах *огibaющей* мы извлекаем значения поля в центрах волноводов, образующих доменную стенку (для корректного перехода к континуальному пределу):

$$\bar{\mathcal{A}}(z, x_m, \bar{x}_0) = \mathcal{E}(z, x \equiv x_m, y \equiv y_c, \bar{x}_0), \quad (2.62)$$

где y_c – вертикальная координата волноводов, составляющих интерфейс (рис. 21).

Разреженность функции $\bar{\mathcal{A}}(z, x_m, \bar{x}_0)$ вдоль оси x , заданной в дискретных точках $x = x_m$, представляет потенциальную сложность при определении континуального уравнения, которое обычно предполагает наличие высокой дискретизации. Последнее особенно важно для точного приближения производных в модели уравнения в частных производных (УЧП). Для преодоления этой трудности мы задаём набор начальных условий и вычисляем несколько реализаций *огibaющей* с целью генерации более полного набора данных. Конкретно, мы разбиваем интервалы $[x_m, x_{m+1}] = [x_m, x_m + \Delta_x q]$, где число шагов $q = 32$ и размер шага $\Delta_x = a/q$, и проводим сканирование параметра $\bar{x}_0$ по правилу $\bar{x}_0(n) = \bar{x}_0 + \Delta_x n$, $n = [1, \dots, q]$. Это позволяет выполнить серию вычислений $\bar{\mathcal{A}}(z, x_m, \bar{x}_0(n))$, которые затем могут быть объединены в гладкую функцию $\mathcal{A}(z, x)$.

Ранее мы вывели уравнение для $\tilde{\mathcal{A}}(z, x)$, (см. уравнение (2.40)) справедливое для доменных стенок обоих типов, которое мы далее перепишем в виде

$$i \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}}{\partial z} = i v \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}}{\partial x} - G |\tilde{\mathcal{A}}|^2 \tilde{\mathcal{A}} - i v_g |\tilde{\mathcal{A}}|^2 \frac{\partial |\tilde{\mathcal{A}}|^2}{\partial x} \tilde{\mathcal{A}} - \eta \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{A}}}{\partial x^2} + \beta_0 \tilde{\mathcal{A}}. \quad (2.63)$$

Напомним, что был введен малый параметр μ и предполагалось, что $\mu \propto |G/\beta_0| \times \max(|\tilde{\mathcal{A}}|^2)$, и $|\eta\beta_0| \propto \mu^2$. Это означает, что асимптотические методы всегда ограничены априорными предположениями относительно параметров, что сужает область их применимости и привязывает к конкретным условиям. Предложенная нами схема свободна от априорных ограничений, которые традиционно накладываются применяемыми в асимптотических аналитических методах иерархиями масштабов.

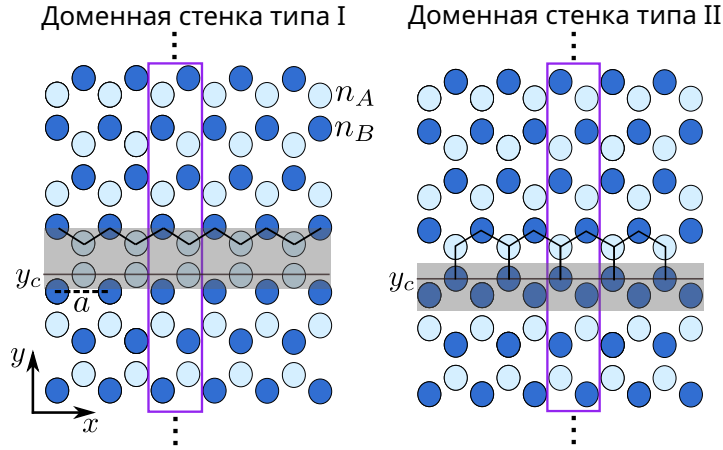


Рисунок 20: Геометрии суперячеек (обозначенные фиолетовыми прямоугольными рамками) решетки с зигзагообразными доменными стенками (зона интерфейса выделена серым цветом): слева – тип I (zig-zag в англоязычной литературе), справа – тип II (bearded). Параметр a – пространственный период решетки. Мы рассмотрели суперячейки, которые состоят из 64 идентичных эллиптических волноводов, но с различными возмущениями показателя преломления: для 32 волноводов подрешётки А показатель преломления составляет n_A (светло-синий), тогда как для остальных 32 волноводов подрешётки В - n_B (тёмно-синий). Мы задаем периодические граничные условия вдоль оси абсцисс и открытые граничные условия вдоль оси y .

2.7.4 Линейный случай

Мы начнём исследование с линейного случая, соответствующего малым интенсивностям. Уравнение для огибающей можно представить в виде системы уравнений для вещественной и мнимой частей амплитуды $\tilde{\mathcal{A}} = \tilde{\mathcal{A}}_R + i\tilde{\mathcal{A}}_I$. Предположим, что эта система имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial z} = \beta_0 \tilde{\mathcal{A}}_I + \beta_{0I} \tilde{\mathcal{A}}_R + v \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial x} - v_I \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial x} - \eta \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial x^2} - \eta_I \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial x^2} + \eta' \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial x^3} + \eta'_I \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial x^3}, \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial z} = -\beta_0 \tilde{\mathcal{A}}_R + \beta_{0I} \tilde{\mathcal{A}}_I + v \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial x} + v_I \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial x} + \eta \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial x^2} - \eta_I \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial x^2} - \eta' \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{A}}_R}{\partial x^3} + \eta'_I \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{A}}_I}{\partial x^3}. \quad (2.65)$$

Представление через вещественную и мнимую части является оптимальным для решения данной задачи, поскольку оно обеспечивает более компактное представление библиотеки функций в виде дифференциальных операторов по сравнению с параметризацией через интенсивность и фазу.

Отметим, что подход позволяет эффективно решать задачу реконструкции дисперсии краевого состояния путём её "сканирования" с использованием пучка конечной спектральной ширины в окрестности заданного несущего волнового вектора k_0 (для этого выбираются различные значения k_0 – это и подразумевается под "сканированием").

Для подготовки обучающего набора данных мы последовательно запускали импульсы с различными ширинами пучка: а именно, $\mathcal{L}_1 = 3a$, $\mathcal{L}_2 = 3a/2$ и $\mathcal{L}_3 = (3a/2) \times 1.5$ (их спектральные ширины в импульсном пространстве представлены на рис. 21). Более узкие

импульсы обеспечивают повышенное разрешение при оценке параметров дисперсии и расширения импульса, тогда как более широкий импульс способствует более точному определению параметра линейной скорости. Комбинируя данные, полученные при различных ширинах пучков, удаётся получить уравнения, применимые к различным масштабам входного излучения. При построении матрицы $\mathbf{X}$ мы умножаем пространственные производные на $\mathcal{L}_3$, например $\partial_x \propto \mathcal{L}_3$. Затем мы случайным образом выбираем точки данных, в которых интенсивность превышает пороговое значение 0.05.

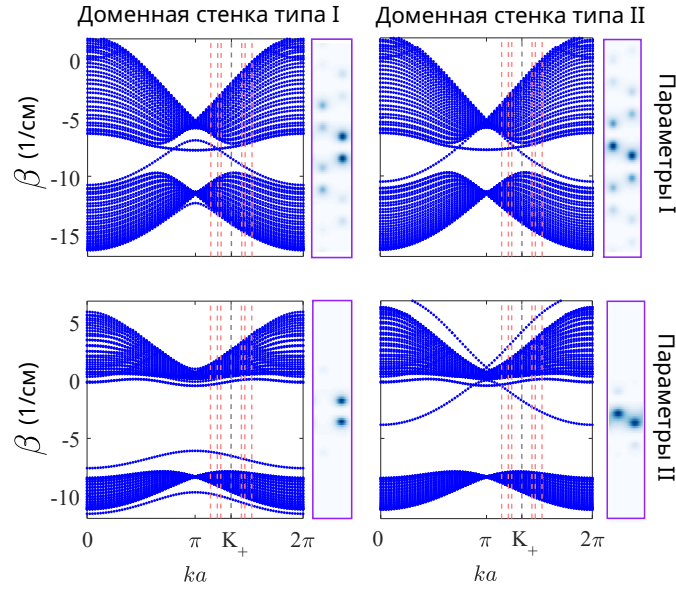


Рисунок 21: Зонные структуры $\beta(k)$, рассчитанные для двух наборов параметров: I (верхний ряд) и II (нижний ряд) (параметры приведены в табл. 1) для двух типов доменных стенок (как на рис. 20). Серой пунктирной линией отмечено положение волнового числа $K_+ = 4\pi/(3a)$. Красные вертикальные пунктирные линии соответствуют ширинам пучка в импульсном пространстве ($K_+a \pm \delta_{1,2,3}$, где $\delta_{1,2,3} = a/\mathcal{L}_{1,2,3}$ при $\mathcal{L}_1 = 3a$, $\mathcal{L}_2 = 3a/2$ и $\mathcal{L}_3 = 3a/2 \times 1.5$). Соответствующие поперечные профили интенсивности краевого состояния в точке K_+ представлены в фиолетовых рамках справа.

Схематическая структура библиотеки функций частично визуализирована на рис. 19. Даже при предположении, что все коэффициенты в уравнениях для $\tilde{\mathcal{A}}_R$ и $\tilde{\mathcal{A}}_I$ различны, некоторые из них объединяются в группы, соответствующие определённым физическим процессам, тогда как другие являются малыми и могут быть исключены в соответствии с принципами разреженной регрессии.

Коэффициенты доминирующих членов далее уточняются. На коротких дистанциях распространения ведущими членами оказываются те, которые отвечают за линейную фазу, дрейф с групповой скоростью, а также дисперсию второго порядка, приводящую к постепенному симметричному расширению импульса.

Эти эффекты описываются коэффициентами $\langle \mathbf{c}_i \rangle = \langle \beta_0 \rangle, \langle v \rangle, \langle \eta \rangle$, а также их стандартными отклонениями $\delta \mathbf{c}_i$, рассчитанными по 100 валидационным выборкам обучающего набора данных. Каждое из валидационных подмножеств содержит приблизительно от 40 000 до 60 000 точек. Для каждого набора данных в этих подмножествах извлекаются коэффициенты,

после чего вычисляются их среднее значение $\langle \mathbf{c}_i \rangle$ и стандартное отклонение $\delta \mathbf{c}_i$. Данный подход обеспечивает статистический анализ коэффициентов модели.

Мы проводим анализ методами машинного обучения для трёх различных вариантов библиотеки функций. Данный подход позволяет определить наиболее подходящую библиотеку функций для набора данных и избежать как переобучения, так и недообучения модели.

В качестве первой библиотеки мы анализируем каждый член для действительной и мнимой компонент независимо. Этот этап позволяет выявить потенциальные взаимосвязи между действительной и мнимой частями.

На втором этапе мы анализируем коэффициенты для подходящих комбинаций этих действительных и мнимых членов в совокупности в виде $[\partial_z \tilde{\mathcal{A}}_R, \partial_z \tilde{\mathcal{A}}_I]$, $[\tilde{\mathcal{A}}_I, -\tilde{\mathcal{A}}_R]$, $[\tilde{\mathcal{A}}_R, \tilde{\mathcal{A}}_I]$, $[\partial_x \tilde{\mathcal{A}}_R, \partial_x \tilde{\mathcal{A}}_I]$, $[-\partial_x \tilde{\mathcal{A}}_I, \partial_x \tilde{\mathcal{A}}_R]$, $[-\partial_{xx} \tilde{\mathcal{A}}_I, \partial_{xx} \tilde{\mathcal{A}}_R]$, $[-\partial_{xx} \tilde{\mathcal{A}}_R, \partial_{xx} \tilde{\mathcal{A}}_I]$, $[\partial_{xxx} \tilde{\mathcal{A}}_I, \partial_{xxx} \tilde{\mathcal{A}}_R]$, $[\partial_{xxx} \tilde{\mathcal{A}}_R, -\partial_{xxx} \tilde{\mathcal{A}}_I]$.

На заключительном этапе мы фокусируемся исключительно на четырёх наиболее значимых членах $[\partial_z \tilde{\mathcal{A}}_R, \partial_z \tilde{\mathcal{A}}_I]$, $[\tilde{\mathcal{A}}_I, -\tilde{\mathcal{A}}_R]$, $[\partial_x \tilde{\mathcal{A}}_R, \partial_x \tilde{\mathcal{A}}_I]$, $[-\partial_{xx} \tilde{\mathcal{A}}_I, \partial_{xx} \tilde{\mathcal{A}}_R]$.

инт.	пар.	k	$\langle \beta_0 \rangle + \delta \beta_0$ (1/mm)	$\langle v \rangle + \delta v$ ($\cdot 10^{-2}$)	$\langle \eta \rangle + \delta \eta$ ($\cdot 10^{-4}$ mm)	$\langle \eta'_I \rangle + \delta \eta'_I$ ($\cdot 10^{-6}$ mm ²)
II	II	K_0	$-0.18 \pm 5 \cdot 10^{-5}$	0.61 ± 0.0006	0.43 ± 0.002	-0.24 ± 0.01
II	II	K_1	$-0.25 \pm 4 \cdot 10^{-5}$	0.52 ± 0.0004	0.43 ± 0.002	0.09 ± 0.009
II	II	K_2	$-0.09 \pm 1 \cdot 10^{-5}$	0.7 ± 0.001	0.52 ± 0.005	-0.53 ± 0.02
II	I	K_0	-0.77 ± 0.0001	0.86 ± 0.002	0.54 ± 0.008	0.13 ± 0.03
II	I	K_1	-0.87 ± 0.0001	0.72 ± 0.002	0.61 ± 0.007	0.21 ± 0.03
II	I	K_2	-0.66 ± 0.0001	0.96 ± 0.001	0.49 ± 0.008	-0.11 ± 0.03
I	I	K_0	-0.82 ± 0.0001	0.79 ± 0.002	0.09 ± 0.01	0.96 ± 0.06
I	I	K_1	-0.9 ± 0.0001	0.71 ± 0.002	0.42 ± 0.009	0.79 ± 0.04
I	I	K_2	-0.73 ± 0.0001	0.69 ± 0.002	-0.33 ± 0.01	-0.33 ± 0.07
I	II	K_0	$-0.67 \pm 4 \cdot 10^{-5}$	0.23 ± 0.0005	-0.15 ± 0.002	0.42 ± 0.01
I	II	K_1	$-0.64 \pm 4 \cdot 10^{-5}$	0.17 ± 0.0005	-0.29 ± 0.002	0.31 ± 0.01
I	II	K_2	$-0.7 \pm 5 \cdot 10^{-5}$	0.24 ± 0.0007	0.01 ± 0.0027	0.35 ± 0.01
I	II	K_3	$-0.77 \pm 7 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5} \pm 0.0007$	0.31 ± 0.003	-0.0002 ± 0.01

Таблица 4: Коэффициенты $\langle \mathbf{c}_i \rangle = \langle \beta_0 \rangle, \langle v \rangle, \langle \eta \rangle, \langle \eta'_I \rangle$ и их возможные диапазоны значений $\delta \mathbf{c}_i$, определяемые как стандартное отклонение, полученные из линейных наборов данных при различных волновых числах k вдоль дисперсионной кривой краевого состояния, обозначенных как $K_0 = 4\pi/(3a)$, $K_1 = (4\pi/3 + 0.4)/a$, $K_2 = (4\pi/3 - 0.4)/a$, $K_3 = 2\pi/a$. инт. – интерфейс, пар. – параметры.

Ненулевые члены, полученные в результате анализа, представляют собой коэффициенты, наиболее точно описывающие нашу систему. Достоверность этих коэффициентов может быть проверена путём реконструкции дисперсионного соотношения краевого состояния в окрестности различных значений k_0 , как это показано зелеными линиями на рис. 22:

$$\beta_e = \beta_0 - v(k - k_0) + \eta(k - k_0)^2 + \eta'_I(k - k_0)^3. \quad (2.66)$$

Определённые коэффициенты также могут быть верифицированы посредством анализа пространственной динамики системы. Для этой цели мы численно решаем уравнение в

частных производных (2.64), включающее восстановленные ненулевые члены, с начальным условием в виде Гауссова профиля $f(x, \bar{x}_0) = f_0 \exp\left(-\frac{(x-\bar{x}_0)^2}{2\mathcal{L}_t^2}\right)$, заданного при $z = 0$, где $\mathcal{L}_t$ — ширина пучка, отличная от используемых при формировании обучающего набора $\mathcal{L}_{1,2,3}$.

На рис. 23 продемонстрированы линейные режимы распространения без искажений, а также расширения пучка, сопровождаемого уменьшением амплитуды. Результаты, полученные при моделировании динамики пучка в рамках параксиального уравнения, демонстрируют хорошее согласие с результатами, следующими из упрощённой модели динамики огибающей, описанной восстановленным уравнением в частных производных.

На больших трассах распространения модель может быть дополнительно уточнена за счёт включения членов с третьими производными, ответственных за асимметричные искажения волнового пакета.

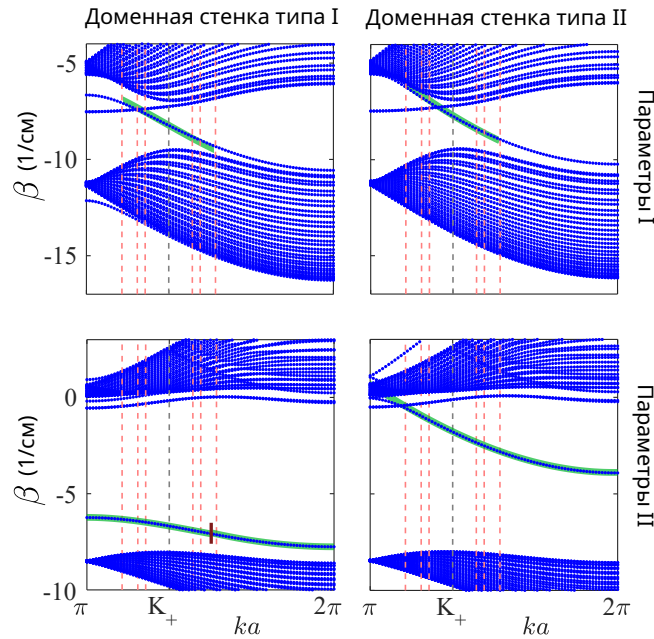


Рисунок 22: Численно рассчитанная зонная структура $\beta(k)$ (синие точки). Точки внутри щели отвечает дисперсионной кривой краевого состояния. Мы сравниваем этот численный расчет с зависимостью, построенной по коэффициентам, определённым методами машинного обучения (зелёные линии). Параметры расчётов для панелей соответствуют рис. 21. Для набора параметров I и набора параметров II доменной стенки типа II при подготовке данных несущий вектор $k_0 = K_+$. Для доменной стенки I набора параметров II слева от коричневого вертикального маркера несущий вектор — $k_0 = K_+$, тогда как справа — около $k_0 = 2\pi$. Пунктирные вертикальные линии, как и на рис. 21, соответствуют трём ширинам пучка.

2.7.5 Нелинейный случай

По мере увеличения интенсивности пучка ожидается проявление нелинейных эффектов, среди которых — самофокусировка и нелинейные поправки к групповой скорости. В связи с этим представляется естественным сосредоточить внимание на данных эффектах и оценить,

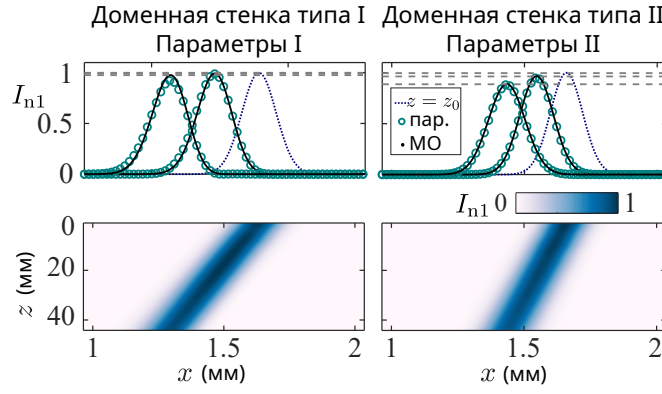


Рисунок 23: Эволюция огибающей пучка для доменных стенок обоих типов при $\mathcal{L}_t = 3a/2 \times 1.8$ для малой входной интенсивности $I(z=0) < 0.04 \times I_0$ (линейный случай). Приведена интенсивность, нормированная на максимальное значение, I_{n1} . Верхний ряд изображает профили для фиксированного z : в начальный момент времени ($z_0 = 0$, синяя пунктирная линия), при $z = 22$ мм и $z = 44$ мм. Зелёные кружки: результаты параксиального моделирования огибающей волнового пакета, полученные с использованием уравнения (В.8) (*пар.*); чёрные сплошные линии: численное решение уравнения (2.64) с коэффициентами, определёнными с использованием метода, описанного на рис. 19 (*МО*). Нижний ряд: пространственное распределение интенсивности в плоскости xz . Для доменных стенок I и II типов несущие волновые числа составляют $k_0 = K_+ = 4\pi/(3a)$ и $k_0 = (4\pi/3 - 0.4)/a$ соответственно.

насколько их учёт позволяет адекватно описать трансформацию пучка в нелинейном случае:

$$i \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}}{\partial z} = iv \frac{\partial \tilde{\mathcal{A}}}{\partial x} - \eta \frac{\partial^2 \tilde{\mathcal{A}}}{\partial x^2} + i\eta'_I \frac{\partial^3 \tilde{\mathcal{A}}}{\partial x^3} + \beta_0 \tilde{\mathcal{A}} - i(v_{g1} \tilde{\mathcal{A}} + v_{g2} |\tilde{\mathcal{A}}|^2 \tilde{\mathcal{A}} + v_{g3} |\tilde{\mathcal{A}}|^4 \tilde{\mathcal{A}}) \frac{\partial |\tilde{\mathcal{A}}|^2}{\partial x} - (G_1 |\tilde{\mathcal{A}}|^2 + G_2 |\tilde{\mathcal{A}}|^4) \tilde{\mathcal{A}} + i(\gamma_1 |\tilde{\mathcal{A}}|^2 + \gamma_2 |\tilde{\mathcal{A}}|^4) \tilde{\mathcal{A}}. \quad (2.67)$$

Мы перепишем это уравнение в терминах амплитуды и фазы, $\tilde{\mathcal{A}} = \rho e^{i\varphi}$, тогда получим систему, описывающую эволюцию величин ρ и φ . Последние два члена в полученных уравнениях могут быть интерпретированы как нелинейные потери, возникающие вследствие взаимодействия с объемными модами в нелинейном режиме при увеличении интенсивности. Данный механизм приводит к возможной диссипации энергии из краевого состояния в объем.

Важным является наблюдаемое разделение нелинейных эффектов в рамках предложенного подхода: эффект самофокусировки вносит вклад преимущественно в уравнение для фазы, тогда как нелинейные потери и эффекты нелинейных поправок к групповой скорости проявляются в уравнении для интенсивности.

Коэффициенты линейного оператора $\hat{L}$ предполагаются известными из проведённого ранее анализа в области низких интенсивностей. В связи с этим регрессионная задача решается для разности между эволюционным оператором и линейным оператором, умноженной на фазовый множитель (см. схему на рис. 19), $(i\partial_z \tilde{\mathcal{A}} - \hat{L} \tilde{\mathcal{A}}) e^{-i\varphi} \equiv |\mathcal{B}| \cos \theta + i|\mathcal{B}| \sin \theta$. Данная величина соответствует нелинейной поправке $\hat{N} \tilde{\mathcal{A}}$, существенной при высоких интенсивностях.

$$-|\mathcal{B}| \cos \theta = -\beta_0 \rho + G_1 \rho^3 + G_2 \rho^5; \quad |\mathcal{B}| \sin \theta = -(v_{g1} \rho + v_{g2} \rho^3 + v_{g3} \rho^5) \frac{\partial \rho^2}{\partial x} + \gamma_1 \rho^3 + \gamma_2 \rho^5. \quad (2.68)$$

При подготовке данных смоделирована эволюция пучков с тремя различными значениями входной интенсивности ($z = 0$): $I_1(z = 0) = (0.5)^2 \times I_0$, $I_2(z = 0) = (0.425)^2 \times I_0$, $I_3(z = 0) = (0.35)^2 \times I_0$, при этом ширина пучка фиксирована $\mathcal{L} = 5a$. Мы ограничились значениями вдоль оси z от $z_0 \approx 7.5$ мм до $z_1 \approx 23$ мм. Мы выбираем этот участок распространения, так как при данных z нелинейная краевая волна полностью сформирована (учитывая, что при начальном $z = 0$ мы задали линейный поперечный профиль краевой моды, мы исключаем начальный переходный этап распространения). Эти участки также ограничены областями, где выполняются предположения о слабой нелинейности волны (нелинейный частотный сдвиг меньше ширины запрещённой зоны) и плавности профиля. Кроме того, мы минимизируем взаимодействие между сформированной нелинейной краевой волной и объёмными модами.

На этапе подготовки матрицы $\mathbf{X}$ данные нормируются на значение $\rho_n = 0.4$, при этом выбираются только точки с интенсивностью, превышающей 0.1. Затем набор данных разделяется на 100 валидационных выборок, аналогично линейному случаю, где каждая выборка содержит приблизительно по 30 000 точек. Для каждой выборки вычисляются коэффициенты, которые затем усредняются.

Далее мы исследуем различные библиотеки функций и оцениваем ошибку на соответствующих тестовых наборах данных, используя функцию средней абсолютной процентной ошибки (mean absolute percentage error) для уравнений. Наши результаты показывают, что включение всех трех членов с нелинейной групповой скоростью приводит к значительному стандартному отклонению в определении коэффициентов, что указывает на переобучение. Следовательно, наборы функций (2-4) являются более предпочтительными для достижения более корректных результатов. Наш анализ выявил, что библиотеки 2 и 3 демонстрируют наименьшие значения ошибки на тестовом наборе данных.

Библиотека функций 1: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [v_{g1}\rho^1 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, v_{g2}\rho^3 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, v_{g3}\rho^5 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, \gamma_1\rho^3, \gamma_2\rho^5; G_1\rho^3, G_2\rho^5]$.

Библиотека функций 2: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [v_{g1}\rho^1 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, \gamma_1\rho^3, \gamma_2\rho^5; G_1\rho^3, G_2\rho^5]$.

Библиотека функций 3: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [v_{g2}\rho^3 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, \gamma_1\rho^3, \gamma_2\rho^5; G_1\rho^3, G_2\rho^5]$.

Библиотека функций 4: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [v_{g3}\rho^5 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, \gamma_1\rho^3, \gamma_2\rho^5; G_1\rho^3, G_2\rho^5]$.

Библиотека функций 5: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [v_{g1}\rho^1 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, v_{g2}\rho^3 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}, \gamma_1\rho^3, \gamma_2\rho^5; G_1\rho^3, G_2\rho^5]$.

Библиотека функций 6: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [\gamma_1\rho^3, \gamma_2\rho^5; G_1\rho^3, G_2\rho^5]$.

Библиотека функций 7: $\mathcal{B} \cdot [\cos \theta; \sin \theta] = [v_{g2}\rho^3 \frac{\partial \rho^2}{\partial x}; G_1\rho^3]$.

Определённые с высокой точностью коэффициенты модели подтверждают наличие двух основных конкурирующих нелинейных эффектов – опрокидывания и самофокусировки. На рис. 24 представлены типичные примеры нелинейной динамики: показана эволюция волнового пакета при начальной интенсивности $I_1(z = 0) = (0.45)^2 \times I_0$, которая отличается от интенсивностей, использовавшихся при формировании обучающего набора данных. Такой выбор входного сигнала позволяет независимо проверить корректность предложенной модели и достоверность полученных коэффициентов.

В верхнем ряду рис. 24 слева отчётливо видна нарастающая асимметрия профиля волнового пакета. Подобная деформация соответствует эффекту самоукручения, который

биб/инт	$\langle G_1 \rangle \pm \delta G_1$ [(0.4) ² mm ⁻¹ (·m ² /10 ¹⁶ W) ²]	$\langle G_2 \rangle \pm \delta G_2$ [(0.4) ⁴ mm ⁻¹ (·m ² /10 ¹⁶ W) ⁴]	$\langle v_{g1} \rangle \pm \delta v_{g1}$ [(0.4) ² · (·m ² /10 ¹⁶ W) ²]	$\langle v_{g2} \rangle \pm \delta v_{g2}$ [(0.4) ⁴ · (·m ² /10 ¹⁶ W) ⁴]	$\langle v_{g3} \rangle \pm \delta v_{g3}$ [(0.4) ⁶ · (·m ² /10 ¹⁶ W) ⁶]	$\langle \gamma_1 \rangle \pm \delta \gamma_1$ [(0.4) ² mm ⁻¹ (·m ² /10 ¹⁶ W) ²]	$\langle \gamma_2 \rangle \pm \delta \gamma_2$ [(0.4) ⁴ mm ⁻¹ (·m ² /10 ¹⁶ W) ⁴]
lib 1/ II	0.13 ± 0.0002	-0.0007 ± 0.0001	0.03 ± 0.004	0.003 ± 0.007	-0.003 ± 0.003	0.003 ± 0.0002	-0.002 ± 0.0001
lib 2/ II	0.13 ± 0.0002	-0.0007 ± 0.0001	0.03 ± 0.001	x	x	0.003 ± 0.0002	-0.002 ± 0.0001
lib 3/ II	0.13 ± 0.0002	-0.0007 ± 0.0001	x	0.02 ± 0.001	x	0.003 ± 0.0002	-0.002 ± 0.0001
lib 4/ II	0.13 ± 0.0002	-0.0007 ± 0.0001	x	x	0.007 ± 0.0004	0.003 ± 0.0002	-0.002 ± 0.0001
lib 5/ II	0.13 ± 0.0002	-0.0007 ± 0.0001	0.03 ± 0.004	0.003 ± 0.007	x	0.003 ± 0.0002	-0.002 ± 0.0001
lib 6/ II	0.13 ± 0.0002	-0.0007 ± 0.0001	x	x	x	0.03 ± 0.004	0.003 ± 0.007
lib 7/ II	0.13 ± 10 ⁻⁵	x	x	0.03 ± 0.004	x	x	x
lib 1/ I	0.015 ± 0.0002	0.013 ± 0.0002	0.32 ± 0.006	-0.21 ± 0.013	0.096 ± 0.007	0.003 ± 0.0002	-0.004 ± 0.0001
lib 2/ I	0.015 ± 0.0002	0.013 ± 0.0002	0.22 ± 0.001	x	x	0.003 ± 0.0002	-0.004 ± 0.0001
lib 3/ I	0.015 ± 0.0002	0.013 ± 0.0002	x	0.2 ± 0.001	x	0.003 ± 0.0002	-0.004 ± 0.0001
lib 4/ I	0.015 ± 0.0002	0.013 ± 0.0002	x	x	0.14 ± 0.001	0.003 ± 0.0002	-0.004 ± 0.0002
lib 5/ I	0.015 ± 0.0002	0.013 ± 0.0002	0.32 ± 0.006	-0.21 ± 0.01	x	0.003 ± 0.0002	-0.004 ± 0.0001
lib 6/ I	0.015 ± 0.0002	0.013 ± 0.0002	x	x	x	0.3 ± 0.006	-0.2 ± 0.01
lib 7/ I	0.03 ± 6 · 10 ⁻⁵	x	x	0.32 ± 0.006	x	x	x

Таблица 5: Коэффициенты нелинейных уравнений. Указаны средние значения и $\pm$ стандартные отклонения ($\langle c_i \rangle \pm \delta c_i$).

возникает вследствие доминирования нелинейной поправки к групповой скорости v_g . Напротив, для набора параметров II (рис. 24 справа) видна самофокусировка [45, 131]. Указанное поведение хорошо согласуется с теорией нелинейного уравнения Шрёдингера с фокусирующей нелинейностью.

Следует отметить, что мы допускаем существование нелинейных потерь, описываемых слагаемыми с коэффициентами $\gamma_{1,2}$. Однако их влияние оказывается пренебрежимо малым. Это позволяет утверждать, что основные трансформации волнового поля происходят без существенной диссипации энергии.

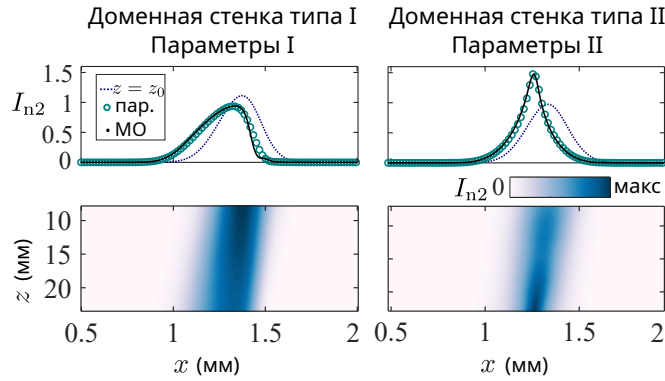


Рисунок 24: Нелинейная динамика пучка шириной $\mathcal{L} = 5a$ вдоль доменных стенок обоих типов для различных групп параметров. Аналогично рис. 23, в верхнем ряду построены распределения интенсивности для фиксированных значений координаты z : при $z_0 = 7.5$ мм (синяя пунктирная линия) и при $z = 23$ мм. Начальная интенсивность составляет $I(z = 0) = (0.45)^2 \times I_0$, построена нормированная интенсивность $I_{n2} = I(z)/[(0.45)^2 \times I_0]$. Нижний ряд: пространственное распределение интенсивности в плоскости xz . Обозначения легенды, как на рис. 23.

2.8 Выводы по главе

В данном разделе были изучены свойства нелинейных краевых волн, локализованных на топологических доменных стенках.

Во-первых, в континуальном пределе развито описание нелинейной динамики краевых импульсов, распространяющихся вдоль доменных стенок в топологических решетках типа димеризованного графена на основе одномодовых волноводов с Керровской нелинейностью. Получено уравнение в частных производных, описывающее динамику краевых импульсов, представляющее собой модифицированное нелинейное уравнение Шрёдингера, содержащее член, соответствующий нелинейной групповой скорости. Показано, что при пренебрежении пространственной дисперсией распространение нелинейных краевых импульсов сопровождается укрупнением заднего фронта, которое за конечное время приводит к градиентной катастрофе. Проведена регуляризация особенности посредством учета пространственной дисперсии, в результате чего на заднем фронте импульса рождаются квазисолитонные образования. Наконец, проведено численное моделирование реалистичных нелинейных топологических решеток, демонстрирующее эффект градиентной катастрофы.

Во-вторых, в рамках полученного модифицированного НУШ проанализирована модуляционная неустойчивость краевой моды к малоамплитудным длинноволновым возмущениям: получена область параметров, отвечающая устойчивому решению. Выполненное численное моделирование эволюции возмущённой краевой волны в реалистичной фотонной решётке одномодовых диэлектрических волноводов показало хорошее согласие с развитой теорией.

Наконец, в-третьих, рассмотрено применение алгоритма линейной регрессии (один из методов классического машинного обучения) для получения эволюционного уравнения, описывающего динамику комплексной огибающей краевого импульса, локализованного поперечно к топологической доменной стенке и распространяющегося вдоль неё. Восстановленные континуальные модели учитывают такие физические процессы, как пространственная дисперсия (в том числе высокого порядка), опрокидывание и самофокусировка, тем самым обеспечивая адекватное описание динамики распространения. Показано, что в нелинейном случае для группы параметров, отвечающих слабой дисперсии, определяющим слагаемым, искажающим форму начального симметричного Гауссовского распределения, является нелинейная групповая скорость, приводящая к асимметрии профиля в ходе распространения; а для большой дисперсии второго порядка — нелинейный набег фазы, что ведёт к симметричному сжатию пучка и увеличению максимальной интенсивности в нём. Предложенная схема свободна от априорных ограничений, которые традиционно накладываются применяемыми в асимптотических аналитических методах иерархиями масштабов. Это делает её мощным инструментом, усиливающим возможности машинного обучения и представляющим интерес для оптимизации параметров фотонных решеток.

Помимо конкретного примера фотонной решётки, рассмотренного нами, результаты могут быть также полезны для понимания нелинейных динамических явлений в других экспериментально реализуемых топологических системах, сконструированных на базе метаматериалов [20], оптических решеток [21], [22] и экситон-поляритонного конденсата [23].

Глава 3

Методы определения топологических свойств фотонных систем

Актуальность разработки новых методов определения топологических инвариантов фотонных систем обусловлена высокой сложностью традиционных подходов. Наиболее часто используемыми являются косвенные методы, основанные на непосредственном наблюдении топологически защищённых краевых состояний [134]. Альтернативными подходами, требующими значительно больших вычислительных и экспериментальных ресурсов, являются прямая томография Блоховских состояний по зоне Бриллюэна и исследование адиабатического транспорта волнового пакета с последующим восстановлением кривизны Берри [135, 136].

В данной главе представлены предложенные нами подходы, позволяющие определить топологические свойства фотонных решёток. В основе первого из них лежит исследование особенностей нелинейной динамики волнового поля, в том числе развития модуляционной неустойчивости в рамках модели ВНЗ. Ключевая идея второго подхода состоит в интерпретации исходной проблемы как задачи классификации топологии неэрмитовой модели SSH и использовании для её решения методов машинного и глубокого обучения.

3.1 Модуляционной неустойчивость в нелинейной квадратной киральной решетке

В данном разделе будет исследована неустойчивость объемных нелинейных волн на примере Блоховских мод в двумерной киральной квадратной решетке с нелинейностью Керровского типа, изображенной на рис. 25(а); и найдены отличия в проявлении данного эффекта для тривиальной и нетривиальной топологий. Как и в предыдущих главах, физической платформой, подходящей для демонстрации полученных результатов, являются решетки волноводов, но мы остановимся на подробном изучении эффектов в рамках системы Дираковских уравнений, соответствующих модели ВНЗ.

3.1.1 Модель: нелинейная двумерная квадратная киральная решетка

Данную систему можно описать с помощью Гамильтониана $\hat{H}_s = \hat{H}_L + \hat{H}_{NL}$, содержащего линейную $\hat{H}_L$ и нелинейную $\hat{H}_{NL}$ части, определенные как

$$\hat{H}_L(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad d_z = \Delta + 2J_2 (\cos k_x - \cos k_y), \quad (3.1)$$

$$d_x + id_y = J_1 [e^{-i\pi/4} (1 + e^{i(k_y - k_x)}) + e^{i\pi/4} (e^{-ik_x} + e^{ik_y})], \quad (3.2)$$

$$\hat{H}_{NL}\psi_{\mathbf{r}}^{(j)} = \Gamma f(|\psi_{\mathbf{r}}^{(j)}|^2) \psi_{\mathbf{r}}^{(j)}. \quad (3.3)$$

В этих уравнениях волновой вектор $\mathbf{k}$ принимает значения в пределах зоны Брюллиэна квадратной решетки $k_{x,y} \in [-\pi, \pi]$, $J_{1,2}$ – коэффициенты связи между ближайшими элементами решетки и элементами, следующими за ближайшими соответственно, Δ – отстройка собственных постоянных распространения между подрешетками a, b (рис. 25), Γ – коэффициент нелинейности. Для дальнейших выкладок мы зафиксировали $J_2 = J_1/\sqrt{2}$.

Чтобы ввести топологические фазы в данной системе, мы начнем с линейного случая. Тогда собственные энергии Гамильтониана $\hat{H}_L$ (рис. 26):

$$E_L(k_x, k_y, \Delta) = \pm \sqrt{4J_1^2 [1 + \cos k_x \cos k_y] + (\Delta + 2J_2 (\cos k_x - \cos k_y))^2} = \pm \epsilon, \quad (3.4)$$

как мы видим, при некотором соотношении параметров возникает запрещенная зона. Щель закрывается в точке $\mathbf{k}_0$, если минимум верхней зоны совпадает с максимумом нижней зоны, что означает $\epsilon(\mathbf{k}_0) = -\epsilon(\mathbf{k}_0)$, или, эквивалентно, $\epsilon(\mathbf{k}_0) = 0$. Если $J_1\Delta < 0$, то $\mathbf{k}_0 = (0, \pi)$; если $J_1\Delta > 0$ – то $\mathbf{k}_0 = (\pi, 0)$. Из соотношения $\epsilon(\mathbf{k}_0) = \Delta \pm 2\sqrt{2}J_1 = 0$ следует, что топологический переход (связанный с закрытием щели и последующим переворотом зон) происходит при $\Delta = \mp 2\sqrt{2}J_1$ (рис. 25(b), 26) (что подтверждается непосредственным расчетом числа Черна).

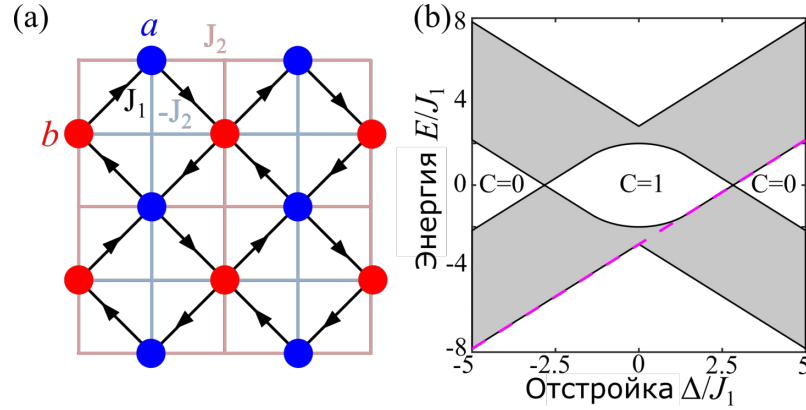


Рисунок 25: (a): схематическое изображение рассматриваемой двумерной системы, состоящей из двух подрешеток (a, b) с расстройкой Δ и коэффициентами связи $J_{1,2}$. (b): линейные энергетические зоны (выделены серым) в зависимости от Δ при $J_2 = J_1/\sqrt{2}$. Розовая пунктирная линия – $E = \Delta - 4J_2$. На рис. отмечены числа Черна: $C = 1$ отвечает нетривиальной топологической фазе, $C = 0$ – тривиальной.

Для дальнейшего анализа данной системы мы разложим уравнение (3.1) вблизи точки высокой симметрии $\mathbf{k}_0 = (\pi, 0)$, тем самым получим эффективную континуальную модель. В окрестности $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{p}$, разложение Блоховского Гамильтониана $\hat{H}_L(\mathbf{k})$ (3.1) для $|\mathbf{p}| \ll 1$ приводит к Гамильтониану *Дираковского типа*:

$$\hat{H}_D = J_1\sqrt{2}(p_x\hat{\sigma}_y - p_y\hat{\sigma}_x) + (m_{\text{eff}} + J_2[p_x^2 + p_y^2])\hat{\sigma}_z, \quad (3.5)$$

здесь $m_{\text{eff}} = \Delta - 4J_2$. Отметим, что данный Гамильтониан соответствует ВНЗ модели с точностью до замены обозначений $v_d \rightarrow \sqrt{2}J_1$, $M \rightarrow m_{\text{eff}}$, $\beta \rightarrow J_2$.

Соответствующие нелинейные эволюционные уравнения с учетом $p_{x,y} = -i\partial_{x,y}$ могут быть записаны как:

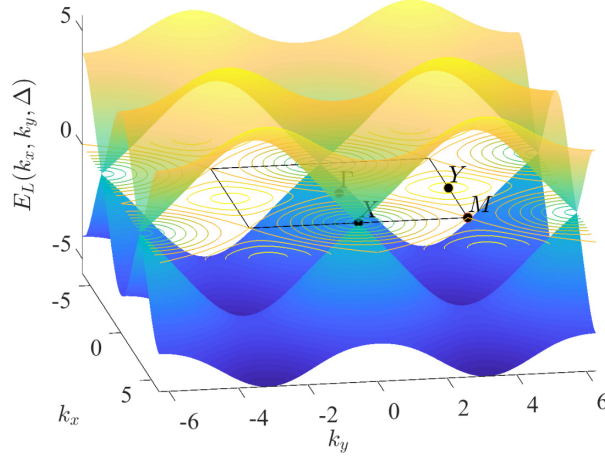


Рисунок 26: Трёхмерное представление дисперсии для рассматриваемой решетки с параметрами $J_1 = 1$; $J_2 = J_1/\sqrt{2}$; $\Delta = 2\sqrt{2}J_1$. Черные точки обозначают точки высокой симметрии первой зоны Бриллюэна (черный квадрат): $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi, 0)$, $Y = (0, \pi)$, $M = (\pi, \pi)$.

$$i\partial_t \psi = \begin{pmatrix} \Delta - 4J_2 - J_2 [\partial_x^2 + \partial_y^2] + \Gamma|\psi_1|^2 & J_1\sqrt{2}(i\partial_y - \partial_x) \\ J_1\sqrt{2}(i\partial_y + \partial_x) & -\Delta + 4J_2 + J_2 [\partial_x^2 + \partial_y^2] + \Gamma|\psi_2|^2 \end{pmatrix} \psi. \quad (3.6)$$

3.1.2 Свойства нелинейных Блоховских мод

На первом этапе анализа данной системы мы найдем явное выражение для нелинейных Блоховских волн, для этого будем искать решение системы (3.6) в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} e^{-iEt + ip_x x + ip_y y} \quad (3.7)$$

и получим систему уравнений для амплитуд A и B :

$$\begin{cases} (-E + \Delta - 4J_2 + J_2 [p_x^2 + p_y^2] + \Gamma|A|^2)A - J_1\sqrt{2}(p_y + ip_x)B = 0; \\ (E + \Delta - 4J_2 + J_2 [p_x^2 + p_y^2] - \Gamma|B|^2)B + J_1\sqrt{2}(p_y - ip_x)A = 0, \end{cases} \quad (3.8)$$

где волновой вектор может быть переписан в полярной системе координат $\mathbf{p} = (p_x, p_y) = (p \cos \theta, p \sin \theta)$. В точке $\mathbf{p} = 0$ решения системы (3.8):

$$A^{(0)} = 0, \quad |B^{(0)}|^2 = I_0, \quad E_2^{(0)} = -\Delta + 4J_2 + \Gamma|B^{(0)}|^2 = -\Delta + 4J_2 + \Gamma I_0, \quad (3.9)$$

$$B^{(0)} = 0, \quad |A^{(0)}|^2 = I_0, \quad E_1^{(0)} = \Delta - 4J_2 + \Gamma|A^{(0)}|^2 = \Delta - 4J_2 + \Gamma I_0, \quad (3.10)$$

в этом выражении мы ввели полную интенсивность $|A|^2 + |B|^2 = I_0$. В пределе $\Gamma I_0 \rightarrow 0$ эти решения переходят в значения энергии верхней и нижней зоны в точке $p_x = p_y = 0$ в линейном случае. При этом заселенной оказывается только одна из подрешеток.

В случае высоких интенсивностей $I_0 \geq \pm 2 \frac{(\Delta - 4J_2)}{\Gamma}$ существует дополнительное решение

$|A^{(0)}|^2 = \frac{I_0}{2} - \frac{\Delta - 4J_2}{\Gamma}$, $|B^{(0)}|^2 = \frac{I_0}{2} + \frac{\Delta - 4J_2}{\Gamma}$ с энергией $E_3^{(0)} = \frac{\Gamma I_0}{2}$. Оно дважды вырождено, и его собственный вектор:

$$\begin{pmatrix} A^{(0)} \\ B^{(0)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \sqrt{I_0 - \frac{2(\Delta - 4J_2)}{\Gamma}} \\ \pm \sqrt{I_0 + \frac{2(\Delta - 4J_2)}{\Gamma}} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Здесь фаза φ – свободный параметр, зависящий от того, в каком направлении в пространстве волновых векторов мы движемся к точке $p_x = p_y = 0$.

Чтобы понять, как фаза волновой функции (3.11) связана с направлением волнового вектора вблизи точки $p_x = p_y = 0$, мы подставляем нелинейное Блоховское решение, описывающее волну в точке $p_x = p_y = 0$ (3.11), в уравнение (3.8). Рассмотрим второе уравнение системы, полученной после подстановки. Оказывается, что все члены этого уравнения, кроме одного, чисто вещественные в области существования решения. Исключение составляет член, содержащий ψ_1 , который пропорционален выражению $(p_y - ip_x)\psi_1 = pe^{i\varphi_p + i\varphi - i\pi/2}|A^{(0)}|$.

Это выражение показывает, что угол φ_p , определяющий направление волнового вектора $\mathbf{p}$, связан с фазой φ соотношением: $\varphi_p = -\varphi + \pi/2$. Если $\varphi = 0$, то волновой вектор направлен вдоль оси y : $\mathbf{p} = (0, p_y)$; если $\varphi = \pi/2$, то волновой вектор направлен вдоль оси x : $\mathbf{p} = (p_x, 0)$.

Таким образом, относительная фаза между компонентами $A^{(0)}$ и $B^{(0)}$ указывает направление в плоскости (p_x, p_y) , по которому мы приближаемся к точке $p_x = p_y = 0$.

Чтобы получить вид дисперсии (здесь под дисперсией, нелинейным спектром мы понимаем формальную зависимость энергии от волнового вектора) для волновых векторов $p_{x,y}$, отличных от 0, мы применяем стандартный подход теории возмущений (p_x и p_y – возмущения, $E = E^{(0)} + E^{(1)} + \dots$; $A = A^{(0)} + A^{(1)} + \dots$; $B = B^{(0)} + B^{(1)} + \dots$) и получаем выражение:

$$E = E_3^{(0)} + E^{(1)} = \frac{\Gamma I_0}{2} \pm \frac{\sqrt{2}J_1 \sqrt{p_x^2 + p_y^2}}{\sqrt{1 - \frac{4(\Delta - 4J_2)^2}{I_0^2 \Gamma^2}}}.$$

Таким образом, если выполняется условие $\Gamma^2 I_0^2 > 4(\Delta - 4J_2)^2$, одна из дисперсионных кривых образует петлю. Такая особенность энергетических зон носит название *нелинейный Дираковский конус* [137], рис. 27. Линии в пространстве параметров, описывающие этот переход:

$$\Gamma I_0 = \pm 2(\Delta - 4J_2). \quad (3.12)$$

В окрестности точки $E = E_3^{(0)}$ дисперсионная кривая имеет крестообразную форму. Квадраты амплитуд собственных векторов принимают следующий вид:

$$|A|^2 = \frac{I_0}{2} - \frac{\Delta - 4J_2}{\Gamma} \left(1 \mp \frac{2\sqrt{2}J_1 \sqrt{p_x^2 + p_y^2}}{\sqrt{I_0^2 \Gamma^2 - 4(\Delta - 4J_2)^2}} \right), \quad (3.13)$$

$$|B|^2 = \frac{I_0}{2} + \frac{\Delta - 4J_2}{\Gamma} \left(1 \mp \frac{2\sqrt{2}J_1 \sqrt{p_x^2 + p_y^2}}{\sqrt{I_0^2 \Gamma^2 - 4(\Delta - 4J_2)^2}} \right). \quad (3.14)$$

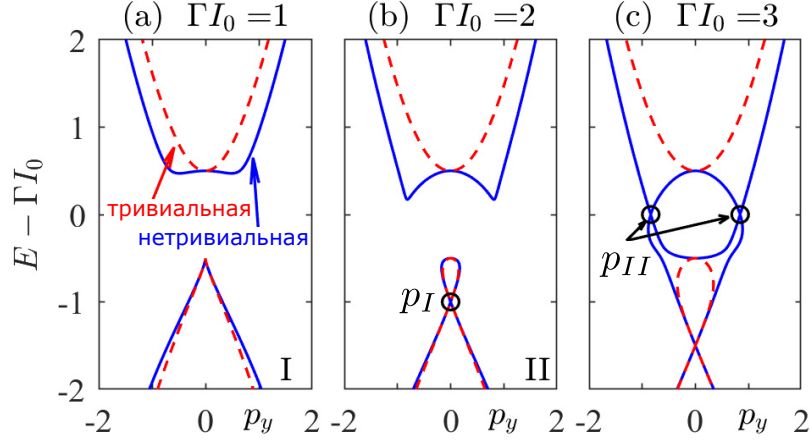


Рисунок 27: Переход в нелинейном спектре Блоховских волн при пересечении критической линии в нетривиальной (синий цвет; $m_{\text{eff}} = -1/2$) и тривиальной (красный цвет; $m_{\text{eff}} = 1/2$) фазах эффективной Дираковской модели, описываемой уравнением (3.5).

Мы также можем получить неявное точное выражение для энергии, справедливое для всех волновых векторов. Чтобы упростить дальнейшие выкладки, мы примем, что $p_x = 0$ и перепишем систему нелинейных Дираковских уравнений в наиболее общем виде:

$$\begin{pmatrix} E_n - M_n & J_1 \sqrt{2} p_y \\ J_1 \sqrt{2} p_y & E_n + M_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \quad (3.15)$$

тогда выражение для нелинейной дисперсии:

$$E_n^2 = 2J_1^2 p_y^2 + M_n^2(p_y^2), \quad (3.16)$$

где $E_n = E - \Gamma I_0/2$, $M_n = \Delta - 4J_2 + \frac{\Gamma I_0 (\Delta - 4J_2 + J_2 p_y^2)}{2(E - \Gamma I_0)} + J_2 p_y^2$. При этом собственные векторы

$$|A|^2 = \frac{I_0}{2} + \frac{(\Delta - 4J_2) I_0}{2(-\Gamma I_0 + E)} + \frac{J_2 p_y^2 I_0}{2(-\Gamma I_0 + E)}, \quad |B|^2 = \frac{I_0}{2} - \frac{(\Delta - 4J_2) I_0}{2(-\Gamma I_0 + E)} - \frac{J_2 p_y^2 I_0}{2(-\Gamma I_0 + E)}. \quad (3.17)$$

Уравнение (3.16) может быть также переписано как

$$((E - \Gamma I_0/2)^2 - 2J_1^2 p_y^2) (E - \Gamma I_0)^2 = (\Delta - 4J_2 + J_2 p_y^2)^2 \left(E - \frac{\Gamma I_0}{2} \right)^2. \quad (3.18)$$

Эта зависимость для различных параметров построена на рис. 27.

Следует отметить, что данная дисперсионная кривая поддерживает существование 2 дополнительных петель (помимо петли в точке $p_y = p_I = 0$, описанной выше) при $d_z(\mathbf{p}) = 0$:

$$p_y = \pm p_{II} = \pm \sqrt{\frac{4J_2 - \Delta}{J_2}}, \quad (3.19)$$

причем это дополнительное разветвление происходит только в нетривиальной фазе, то есть при $|\Delta| < 4J_2$.

Энергии в этих точках $\pm p_{II}$ принимают значения:

$$E_3^{(0)II} = \Gamma I_0, \quad E_{2,1}^{(0)II} = \Gamma I_0/2 \pm \sqrt{\frac{2J_1^2(4J_2 - \Delta)}{J_2}}. \quad (3.20)$$

Энергия $E_3^{(0)II}$ соответствует дополнительным перекрестиям, которые возникают только в нетривиальном случае. Собственные векторы в этой особой точке:

$$\begin{pmatrix} A^{(0)II} \\ B^{(0)II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \sqrt{\frac{I_0}{2} + \sqrt{\frac{I_0^2}{4} - 2J_1^2(p_{II})^2/\Gamma^2}} \\ \pm \sqrt{\frac{I_0}{2} - \sqrt{\frac{I_0^2}{4} - 2J_1^2(p_{II})^2/\Gamma^2}} \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

отсюда мы получаем условие существования данного пересечения $\frac{I_0}{2} \pm \sqrt{\frac{I_0^2}{4} - 2J_1^2(p_{II})^2/\Gamma^2} \geq 0$, что можно преобразовать к виду

$$\frac{\Gamma I_0}{2} = \pm \sqrt{\frac{2J_1^2(4J_2 - \Delta)}{J_2}}, \quad (3.22)$$

где знак следует выбирать в зависимости от знака нелинейности Γ .

На рис. 27 представлены описанные ключевые особенности нелинейного энергетического спектра. На (а) изображён начальный момент бифуркации в точке $p_y = 0$, приводящей к образованию петлеобразного решения для низкоэнергетических веток, как на (b). При больших интенсивностях в нетривиальном случае возникает дополнительная бифуркация в точке $p_y = \pm p_{II}$ для высокоэнергетической моды (b). Если мы будем дальше увеличивать интенсивности (как на (с)), то в нетривиальном случае низкоэнергетические и высокоэнергетические ветки сомкнутся, то есть щель закроется. При этом в тривиальной конфигурации щель всё равно сохранится.

3.1.3 Модуляционная неустойчивость объемных нелинейных мод

Хотя нелинейный Дираковский конус в точке $p_x = p_y = 0$ возникает в обеих топологических фазах, устойчивость мод вблизи точки бифуркации чувствительна к топологии соответствующей линейной зоны.

Для исследования устойчивости нелинейных Блоховских мод мы рассмотрим малое возмущение к их амплитудам $(\delta a, \delta b)$, то есть будем искать решение в виде:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_0 + \delta a \\ B_0 + \delta b \end{pmatrix} e^{-iEt + ip_x x + ip_y y}. \quad (3.23)$$

Тогда линеаризованные уравнения для δa , δb могут быть переписаны как

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta a \\ \delta b \\ \delta a^* \\ \delta b^* \end{pmatrix} = \hat{L} \begin{pmatrix} \delta a \\ \delta b \\ \delta a^* \\ \delta b^* \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

где оператор $\hat{L}$ представляет собой матрицу 4×4

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} \hat{H}_L(\partial_x, \partial_y) + H_L(p_x, p_y) - E\hat{I} + 2\Gamma \begin{pmatrix} |A_0|^2 & 0 \\ 0 & |B_0|^2 \end{pmatrix} & \Gamma \begin{pmatrix} A_0^2 & 0 \\ 0 & B_0^2 \end{pmatrix} \\ -\Gamma \begin{pmatrix} A_0^{*2} & 0 \\ 0 & B_0^{*2} \end{pmatrix} & -\hat{H}_L^*(\partial_x, \partial_y) - H_L^*(p_x, p_y) + E\hat{I} - 2\Gamma \begin{pmatrix} |A_0|^2 & 0 \\ 0 & |B_0|^2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

и мы также ввели операторы

$$H_L(p_x, p_y) = \begin{pmatrix} J_2(p_x^2 + p_y^2) & -J_1\sqrt{2}(p_y + ip_x) \\ -J_1\sqrt{2}(p_y - ip_x) & -J_2(p_x^2 + p_y^2) \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

$$\hat{H}_L(\partial_x, \partial_y) = \begin{pmatrix} \Delta - 4J_2 - J_2(\partial_x^2 + \partial_y^2) & J_1\sqrt{2}(i\partial_y - \partial_x) \\ J_1\sqrt{2}(i\partial_y + \partial_x) & -\Delta + 4J_2 + J_2(\partial_x^2 + \partial_y^2) \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Для определения области неустойчивости мы рассмотрим возмущения в виде плоских волн $[\delta a; \delta a^*; \delta b; \delta b^*] = [C_1; C_2; C_3; C_4]e^{-i\lambda t + i\kappa_x x + i\kappa_y y} = \mathbf{C}e^{-i\lambda t + i\kappa_x x + i\kappa_y y}$, где мы предполагаем $\kappa_x = 0$ с целью упрощения дальнейших выкладок. Уравнение (3.24) приводит к системе уравнений для амплитуд $\mathbf{C}$:

$$(\hat{L} - \lambda \hat{I}) \mathbf{C} = 0.$$

Величина λ , положительная мнимая часть которой сигнализирует об неустойчивости, является решением уравнения $\det(\hat{L} - \lambda \hat{I}) = 0$, коэффициенты матрицы $\hat{L}$ определены для рассматриваемого стационарного состояния с энергией E и собственным вектором $(A_0, B_0)^T$.

Для начала мы рассмотрим случай малой нелинейности $\Gamma I_0 < \pm 2(\Delta - 4J_2)$ и для определенности зафиксируем $E = (\Delta - 4J_2) + \Gamma I_0$, $B^{(0)} = 0$, $|A^{(0)}|^2 = I_0$, $p_x = p_y = 0$ (см. уравнение 3.9).

Мы запишем решения уравнения $\det(\hat{L} - \lambda \hat{I}) = 0$ вдоль линий $I_0\Gamma + C = -2(\Delta - 4J_2)$:

$$\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{-F + D}; \quad \lambda_{3,4} = \pm\sqrt{F + D},$$

где мы ввели

$$F = \sqrt{C^4/4 + (C + \Gamma I_0)^2 J_2^2 \kappa_y^4 + \kappa_y^2 (-J_2 C^2 (C + \Gamma I_0) + 4J_1 C \Gamma I_0 + 2C^2 J_1^2)} \\ D = J_2^2 \kappa_y^4 + \kappa_y^2 (J_2 I_0 \Gamma + 2J_1^2 - C J_2) + C^2/2.$$

Меняя параметр C , мы можем построить карты неустойчивости для всех значений Δ, Γ , что

изображено на рис. 28.

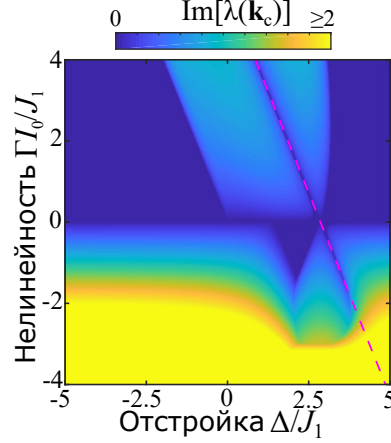


Рисунок 28: Инкремент нарастания наиболее неустойчивого волнового вектора возмущения $\mathbf{k}_c$. Розовая пунктирная линия соответствует $I_0\Gamma = -2(\Delta - 4J_2)$.

При слабых нелинейностях ΓI_0 в тривиальной фазе мы наблюдаем поведение, качественно схожее со скалярным нелинейным уравнением Шрёдингера: Блоховские волны неустойчивы в условиях самофокусирующей нелинейности, то есть при $\Gamma m_{\text{эфф}} < 0$. В случае нетривиальной топологии особый интерес вызывает линия $I_0\Gamma = -2(\Delta - 4J_2)$, вдоль которой сохраняется устойчивость.

Далее мы анализируем уравнение (3.31) для $C = 0$, то есть вдоль линии $I_0\Gamma = -2(\Delta - 4J_2)$, одной из границ существования петлеобразного решения, точке вырождения двух решений (нижней ветки и петлеобразного решения):

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{J_2^2 \kappa_y^4 + 2\kappa_y^2 J_1^2}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \sqrt{-4(\Delta - 4J_2)J_2 \kappa_y^2 + J_2^2 \kappa_y^4 + 2J_1^2 \kappa_y^2}. \quad (3.28)$$

Мнимая часть $\text{Im}(\lambda_{1,2})$ обращается в нуль при любых значениях волнового числа κ_y , следовательно $\lambda_{1,2}$ не указывает на наличие неустойчивости. Область устойчивости может быть определена из анализа $\lambda_{3,4}$: это чисто вещественная величина при условии $\Gamma > -\frac{J_1^2}{I_0 J_2}$, что эквивалентно неравенству

$$2J_1^2 \geq 4(\Delta - 4J_2)J_2.$$

В нетривиальном случае, поскольку $J_2(\Delta - 4J_2) < 0$, можно заключить, что неравенство $2J_1^2 \geq 4(\Delta - 4J_2)J_2$ выполняется для любых значений параметров J_2, Δ . Таким образом, точка пересечения является устойчивой. Однако в тривиальном случае существует область параметров, для которой $\text{Im}(\lambda_{3,4}) > 0$, и точка пересечения становится неустойчивой. Граница области неустойчивости в тривиальной фазе определяется выражением:

$$\Delta_c = 4J_2 + \frac{J_1^2}{2J_2}. \quad (3.29)$$

Результаты представлены на рис. 29(a,b). Инкремент неустойчивости в тривиальной

фазе при $\Delta > \Delta_c \max_{\kappa_y} \text{Im} \lambda_{3,4}$ в точке κ_y^{max} :

$$\text{Im}[\lambda(p_c)] \equiv \max_{\kappa_y} \text{Im} \lambda_{3,4} = \frac{|J_1^2 + \Gamma I_0 J_2|}{|J_2|}; \quad |p_c| \equiv \kappa_y^{max} = \pm \sqrt{\frac{|\Gamma I_0 J_2 + J_1^2|}{J_2^2}}. \quad (3.30)$$

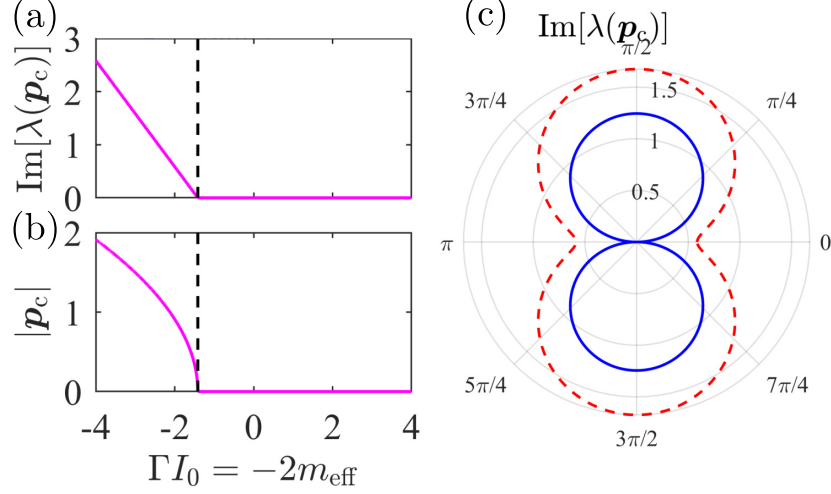


Рисунок 29: Инкремент нарастания (a) и абсолютная величина (b) (см. уравнение (3.30)) наиболее неустойчивого волнового вектора возмущения вдоль критической линии (изображена розовым пунктиром на рис. 28). (c): инкремент нарастания неустойчивости как функция фазы нелинейной Блоховской волны φ для $\Gamma I_0 = 3$ в нетривиальной (синий цвет, $m_{\text{eff}} = -1/2$) и тривиальной (красный цвет, $m_{\text{eff}} = 1/2$) фазах.

Для понимания этих зависящих от топологической фазы областей устойчивости, отметим, что в тривиальной фазе моды возмущения сохраняют схожую поляризацию с нелинейной Блоховской волной, что обеспечивает эффективное нелинейное смешение волн. С другой стороны, в нетривиальной фазе поляризация мод возмущения поворачивается к противоположному полюсу сферы Блоха, тем самым уменьшая эффективность нелинейного смешения волн из-за плохого пространственного перекрытия между нелинейной Блоховской волной и модами возмущения. Хотя это различие может показаться незначительным, оно может играть решающую роль вблизи точек бифуркации, снимая вырождение между зонами мод возмущения. Таким образом, модуляционная неустойчивость зависит не только от дисперсии собственных значений энергии, но и чувствительна к геометрическим свойствам Блоховских волн, т.е. топологии зон. Далее мы приводим вычисления, подтверждающие данные выводы.

На рис. 30, 31 показаны дисперсия линейных возмущений в зависимости от κ_y в тривиальной и нетривиальной фазах в случае слабой нелинейности. Поляризацию мод возмущения характеризуют с помощью: 1) усреднённого по времени перекрытия с линейными Блоховскими волнами $|\langle \delta\psi | \psi^{(0)} \rangle|^2$, 2) дисбаланса подрешёток $s_z = |\delta a|^2 - |\delta b|^2 = \langle \sigma_z \rangle$. В тривиальной фазе моды возмущения сохраняют значительное перекрытие с линейными Блоховскими волнами, а величина $|s_z|$ остаётся большой, что указывает на преимущественную локализацию мод возмущения на одной подрешётке. В нетривиальной фазе при больших κ_y величина $|s_z|$ переходит к противоположному полюсу сферы Блоха, что снижает эффективность нелинейного волнового смешения.

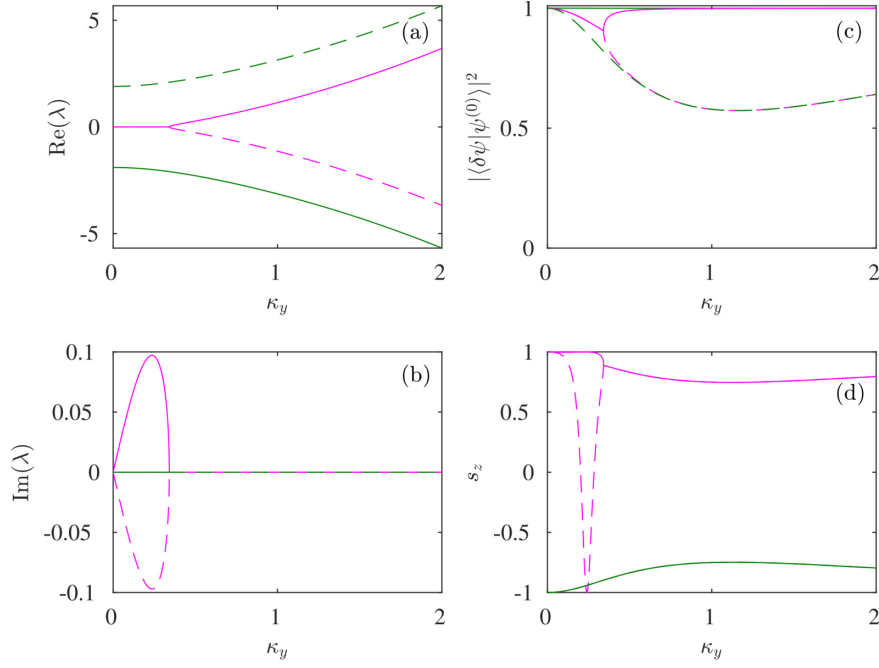


Рисунок 30: (a): действительная и (b) мнимая части спектра λ линейных возмущений, (c) квадрат модуля скалярного произведения между модами возмущения и линейными Блоховскими волнами, (d) проекция s_z спина собственных векторов возмущения в слабо нелинейном режиме, при фокусирующей нелинейности $\Gamma = -1$, $I_0 = 0.1$, $m_{\text{eff}} = 1$ (тривиальный случай).

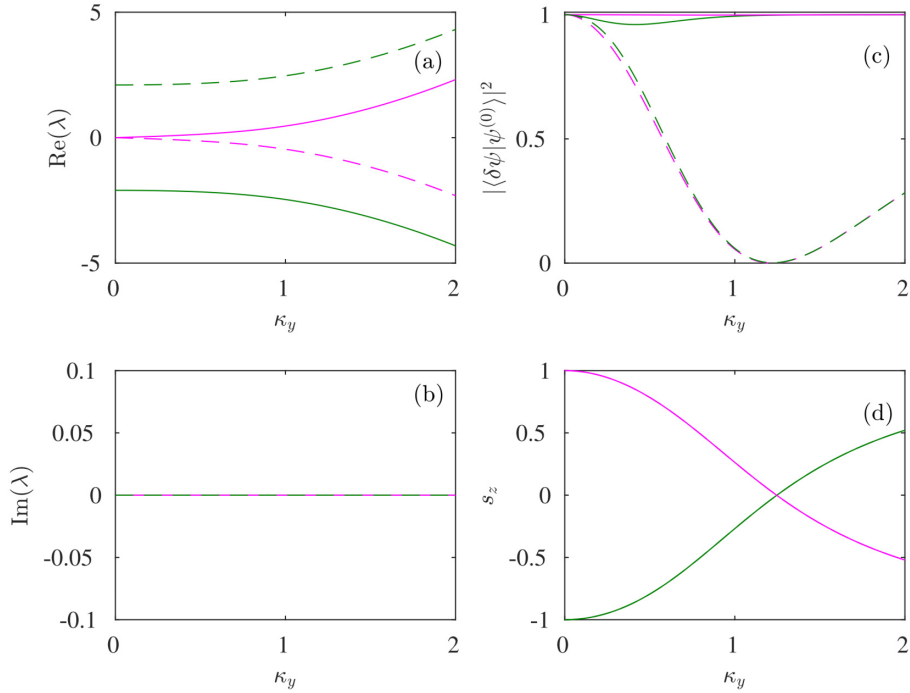


Рисунок 31: (a): действительная и (b) мнимая части спектра λ линейных возмущений, (c) квадрат модуля скалярного произведения между модами возмущения и линейными Блоховскими волнами, (d) проекция s_z спина собственных векторов возмущения в слабо нелинейном режиме, при фокусирующей нелинейности $\Gamma = -1$, $I_0 = 0.1$, $m_{\text{eff}} = -1$ (нетривиальный случай).

Перейдем к случаю большей интенсивности и исследуем зависимость инкремента неустойчивости нелинейной Блоховской волны, нарушающей симметрию, от φ (3.11), рис. 29(c). Для

этого мы подставляем найденные величины $|A_0|^2 = \frac{I_0}{2} - \frac{\Delta - 4J_2}{\Gamma}$, $|B_0|^2 = \frac{I_0}{2} + \frac{\Delta - 4J_2}{\Gamma}$ и значение $E^{(0)} = \frac{\Gamma I_0}{2}$. Мы находим λ вдоль прямых линий $I_0\Gamma + C = -2(\Delta - 4J_2)$ на плоскости параметров (Γ, Δ) :

$$\lambda = \pm \sqrt{\pm a + C J_2 \kappa_y^2 + \Gamma I_0 J_2 \kappa_y^2 + 2 J_1^2 \kappa_y^2 + J_2^2 \kappa_y^4}, \quad (3.31)$$

здесь

$$a = \frac{\sqrt{e^{-2i\varphi} \kappa_y^2 (C^2 (-1 + e^{2i\varphi})^2 J_1^2 + 2C (-1 + e^{2i\varphi})^2 \Gamma I_0 J_1^2) + 2\Gamma^2 I_0^2 J_2^2 \kappa_y^4}}{\sqrt{2}}. \quad (3.32)$$

С использованием этих соотношений мы построили рис. 29(с) для $\Gamma I_0 = 3$. В нетривиальной фазе неустойчивость существенно анизотропна, причем волновые векторы в направлении $\mathbf{p} = (p_x, 0)$ остаются устойчивыми, тогда как в тривиальной фазе неустойчивости возникают для всех углов.

Наконец, мы дополнительно рассмотрим уравнение (3.31) для фиксированной фазы $\varphi = \pi n, n \in \mathbb{Z}$:

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{J_2^2 \kappa_y^4 + C J_2 \kappa_y^2 + 2 J_1^2 \kappa_y^2}, \quad (3.33)$$

$$\lambda_{3,4} = \pm \sqrt{J_2^2 \kappa_y^4 + C J_2 \kappa_y^2 + 2 J_2 \Gamma I_0 \kappa_y^2 + 2 J_1^2 \kappa_y^2}. \quad (3.34)$$

Границы устойчивости в этом случае совпадают с линиями $C = -\frac{2J_1^2}{J_2} - 2\Gamma I_0$ и $C = -\frac{2J_1^2}{J_2}$, что эквивалентно $I_0\Gamma = 2(\Delta - 4J_2 - \frac{J_1^2}{J_2})$ и $I_0\Gamma = -2(\Delta - 4J_2 - \frac{J_1^2}{J_2})$.

Карты максимального значения инкремента неустойчивости $\max_\lambda [\text{Im}(\lambda)]$ для решения $E = \Gamma I_0/2$ представлены на рис. 32 и построены с использованием уравнения (3.31) для $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/2$. В наших обозначениях линейная устойчивость возмущений по направлению y зависит от фазового угла спинора φ . Обобщая эту особенность, отметим, что устойчивость определяется взаимной ориентацией $\Delta\theta = \theta_p - \theta_0$ стационарного решения с $\mathbf{p}_0$ и возмущения с $\mathbf{p}_p$. В нетривиальной фазе решение остается устойчивым при $\Delta\theta = 0$ ($\varphi = 0, \theta_p = \pi/2, \theta_0 = \pi/2$) и демонстрирует максимальную поперечную модуляционную неустойчивость при $\Delta\theta = \pi/2$ ($\varphi = \pi/2, \theta_p = \pi/2, \theta_0 = 0$).

3.2 Определение топологических фаз Флоке систем

В рамках продолжения изучения особенностей модуляционной неустойчивости в нелинейных решётках с топологическими свойствами мы исследовали Флоке системы. В линейном случае в зависимости от параметров Гамильтониана данная система поддерживает различные топологические фазы, среди которых: фаза нормального изолятора, фаза изолятора Черна, фаза аномального изолятора Флоке и фаза аномального изолятора Флоке высокого порядка. Таким образом, данная решётка – удобная платформа для изучения сразу нескольких различных топологических фаз. В дополнение к стандартному анализу модуляционной неустойчивости объемных Блоховских мод системы мы описали свойства нелинейной динамики суперпозиционного состояния, что позволило идентифицировать аномальные топологические

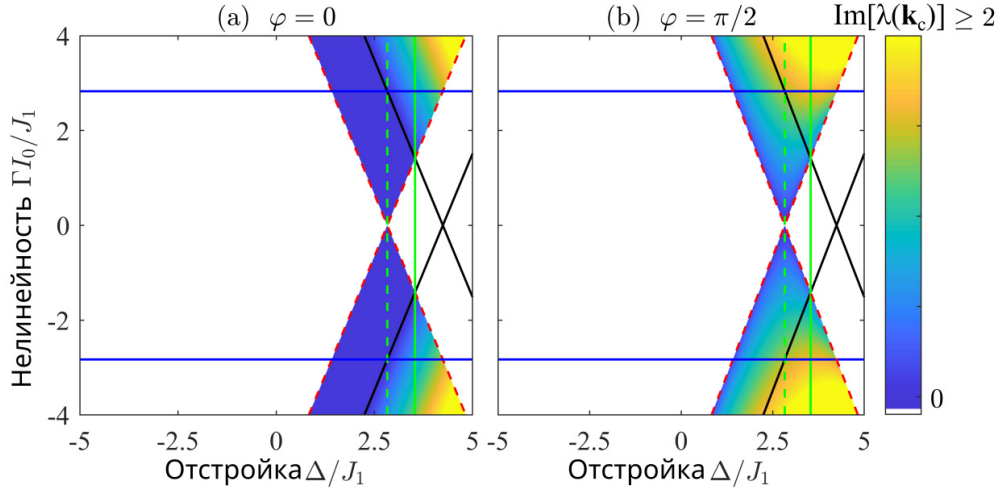


Рисунок 32: Максимальное значение инкремента (см. цветовую шкалу) $\max_{\lambda}(\text{Im}(\lambda))$ для различных параметров Δ , Γ для решения $E = \Gamma I_0/2$ в точке $p = 0$, рассчитанное с использованием уравнения (3.31) для $\varphi = 0$ (а) и для $\varphi = \pi/2$ (б). Белый цвет обозначает отсутствие решения. Параметры системы: $J_2 = 1/\sqrt{2}$, $J_1 = 1$, $I_0 = 1$. Пунктирные красные линии $\Gamma = \pm \frac{2}{I_0} (4J_2 - \Delta)$ обозначают границы существования решения. На этих линиях в нетривиальном случае ($|\Delta| < 2\sqrt{2}$, зелёная пунктирная линия отмечает $\Delta = 2\sqrt{2}$) рассматриваемое нами решение является устойчивым. В тривиальном случае ($|\Delta| > 2\sqrt{2}$) при $\Delta < \Delta_c = \frac{J_1^2}{2J_2} + 4J_2$ решение устойчиво, тогда как при $\Delta > \Delta_c$ оно неустойчиво; $\Delta = \Delta_c$ обозначена сплошной зелёной линией. Границы устойчивости для $\varphi = 0$ показаны чёрными прямыми линиями $I_0\Gamma = \pm 2(\Delta - 4J_2 - \frac{J_1^2}{J_2})$. Точка пересечения чёрной линии с границей тривиальной фазы $\Gamma = \pm \frac{2J_1^2}{J_2 I_0}$ (синие прямые линии) определяет интенсивность, при которой, изменяя Δ , мы можем различить тривиальную и нетривиальную фазы по изменению устойчивости и наблюдать переход между ними.

фазы данной системы.

3.2.1 Введение: топологические системы Флоке

Одно из развивающихся в данный момент направлений топологической физики – изучение топологических эффектов в Флоке решетках. Уникальные свойства таких систем позволяют наблюдать широкий спектр нетривиальных топологических явлений, среди которых — квантованная перекачка заряда и существование аномальных топологических фаз, не имеющих аналогов в других системах [138, 139, 140, 141, 142, 143].

Топологические фазы рассматриваемых в данном подразделе систем классифицируются согласно свойствам их операторов Флоке, то есть операторов временной эволюции, описывающих динамику системы за один полный период изменения ее параметров [144, 145]. В отличие от статических систем, где топологические свойства определяются Гамильтонианом и его спектром, в Флоке системах ключевую роль играет полная эволюция состояний в течение цикла изменения параметров.

Каждое собственное состояние оператора Флоке накапливает фазу φ за один период T , что позволяет определить квазиэнергию $\Omega = \varphi/T$, представляющую собой среднюю фазу,

накапливаемую за единицу времени. Поскольку фаза является периодической переменной с периодом $2\pi/T$, системы Флоке не имеют однозначно определённых собственных состояний. Тем не менее, в них сохраняется топологическое соответствие между объёмными и краевыми состояниями (bulk-boundary correspondence), при котором количество топологически защищённых краевых мод в конечных системах определяется топологическими инвариантами объёмных собственных состояний [141, 142, 143].

Фотонные системы представляют собой удобную платформу для реализации Флоке систем и наблюдения их топологических свойств [13, 14]. В частности, в массивах оптических волноводов продольная координата распространения играет роль времени, что позволяет создавать Флоке решётки путем чисто пространственной модуляции показателя преломления [146, 147, 30, 29, 148, 28].

В последнее время развиваются исследования, посвященные нелинейным эффектам в Флоке системах. Например, объёмные и краевые солитоны были экспериментально обнаружены в двумерных фотонных решётках Флоке [22, 40, 149, 150]. Эти недавние работы стимулируют интерес к изучению того, как нелинейные эффекты могут быть использованы для исследования топологических инвариантов в системах Флоке.

3.2.2 Описание Флоке решетки

В качестве примера реализации системы Флоке мы рассмотрим модель сильной связи для двухкомпонентной квадратной решетки с периодически модулированными связями между ближайшими соседями J (рис. 33). Модуляция состоит из 4 этапов одинаковой длительности $Z/4$, где Z — полный период модуляции, и задается следующим образом:

$$J_n(z) = \begin{cases} \theta, & (n-1)Z/4 \leq z \leq nZ/4, \quad n = 1; \\ \gamma, & (n-1)Z/4 \leq z \leq nZ/4, \quad n = 2, 3, 4; \\ 0, & \text{в других случаях,} \end{cases}$$

здесь z — эволюционная координата, аналогичная времени. Без потери общности, мы предположим, что $Z = 4$, $\theta = \frac{3\pi}{4}$.

На практике такая система может быть реализована экспериментально с помощью закрученных (spiral) волноводных решёток. Основная идея заключается в том, что изменение эффективной связи между соседними волноводами достигается за счёт пространственного изменения расстояния между ними вдоль продольной оси z . Можно использовать прямоугольную решётку, как на рис. 33. На каждом этапе модуляции $n = 1, 2, 3, 4$ соответствующие пары волноводов сближаются или удаляются друг от друга, что меняет коэффициент связи между ними. Поскольку связь между волноводами экспоненциально зависит от расстояния между их осями, такая модуляция позволяет реализовать разные значения θ и γ на каждом этапе.

В рамках метода сильной связи в импульсном пространстве для каждого шага цикла

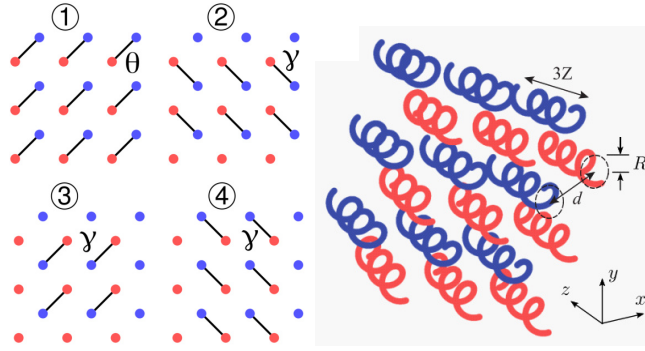


Рисунок 33: Слева: схематическое изображение Флоке системы, иллюстрирующее характер взаимодействия в методе сильной связи на каждой четверти периода (1-4). Справа: решетка закрученных волноводов как пример Флоке системы.

можно записать соответствующий Гамильтониан:

$$\hat{H}_n(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & J_n e^{i\mathbf{k}\delta_n} \\ J_n e^{-i\mathbf{k}\delta_n} & 0 \end{pmatrix},$$

где δ_n – вектор в направлении до ближайшего соседнего элемента. Собственные значения этого Гамильтониана равны $\pm J_n$, соответствующие собственные моды имеют вид $u_n = C(\pm e^{i\mathbf{k}\delta_n}, 1)^T$.

Каждый элемент квадратной решетки имеет 4 соседних элемента, смещённых на:

$$\delta_1 = \frac{a_0}{2}(1, 1)^T, \quad \delta_2 = \frac{a_0}{2}(1, -1)^T, \quad \delta_3 = -\delta_1, \quad \delta_4 = -\delta_2. \quad (3.35)$$

Далее без потери общности мы зафиксируем $a_0 = 1$.

Эволюционная задача в данной периодической системе имеет вид:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial z} \psi &= \hat{H}(z) \psi; \quad \hat{H}(z + Z) = \hat{H}(z), \forall z; \\ \psi(z_2) &= U(z_2, z_0) \psi(z_0); \quad U(z_2, z_0) = e^{-i \int_{z_0}^{z_2} \hat{H}(z) dz}, \end{aligned}$$

где введен оператор эволюции $U(z_2, z_0)$. *Квазиэнергии* Ω (описывают собственные значения Гамильтониана в этой задаче) могут быть определены из уравнения:

$$U(z_0 + Z, z_0) \psi(z_0, \Omega) = e^{-i\Omega Z} \psi(z_0, \Omega),$$

и оператор эволюции $U(z_0 + Z, z_0)$ может быть записан независимо на каждом из 4 шагов модуляции коэффициента связи:

$$U(z_0 + Z, z_0) = \prod_{n=1}^4 U_n; \quad U_n = e^{-i\hat{H}_n \frac{Z}{4}}. \quad (3.36)$$

Вычисляя собственные значения λ оператора $U(z_0 + Z, z_0)$, мы можем получить квазиэнергии как $\Omega = \frac{i}{Z} \ln \lambda$.

Эволюционный оператор за весь цикл имеет вид:

$$U_z \equiv U(z_0 + Z, z_0) = \hat{S}_\gamma(-\kappa_-) \hat{S}_\gamma(-\kappa_+) \hat{S}_\gamma(\kappa_-) \hat{S}_\theta(\kappa_+), \quad (3.37)$$

где $\kappa_- = \delta_2 \mathbf{k}$, $\kappa_+ = \delta_1 \mathbf{k}$.

Мы перепишем эволюционные операторы, используя то, что матрица вида

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \theta e^{i\kappa_+} \\ \theta e^{-i\kappa_+} & 0 \end{pmatrix},$$

в представлении матричных экспонент является

$$e^{-i\hat{H}_1} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -i \sin \theta e^{i\kappa_+} \\ -i \sin \theta e^{-i\kappa_+} & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Запишем явную форму эволюционного оператора за весь период модуляции в окрестности точек высокой симметрии в пространстве волновых векторов:

★ Γ ($k_x = 0$, $k_y = 0$):

$$U(z_0 + Z, z_0) = \begin{pmatrix} \cos(3\gamma + \theta) & -i \sin(3\gamma + \theta) \\ -i \sin(3\gamma + \theta) & \cos(3\gamma + \theta) \end{pmatrix},$$

его собственные значения равны $\lambda = e^{\mp i(3\gamma + \theta)}$ для симметричной и антисимметричной мод, соответственно. Соответствующие квазиэнергии $\Omega = \pm(3\gamma + \theta)/Z$.

★ X ($k_x = \pi$, $k_y = 0$):

$$U(z_0 + Z, z_0) = \begin{pmatrix} \cos(\gamma - \theta) & -\sin(\gamma - \theta) \\ \sin(\gamma - \theta) & \cos(\gamma - \theta) \end{pmatrix},$$

его собственные значения равны $\lambda = e^{\mp i(\gamma - \theta)}$, собственные векторы равны $(-i, 1)^T$, $(i, 1)^T$. Соответствующие квазиэнергии равны $\Omega = \pm(\gamma - \theta)/Z$.

★ M ($k_x = \pi$, $k_y = \pi$):

$$U(z_0 + Z, z_0) = \begin{pmatrix} \cos(\gamma - \theta) & -i \sin(\gamma - \theta) \\ -i \sin(\gamma - \theta) & \cos(\gamma - \theta) \end{pmatrix},$$

его собственные значения равны $\lambda = e^{\mp i(\gamma - \theta)}$, собственные векторы равны $(1, 1)^T$, $(-1, 1)^T$. Соответствующие квазиэнергии равны $\Omega = \pm(\gamma - \theta)/Z$.

Данные результаты приведены в таблице 6.

Чтобы определить топологические фазы, возникающие в этой системе, построим график ΩZ в линейном случае (рис. 34). Отметим, что эта функция является периодической с периодом 2π .

Щели в квазиэнергетическом спектре открываются вблизи $\theta = 0$ и $\theta = \pi/Z$. Щель закрывается на границах между различными топологическими фазами, что соответствует Дираковским точкам в объемной зонной структуре. В зависимости от соотношения γ/θ каждая

Точка	$\mathbf{k}_0$	Собственное значение	Собственный вектор	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4
Γ	$(0, 0)$	$e^{-i(3\gamma+\theta)}$	$(1, 1)^T/\sqrt{2}$	θ	γ	γ	γ
M	(π, π)	$e^{-i(\gamma-\theta)}$	$(1, 1)^T/\sqrt{2}$	$-\theta$	γ	$-\gamma$	γ
X	$(\pi, 0)$	$e^{i(\gamma-\theta)}$	$(i, 1)^T/\sqrt{2}$	θ	γ	$-\gamma$	$-\gamma$
Y	$(0, \pi)$	$e^{i(\gamma-\theta)}$	$(i, 1)^T/\sqrt{2}$	θ	$-\gamma$	$-\gamma$	γ

Таблица 6: Характеристики собственных состояний в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна $\mathbf{k}_0$. ω_n — линейные собственные значения $\hat{H}_n$ для выбранного собственного вектора на каждой четверти периода. Собственные энергии $\hat{H}_n$ равны $\omega_n = \pm J_n$, а нормированные собственные моды имеют вид $|u_n(\mathbf{k}_0)\rangle = (\pm e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \delta_n}, 1)^T/\sqrt{2}$.

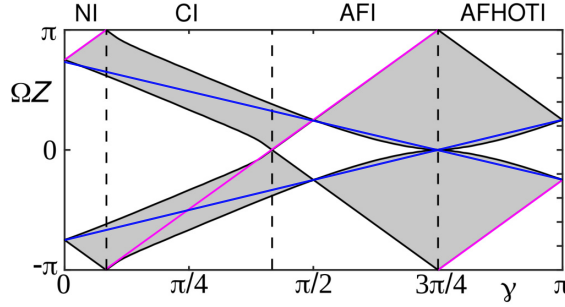


Рисунок 34: Линейная зонная структура ΩZ как функция коэффициента связи γ для фиксированного значения $\theta = 3\pi/4$. Пурпурная линия соответствует квазиэнергии симметричной Блоховской волны. Мы построили линии $\pm(\gamma - \theta)/Z$ синим цветом. Пунктирные линии обозначают границы между различными топологическими фазами (нормальный изолятор NI, топологический изолятор Черна CI, аномальный топологический изолятор Флоке AFI и аномальный топологический изолятор Флоке высокого порядка AFHOTI).

запрещенная зона может поддерживать или не поддерживать топологические краевые моды или угловые моды. Фазовая диаграмма модели содержит: фазу нормального изолятора (NI), когда нет топологических состояний; фазу Черновского изолятора (CI), когда только одна запрещенная зона поддерживает возникновение киральных краевых мод; фазу аномального топологического изолятора Флоке (AFI), когда обе запрещенные зоны содержат киральные краевые моды; и, наконец, фазу аномального топологического изолятора Флоке высокого порядка (AFHOTI), в которой обе щели содержат топологические угловые моды – рис. 34.

Первая точка Дирака $\gamma = \pi/12$ разделяет фазы NI и CI. Вторая точка Дирака $\gamma = 5\pi/12$ – фазы CI и AFI, в то время как третья точка Дирака при $\gamma = 3\pi/4$ – фазы AFI и AFHOTI. Кроме того, существуют другие критические точки при $\gamma = 0, \pi/2$ и π , соответствующие плоским квазиэнергетическим зонам с собственными значениями, не зависящими от волнового числа.

3.2.3 Топологические характеристики Флоке решетки

Наличие различных квазиэнергетических зон позволяет использовать топологические инварианты, первоначально предложенные в статических системах, для описания решеток Флоке. Например, топологический инвариант фазы CI для n -ной зоны можно найти путем

интегрирования кривизны Берри по зоне Бриллюэна:

$$C_n = \frac{i}{2\pi} \int_{\text{BZ}} [\langle \partial_{k_x} u_n | \partial_{k_y} u_n \rangle - \langle \partial_{k_y} u_n | \partial_{k_x} u_n \rangle] d^2 \mathbf{k}.$$

Аномальные фазы Флоке возникают из-за периодичности квазиэнергетических собственных значений, что приводит к топологическим явлениям, нереализуемым в статических системах. Поскольку квазиэнергии определены по модулю $2\pi/Z$, киральные краевые состояния могут возникать во всех запрещенных зонах, включая те, что было бы полубесконечными в статической системы, что соответствует фазе AFI с нулевым числом Черна. Топологические инварианты, описывающие такие аномальные фазы, требуют анализа полной эволюции в течение периода изменения параметров,

$$\hat{U}(z) = \mathcal{T} \exp \left(-i \int_0^z H(z') dz' \right),$$

где $\mathcal{T}$ обозначает упорядочение по времени. Например, аномальная фаза Флоке характеризуется числом намотки (*winding number*)

$$W = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^Z dz \int_{\text{BZ}} d^2 \mathbf{k} \text{Tr} \left(\hat{U}^{-1} \partial_z \hat{U} \left[\hat{U}^{-1} \partial_{k_x} \hat{U}, \hat{U}^{-1} \partial_{k_y} \hat{U} \right] \right).$$

В работе [151] был предложен альтернативный подход для определения топологических свойств подобных систем, основанный на исследовании собственных состояний оператора инверсии, определенного для данной системы как матрица Паули $\hat{\sigma}_x$, в точках высокой симметрии Γ, M, X, Y . В силу инверсионной симметрии для рассматриваемой системы эволюционный оператор (3.37) в точках Γ, M, X, Y удовлетворяет соотношению $\mathcal{I} U_z \mathcal{I} = U_z$. Собственные значения инверсионной симметрии затем определяются через $\mathcal{I}|\varphi\rangle = \pm|\varphi\rangle$, где $|\varphi\rangle$ — собственный вектор нижней зоны в данной ТВС (точке высокой симметрии). По сути, этот подход позволяет маркировать симметричный и антисимметричный собственные векторы. Результаты приведены на рис. 35.

Фаза	NI		CI		AFI		AFHOTI	
Точка	Γ	M	Γ	M	Γ	M	Γ	M
$\varphi_0(\mathbf{k}_0, z_m) = \pi$	0	0	+	0	+	0	++	0
$\varphi_0(\mathbf{k}_0, z_m) = 0$	0	0	0	0	+	0	+	(-+)-

Таблица 7: Характеристики знаков $S(\mathbf{k}_0, z_m)$ эффективного континуального Гамильтониана вблизи динамической точки обращения симметрии z_m для точек $\mathbf{k}_0 = (0, 0)$ и $\mathbf{k}_0 = (\pi, \pi)$.

Различные знаки в точках Γ и M в фазе CI указывают на ненулевое число Черна. Для выявления различий между фазами NI, AFI и AFHOTI, каждая из которых характеризуется нулевым числом Черна, необходимо исследовать микроскопическую динамику внутри одного периода. В отличие от фазы NI, фазы AFI и AFHOTI обладают множеством *динамических точек обращения симметрии (ДТОС)*, как показано на рис. 35. ДТОС — это фиксированные

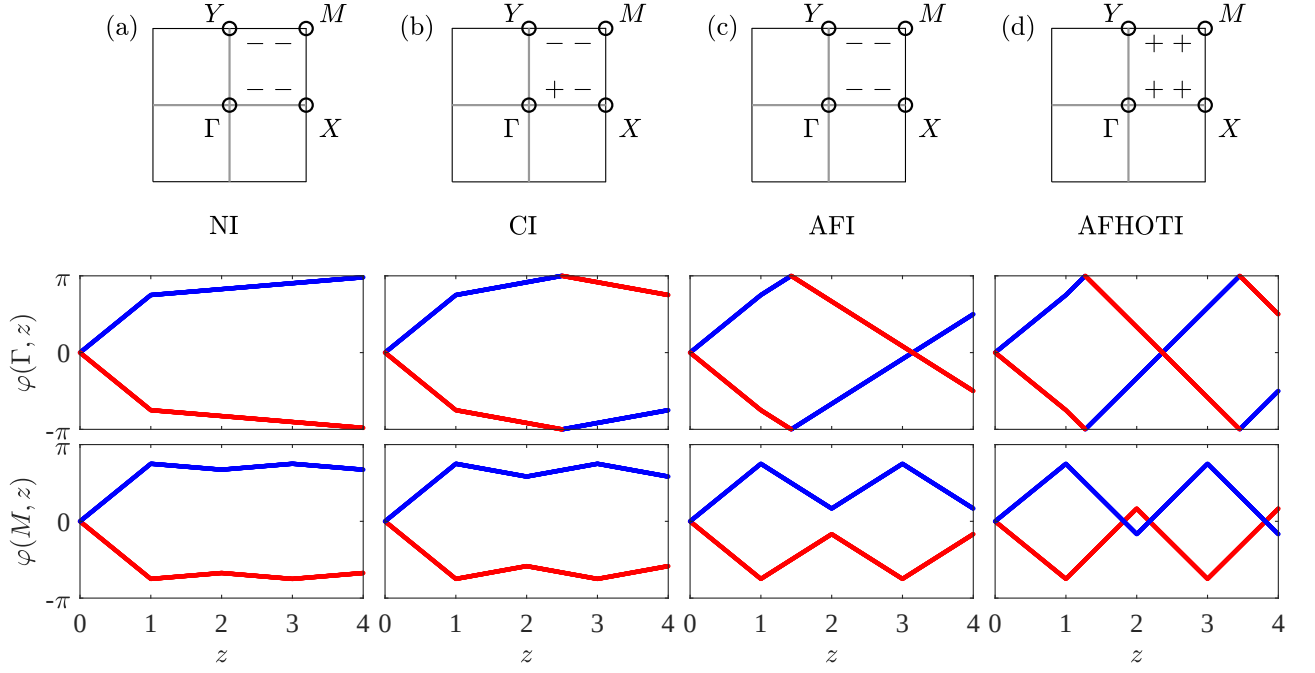


Рисунок 35: Собственные значения оператора инверсии, рассчитанные для собственного состояния нижней зоны в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна (верхний ряд) и фазовые зоны (средний и нижний ряды) при фиксированном $\theta = 3\pi/4$ для различных топологических фаз: (a) $\gamma = \pi/13$ (NI), (b) $\gamma = \pi/6$ (CI), (c) $\gamma = 7\pi/12$ (AFI), (d) $\gamma = 11\pi/12$ (AFHOTI). Эволюция фазы симметричного (синяя сплошная линия) и антисимметричного (красная сплошная линия) собственных векторов в точках Γ и M . Собственные значения оператора инверсии для красных (синих) зон равны -1 ($+1$).

значения координаты z , в которых собственные значения оператора инверсии меняют знак.

В их окрестностях эффективный Гамильтониан $\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}_0, z)$, появляющийся в операторе эволюции $\hat{U}_z = \hat{U}(\mathbf{k}_0, z) = e^{-i\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}_0, z)}$, может быть определён следующим образом:

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}_0, z_m + \Delta z_m) = \varphi_0(\mathbf{k}_0, z_m) + S(\mathbf{k}_0, z_m)\gamma\Delta z_m\hat{\sigma}_x, \quad (3.38)$$

где знаки $S(\mathbf{k}_0, z_m)$ приведены в таблице 7. В фазе AFI для $0 < z < Z$ (рис. 35, второй ряд) наблюдаются две устойчивые ДТОС в Γ . В фазе AFHOTI мы видим три устойчивых точки пересечения в Γ . Нечётное количество устойчивых точек пересечения указывало бы на первую порядковую топологическую фазу. Однако в нашем случае система поддерживает чётное количество устойчивых точек пересечения, и такой анализ симметрии не может однозначно различить между первой и более высокими порядковыми топологическими фазами.

3.2.4 Свойства нелинейной Флоке системы

Затем мы перейдем к изучению нелинейной системы и введем нелинейный эволюционный оператор

$$|u_{NL}(z + Z)\rangle = \hat{U}_{NL}|u_{NL}(z)\rangle = \exp\left(-i \int_0^Z [\hat{H}_L(z) + \hat{H}_{NL}]dz\right) |u_{NL}\rangle = e^{-iZ\Omega_{NL}} |u_{NL}(z)\rangle. \quad (3.39)$$

Так как на каждом шаге цикла модуляции справедлив Гамильтониан, характерный для нелинейного димера, задача, в принципе, аналитически разрешима. Однако решение будет иметь крайне сложную форму, так как аналитическое решение при произвольных начальных условиях включает эллиптические функции. Вместо этого, уравнение (3.39) может быть решено численно.

Далее мы ограничим наш анализ простейшими нелинейными решениями, соответствующими ТВС $\mathbf{k}_0$ (см. таблицу 6), которые имеют вид $|u_{NL}^\pm(\mathbf{k}_0)\rangle = (\pm e^{i\Theta(\mathbf{k}_0)}, 1)^T / \sqrt{2}$, независимый от θ , γ и g . $\Theta(\mathbf{k}_0)$ – соответствующая нелинейная фаза режима.

Так как нелинейная часть Гамильтониана имеет вид $\hat{H}_{NL} = g\hat{I}$ и коммутирует с $\hat{H}_L(z)$ (можно выбрать общий базис), между подрешётками отсутствует перенос энергии, и квазиэнергии нелинейных Блоховских волн равны $\Omega_{NL} = \Omega/Z + g/2$, а собственные векторы нелинейных волн Блоха независимы от z .

Мы хотим изучить, как особенности линейного спектра Флоке (например, дисперсия, топологические свойства) влияют на характеристики модуляционной неустойчивости нелинейных волн Блоха. Так как Гамильтониан задачи инвариантен относительно преобразования $(a_{\mathbf{r}}, b_{\mathbf{r}})^T \rightarrow (-a_{\mathbf{r}}, b_{\mathbf{r}})^T$, $z \rightarrow -z$, $g \rightarrow -g$, достаточно рассматривать только симметричные волны Блоха $|u_+\rangle = (1, 1)^T / \sqrt{2}$.

3.2.5 Модуляционная неустойчивость нелинейных Блоховских волн

Для изучения модуляционной неустойчивости мы рассмотрим малоамплитудное возмущение к нелинейной Блоховской волне $|u_{NL}^+(\mathbf{k}_0)\rangle$, то есть представим решение в виде

$$|\psi_{\mathbf{r}}(z)\rangle = (|u_{NL}^+(\mathbf{k}_0)\rangle + |\delta\psi_{\mathbf{r}}\rangle)e^{-i(\omega_j + g/2)z}e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.40)$$

где $(\omega_j + g/2)$ – мгновенная энергия нелинейной моды на шаге j модуляции (см. данные таблицы 6), а $\mathbf{k}_0$ – волновой вектор, в окрестности которого мы исследуем неустойчивость.

Мы подставляем это состояние в уравнение эволюции для каждого шага модуляции, сохраняя только линейные члены возмущения. Для проведения линейного анализа устойчивости мы используем тождества

$$\hat{\mathbf{k}} = -i\partial_{\mathbf{r}}; \quad e^{i\hat{\mathbf{k}}\delta_n} = \sum_n \frac{(i\hat{\mathbf{k}}\delta_n)^n}{n!} = \sum_n \frac{(\partial_{\mathbf{r}}\delta_n)^n}{n!}, \quad e^{i\hat{\mathbf{k}}\delta_n}[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}] = e^{i\mathbf{k}\delta_n}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.41)$$

Рассматривая возмущения вида $|\delta\psi_{\mathbf{r}}\rangle = |v_{\mathbf{p}}\rangle e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} + |w_{\mathbf{p}}^*\rangle e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$ и применяя стандартный линейный анализ устойчивости, мы записываем оператор, описывающий эволюцию вектора возмущения $(v, w, v^*, w^*)^T$ на каждом шаге периода цикла модуляции:

$$\hat{H}'_j = \begin{pmatrix} g - \omega_j & J_j e^{i\mathbf{p} \cdot \delta_j} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \delta_j} & \frac{1}{2} g e^{2i\Theta(\mathbf{k}_0)} & 0 \\ J_j e^{-i\mathbf{p} \cdot \delta_j} e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \delta_j} & g - \omega_j & 0 & \frac{1}{2} g e^{2i\Theta(\mathbf{k}_0)} \\ -\frac{1}{2} g e^{-2i\Theta(\mathbf{k}_0)} & 0 & \omega_j - g & -J_j e^{i\mathbf{p} \cdot \delta_j} e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \delta_j} \\ 0 & -\frac{1}{2} g e^{-2i\Theta(\mathbf{k}_0)} & -J_j e^{-i\mathbf{p} \cdot \delta_j} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \delta_j} & \omega_j - g \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

где $\omega_j = \pm J$ зависит от выбранной моды (см. таблицу 6). Используя данные Гамильтонианы, можно построить оператор эволюции для возмущений в течение всего цикла модуляции в нелинейном случае в виде

$$\tilde{U} = e^{-i\hat{H}'_1} e^{-i\hat{H}'_2} e^{-i\hat{H}'_3} e^{-i\hat{H}'_4}. \quad (3.43)$$

Если какое-либо из собственных значений $\tilde{\lambda}$ оператора $\tilde{U}$ имеет модуль $|\tilde{\lambda}| > 1$, то соответствующая нелинейная Блоховская волна является неустойчивой.

Собственные значения оператора $\hat{H}_{1,4}$ равны $0, 0, \pm 2\sqrt{J_{1,4}(J_{1,4} - g)}$. Таким образом, достаточным условием для неустойчивости всей системы является неустойчивость на одном из циклов модуляции, что реализуется, когда $g > J_{1-4}$ ($J_1 = \theta, J_{2-4} = \gamma$). Данное условие не зависит от зонной структуры решётки и поэтому представляет для нас меньший интерес. Следовательно, мы сосредоточим наше внимание на области $g < J$ (то есть γ и θ).

Численно полученные значения инкремента неустойчивости представлены на рис. 36 в зависимости от параметров γ и g . В случае слабой нелинейности области устойчивости определяются квазиэнергией линейной Блоховской волны. Когда квазиэнергия располагается на верхнем (нижнем) крае зоны, неустойчивость возникает при слабой положительной (отрицательной) величине g . В противном случае, для возникновения неустойчивости необходимо, чтобы нелинейность была достаточно сильной для смещения квазиэнергии в запрещённую зону.

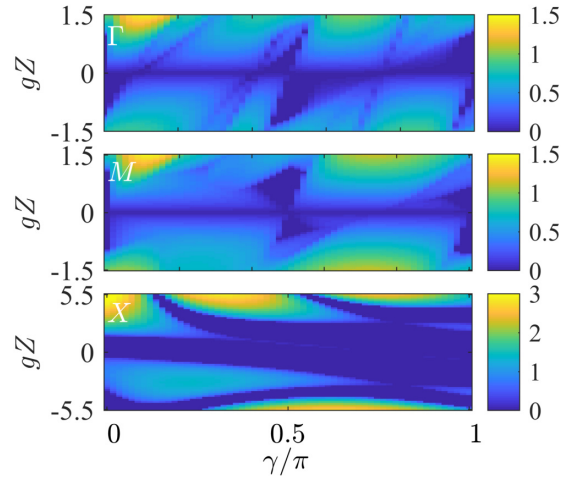


Рисунок 36: Максимальные значения инкремента неустойчивости в зависимости от параметра связи γ и коэффициента нелинейности g . Данный анализ проводился при фиксированном значении $\theta = 3\pi/4$, для каждой из точек высокой симметрии: Γ, M, X .

В критических точках зонной структуры, а именно в точках Дирака и в пределе плоских зон, знак эффективной массы волны меняется, что приводит (при фиксированном g) к смене режимов с устойчивого на неустойчивый. Эти переходы наблюдаются для Блоховских волн в точках Γ и M , расположенных на краях зон. Точки X и Y , как правило, являются седловыми точками квазиэнергетических зон, что означает, что для развития неустойчивости в их окрестности всегда требуется достаточно большая нелинейность.

Данные сценарии развития неустойчивости схожи с теми, что мы рассмотрели в предыдущем разделе. *В спектре линейных возмущений возникают устойчивые линии, соответствующие перевороту зон, индуцированному нелинейностью.*

3.2.6 Определение аномальных фаз Флоке

Далее мы рассмотрим метод определения аномальных топологических фаз Флоке, основанный на анализе нелинейной динамики суперпозиционного состояния. Как мы уже упоминали, для изучения этого типа топологических фаз необходимо рассматривать эволюционный оператор за весь период $z \in [0, Z]$.

Наша идея заключается в использовании симметрии модели. Сначала, как мы показали в предыдущих разделах и что полностью согласуется с работой [151], вспомним, что аномальные фазы Флоке могут быть различены при рассмотрении Гамильтониана только в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна $\mathbf{k}_0$. В этих точках собственные векторы независимы от z . При этом в ДТОС $z = z_m$ любое начальное состояние поляризации, которое было в момент $z = 0$, будет восстановлено, т. е. оператор эволюции $\hat{U}(\mathbf{k}_0, z_m) = \pm \hat{1}$. Отслеживая, как поляризация вращается в окрестности ДТОС, мы можем извлечь параметры мгновенного Гамильтониана и, следовательно, эффективный Гамильтониан (формула (3.38)), с помощью которого можно различать аномальные топологические фазы согласно схеме работы [151] (рис. 37).

Опишем подробно предлагаемый нами метод для Γ -точки. Сначала мы напомним, что из динамических уравнений для нелинейного димера элементов с коэффициентом связи между элементами J ,

$$i\partial_z \begin{pmatrix} a_{\mathbf{r}} \\ b_{\mathbf{r}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g|a_{\mathbf{r}}|^2 & J \\ J & g|b_{\mathbf{r}}|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{r}} \\ b_{\mathbf{r}} \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

можно получить систему эволюционных уравнений для псевдоспиновых компонент, определённых формально как $\mathbf{s} = \langle \psi_{\mathbf{r}} | \hat{\sigma} | \psi_{\mathbf{r}} \rangle$:

$$\partial_z s_z = 2J s_y, \quad (3.45)$$

$$\partial_z s_y = -s_z(2J - g s_x), \quad (3.46)$$

$$\partial_z s_x = -g s_y s_z, \quad (3.47)$$

и законы сохранения для полной интенсивности и псевдоспина

$$|a_{\mathbf{r}}|^2 + |b_{\mathbf{r}}|^2 \equiv \text{const}, \quad s_z^2 + s_y^2 + s_x^2 \equiv \text{const}. \quad (3.48)$$

Рассмотрим эволюцию начального состояния $(0, 1)^T$, представляющего собой суперпозицию симметричного (S) и антисимметричного (A) собственных векторов. По аналогии с рис. 35, на рис. 38(а) показано поведение фазы $\varphi_{S,A}(z)$ в пределах периода Z в линейном случае, когда $g = 0$.

Для начала рассмотрим случай малой интенсивности излучения, при которой нелинейные эффекты можно считать пренебрежимо малыми, и система находится в линейном режиме.

Предположим, что мы постепенно удаляем слои образца решётки Флоке, начиная с его выходной грани $z = Z$, чтобы эмпирически определить такую координату z_m , при которой псевдоспин восстанавливает своё начальное значение: $s_z(z_m) = s_z(0) = -1$. Одновременно с этим разность фаз: $\Delta\varphi(z_m) = \varphi_A(z_m) - \varphi_S(z_m) = 0$ (рис. 38(b,c)).

На следующем этапе интенсивность излучения увеличивается, и при фиксированной координате z_m , найденной на предыдущем шаге, производится измерение псевдоспина, который уже отличен от значения в линейном случае $s_z(z_m) \neq s_z(0) = -1$, т.к. $g \neq 0$. Опишем, каким образом это измерение позволяет определить топологию системы.

Для этого мы перепишем разность фаз $\Delta\varphi(z)$ в терминах псевдоспинов как $\Delta\varphi = \arctan(s_y/s_z)$. В нелинейном режиме, когда $g \neq 0$, разность фаз становится зависящей от нелинейности, что показано на рис. 38(b,c) и описывается уравнением:

$$\partial_z \Delta\varphi = -2J + g \frac{s_x s_z}{s_y^2 + s_z^2} = -2J + g \frac{s_x s_z}{1 - s_x^2}. \quad (3.49)$$

На рис. 38(b) мы обозначаем координату z_0 , где в нелинейном случае $\Delta\varphi(z = z_0) = 0$, и, следовательно, $s_y(z_0) = 0$, в то время как $s_{z,x}$ достигают минимума.

Далее учтем, что в точке z_0 выполняется закон сохранения полного псевдоспина:

$$s_{x0}^2 + s_{z0}^2 = 1. \quad (3.50)$$

При этом мы предполагаем, что нелинейность в системе относительно слаба, и нелинейный сдвиг точки z_0 относительно z_m мал. Учитывая эти предположения, в точке z_0 можно записать следующие приближенные выражения для псевдоспиновых компонент:

$$s_{x0} = \delta, \quad s_{z0} = -1 + \frac{\delta^2}{2}, \quad (3.51)$$

где $\delta \ll 1$ является малым параметром, характеризующим степень отклонения от линейного случая.

В окрестности точки z_0 мы аппроксимируем координатную зависимость псевдоспиновых компонент следующими выражениями:

$$s_z = -1 + \frac{\delta^2}{2} + 2J^2(z - z_0)^2, \quad (3.52)$$

$$s_x = \delta + gJ(z - z_0)^2, \quad (3.53)$$

$$s_y = (2J - g\delta)(z - z_0). \quad (3.54)$$

Здесь J представляет собой неизвестную константу взаимодействия. Важно отметить, что отклонения $|z - z_0|$ и $|\delta|$ связаны с тем, что система нелинейна, $g \neq 0$.

Для проверки согласованности полученных выражений, мы подставляем соотношения (3.52) - (3.54) в исходные уравнения, описывающие динамику псевдоспиновых компонент, и удостоверяемся, что они выполняются с необходимой точностью в нулевом и первом порядке по малому параметру δ .

В линейном пределе псевдоспиновая компонента s_x должна быть точно равна нулю. Это предположение позволяет нам предвидеть наличие двух асимптотик: $\delta = G_0 g$ и $z_m - z_0 = G_1 g^2$, которые подтверждаются результатами, представленными на рис. 38(d,h).

Измерение величины $s_x(z_m, g \rightarrow 0) \approx G_0 g$ при малой интенсивности позволяет определить коэффициент G_0 . Затем, выполняя серию измерений для больших значений нелинейности g (или, что эквивалентно, увеличивая интенсивность падающего излучения), мы можем определить параметр J из системы уравнений (3.52) - (3.54).

Таким образом, линейная зависимость $s_y \approx 2J\Delta z_m$ в окрестности ДТОС может быть использована для получения информации о коэффициенте связи. Это позволяет определить характеристики знака эффективного Гамильтониана $\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}_0, z)$, представленные в таблице 7, и отличить аномальные фазы Флоке от тривиальной фазы, как обсуждалось в подразделе 3.2.3.

Также описанная процедура может быть использована для описания ДТОС в точке M . Поведение псевдоспина в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна проиллюстрировано на рис. 37. Стрелки изображают поляризацию на выходе решетки как функцию нелинейности в окрестности координаты z_m . А именно – мы рассматриваем z_m пределах третьей четверти периода на рис. 38(a). В окрестности z_m зависимость s_y от z и g является противоположной в точках Γ и M , что согласуется с собственными значениями инверсионной симметрии на графиках, показывающих эволюцию фазы (рис. 35(d)).

Необходимо отметить, что, согласно нашим расчетам и данным, подход, основанный на собственных значениях симметрии, по-прежнему не позволяет отличить AFI-фазу от AFNOTI-фазы.

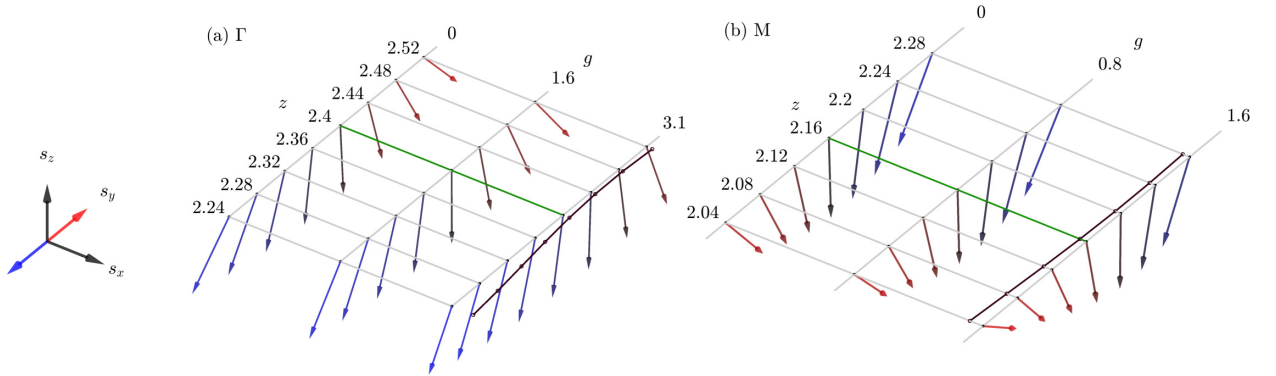


Рисунок 37: Пространственное распределение псевдоспина $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ в окрестности координаты ДТОС z_m для различных коэффициентов нелинейности g . Для точки Γ – $z_m = 2.389$; для точки M – $z_m = 2.167$ (отмечены зелеными линиями). Красный (синий) цвет кодирует положительное (отрицательное) значение компоненты s_y : (a) $s_y = 2\gamma\Delta z_m$ и (b) $s_y = -2\gamma\Delta z_m$. Черная линия с точками визуализирует ненулевое значение s_x при $g \neq 0$ в третьем срезе по g . Параметры: $\theta = 3\pi/4$, $\gamma = 0.9\pi$.

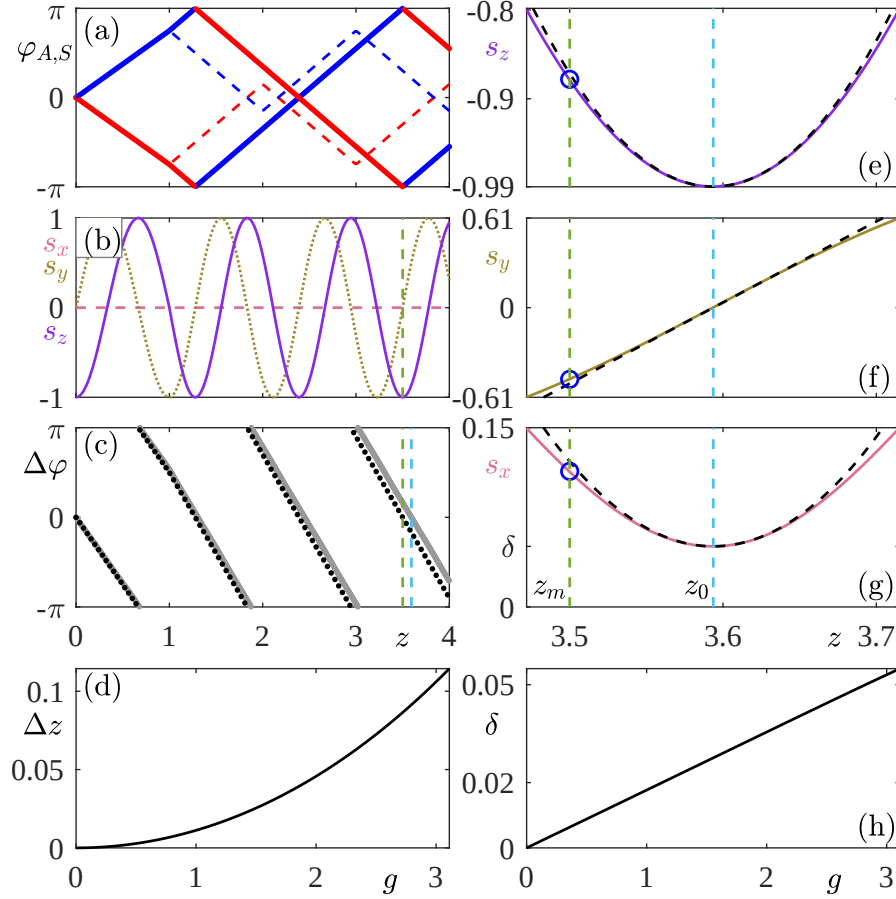


Рисунок 38: (a): эволюция фазы симметричного ($\varphi_S(z)$, синяя сплошная линия) и антисимметричного ($\varphi_A(z)$, красная сплошная линия) собственных векторов в точке Γ в линейном режиме при $g = 0$. Параметры: $\gamma = 0.9\pi$, $\theta = 3\pi/4$. Для сравнения приведена эволюция фазы $\varphi_{A,S}(z)$ в точке M пунктирными линиями. (b): эволюция компонент псевдоспина в линейном случае (сплошная линия: s_z , пунктирная линия: s_y , штриховая линия: s_x). (c): разность фаз $\Delta\varphi = \varphi_A - \varphi_S$ в линейном случае (черная пунктирная линия, $g = 0$) и $\Delta\varphi = \arctan^{-1} s_y/s_z$ в нелинейном случае (серая сплошная линия, $g = 0.9\pi$). Вертикальная зеленая пунктирная линия отмечает координату z_m , в которой проводятся измерения в нелинейном случае: $s_x(z_m) = 0.112$, $s_z(z_m) = -0.86587$, $s_y(z_m) = -0.48756$; вертикальная бирюзовая пунктирная линия отмечает точку z_0 , где $s_y(z_0) = 0$ в нелинейном случае. (e)-(g): эволюция компонент псевдоспина в нелинейном случае в окрестности z_0 : синие линии соответствуют численно полученным решениям, черные пунктирные линии – их аппроксимациям согласно уравнениям (3.52), (3.53), (3.54). (d, h): зависимости нелинейного сдвига координаты, где восстанавливается псевдоспин $\Delta z = |z_m - z_0|$ (d), и $\delta = s_x(z_0)$ (h) от коэффициента нелинейности g .

3.3 Применение методов машинного обучения для вычисления топологического инварианта

Одним из перспективных методов определения топологического инварианта являются алгоритмы, основанные на анализе эволюции электромагнитного поля при распространении светового пучка через фотонную систему. Однако данные схемы обладают рядом недостатков.

В таких подходах требуется либо рассматривать длинные трассы распространения [152, 153], что увеличивает размеры устройств и усложняет их интеграцию в фотонные чипы; либо знать полную пространственно-временную эволюцию [154, 155], что предъявляет высокие требования к измерительной аппаратуре. Более того, зачастую необходима информация как об амплитуде, так и о фазе волновой функции, что существенно ограничивает применимость таких методов в реальных экспериментальных условиях, ведь измерение фазового профиля представляет собой трудоёмкую задачу.

Альтернативой являются подходы, основанные на машинном обучении, которые позволяют определять топологические свойства системы по одному измерению интенсивности при фиксированном значении координаты распространения [156, 157, 158]. Такая процедура существенно упрощает экспериментальную реализацию, особенно при наличии достаточного объёма качественных данных для обучения. Тем не менее, методики, предложенные в указанных работах, предполагают наличие априорной информации о симметриях системы, что включает конкретную структуру Гамильтониана. Это ограничивает их применимость в задачах, где априорное описание системы является неполным или недоступным.

Нами предлагается подход, основанный на анализе с использованием машинного обучения, который также использует единственное измерение интенсивности, но при этом не требует детального знания симметрий или структуры Гамильтониана. Предложенный метод соответствует предпочтительным экспериментальным условиям и позволяет значительно упростить процедуру диагностики топологических инвариантов.

В качестве модельной системы мы рассмотрим одномерные решётки волноводов, которые представляют собой универсальную платформу для исследования топологических эффектов в нанофотонике [159]. Мы ставим задачу предсказания наличия или отсутствия краевых состояний по измерениям интенсивности в объёме конечной решётки (т.е. измерения не включают краевые области решётки).

3.3.1 Подготовка данных

Для начала опишем **геометрию реалистичной решётки волноводов**, для которой решалась задача. Распространение света в такой системе описывается параксиальным уравнением В.2. Как и ранее, эволюция происходит вдоль оси z , а поперечные координаты обозначаются как x и y .

Исследуемая система представляет собой решётку одномерных диэлектрических волноводов с радиационными потерями, расположенную в плоскости xy . Её схема приведена на рис. 39(а); далее мы будем называть её *основной* решёткой. При отсутствии потерь эта фотонная платформа является *эрмитовой*. Наличие ненулевых радиационных потерь обуславливает

неэрмитовость системы и достигается за счёт введения *дополнительного* (вспомогательного) массива волноводов.

Основная решётка представляет собой димеризованный массив типа Су-Шриффера-Хигера (SSH) (см. Приложение С.3), состоящий из N эллиптических волноводов с полуосями $L_{x,y}$, формируемых посредством возмущения фонового показателя преломления n_0 на величину n_A [153], аналогично предыдущей главе. Конкретные значения параметров представлены в таблице 8 и близки к использованным в экспериментальной работе [22].

Радиационные потери можно регулировать путём оптимизации дополнительного массива волноводов, который представляет собой каналы излучения: N_{env} одномодовых волноводов, равноудалённых друг от друга, с возмущением показателя преломления n_B , как показано на рис. 39(b,d). Для корректности анализа необходимо, чтобы N_{env} было достаточно большим, чтобы минимизировать влияние обратного отражения от границ вспомогательного массива. Отражение влияет на процедуру получения топологических характеристик, но данный эффект может наблюдаться в реальном эксперименте из-за конечного размера образца. В настоящей работе мы выбрали $N_{\text{env}} = 14$, что соответствует значениям, доступным в эксперименте.

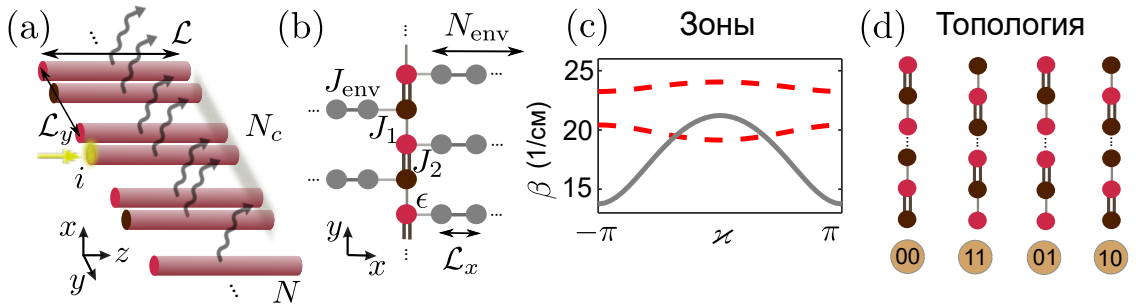


Рисунок 39: Структура исследуемой фотонной решетки и постановка задачи. (a): схематическое изображение димеризованной решетки одномодовых диэлектрических волноводов с перестраиваемыми радиационными потерями. Волновод с индексом i , в который подаётся излучение в начальный момент времени, обозначен жёлтой стрелкой. Распределение интенсивности измеряется в центральной области, состоящей из N_c элементов на выходе образца (выделена серым прямоугольником), что позволяет сформировать набор данных для машинного обучения. (b): модель сильной связи для фотонной решётки, показанной на панели (a). Красные и оранжевые круги обозначают основную решетку – одномерный массив SSH. Серые круги иллюстрируют вспомогательные волноводы, обеспечивающие радиационные потери, присоединенные к основной решетке. Различная штриховка между элементами указывает на различные величины коэффициентов связи. (c): зонные структуры основной (красные пунктирные линии) и вспомогательной (серая сплошная линия) решеток. (d): различные конфигурации двух краев в конечной решетке. Индекс 1 обозначает нетривиальную топологию, индекс 0 – тривиальную.

Параметры решетки, формирующей радиационные каналы, выбраны не произвольным образом. В частности, на дисперсионные характеристики этой системы накладываются определённые требования, которые будут подробно описаны ниже.

Зонная структура основного массива, полученная методом разложения по плоским волнам (см. Приложение D.3), характеризуется наличием двух веток (см. С.3) в интересующем нас диапазоне частот $15 \text{ см}^{-1} < \beta < 25 \text{ см}^{-1}$, что отражено на рис. 39(c) красными

пунктирными линиями.

Зонная структура решётки, соответствующей введённым радиационным каналам, содержит лишь одну дисперсионную ветвь (серая сплошная линия на рис. 39(с)).

Мы работаем в условиях, когда *только одна из зон основного массива полностью перекрывается с дисперсионной кривой вспомогательной решётки*. В начальный момент времени задаётся локализованное распределение поля, обладающее широким спектром поперечных волновых чисел. Такое распределение возбуждает моды как верхней, так и нижней ветвей основного массива. В процессе распространения это возбуждение постепенно затухает вследствие утечки энергии в каналы излучения.

В результате при некоторых $z > 0$ только верхняя ветвь основного массива останется населённой (т.к. утечке подвержены моды зоны, пересекающейся с дисперсионной кривой вспомогательной решётки). Это позволяет рассчитать топологический инвариант зоны с использованием проектора распределения выходного поля, как описано в работе [153].

Отметим, что топологический инвариант относится к конкретной энергетической зоне и может быть корректно определён лишь в случае её эффективного возбуждения. Для этого и вводится дополнительный массив волноводов.

Перейдем к подробной **постановке задачи**. Мы решали задачу предсказания наличия топологически защищенных мод, сосредоточенных вблизи границ решётки, что может быть формализовано как принадлежность образца к одному из 4 классов: 00, 11, 10, 01 (каждый из двух краёв может быть тривиальным или нетривиальным, рис. 39(d)). Нетривиальная граница поддерживает топологическое краевое состояние с частотой, лежащей в середине запрещенной зоны. То есть мы учитываем возможность введения различных границ решетки, это обозначает, что допускается нечетное значение N .

Мы рассмотрели детектирование топологических состояний в зонной структуре с помощью методов машинного и глубокого обучения по измерению интенсивности на выходе решётки в $N_c < N$ центральных элементах (рис. 40), сформированному в результате эволюции по z локализованного в пределах одного элемента при $z = 0$ возбуждения. Для интерпретации полученных результатов мы будем использовать развитую в [153] теорию.

Таким образом, **целью** является решение задачи классификации для конечного фрагмента решетки, а именно, определение различных конфигураций границ на основе распределения интенсивности, измеренного на выходе N_c центральных волноводов при возбуждении единственного волновода i (рис. 39(a)) на входе образца.

Следует отметить, что такая постановка задачи отличается от предложенной в [153], где обе границы решетки имели одинаковые края. Кроме того, для вычисления проектора поля использовалось распределение поля во всех элементах основного массива, то есть $N_c = N$ при четном N . Предложенная нами сейчас постановка задачи является наиболее общей.

В работе [153] был предложен **метод определения топологического инварианта с помощью проектора поля**, применимый к системам, аналогичным исследуемой, состоящим из чётного числа элементов (топологические классы 00 или 11). Конфигурация решётки и начальное распределение поля полностью соответствуют постановке задачи, рассмотренной в

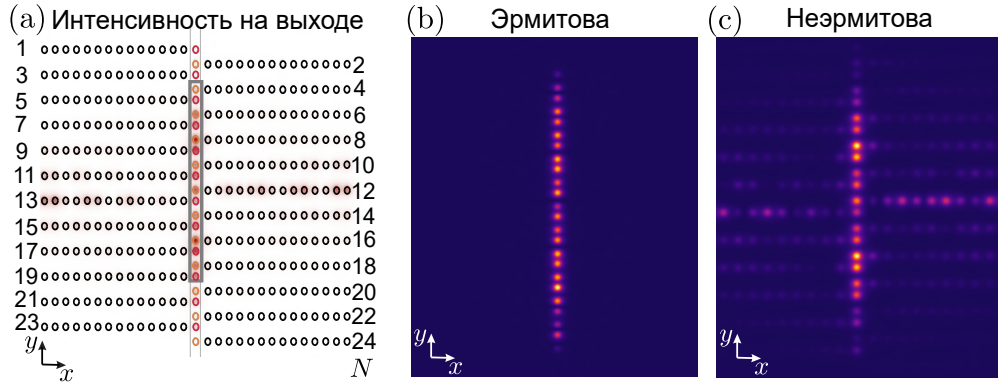


Рисунок 40: Интенсивность на выходной грани решетки волноводов, полученная в рамках моделирования параксиального уравнения. (а): распределение выходной интенсивности (цветовая карта), наложенное на поперечное сечение решетки (волноводы обозначены эллипсами). (b, c): распределение интенсивности на выходной грани массива волноводов для (b) эрмитовой (без потерь) решетки и (c) решетки с радиационными потерями.

настоящей работе.

Процедура схематично представлена на рис. 41. Анализируя комплекснозначное распределение поля (следует отметить, что на рис. 41(c) представлена только интенсивность), мы можем вычислить фазу Зака. Как видно из рис. 41(a), в случае нетривиальной конфигурации фаза Зака асимптотически приближается к значению π (оранжевая кривая стремится к чёрной пунктирной линии), при условии наличия радиационных каналов, то есть для неэрмитовой решётки.

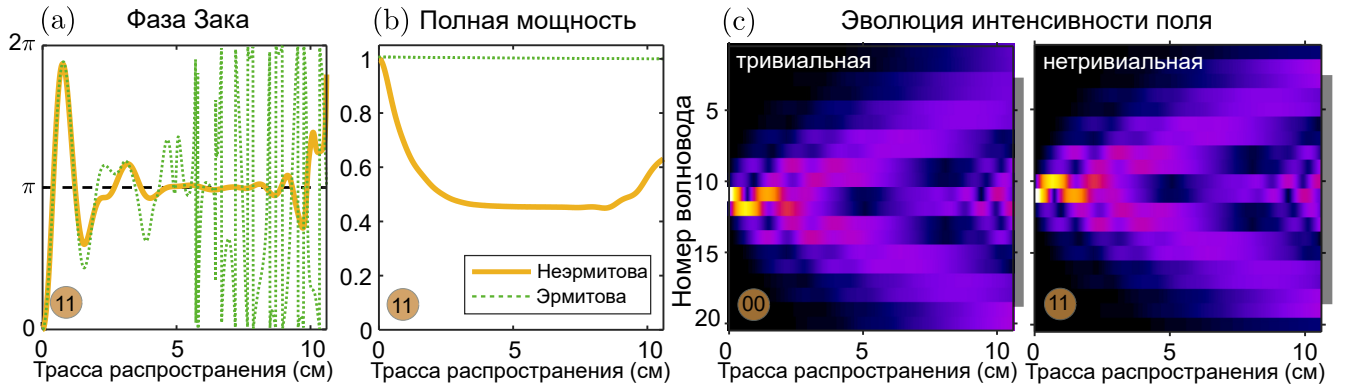


Рисунок 41: (a, b): характеристики эволюции поля для решётки с топологией 11 и контролируемыми радиационными потерями (жёлтые кривые, неэрмитова решётка) и без них (зелёные кривые, эрмитова решётка). Фаза Зака в диапазоне $4 \text{ см} < z < 9 \text{ см}$ сходится к квантованному значению π при использовании $N_{\text{env}} = 14$ элементов в дополнительном массиве. Для $z \approx 10 \text{ см}$ наблюдается увеличение полной мощности, связанное с отражением от границ массива дополнительных волноводов. (c): эволюция поля для N элементов основного массива (показаны значения интенсивности в центре каждого волновода) в тривиальной (слева) и нетривиальной (справа) конфигурациях с фиксированными параметрами решетки. Серая линия справа отмечает область N_c центральных волноводов, интенсивность в которых подается на вход нейронной сети.

Процедура вычисления фазы Зака включает следующие этапы:

1. С использованием двухкомпонентных функций $u_k(z)$, полученных посредством преобразо-

Параметр	Значение
L_y	5.4 мкм
L_x	4 мкм
d_1	17 мкм
d_2	23 мкм
ρ	17 мкм
d_ϵ	19 мкм
n_0	1.47
n_A	1.2×10^{-3}
n_B	1.1×10^{-3}
λ	1030 нм

Таблица 8: Параметры фотонной решетки с контролируемыми радиационными потерями. Основной массив: полуоси эллиптических одномодовых волноводов $L_{x,y}$; межосевые расстояния между центрами волноводов вдоль вертикальной оси $d_{1,2}$ (период решетки $\mathcal{L}_y = d_1 + d_2$). Дополнительные массивы волноводов расположены на расстоянии d_ϵ от основного массива. Для них межосевое расстояние вдоль горизонтальной оси равняется $\rho = \mathcal{L}_x$. λ обозначает длину волны излучения, n_0 – фоновый показатель преломления кварцевого стекла, а $n_{A,B}$ – возмущения показателя преломления внутри волноводов основного массива и дополнительно-го массива, соответственно.

вания Фурье распределения поля на двух подрешетках основного массива, формируется усредненный оператор проекции поля:

$$|u_k(z)\rangle \langle u_k(z)| \equiv \hat{P}_k. \quad (3.55)$$

2. Вычисляется фаза Зака по следующей формуле:

$$\nu = \text{Im} \ln \left(\text{Tr} \left[\prod_n \hat{P}(k_n) \right] \right), \quad (3.56)$$

где $k_n = 2\pi n/\mathcal{L}$ представляет собой дискретизованное пространство импульсов.

Как видно из рис. 41, на трассах $4 \text{ см} < z < 9 \text{ см}$ происходит полная депопуляция верхней зоны основного массива вследствие утечки, что видно на графике полной мощности волнового пакета для основного массива, которая сходится к значению $1/2$. Однако при увеличении трасс распространения $z > 9 \text{ см}$ возникает отражение поля от границ системы, что приводит к увеличению полной мощности (рис. 41(b)) и делает данный метод неприменимым. Таким образом, для точного восстановления топологического инварианта нашей системы с помощью описанного метода требуется либо большая решетка, либо строго контролируемая длина трассы распространения, чтобы избежать отражений от границ. Подход, основанный на машинном обучении, не предполагает введение таких ограничений.

С целью упрощения численного моделирования распространения излучения в решетке волноводов, представленной на рис. 39(b), мы перешли к **эффективной модели сильной**

связи (МСС), позволяющей описывать динамику системы с помощью уравнений:

$$i \frac{\partial \psi_m}{\partial z} = \hat{H}_0 \psi_m + \epsilon c_{m1}, \quad (3.57a)$$

$$i \frac{\partial c_{m1}}{\partial z} = \Delta c_{m1} + \epsilon \psi_m + J_{\text{env}} c_{m2}, \quad (3.57b)$$

$$i \frac{\partial c_{ml}}{\partial z} = \Delta c_{ml} + J_{\text{env}}(c_{ml-1} + c_{ml+1}), \quad l = 2, \dots, N_{\text{env}} - 1, \quad (3.57c)$$

$$i \frac{\partial c_{ml}}{\partial z} = \Delta c_{ml} + J_{\text{env}}(c_{ml-1}), \quad l = N_{\text{env}}. \quad (3.57d)$$

В данной модели ψ_m и c_{ml} представляют собой амплитуды поля в основном и дополнительном массивах, соответственно. $\hat{H}_0$ обозначает Гамильтониан основного массива размером $N \times N$, составленный из чередующихся коэффициентов связи между ближайшими соседями $J_{1,2}$. Параметр ϵ характеризует связь между основным массивом и каналами радиационных потерь, J_{env} – коэффициент связи в дополнительном массиве волноводов, а Δ – расстройка постоянных распространения.

Мотивацией для построения эффективной модели послужила вычислительная сложность прямого моделирования в рамках параксиального уравнения, требующего значительных временных затрат при подготовке достаточного количества данных для обучения.

Параметры МСС были подобраны таким образом, чтобы обеспечить соответствие зонной структуре и эволюции, полученным в результате моделирования на основе параксиального уравнения (рис. 42). Незначительные расхождения между результатами этих двух подходов связаны с влиянием взаимодействия между волноводами, следующими за ближайшими соседними. Однако данные расхождения оказываются несущественными для рассматриваемой в настоящей работе задачи. Продемонстрированное соответствие позволяет утверждать, что предложенная модель сильной связи адекватно описывает эволюцию электромагнитного поля в решетке волноводов.

Параметр	диапазон изменений
J_k	[1.5; 2] 1/см
J_p	[0.4; 0.6] 1/см
J_{env}	[1.7; 2] 1/см
ϵ	[0.8; 1] 1/см
Δ	[-3.3; -3.5] 1/см
$\mathcal{L}$	[2.6; 10.6] см
N	[20; 26]
N_{env}	[14]
N_c	16

Таблица 9: Диапазоны значений параметров МСС, использованных при подготовке набора данных. Средние значения указанных параметров соответствуют физическим величинам, приведенным в таблице 8. В нетривиальной решетке ($J_1 < J_2$) использовались параметры $k = 2$ и $p = 1$, а в тривиальной решетке ($J_1 > J_2$) – параметры $k = 1$ и $p = 2$. При подготовке наборов данных значения $J_{1,2}$ равномерно выбирались из указанных интервалов.

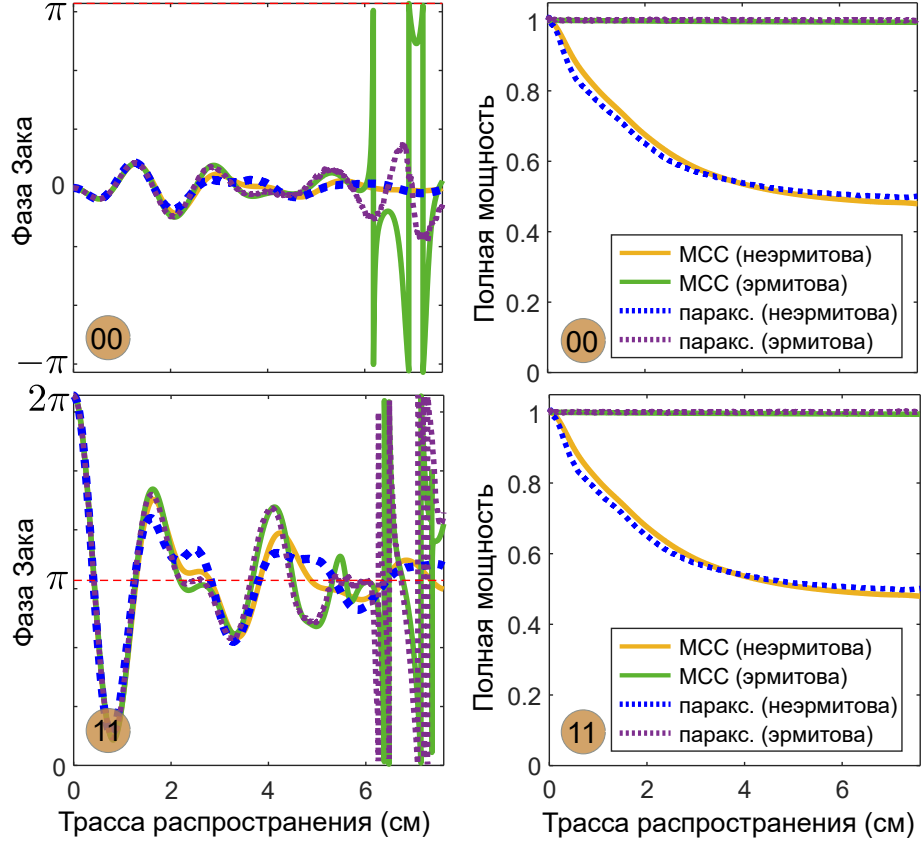


Рисунок 42: Зависимости фазы Зака и полной мощности в основном массиве от эволюционной координаты z , полученные с использованием параксиального приближения (паракс.) и модели сильной связи (МСС), для эрмитовой решётки (эрмитова) и решётки с радиационными потерями (неэрмитова) для различных топологических классов (00 и 11).

В рамках модели сильной связи дисперсия основного массива записывается как С.3:

$$\beta_{\text{SSH}}^{(\pm)} = \pm \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos \kappa_y \mathcal{L}_y}, \quad (3.58)$$

а дисперсия решетки дополнительного массива, элементарная ячейка которого состоит из одного элемента,

$$\beta_{\text{env}} = \Delta + 2J_{\text{env}} \cos \kappa_x \mathcal{L}_x.$$

Далее мы вводим безразмерное волновое число $\kappa_x \mathcal{L}_x = \kappa_y \mathcal{L}_y = \varkappa$.

Пересечение дисперсионной кривой дополнительного массива с единственной веткой основного массива гарантируется при

$$\left(\max \beta_{\text{env}}(\varkappa) < \min \beta_{\text{SSH}}^{(+)}(\varkappa) \right) \cap \left(\max \beta_{\text{env}}(\varkappa) > \max \beta_{\text{SSH}}^{(-)}(\varkappa) \right) \cap \left(\min \beta_{\text{env}}(\varkappa) < \min \beta_{\text{SSH}}^{(-)}(\varkappa) \right), \quad (3.59)$$

что эквивалентно

$$(-|J_1 - J_2| < \Delta + 2J_{\text{env}} < |J_1 - J_2|) \cap (\Delta - 2J_{\text{env}} < -|J_1 + J_2|). \quad (3.60)$$

Чтобы подготовить данные для нескольких массивов решеток, мы рассмотрели диапазоны изменения коэффициентов связи, как в таблице 9, средние значения которых соответствуют параметрам решетки, представленным в таблице 8.

Величина Δ варьируется при изменении возмущения показателя преломления Δn_B , а коэффициенты связи зависят от расстояния между центрами волноводов d . Чтобы соотнести реальные расстояния между волноводами и коэффициенты эффективной модели, мы промоделировали стационарное параксиальное уравнение для димера элементов, что позволяет оценить коэффициент связи между соседними волноводами как полуразность постоянных распространения симметричной и антисимметричной собственных мод димера. Полученные результаты демонстрируют ожидаемую экспоненциальную зависимость коэффициента связи от расстояния между волноводами, что подтверждается аппроксимацией экспоненциальной кривой (рис. 43, пунктирная линия).

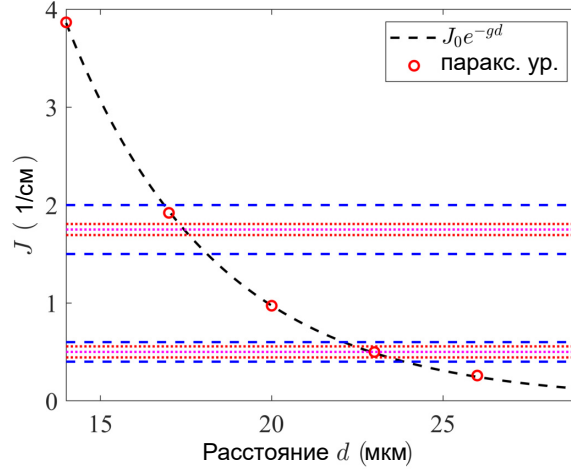


Рисунок 43: Зависимость коэффициента связи J от расстояния между центрами волноводов d , рассчитанная с использованием параксиальных уравнений (красные точки). Горизонтальные синие пунктирные линии обозначают диапазоны $J_2 \in [1.5, 2] 1/\text{см}$ и $J_1 \in [0.4, 0.6] 1/\text{см}$ (см. таблицу 9). Пурпурные линии соответствуют значениям $J_1 = 0.5 1/\text{см}$ и $J_2 = 1.75 1/\text{см}$, а красные пунктирные линии отображают диапазоны коэффициентов связи с беспорядком для амплитуды беспорядка $\langle d \rangle = 0.1$ (см. раздел 3.3.5). Параметры $g = 0.23 1/\mu\text{м}$, $J_0 = 96.23 1/\text{см}$.

Итак, для подготовки датасетов мы решали эволюционную задачу (3.57), при этом допускали вариацию следующих параметров: трассы распространения $\mathcal{L}$; общего количества волноводов N ; количества центральных волноводов N_c , распределение интенсивности в которых подается на вход методов машинного обучения. Положение возбуждаемого волновода i может быть смещено на 1 от центра массива согласно выражению $[N/2 + l]$ (квадратные скобки обозначают операцию округления вверх до целого), где l принимает значения 0 или 1. Для каждого значения $\mathcal{L}$ формировался набор данных из 32 000 векторов интенсивности.

3.3.2 Методы обучения без учителя

Для начала мы провели предварительный анализ подготовленных данных с использованием метода t-SNE (стохастическое вложение соседей с t-распределением). t-SNE представляет собой нелинейный алгоритм снижения размерности, который строит низкоразмерное представление данных, сохраняя локальные расстояния между точками: объекты, близкие в исходном пространстве, остаются соседями в проецированном пространстве [160].

В идеальном случае векторы, соответствующие одной конфигурации кристаллической решётки, формируют компактные кластеры в пространстве пониженной размерности. Это позволяет визуализировать скрытые закономерности в данных и оценить качество их структурированности.

В данном разделе мы работаем с распределением интенсивности в $N_c = N$ элементах (где $N = 22$ или 23 , если быть более точными) и допускаем возможность смещения возбуждаемого при $z = 0$ волновода относительно центра решётки.

На рис. 44 представлены карты t-SNE для решеток с фиксированным $\mathcal{L} = 7.6$ см и двумя различными положениями первоначально возбуждённого волновода при $N = 22$ (23). Тогда как в эрмитовом случае различные топологические классы смешиваются в пространстве пониженной размерности; в случае, когда введены радиационные потери, наблюдается чёткое разделение классов. Эти результаты качественно согласуются с теоретическими предсказаниями работы [153], где показано, что топологические фазы становятся различимыми в неэрмитовом случае для рассматриваемой нами конфигурации.

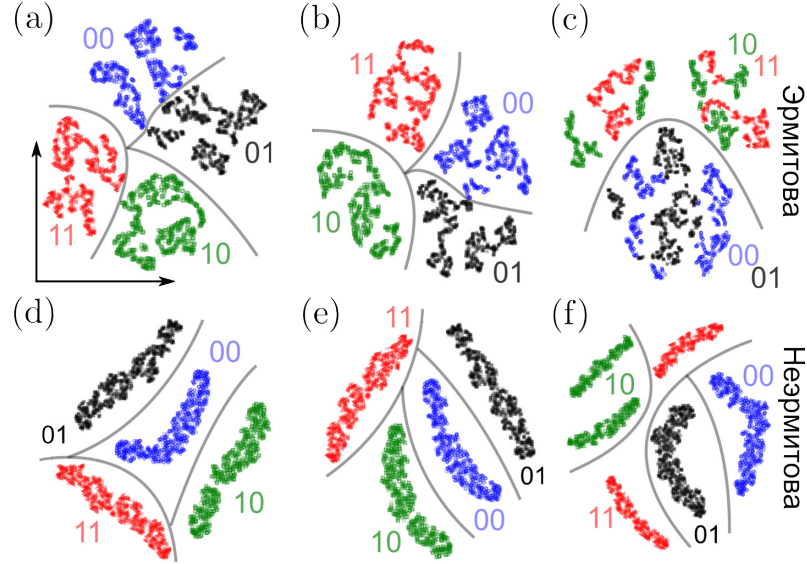


Рисунок 44: Карты t-SNE системы с четырьмя топологическими классами: (a-c) эрмитова решётка, (d-f) решётка с радиационными каналами в пространстве (u_1, u_2) . Мы варьируем положение возбужденного в начальный момент времени волновода i : (a,d) возбужден нечётный волновод ($i = 11$), (b,e) чётный волновод ($i = 12$). Случаи случайного выбора возбуждаемого волновода в димере 11 – 12: (c,f). Каждой точке двумерного параметрического пространства (u_1, u_2) соответствует вектор распределения интенсивности размерности $N = 22$ или $N = 23$ в зависимости от топологического класса: 00 (синий), 11 (красный), 10 (зелёный), 01 (чёрный).

Однако при введении неопределённости (например, в положении начального возбуж-

дения) данные перестают чётко разделяться на 4 класса: в эрмитовом случае различные классы оказываются перемешаны (рис. 44(c)), тогда как в неэрмитовой решётке наблюдается избыточное количество кластеров (рис. 44(f)).

Далее мы дополнительно исследуем зависимости (с,f) рис. 44 с применением методов статистики. На рис. 45 представлен статистический анализ данных, использованных для построения этих панелей. Визуализация демонстрирует возможность попарного объединения классов 01 и 00, 10 и 11. При этом классы с различной топологией границ (01 и 10) отличаются от классов с идентичной топологией границ (00 и 11) нечётным значением N , что обусловлено разной длиной входных векторов (23-й волновод показан затенённым). Постобработка данных выявляет существенное перекрытие столбцов интенсивности для классов 00 и 11 в каждом волноводе эрмитовой системы, тогда как в решётке с потерями перекрытие меньше и формируются сдвинутые димерные структуры.

На рис. 46 представлены нормированные гистограммы, отражающие построенные статистические характеристики распределения интенсивности $N = 22(23)$. Данные распределения были получены при расчете эволюционной динамики до $\mathcal{L} = 7.6$ см. Полученные данные использовались в качестве входных для алгоритма машинного обучения без учителя t-SNE, причём размерность векторов варьировалась от 22 до 23 в зависимости от конкретного топологического класса (00 и 11 для 22 и 01 и 10 для 23).

Используя рис. 46, мы исследуем, как метод t-SNE различает топологические классы. Во-первых, следует отметить, что классы с идентичной топологией (00 и 11) отличаются от классов 01 и 10 благодаря различной длине входных векторов (22 и 23 соответственно). Кроме того, различие между классами 01/00 и 11/10 можно установить по анализу максимальных значений соответствующих распределений интенсивности, которые имеют видимые различия.

В эрмитовом случае эти статистические распределения не обладают выраженными максимумами, что затрудняет идентификацию топологии, что также видно на рис. 44. В отличие от неэрмитова случая, в эрмитовых решётках границы между областями, соответствующими разным топологическим классам, выражены менее чётко. Как следствие, точное определение топологического класса становится проблематичным, когда может варьироваться исходно возбуждённый волновод, что показано на рис. 44(c).

Используя данный статистический подход, мы можем объяснить появление 6 классов на рис. 44(f) в случае неэрмитовой системы. Описанное дополнительное пояснение включает маркировку не только четырёх топологических классов, но и обозначение исходно возбуждённого волновода.

Как видно из рис. 47, данный метод не выявляет различий между случаями с разным начальным возбуждением для топологий 00 и 01, что согласуется с результатами, представленными на рис. 46, где максимумы распределений для различных i оказываются схожими в этих случаях (см. синие и чёрные кривые в первом и втором столбцах).

Хотя введение радиационных потерь в фотонную решётку приводит к лучшему разделению между топологическими классами по сравнению с эрмитовым случаем, идентификация топологии только на основе распределений центральных элементов остаётся невозможной

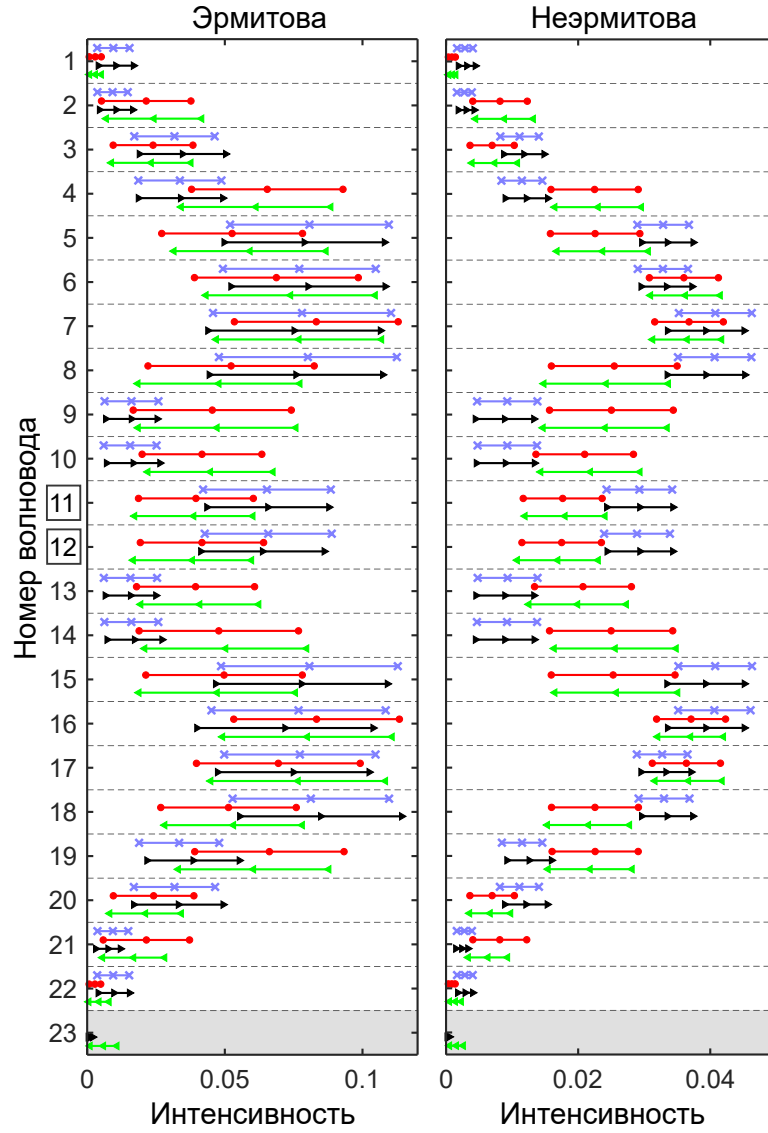


Рисунок 45: Статистические характеристики распределений интенсивности в волноводах. Наборы данных подготовлены для эрмитова случая и системы с радиационными потерями при двух возможных положениях начального возбуждения $i = 11, 12$ для трассы распространения $\mathcal{L} = 7.6$ см. Среднее значение показано маркерами в центре горизонтальных линий, стандартное отклонение соответствует границам этих линий. Классы обозначены цветами: 00 (синие квадраты), 11 (красные круги), 01 (чёрные треугольники, направленные вправо), 10 (зелёные треугольники, направленные влево). Общее количество волноводов N составляет 22 (чётное) для классов 00 и 11, и 23 (нечётное) для классов 01 и 10.

для методов обучения без учителя. Следовательно, требуется применение методов машинного обучения с учителем.

3.3.3 Обучение с учителем

Для решения задачи классификации четырех топологических классов применялись методы машинного (к-ближайших соседей (KNN), метод опорных векторов (SVM), деревья решений) и глубокого обучения (многослойный перцептрон (MLP), сверточные нейронные сети (CNN)).

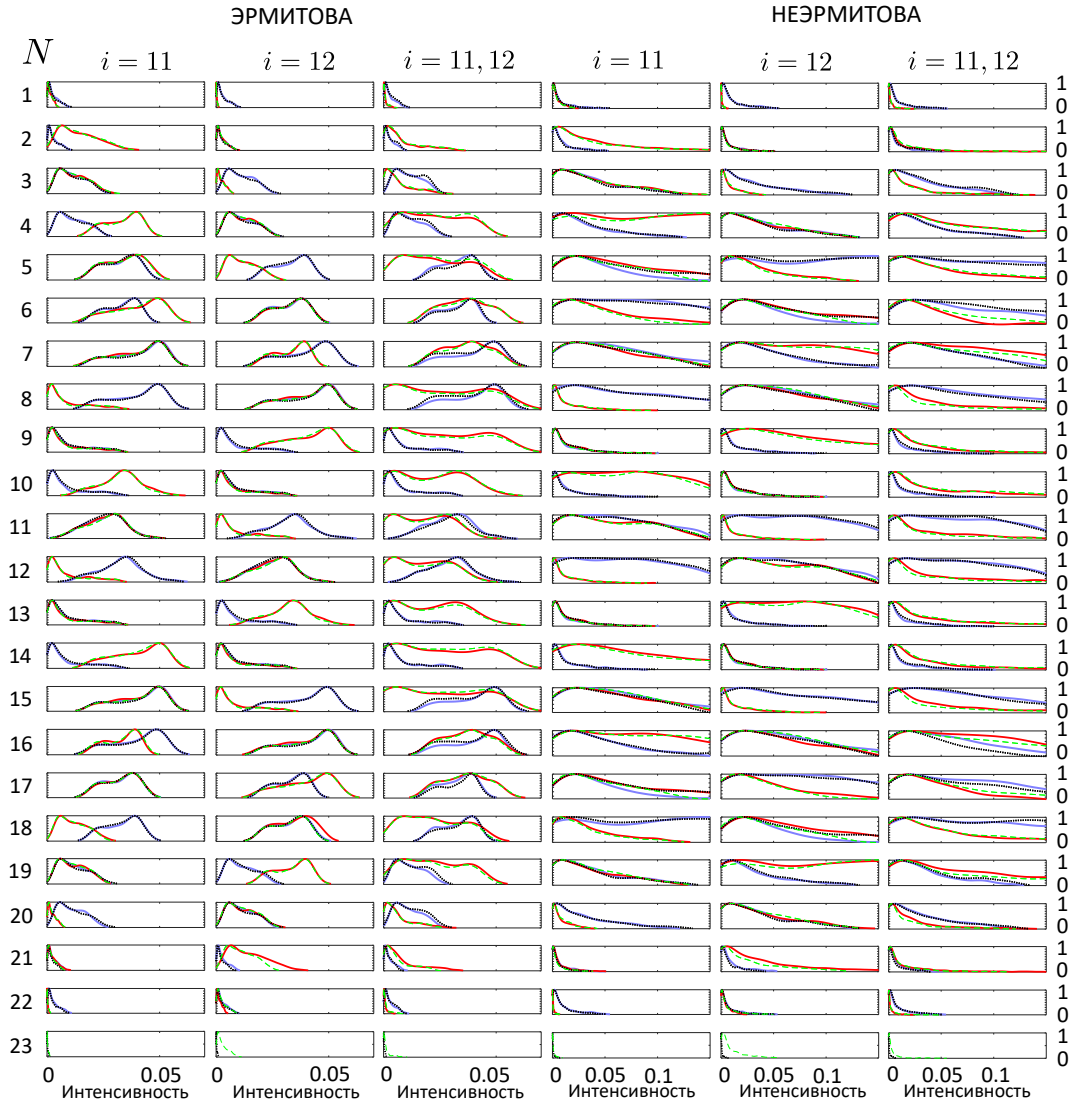


Рисунок 46: Статистические характеристики распределений интенсивности для различных волноводов ($N = 1, \dots, 23$) в разных топологических классах (пояснение к рис. 44). Колонки 1–3 соответствуют случаю решётки с радиационными каналами, тогда как колонки 4–5 представляют эрмитову систему. Номер изначально возбужденных волноводов обозначен индексом i . В частности, колонки 1–2 и 4–5 соответствуют возбуждению одного волновода, а данные для построения колонок 3 и 6 были получены для двух возможных начальных возбуждений. Топологический класс 00 обозначен синим цветом, класс 11 — красным, класс 01 — чёрным, а класс — зелёным.

Для оценки точности классификации в данной небинарной задаче использовалась метрика *accuracy*, определяемая как доля корректных предсказаний модели:

$$\text{Accuracy} = \frac{\sum_{i=1}^n \mathbb{1}[p_i = y_i]}{n}, \quad (3.61)$$

где p_i и y_i - предсказанное и истинное значения соответственно, а $\mathbb{1}$ – индикаторная функция, равная 1 при выполнении условия и 0 в противном случае.

На рис. 48 показана зависимость точности методов обучения с учителем от параметра $\mathcal{L}$. Точность возрастает с увеличением длины трассы распространения. При малых значениях

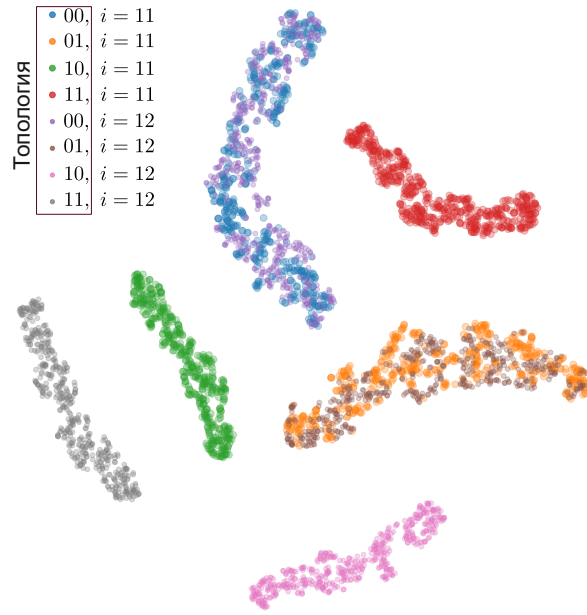


Рисунок 47: Карты t-SNE для системы с радиационными потерями, имеющей 4 топологических класса в зависимости от конфигурации двух краёв (как на рис. 44(e)). Возбуждаемый волновод случайным образом выбирается внутри димера (номер возбуждаемого волновода $i = 11$ или 12). В легенде указан тип топологии (00, 11, 01, 10) и номер исходно возбуждённого волновода i .

$\mathcal{L}$ методы машинного обучения не позволяют различить разные топологические фазы, и все методы демонстрируют сходные плато точности на графиках. С ростом $\mathcal{L}$ точность методов машинного обучения увеличивается. При этом теоретическая кривая для фазы Зака в нетривиальном случае перестаёт сходиться к квантованному значению π при $\mathcal{L} = 10.6$ см (рис. 41(a)), мощность в основном массиве продолжает увеличиваться (рис. 41(b)), то есть, как было упомянуто ранее, метод [153] оказывается не применим.

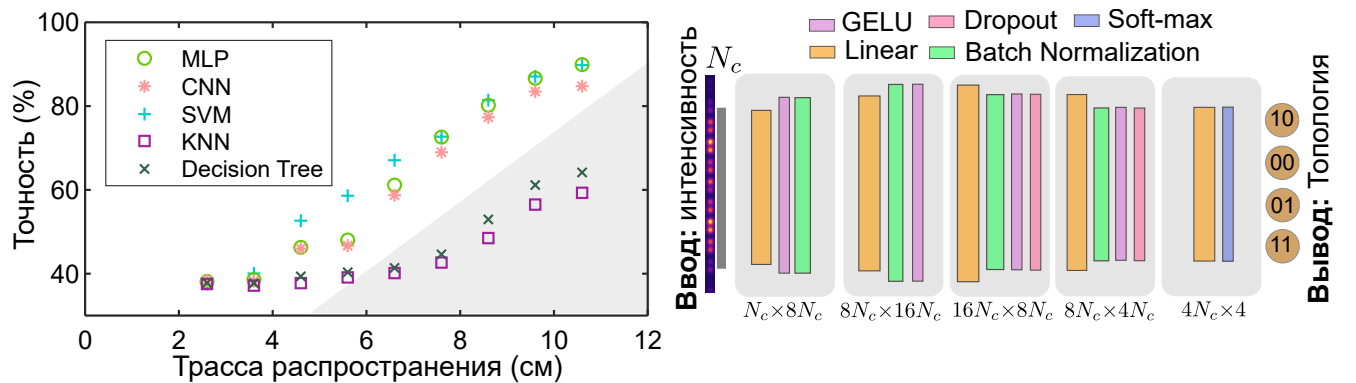


Рисунок 48: Слева: точность (ассигасу) методов обучения с учителем в зависимости от длины трассы распространения $\mathcal{L}$. Справа: схема сверточной нейронной сети, принимающей на вход распределение интенсивности при $z = \mathcal{L}$ и определяющей топологию границ решетки; параметр $N_c = 16$.

Увеличение точности методов машинного обучения для больших $\mathcal{L}$ может быть связано с тем, что при достижении излучением границ системы для различения тривиального и нетривиального случаев можно учитывать не только объемные свойства, но и поведение

на границах, что успешно реализуется в методах машинного обучения. Как видно из динамики на рис. 41(с), тривиальный и нетривиальный случаи имеют визуальные различия: в нетривиальном случае объемные моды слабо связаны с локализованными на границах.

Следует отметить, что при увеличении числа вспомогательных волноводов N_{env} теоретическая кривая мощности стремится к значению 0.5, однако отражение от границ основного массива по-прежнему проявляется на больших расстояниях распространения.

Таким образом, методы на основе нейронных сетей применимы в более широком диапазоне условий по сравнению с теоретической схемой, основанной на расчете проекторов поля.

Согласно результатам, представленным на рис. 48, классические методы машинного обучения демонстрируют более низкую точность по сравнению с нейронными сетями и методом опорных векторов (SVM). Из двух наиболее перспективных моделей для детального анализа на рис. 49 был выбран метод MLP (многослойный перцептрон).

Как отмечалось ранее, обучение проводилось на данных, полученных для $N_c < N$ центральных волноводов. На рис. 49 показана зависимость точности классификации от количества центральных волноводов при включении всех значений $\mathcal{L}$ в обучающие выборки.

В первоначальной теоретической схеме проектор поля рассчитывался для $N_c = N$ элементов, однако формально его можно вычислить и для любого $N_c < N$, что иллюстрируется на рис. 49. Фаза Зака лучше сходится к корректному значению π при больших N_c , что также является необходимым условием для повышения точности алгоритмов машинного обучения: на рис. 49 видно увеличение точности с ростом отношения N_c/N .

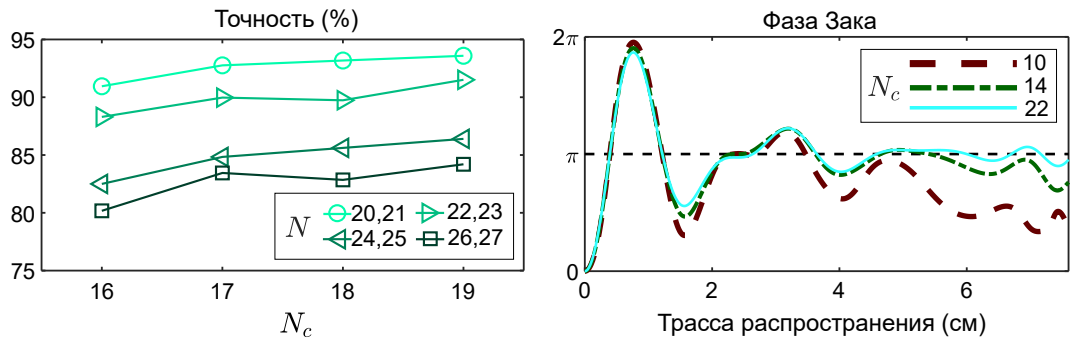


Рисунок 49: Слева: точность классификации методами глубокого обучения в зависимости от параметров: общего числа волноводов N и количества центральных волноводов N_c , используемых при обучении. Справа: теоретическая зависимость фазы Зака от длины трассы распространения и параметра N_c для нетривиальной решетки из $N = 22$ элементов.

В машинном обучении важным показателем является динамика изменения *функции потерь* (loss function) в зависимости от эпох. Под *эпохой* в машинном обучении понимают полный цикл обучения, при котором модель обрабатывает весь обучающий набор данных, включая прямое распространение сигнала, вычисление ошибки и обратное распространение градиента для корректировки весовых коэффициентов.

Как видно из рис. 50, в нашем исследовании процесс обучения проводился в течение 100 эпох. Функция потерь служит критерием оценки качества обучения модели: чем ниже её значение, тем точнее модель решает поставленную задачу. Наблюдается положительная

корреляция между точностью MLP и параметром $\mathcal{L}$, что проявляется в уменьшении величины плато функции потерь при больших значениях эпох.

Характер изменения функции потерь имеет типичную для нейронных сетей динамику. На начальных эпохах наблюдается быстрое уменьшение значения функции потерь, что соответствует этапу обучения модели базовым закономерностям в данных; на последующих этапах, когда модель начинает выявлять более сложные взаимосвязи, скорость уменьшения функции потерь существенно замедляется.

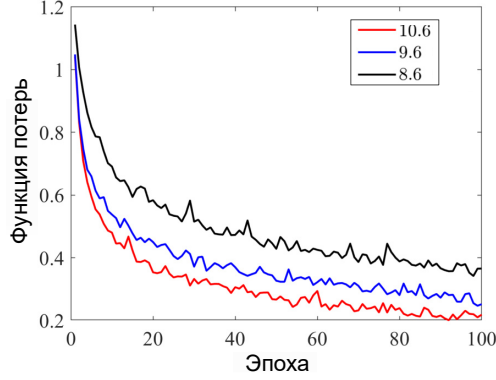


Рисунок 50: Зависимость функции потерь для обучающих данных от номера эпохи при различных трассах распространения (см. легенду, указаны значения $\mathcal{L}$ в сантиметрах).

Полученные результаты доказывают способность модели к эффективному обучению и адаптации к особенностям входных данных. Наличие выраженного плато на графике функции потерь свидетельствует о достижении моделью оптимального уровня обучения для данной архитектуры.

3.3.4 Сравнение топологической и нетопологической систем

Для лучшего понимания эффективности сконструированной нейросети при классификации топологических фаз мы провели сравнение топологической решётки SSH с чётным числом элементов и её нетопологического аналога (при этом массив дополнительных волноводов остаётся неизменным для обоих случаев). В нетопологическом случае димеризация обусловлена различными постоянными распространения для соседних элементов (Δ_1 и $\Delta_2 = -\Delta_1$) при постоянной связи J между ними, как схематично показано на рис. 51. Тривиальные граничные дефекты вводились как расстройки постоянных распространения крайних элементов: для левого края $\tilde{\Delta}_1 = \Delta_1(1 - q_1)$, для правого $\tilde{\Delta}_2 = \Delta_2(1 - q_2)$, при этом параметры $q_{1,2}$ характеризуют *отстройку* граничных дефектов.

Параметры нетопологической решётки (Δ_1 и J) подбирались таким образом, чтобы вид её зонной структуры

$$\beta_{\text{non-top}} = 1/2(\Delta_1 + \Delta_2 \pm \sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2)^2 + 8J^2 + 8J^2 \cos \kappa})$$

совпадал с топологическим случаем (3.58), что достигается при изменении параметров в диапазонах $\Delta_1 \in [0.9, 1.2]$, $\Delta_2 = -\Delta_1$, $J \in [0.7, 1.2]$. На рис. 52 показаны соответствующие

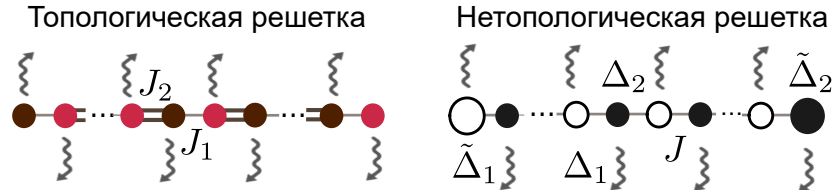


Рисунок 51: Схематическое изображение топологической решетки и её нетопологического аналога.

дисперсии.

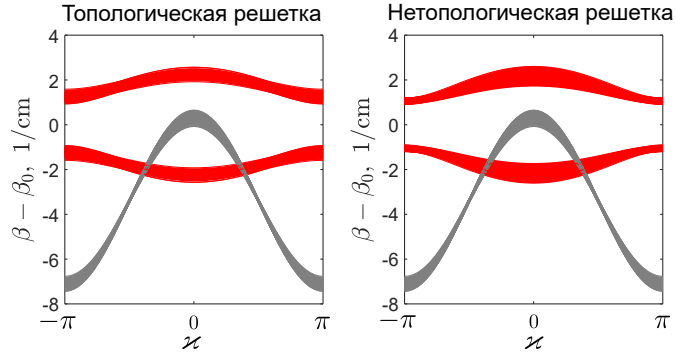


Рисунок 52: Набор дисперсионных кривых β для топологической решетки SSH и ее нетопологического аналога в моделируемых пределах изменения параметров. Зоны основного массива построены красным, зоны дополнительного массива — серым.

При подготовке данных в случае классификации краёв нетопологической решетки решалась аналогичная эволюционная задача.

На рис. 54 сравнивается точность нейросети на данных для трёх трасс распространения для топологического массива SSH и нетопологического массива с дефектами на краях при различении двух классов: оба края либо поддерживают локализованные решения (класс 11), либо не поддерживают (класс 00). Как показано на рис. 53, характерный пространственный масштаб распределений нетопологических краевых мод регулируется величиной отстройки граничного дефекта.

Результаты показывают, что при малых отстройках дефектов (рис. 54) точность для нетопологической решётки существенно ниже, чем для топологического случая, поскольку дефекты не связаны с объёмными свойствами системы. Однако при увеличении величины отстройки дефектов изменяются и объёмные моды, что приводит к росту точности модели.

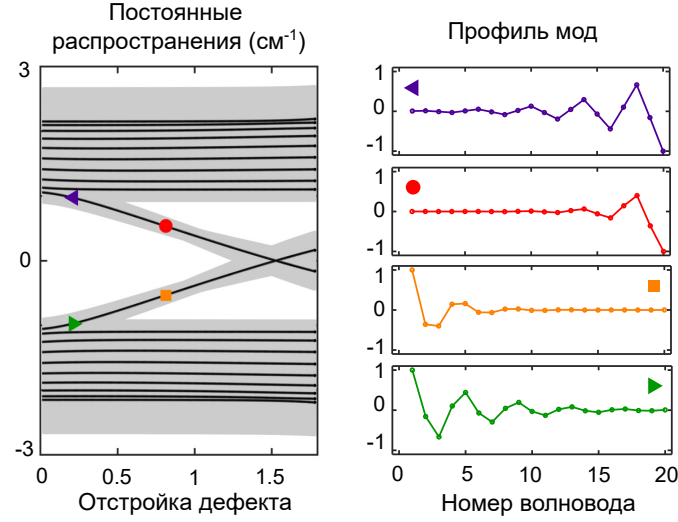


Рисунок 53: Свойства мод нетопологической решетки. Слева: зонная структура конечной нетопологической решётки в зависимости от отстройки дефекта $q_1 = -q_2 = q$ при фиксированном числе элементов основного массива $N = 22$. Затенённая область показывает все зоны для возможных значений коэффициента связи J и $\Delta_1 = -\Delta_2$, использованных при подготовке данных. Справа: профили мод, локализованных на концах нетопологической решётки. Цвета и формы маркеров на панели слева в характерных спектральных положениях соответствуют профилям на панели справа.

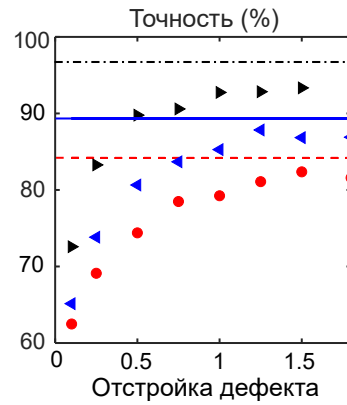


Рисунок 54: Точность классификации для нетопологического случая при различных значениях $\mathcal{L}$: $\mathcal{L} = 7.6$ см (красные круги), $\mathcal{L} = 8.6$ см (голубые треугольники), $\mathcal{L} = 10.6$ см (черные треугольники). Для сравнения цветные горизонтальные линии показывают точность в топологическом случае для соответствующего значения $\mathcal{L}$.

3.3.5 Роль беспорядка и перенос обучения

Transfer learning (перенос обучения) представляет собой метод, при котором модель, обученная на одном наборе данных, используется для решения новой, но схожей задачи, которой соответствует новый набор данных. В данном исследовании мы анализируем способность моделей, обученных на идеальных данных, классифицировать данные, полученные при моделировании решётки с другими параметрами, а также систем с беспорядком. То есть мы исследуем способность модели к обобщению. Этот аспект особенно важен для реальных фотонных схем, где неизбежные технологические неоднородности приводят к вариациям параметров от образца к образцу. Устойчивость и адаптивность алгоритмов машинного обучения к таким изменениям играют ключевую роль при переходе от теоретических моделей к реальным экспериментальным применениям.

Проведённый анализ выявил, что для параметра $\mathcal{L}$ способности к обобщению нет – при тестировании на данных с другими значениями $\mathcal{L}$ точность модели существенно снижается.

Способность к обобщению по параметру N была проверена с помощью перекрёстной проверки (кросс-валидации). Это классический подход для определения способности обученных моделей к работе с данными, отличными от обучающего набора. При этом весь набор данных разбивается на подмножества в соответствии со значением параметра N . На основе этой разбивки строится карта метрики точности (рис. 55). Если точность не снижается значительно, то модель может быть обобщена на новые данные. Результаты анализа показывают, что обобщение достигается для диапазона значений N , соответствующих присоединению димера к обоим концам решётки. Устойчивость модели к таким изменениям объясняется тем, что указанное структурное модифицирование не изменяет базовую топологию системы и сохраняет её фундаментальные свойства.

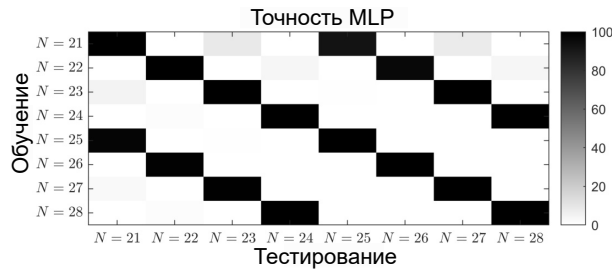


Рисунок 55: Карта кросс-валидационного контроля для параметра N .

Далее исследуется подход переноса обучения в системах со случайным беспорядком. На этом этапе исследования мы зафиксировали $\mathcal{L} = 10.6$ см. В модель SSH-Гамильтониана основного массива вводятся возмущения двух типов: *недиагональный беспорядок* в коэффициентах связи между элементами и *диагональный беспорядок* в постоянных распространения.

Математически введение беспорядка реализуется добавлением случайных величин к коэффициентам Гамильтониана. В частности, для недиагонального беспорядка необходимо модифицировать каждый коэффициент связи случайной величиной $l' \langle d \rangle \text{mean}(J_1, J_2)$, где l' равномерно распределена в интервале $[-1/2, 1/2]$, а $\langle d \rangle$ характеризует амплитуду беспорядка (также мы называем $\langle d \rangle$ величиной беспорядка). Важно отметить, что данный тип возмущений

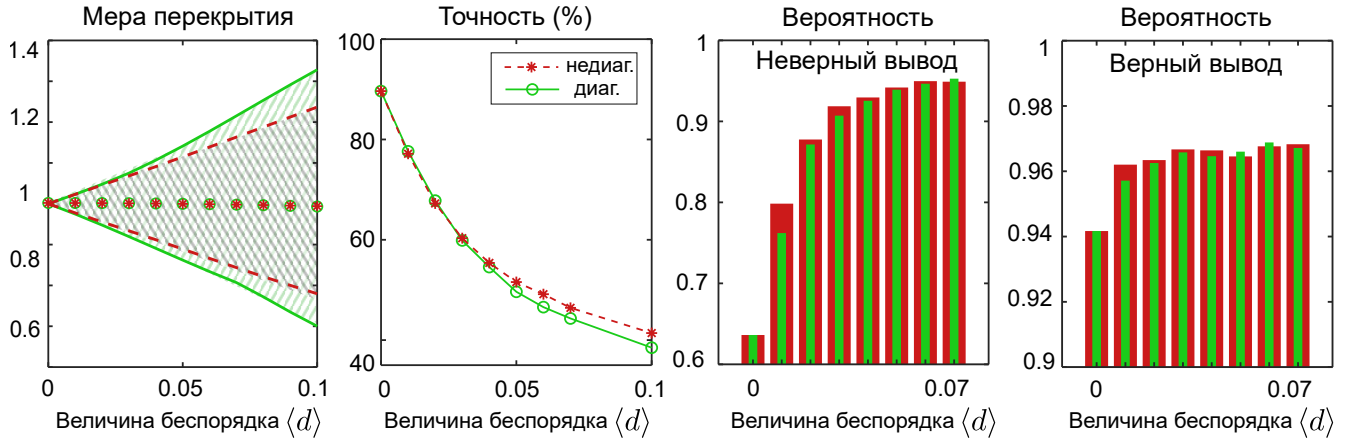


Рисунок 56: Перенос обучения (transfer learning) для решётки с беспорядком. Слева: визуализация влияния беспорядка на данные – изменение меры перекрытия (3.62), вызванное беспорядком. Затенённые области показывают диапазоны вариаций для ансамбля из 4000 случайных реализаций беспорядка (зелёный цвет соответствует диагональному беспорядку, серый – недиагональному), звёздочки и точки обозначают средние значения. Далее: зависимость точности нейросети при переносе обучения от величины беспорядка. Нейронная сеть обучалась на идеальных данных ($\langle d \rangle = 0$), после чего проводилась оценка точности предсказаний для различных $\langle d \rangle > 0$. Параметры решётки варьировались согласно данным таблицы 9. Справа (заголовок "Вероятность"): оценка уверенности нейросети. Вероятности, присваиваемые нейронной сетью ошибочным и правильным ответам при различных величинах беспорядка (зелёные столбцы соответствуют диагональному беспорядку, красные – недиагональному).

сохраняет киральную симметрию Гамильтониана, что гарантирует сохранение топологических краевых состояний при нулевой энергии. Если говорить о реалистичных параметрах решетки, то максимальное значение амплитуды беспорядка $\langle d \rangle = 0.1$ соответствует смещению центра расстояния между осями волноводов на величину ≈ 0.5 мкм, что также показано на рис. 43.

Для диагонального беспорядка мы вводим аналогичное возмущение $l\langle d \rangle \text{mean}(J_1, J_2)$ на диагоналях Гамильтониана.

Для количественной оценки влияния беспорядка на распределение интенсивности мы вычисляем степень схожести между данными, полученными в идеальном случае и при наличии беспорядка, на выходной грани решётки. Рассчитываются поля $\psi_m(\langle d \rangle, i)^{1,2}$, где индексы 1 и 2 соответствуют диагональному и недиагональному беспорядку соответственно, а i обозначает номер конкретной реализации беспорядка.

Затем вводится мера перекрытия интенсивностей:

$$\mathcal{O}^{1,2}(\langle d \rangle, i) = \sum_m |\psi_m(\langle d \rangle, i)^{1,2}|^2 \cdot |\psi_m^0|^2, \quad (3.62)$$

где суммирование проводится по волноводам основного массива, а ψ_m^0 – распределение интенсивности на выходе в случае отсутствия беспорядка.

Для построения графика меры перекрытия мы вычисляем $\mathcal{O}^{1,2}(\langle d \rangle, i)$ для 4000 реализаций беспорядка при каждом значении $\langle d \rangle$. С целью стандартизации представления данных полученные функции нормируются на значение $\mathcal{O}^{1,2}(\langle d \rangle, i)$ при $\langle d \rangle = 0$. На рис. 56 штрихован-

ные области соответствуют указанным диапазонам. Отметим, что амплитуда диагонального беспорядка масштабирована как $\langle d_{\text{диаг}} \rangle = 4\langle d_{\text{недиаг}} \rangle$, чтобы обеспечить сопоставимое влияние обоих типов беспорядка на меру перекрытия при заданном $\langle d \rangle$.

Для демонстрации трансфера обучения на данных с беспорядком нейронная сеть обучалась на идеальных данных, а тестировалась на данных, полученных при введении беспорядка в систему (рис. 56), где диапазон параметров указан в таблице 9. Кривые точности для обоих типов беспорядка ведут себя схожим образом, демонстрируя снижение точности классификации с ростом величины беспорядка. Увеличение диапазона изменения меры перекрытия приводит к существенной модификации выходной интенсивности, что в конечном итоге вызывает резкое ухудшение точности классификации.

Дополнительно мы оцениваем уверенность обученной нейросети. Для этого мы детально анализируем последний слой, Softmax (два правых графика на рис. 48). Функция Softmax возвращает вероятности принадлежности к четырём классам. В данном исследовании мы фиксируем класс 00 (оба конца тривиальны), однако полученные результаты качественно аналогичны и для других классов. Если модель присваивает классу высокую вероятность, это отражает её большую уверенность в данном предсказании, чем когда вероятность оказывается низкой.

Для каждой амплитуды беспорядка формируется набор тестовых векторов, из которого выбираются те, которые модель классифицирует с наибольшей вероятностью принадлежности к классу 00. Если выбранный вектор действительно относится к данному классу, соответствующая вероятность помечается как истинная; в противном случае — как ложная. Затем производится усреднение по истинным и ложным ответам для построения рис. 56. Примечательно, что по мере снижения точности нейросети уровень её уверенности как в правильных, так и в ошибочных ответах возрастает. Иными словами, с увеличением величины беспорядка нейросеть начинает ошибаться с большей уверенностью, что свидетельствует о том, что технологический беспорядок может выступать в роли адверсарной (adversarial) возмущающей величины.

3.3.6 Выводы

Итак, в рамках данного раздела мы исследовали эффективность различных методов машинного обучения в задаче классификации топологических фаз фотонных систем с контролируемыми радиационными потерями. Во-первых, мы установили, что неопределённость в начальных условиях (таких как номер возбуждённого волновода на входной грани решётки) снижает качество кластеризации без учителя, приводя либо к смешению различных классов, либо к прогнозированию избыточного числа классов.

Затем мы сравнили эффективность различных методов обучения с учителем, обнаружив, что высокая точность классификации достигается при достаточно больших трассах распространения. Отметим, что точность можно дополнительно повысить, увеличив количество волноводов, возбуждаемых в начальный момент времени.

Наконец, мы изучили возможность трансфера обучения. Показано, что нейросеть,

предобученная на идеальных данных, может точно классифицировать системы с беспорядком, что позволяет избежать трудоёмкого переобучения для каждой новой системы.

Одним из ключевых преимуществ предлагаемого метода является его адаптивность к различным типам фотонных структур, а также возможность эффективной работы при наличии ограниченного набора экспериментальных данных.

Наш подход к классификации топологии фотонных систем по неполным измерениям может быть развит для решения более общей задачи реконструкции Гамильтониана решётки. Такие методы находят применение в фотонике, физике конденсированного состояния и квантовых вычислениях.

3.4 Выводы по главе

В данной главе мы описали два различных подхода, позволяющих определить топологические свойства фотонных решёток. В основе первого из них лежит исследование особенностей нелинейной динамики волнового поля. Ключевая идея второго подхода состоит в интерпретации исходной проблемы как задачи классификации и использовании для её решения методов машинного и глубокого обучения.

В первом случае для выявления базовых закономерностей и демонстрации основных принципов изучалась модуляционная неустойчивость Блоховских мод в двумерной киральной квадратной решётке с нелинейностью Керровского типа. В итоге было установлено следующее: при некоторой критической интенсивности происходит бифуркация, сопровождающаяся формированием нелинейного Дираковского конуса в обеих топологических фазах, но устойчивость в окрестности этой точки чувствительна к топологии зонной структуры. Это может быть проиллюстрировано, например, угловой зависимостью максимального инкремента неустойчивости нелинейной блоховской волны. В нетривиальной фазе существует направление, вдоль которого сохраняется устойчивость, тогда как в тривиальной фазе неустойчивости возникают для всех углов. Такая разница в поведении позволяет рассматривать модуляционную неустойчивость как эффективный индикатор топологических переходов в нелинейных фотонных системах.

Данные результаты имеют фундаментальное значение для понимания взаимосвязи между нелинейными эффектами и топологическими свойствами фотонных систем. Показано, что модуляционная неустойчивость, являясь универсальным явлением в нелинейных средах, может служить инструментом для определения топологических свойств, без необходимости полной диагонализации спектра или использования сложных методов томографии.

Также нами был предложен метод определения аномальной фазы Флоке на основе анализа нелинейной динамики суперпозиционного состояния в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна Γ и M в окрестности особых значений эволюционной координаты z , обозначенных как z_m , в которых в линейном случае псевдоспин суперпозиционного состояния восстанавливает значение, приготовленное в начальный момент времени. С использованием асимптотических методов мы написали приближенное аналитическое выражение для компонент псевдоспина в окрестности z_m для малой нелинейности. В частности, нами была получена

линейная зависимость s_y от z , из которой можно получить коэффициенты Гамильтониана метода сильной связи, если измерить значения компонент псевдоспина. В данном подходе мы определяем как величину, так и знак коэффициента связи, что позволяет идентифицировать аномальную фазу Флоке.

Работа демонстрирует, что особенности нелинейной динамики могут служить эффективным средством для изучения топологии энергетических зон, даже в случаях, когда линейные методы оказываются неинформативными. В частности, предложенный подход позволяет определять аномальные фазы Флоке, что невозможно сделать на основе числа Черна, поскольку последние равны нулю во всех аномальных фазах.

Предложенные методы имеют широкую применимость и могут быть адаптированы для других систем, описываемых нелинейными уравнениями Шрёдингера, среди которых квантовые системы с взаимодействием частиц (например, бозе-эйнштейновские конденсаты), а также поляритонные системы с нелинейностью.

В рамках второго подхода мы исследовали эффективность различных методов машинного обучения в задаче классификации топологических фаз фотонных систем с контролируемыми радиационными потерями. Во-первых, мы установили, что неопределенность в начальных условиях (таких как номер возбуждённого волновода на входной грани решётки) снижает качество кластеризации без учителя, приводя либо к смешению различных классов, либо к прогнозированию избыточного числа классов.

Затем мы сравнили эффективность различных методов обучения с учителем, обнаружив, что высокая точность классификации достигается при достаточно больших трассах распространения. Отметим, что точность можно дополнительно повысить, увеличив количество волноводов, возбуждаемых в начальный момент времени.

Наконец, мы изучили возможность трансфера обучения. Показано, что нейросеть, предобученная на идеальных данных, может точно классифицировать системы с беспорядком, что позволяет избежать трудоёмкого переобучения для каждой новой системы.

Полученные в ходе исследования результаты имеют как прикладное, так и фундаментальное значение. С точки зрения фундаментальной науки, разработанный подход демонстрирует принципиальную возможность определения топологических инвариантов фотонных систем без необходимости восстановления полной волновой динамики или знания микроскопических параметров системы. Это открывает новые перспективы для изучения топологических фаз в сложных и плохо изученных структурах, где традиционные методы анализа оказываются неприменимы из-за недостатка информации о симметриях или зонной структуре. Кроме того, наш подход к классификации топологии фотонных систем по неполным измерениям может быть развит для решения более общей задачи реконструкции Гамильтониана решётки. Такие методы находят применение в фотонике, физике конденсированного состояния и квантовых вычислениях.

С прикладной точки зрения, предложенный алгоритм может быть использован для эффективной диагностики топологических свойств в реальных фотонных устройствах, в том числе в системах с беспорядком. Также важно отметить, что нейросеть способна точно

определять топологический класс на основе ограниченного объёма экспериментальных данных — всего лишь по измерению пространственного распределения интенсивности. Такая минимальная информационная база делает метод перспективным для использования в реальных лабораторных и промышленных условиях.

Глава 4

Моды топологических дефектов в гибридных метаповерхностях

В последнее время возрастает актуальность исследований сильно локализованных топологических состояний высокого порядка. Особое внимание уделяется модам, формирующимся на топологических дефектах, например, Дираковских резонаторах [161, 162]. Область их возможных прикладных приложений охватывает такие направления, как генерация структурированного света, устойчивая лазерная генерация, а также создание высокочувствительных сенсорных платформ.

Важной задачей является интеграция данных фотонных платформ с фононными материалами, т.е. задачи взаимодействия света и материи. В последнее время также начались экспериментальные исследования гибридных экситон- или фонон-поляритонных состояний в топологических метаповерхностях. Такие системы перспективны для приложений, так как в них можно реализовать более сильное взаимодействие света и материи для моделирования квантового поведения даже при невысокой интенсивности излучения. Например, в работе [67] были продемонстрированы топологические экситон-поляритоны, а в [68] – топологически защищенные гибридные краевые состояния фонон-поляритонов. Однако это лишь недавние экспериментальные работы, и полное теоретическое описание таких гибридных систем еще не построено, что представляется чрезвычайно актуальной задачей.

Изучению гибридного фотонно-фононного состояния, локализованного на топологическом дефекте, будет посвящена данная глава. Развитое нами теоретическое описание основано на модели ВNZ для двух фотонных псевдоспинов, дополнительно включающей взаимодействие с фононными компонентами.

4.1 Структура гибридной топологической метаповерхности

В качестве физической платформы в данном разделе мы рассмотрели гибридную топологическую метаповерхность, состоящую из кремниевой мембраны, покрытой тонким слоем гексагонального нитрида бора (hBN).

hBN представляет собой слоистый материал с ван-дер-ваальсовой связью, состоящий из чередующихся атомов бора и азота, образующих гексагональную кристаллическую решетку. hBN может быть легко эксфолирован до атомарно тонких слоев, что делает его идеальным кандидатом для создания гибридных наноструктур. В средней инфракрасной области hBN поддерживает фононные резонансы, связанные с поперечными оптическими колебательными модами [163, 164, 165, 166, 167]. Эти фононные моды могут эффективно взаимодействовать с фотонными модами, что приводит к образованию гибридных поляритонных состояний. Взаимодействие между фотонами и фононами в hBN реализуется через механизм сильной связи, при котором энергия обменивается между электромагнитным полем и колебательными модами решетки. Это взаимодействие усиливается в тонких пленках hBN, где локализация

света на нанометровых масштабах приводит к значительному увеличению плотности состояний фотонов и, как следствие, к усилению связи между фотонными и фононными компонентами. Таким образом, hBN предоставляет уникальную платформу для изучения и управления поляритонными состояниями, что открывает новые возможности для создания компактных и эффективных оптических устройств.

Фотонная структура, о которой пойдет речь в данной главе, – это периодическая деформированная гексагональная решетка треугольных отверстий в кремниевом слое. Данная геометрия также известна как узор Кекуле. Степень деформации определяется величиной $C = a/R$. Недеформированная элементарная ячейка однородной гексагональной решетки характеризуется отношением $a/R = 3$, где a обозначает период решетки, а R представляет собой расстояние от центра элементарной ячейки до центроида каждого треугольного отверстия. Сжатые гексамеры были созданы путем поддержания фиксированного значения a и уменьшения R . Этот процесс количественно характеризуется параметром кластеризации $C < 1$ (рис. 57). Напротив, расширенные гексамеры соответствуют $C > 1$. Переход между сжатой и расширенной деформациями, определяемый изменением C , сопровождается инверсией зон при малых значениях волнового вектора, что переключает топологию зонной структуры от тривиальной к нетривиальной.

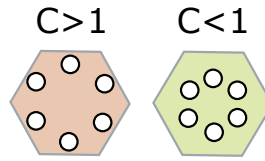


Рисунок 57: Иллюстрации сжатой и расширенной элементарных ячеек. $C > 1$ – нетривиальная структура, $C < 1$ – тривиальная.

Предыдущие исследования фокусировались на изучении топологических доменных стенок между доменами, образованными расширенными и сжатыми гексамерами (например, на рис. 58(b) изображена зигзагообразная доменная стенка).

Мы вводим топологический дефект путем объединения трех доменов с *одинаковым* типом деформации (рис. 58(a)). Три смещённых сектора сжатых гексамеров сходятся в одной центральной точке (начале координат), как показано на рис. 58(a), и создают точечный дефект и линейные дефекты вдоль трёх лучей, исходящих из центра. Элементарные ячейки для решетки могут быть по-разному выделены в трех доменах, обозначенных как $\lambda = 1, 2, 3$.

Рассматриваемая структура была экспериментально реализована и детально исследована в работе [А6]. В представленном ниже разделе приводятся конкретные параметры данной системы, использованные в дальнейшем в нашем моделировании и для построения эффективных теоретических моделей.

4.2 Детали полномасштабного 3D моделирования

Представленные в настоящей работе численные результаты получены из первых принципов (см. Приложение В.1). Геометрические параметры были получены из изображений,

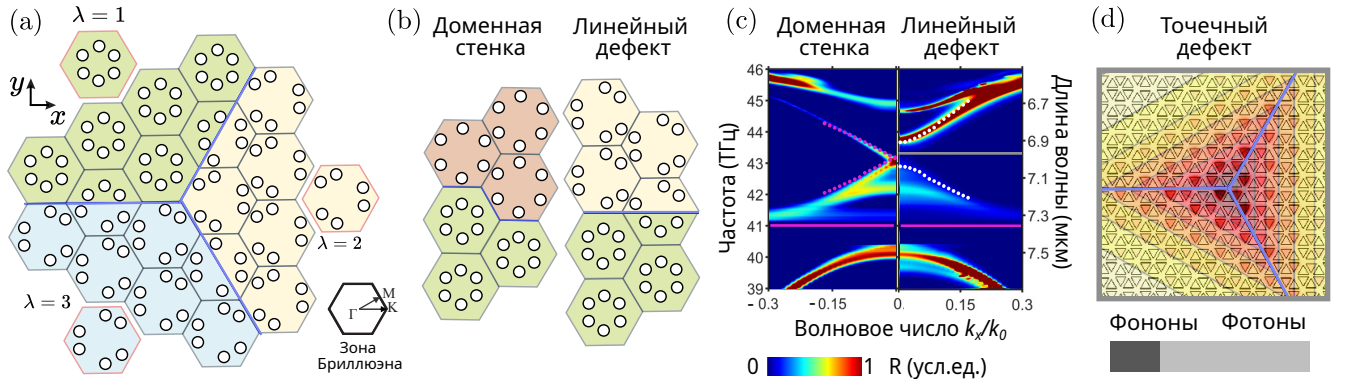


Рисунок 58: (а): схематическое изображение топологического точечного дефекта, образованного путем соединения доменов с тремя различными вариантами выбора объемной элементарной ячейки, обозначенными как $\lambda = 1, 2, 3$. (б): зигзагообразная доменная стенка между расширенными и сжатыми гексамерами и линейный дефект, разделяющий смещенные домены, обозначенные как $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$. (с): результаты численного моделирования распределения плотности электромагнитной энергии для зигзагообразной доменной стенки и линейного дефекта в зависимости от волнового числа и частоты падающей плоской волны. Пунктирные кривые розового и белого цвета показывают дисперсию краевых состояний, рассчитанную на основании эффективной модели Дирака. Сплошные розовые линии обозначают спектральное положение фонованного резонанса hBN. Темно-серая линия соответствует частоте локализованного на точечном дефекте состояния, пространственная структура которого показана на панели (d). (d): квадрат модуля распределения компоненты магнитного поля H_z , направленной перпендикулярно плоскости xy , в кремниевом слое. На график наложены контурные линии, визуализирующие профиль углового состояния, полученный из модели Дирака в рамках континуального приближения. Вставка в виде шкалы показывает долю фотонов и фононов в моде, локализованной на топологическом дефекте.

полученных с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) изготовленных экспериментальных образцов [A10]. Диэлектрическая проницаемость кремния была задана равной $\epsilon_{Si} = 11.69$, в то время как диэлектрическая проницаемость сапфировой подложки (Al_2O_3) $\epsilon_{sub} = 2.05$.

Толщина слоя кремния равнялась 1000 нм, размер треугольных отверстий – $s = 1668$ нм, период решетки $a = 4220$ нм. Для тривиальной системы $C = 3R/a = 0.935$, для нетривиальной – $C = 1.05$.

Гексагональный нитрид бора толщиной 15 нм моделировался как слой поверх структурированной кремниевой метаповерхности. Диэлектрическая проницаемость этого материала:

$$\epsilon_\alpha(\omega) = \epsilon_{\alpha,\infty} \left(1 + \frac{(\omega_{LO}^\alpha)^2 - (\omega_{TO}^\alpha)^2}{(\omega_{TO}^\alpha)^2 - \omega^2 - i\gamma_\alpha\omega} \right), \quad (4.1)$$

где $\alpha \in \{\text{par}, \text{per}\}$ обозначает различные направления в тензоре диэлектрической проницаемости hBN. В частности, $\epsilon_{\text{par}} = \epsilon_{zz}$ соответствует компоненте, параллельной кристаллографической оси, а $\epsilon_{\text{per}} = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ – компоненте, перпендикулярной ей. Параметры, использованные в модели, имеют следующие значения: $\epsilon_{\text{per},\infty} = 4.90$, $\epsilon_{\text{par},\infty} = 2.95$, $\omega_{LO}^{\text{per}} = 1610 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{TO}^{\text{per}} = 1368 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{LO}^{\text{par}} = 825 \text{ см}^{-1}$, $\omega_{TO}^{\text{par}} = 760 \text{ см}^{-1}$, $\gamma_{\text{per}} = 7 \text{ см}^{-1}$, $\gamma_{\text{par}} = 2 \text{ см}^{-1}$.

Для начала мы рассмотрели интерфейсы двух типов: доменную стенку зигзагообразной формы и линейного дефекта, как показано на рис. 58(b). Нами были проведены трехмерные симуляции возбуждения плоской волной мод этих суперячеек (рис. 58(b)). Суперячейка состояла из двух доменов, формирующих границу раздела, ориентированную в направлении x . Каждый домен включал восемь элементарных ячеек вдоль оси y и две элементарные ячейки вдоль оси x . Периодические граничные условия были применены в направлении x . Все остальные границы были окружены идеально согласованными слоями (PML) [A6]. Зонные диаграммы восстановлены путем сканирования частот источника и волновых чисел с последующим цветовым картированием усредненной по времени плотности энергии, проинтегрированной по элементарным ячейкам, прилегающим к интерфейсу.

Также было проведено моделирование мод гибридной метаповерхности, содержащей топологический дефект. Было найдено состояние, локализованное в начале координат (область дефекта). Расчетная область содержала порядка 40 элементарных ячеек вдоль каждой из осей (x, y) и была окружена PML. Условия моделирования по оси z аналогичны тем, что задавались при исследовании суперячеек. Найдена частота угловой моды, локализованной в начале координат (серая линия на рис. 58(c)), а также распределение полей в ней (магнитное поле показано на рис. 58(d)).

Для пояснения результатов проведенного полномасштабного трёхмерного моделирования мы построили эффективную континуальную модель, аналитически описывающую свойства мод точечного и линейного дефекта.

Наше исследование начинается с рассмотрения невзаимодействующей фотонной системы.

4.3 Фотонная система

4.3.1 Вывод ВНЗ Гамильтониана из метода сильной связи

В качестве отправной точки для дальнейшего анализа мы выводим Гамильтониан ВНЗ из Гамильтониана, записанного в приближении МСС. Выбор базиса для Гамильтониана ВНЗ позволяет разделить дипольные и квадрупольные компоненты поля, что является преимуществом для последующего анализа характеристик мод дальнего поля.

Гамильтониан МСС записывается аналогично [105]. Элементарная ячейка представляет собой гексагональный кластер с внутриячеечными связями t_1 и межъячеечными связями t_2 с элементами соседних элементарных ячеек. Расстояние между ближайшими элементами в невозмущенной элементарной ячейке графеноподобной гексагональной решетки равно d_0 , период невозмущенного графена составляет $a_0 = \sqrt{3}d_0$. В системе координат (x', y') , показанной на рис. 59(a), выбираются векторы трансляций $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$ и $\mathbf{a}_2 = a(1/2, \sqrt{3}/2)$, где $a = \sqrt{3}a_0$ – пространственный период.

Гамильтониан, действующий на шестикомпонентную волновую функцию $\mathbf{v}_1$ в импульсном пространстве, имеет вид:

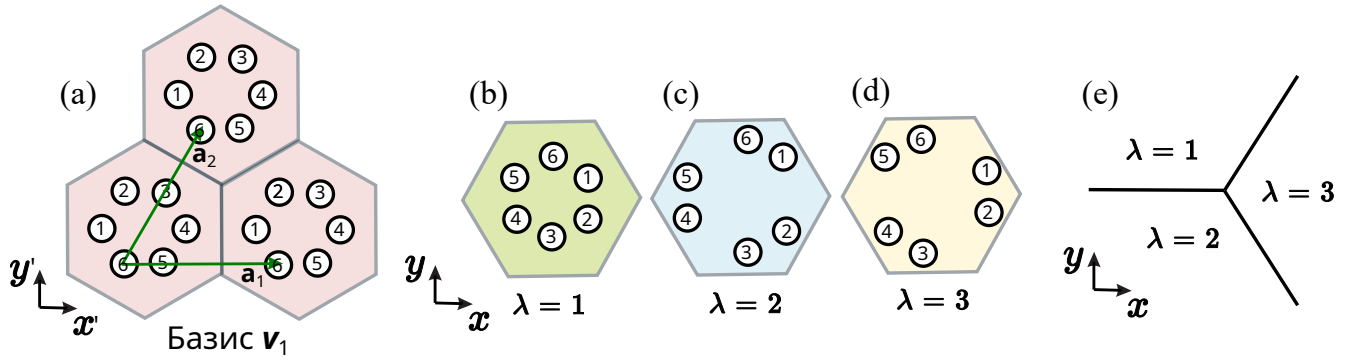


Рисунок 59: (a-d): иллюстрация вида элементарной ячейки и нумерации элементов в различных базисах. (b), (c) и (d) соответствуют Дираковским базисам. Коэффициент связи между элементами уменьшается с увеличением расстояния между ними. В рамках данного рассмотрения учитывается только взаимодействие ближайших соседей. (e): схема топологического дефекта, образованного объединением трех доменов, каждый из которых характеризуется различным выбором элементарной ячейки.

$$\hat{H}_{\mathbf{v}_1} = \begin{pmatrix} \omega_0 & -t_1 & 0 & -t_2 e^{-ia k_x} & 0 & -t_1 \\ -t_1 & \omega_0 & -t_1 & 0 & -t_2 e^{ia \left(\frac{\sqrt{3} k_y}{2} - \frac{k_x}{2} \right)} & 0 \\ 0 & -t_1 & \omega_0 & -t_1 & \omega_0 & -t_2 e^{ia \left(\frac{k_x}{2} + \frac{\sqrt{3} k_y}{2} \right)} \\ -t_2 e^{iak_x} & 0 & -t_1 & \omega_0 & -t_1 & 0 \\ 0 & -t_2 e^{ia \left(\frac{k_x}{2} - \frac{\sqrt{3} k_y}{2} \right)} & 0 & -t_1 & \omega_0 & -t_1 \\ -t_1 & 0 & -t_2 e^{-ia \left(\frac{k_x}{2} + \frac{\sqrt{3} k_y}{2} \right)} & 0 & -t_1 & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Для определения значений коэффициентов связи t_1 и t_2 , характеризующих рассматриваемую метаповерхность, мы сопоставили результаты, полученные с использованием МСС, с результатами трехмерных численных расчетов методом конечных элементов собственных мод кремниевой метаповерхности (рис. 60). Сопоставление осуществлялось на основании соответствия как зонной структуры, так и собственных мод для квази-поперечной электрической (квази-ТЕ) поляризации с преобладающей компонентой H_z магнитного поля.

Зонная структура во всей зоне Бриллюэна (вдоль направлений ГКМГ), представленная на рис. 60, подтверждает наличие полной запрещенной зоны в интересующем спектральном диапазоне (закрашено розовым цветом). В отличие от невозмущенной графеноподобной решетки, характеризующейся дираковскими пересечениями в К-точках, в деформированной гексагональной решетке точки Дирака возникают вблизи Г-точки вследствие механизма сворачивания зон (band folding). Вырождение снимается за счет понижения симметрии, обусловленного искажением решетки, что приводит к открытию фотонной запрещенной зоны.

Указанные шесть зон включают в себя шесть различных типов мод: две синглетные моды и две пары дублетов: две дипольные моды и две квадрупольные моды, попарно вырожденные в Г-точке зоны Бриллюэна (рис. 60(d)).

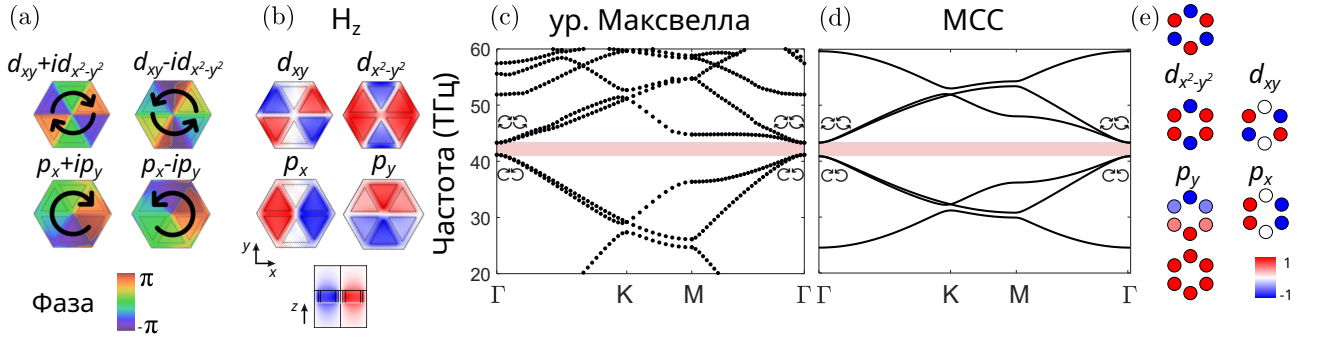


Рисунок 60: Профили полей собственных мод (a,b,e) и зонные структуры (c,d) для тривиальной элементарной решетки фотонной метаповерхности, рассчитанные в рамках (a,b,c) трехмерного полноволнового моделирования и (d,e) метода сильной связи. (a,b): поперечные сечения (срез по верхней плоскости структурированной кремниевой пластины) и вид сбоку (вставка внизу на (b))) распределения поля H_z в элементарной ячейке для дублетных мод в Γ -точке: попарно вырожденные дипольные (p_x, p_y) и квадрупольные ($d_{xy}, d_{x^2-y^2}$) состояния. Дублетные зоны на (c,d) обозначены вращающимися стрелками, различающими дипольные ($p_{\pm} = p_x \pm ip_y$) и квадрупольные ($d_{\pm} = d_{xy} \pm id_{x^2-y^2}$) состояния с круговой поляризацией, проиллюстрированные изменением фазы на панели (a). (e): профили шести мод в Γ -точке, полученные с использованием MCC: два спектрально разделенных синглета в дополнение к дублетам. Полная запрещенная зона в интересующем спектральном диапазоне выделена красноватым оттенком.

Далее мы меняем базис Гамильтониана $\hat{H}_{v_1}$ посредством преобразования $\hat{H}_{v_{cp}} = \hat{U}_r \hat{H}_{v_1} \hat{U}_r^{-1}$ с матрицей

$$\hat{U}_r = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{i\pi/3} & e^{2i\pi/3} & -1 & e^{-2i\pi/3} & e^{-i\pi/3} \\ 1 & e^{2i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} & 1 & e^{2i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} \\ 1 & e^{-i\pi/3} & e^{-2i\pi/3} & -1 & e^{2i\pi/3} & e^{i\pi/3} \\ 1 & e^{-2i\pi/3} & e^{2i\pi/3} & 1 & e^{-2i\pi/3} & e^{2i\pi/3} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

и исключаем первую и шестую строки, мы проецируем исходный Гамильтониан размера 6×6 на четырехмерное подпространство $[p_-, d_-, p_+, d_+]$, состоящее из собственных состояний дипольного ($p_{\mp}$) и квадрупольного ($d_{\mp}$) типов с правой и левой круговой поляризацией, соответствующие орбитальному угловому моменту $l = 1$ и $l = 2$ в их угловой зависимости $\propto \exp\{i(l\varphi)\}$, соответственно:

$$\begin{aligned} p_- &= \left[1 \quad e^{i\pi/3} \quad e^{2i\pi/3} \quad -1 \quad e^{-2i\pi/3} \quad e^{-i\pi/3} \right] / \sqrt{6}, \\ d_- &= \left[1 \quad e^{2i\pi/3} \quad e^{-2i\pi/3} \quad 1 \quad e^{2i\pi/3} \quad e^{-2i\pi/3} \right] / \sqrt{6}, \\ p_+ &= \left[1 \quad e^{-i\pi/3} \quad e^{-2i\pi/3} \quad -1 \quad e^{2i\pi/3} \quad e^{i\pi/3} \right] / \sqrt{6}, \\ d_+ &= \left[1 \quad e^{-2i\pi/3} \quad e^{2i\pi/3} \quad 1 \quad e^{-2i\pi/3} \quad e^{2i\pi/3} \right] / \sqrt{6}. \end{aligned}$$

Индекс $\pm$ указывает на киральность мод. Соответствующие четыре зоны, полученные в

результате аппроксимации с использованием модели сильной связи, представлены на левой панели рис. 61. Дальнейшее улучшение аппроксимации возможно за счет учета взаимодействия элементов с соседними, следующими за ближайшими. В данной работе пренебрегается связью между собственными модами с левой и правой круговой поляризацией, ответственной за снятие вырождения дублетных зон при ненулевых значениях k .

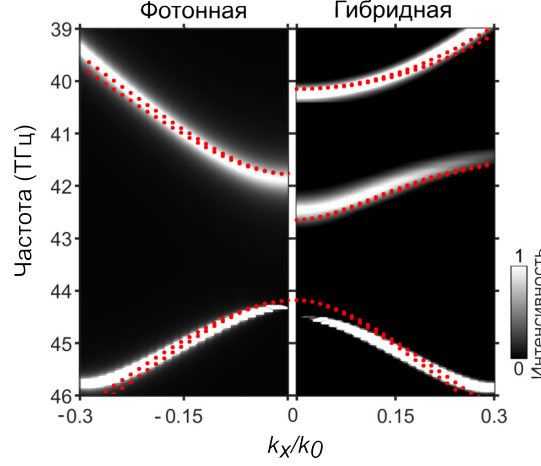


Рисунок 61: Численно смоделированные зонные диаграммы кремниевой метаповерхности (слева), и соответствующий поляритонный аналог (справа). Красными точками показана аппроксимация с использованием модели сильной связи. Подобранные параметры модели сильной связи имеют следующие значения: $t_2 = 3.17 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $t_1 = 3.93 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $q_1 = 7.5 \times 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $q_2 = 0$, а частота середины фотонной запрещенной зоны $\omega_0 = 2.7 \times 10^{14} \text{ с}^{-1}$. При подгонке используются точные значения, полученные из симуляций, для периода a и резонансной частоты $\omega_p = 2\pi c/\lambda_p = 2.58 \times 10^{14} \text{ с}^{-1}$, где резонансная фоновая длина волны равна $\lambda_p = 7.3 \text{ мкм}$. Нормировка волнового числа выполнена относительно $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ при $\lambda_0 = 7.3 \text{ мкм}$. Метаповерхность имеет треугольные отверстия с длиной стороны $s = 1668 \text{ нм}$, пространственный период $a = 4220 \text{ нм}$ и параметр кластеризации $C = 3R/a = 0.935$, где R – расстояние от центра элементарной ячейки до центра каждого треугольного отверстия. Соответствующие эффективные параметры в Дираковской модели составляют $\Lambda = -7.6 \times 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $|\tilde{\Lambda}| = 7.7 \times 10^7 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$. Эффективные параметры ВНЗ: $M = -7.6 \times 10^{12} \text{ с}^{-1}$, $\beta = 97 \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ и $v_D = 6.7 \times 10^7 \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$.

Полученный в результате Гамильтониан имеет вид Гамильтониана Берневига-Хьюза-Чжана (ВНЗ) 1.4.2

$$\hat{H}_{v_{cp}} = \begin{pmatrix} +M - B|\mathbf{k}|^2 + \omega_0 & v_D(-k_y + ik_x) & 0 & 0 \\ v_D(-k_y - ik_x) & -M + B|\mathbf{k}|^2 + \omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +M - B|\mathbf{k}|^2 + \omega_0 & v_D(+k_y + ik_x) \\ 0 & 0 & v_D(+k_y - ik_x) & -M + B|\mathbf{k}|^2 + \omega_0 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

где эффективные параметры: Дираковская скорость $v_D = at_2/2$, массовый член $M = t_2 - t_1$, кривизна $B = 3a_0^2 t_2(t_1 + t_2)/4(2t_2 + t_1)$. Как было сказано ранее, $MB > 0$ соответствует нетривиальной фазе ($t_2 > t_1$, расширенная элементарная ячейка, $C > 1$), а $MB < 0$ – нетривиальной ($t_2 < t_1$, сжатая элементарная ячейка, $C < 1$).

Небольшое снятие вырождения, наблюдаемое в окрестности Γ -точки как в 3D расчетах

собственных мод, так и в модели сильной связи, может быть корректно воспроизведено в континуальном приближении путем введения связи между двумя псевдоспиновыми секторами размера 2×2 посредством недиагональных матриц размера 2×2 $\hat{A}$ и $\hat{A}^\dagger$, где $\hat{A} = \text{diag}\{-A(k_x + ik_y)^2, A(k_x - ik_y)^2\}$, которыми мы пренебрегли в уравнении (4.4), но которые могут быть рассмотрены как возмущение. Коэффициент $A = a^2 t_1 t_2 / 8(2t_2 + t_1) = -a^2 t_2 / 8 + a^2 t_2 / 4(t_1 + 2t_2)$, аналогично коэффициенту $B = a^2 t_2 (t_1 + t_2) / 4(2t_2 + t_1) = -a^2 t_2 / 4 + a^2 t_2 / 4(t_1 + 2t_2)$, состоит из двух слагаемых, где первые возникают из разложения экспонент в Гамильтониане до квадратичного порядка по $k_{x,y}$, в то время как вторые обусловлены взаимодействием дублетов с синглетными состояниями [105].

Эффективный параметр спин-спинового взаимодействия, полученный в результате данной аппроксимации, составляет $A = 27 \text{ м}^2 \text{с}^{-1}$. Степень спин-спинового взаимодействия, которая может быть оценена, как Ak_x/v_D , составляет менее 5% даже для относительно большого значения импульса $k_x/k_0 = 0.15$. Кроме того, эффект спин-спинового взаимодействия нивелируется уширением линий: а именно, комплексная (включающая потери) частота дипольной моды, полученная при решении стационарных уравнений Максвелла, в Γ -точке составляет $(41.9 - 0.225i) \text{ ТГц}$, в то время как при $k_x/k_0 = 0.15$ две резонансные частоты равны $(40.95 - 0.175i) \text{ ТГц}$ и $(45 - 0.05i) \text{ ТГц}$. Это свидетельствует о пренебрежимо малом влиянии спин-спинового взаимодействия.

4.3.2 Дираковские базисы

Дальнейший анализ наиболее удобно проводить в *Дираковских базисах*, которые мы определим ниже. Мы будем работать в системе координат (x, y) , где $x \equiv -y'$, $y \equiv -x'$, как показано на рис. 59. Координаты элементов внутри невозмущенной элементарной ячейки задаются выражением $\mathbf{a}_\mu = d_0 (\sin(\frac{2\pi\mu}{6}), \cos(\frac{2\pi\mu}{6}))$, где $\mu = 1, 2, \dots, 6$, а волновой вектор равен $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$.

Гамильтонианы модели сильной связи записываются для трех возможных вариантов выбора элементарных ячеек в рассматриваемой структуре (рис. 59(b-d)):

$$H_{\lambda,1}^{\mu\nu}(\mathbf{q}) = te^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_\nu - \mathbf{a}_\mu)} (\delta_{\mu+1,\nu} + \delta_{\mu-1,\nu}) + te^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_\mu} \delta_{\mu+3,\nu} + \Lambda e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_\nu - \mathbf{a}_\mu)} (\delta_{\mu+1,\nu} + \delta_{\mu-1,\nu}) + \omega_0 \delta_{\mu,\nu}, \quad (4.5a)$$

$$H_{\lambda,2}^{\mu\nu}(\mathbf{q}) = te^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_\nu - \mathbf{a}_\mu)} (\delta_{\mu+1,\nu} + \delta_{\mu-1,\nu}) + te^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_\mu} \delta_{\mu+3,\nu} + \Lambda [e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_\nu - \mathbf{a}_\mu)} (\delta_{\mu+1,\nu} \delta_{\mu, \text{even}} + \delta_{\mu-1,\nu} \delta_{\mu, \text{odd}}) + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_\mu} \delta_{\mu+3,\nu}] + \omega_0 \delta_{\mu,\nu}, \quad (4.5b)$$

$$H_{\lambda,3}^{\mu\nu}(\mathbf{q}) = te^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_\nu - \mathbf{a}_\mu)} (\delta_{\mu+1,\nu} + \delta_{\mu-1,\nu}) + te^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_\mu} \delta_{\mu+3,\nu} + \Lambda [e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_\nu - \mathbf{a}_\mu)} (\delta_{\mu+1,\nu} \delta_{\mu, \text{odd}} + \delta_{\mu-1,\nu} \delta_{\mu, \text{even}}) + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_\mu} \delta_{\mu+3,\nu}] + \omega_0 \delta_{\mu,\nu}, \quad (4.5c)$$

здесь введены обозначения $t_1 = -t$ и $t_2 = -t - \Lambda$. Далее мы сформируем Y-образное соединение, объединяющее три домена, каждый из которых образован отдельной элементарной ячейкой

(рис. 59(e)):

$$\begin{aligned}\lambda = 1, & \quad y > \tan(\pi/3)x \cap y > 0; \\ \lambda = 2, & \quad y < -\tan(\pi/3)x \cap y < 0; \\ \lambda = 3, & \quad y > -\tan(\pi/3)x \cap y < \tan(\pi/3)x.\end{aligned}$$

В области $\lambda = 1$ явный вид Гамильтониана в матричной форме это:

$$\hat{H}_{\lambda,1} = \begin{pmatrix} \omega_0 & \tilde{t}e^{-id_0q_y} & 0 & te^{id_0(\frac{\sqrt{3}q_x}{2} + \frac{q_y}{2})} & \omega_0 & \tilde{t}e^{id_0(\frac{q_y}{2} - \frac{\sqrt{3}q_x}{2})} \\ \tilde{t}e^{id_0q_y} & \omega_0 & \tilde{t}e^{id_0(-\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - \frac{q_y}{2})} & 0 & te^{id_0(\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - \frac{q_y}{2})} & 0 \\ 0 & \tilde{t}e^{id_0(\frac{\sqrt{3}q_1}{2} + \frac{q_y}{2})} & \omega_0 & \tilde{t}e^{id_0(\frac{q_y}{2} - \frac{\sqrt{3}q_x}{2})} & 0 & te^{-id_0q_y} \\ te^{id_0(-\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - \frac{q_y}{2})} & 0 & \tilde{t}e^{id_0(\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - \frac{q_y}{2})} & \omega_0 & \tilde{t}e^{id_0q_y} & 0 \\ 0 & te^{id_0(\frac{q_y}{2} - \frac{\sqrt{3}q_x}{2})} & 0 & \tilde{t}e^{-id_0q_y} & \omega_0 & \tilde{t}e^{id_0(\frac{\sqrt{3}q_x}{2} + \frac{q_y}{2})} \\ \tilde{t}e^{id_0(\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - \frac{q_y}{2})} & 0 & te^{id_0q_y} & 0 & \tilde{t}e^{id_0(-\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - \frac{q_y}{2})} & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Введем обозначение $\tilde{t} \equiv t + \Lambda$. Данный Гамильтониан может быть преобразован в $\hat{H}_{v_1}$. С этой целью нужно использовать оператор перехода, учитывающий координаты элементов внутри шестиэлементной элементарной ячейки (см. рис. 59(a)):

$$\hat{U}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{id_0q_y} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(\frac{1}{2}\sqrt{3}d_0q_x + \frac{3d_0q_y}{2})} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(\sqrt{3}d_0q_x + d_0q_y)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i\sqrt{3}d_0q_x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i(\frac{1}{2}\sqrt{3}d_0q_x - \frac{d_0q_y}{2})} \end{pmatrix}.$$

Реализуется стандартная процедура преобразования базиса:

$$\hat{H}'_{\lambda,1} = \hat{U}_k^{-1} \hat{H}_{\lambda,1} \hat{U}_k = \begin{pmatrix} \omega_0 & \Lambda + t & 0 & te^{\frac{3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x + q_y)} & 0 & \Lambda + t \\ \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t & 0 & te^{\frac{3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x - q_y)} & 0 \\ 0 & \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t & 0 & te^{-3id_0q_y} \\ te^{\frac{-3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x + q_y)} & 0 & \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t & 0 \\ 0 & te^{\frac{-3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x - q_y)} & 0 & \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t \\ \Lambda + t & 0 & te^{3id_0q_y} & 0 & \Lambda + t & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

за которой следует дополнительное преобразование для достижения корректной нумерации

элементов,

$$\hat{U}_e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В результате мы получаем

$$\hat{U}_e^{-1} \hat{H}'_{\lambda,1} \hat{U}_e = \begin{pmatrix} \omega_0 & \Lambda + t & 0 & te^{3id_0q_y} & 0 & \Lambda + t \\ \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t & 0 & te^{-\frac{3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x - q_y)} & 0 \\ 0 & \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t & 0 & te^{-\frac{3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x + q_y)} \\ te^{3id_0q_y} & 0 & \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t & 0 \\ 0 & te^{\frac{3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x - q_y)} & 0 & \Lambda + t & \omega_0 & \Lambda + t \\ \Lambda + t & 0 & te^{\frac{3}{2}id_0(\sqrt{3}q_x + q_y)} & 0 & \Lambda + t & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

После подстановки $q_y \rightarrow -k_x$, $q_x \rightarrow -k_y$, $3d_0 \rightarrow a$; $\Lambda + t \rightarrow -t_1$, $t \rightarrow -t_2$ Гамильтониан (4.8) преобразуется к виду $\hat{H}_{v_1}$. Это согласуется с преобразованием между системами координат (x, y) и (x', y') .

В других областях ($\lambda = 2, 3$) мы можем применить операторы

$$\hat{U}_{\alpha 2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{U}_{\alpha 3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

чтобы снова перейти к базису $\lambda = 1$:

$$\hat{H}_{\lambda,1} = \hat{U}_{\alpha[2,3]}^{-1} \hat{H}_{\lambda,[2,3]} \hat{U}_{\alpha[2,3]}.$$

Для осуществления финального преобразования базиса от $\hat{H}_{\lambda,[1,2,3]}$ к $\hat{H}_{d1,2,3}$ используется матрица:

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & w^2 & 0 & w & 0 \\ 0 & 1 & 0 & w^2 & 0 & w \\ 1 & 0 & w & 0 & w^2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & w & 0 & w^2 \end{pmatrix},$$

где $w = e^{2\pi i/3}$. Следует отметить, что данный базис конструируется путем взятия линейных

комбинаций элементов из первой подрешетки для четных базисных векторов и из второй подрешетки для нечетных базисных векторов. Мы действуем данным оператором на $\hat{H}_{\lambda,[1,2,3]}$. Далее мы учитываем только блоки Гамильтониана в окрестности интересующих нас частот (рис. 60, тем самым исключая первые и шестые строки и столбцы) и раскладываем коэффициенты до линейного порядка по $q_{x,y}$ ($|q_{x,y}d_0| \ll 1$):

$$\hat{H}_{d1} = \hat{U}^{-1} \hat{H}_{\lambda,1} \hat{U} = \begin{pmatrix} \omega_0 & -\Lambda e^{4\pi i/3} & 0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (-iq_y - q_x) \\ -\Lambda e^{2\pi i/3} & \omega_0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (iq_y + q_x) & 0 \\ 0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (-iq_y + q_x) & \omega_0 & -\Lambda e^{2\pi i/3} \\ d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (iq_y - q_x) & 0 & -\Lambda e^{4\pi i/3} & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

$$\hat{H}_{d2} = \hat{U}^{-1} \hat{H}_{\lambda,2} \hat{U} = \begin{pmatrix} \omega_0 & -\Lambda e^{6\pi i/3} & 0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (-iq_y - q_x) \\ -\Lambda e^{6\pi i/3} & \omega_0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (iq_y + q_x) & 0 \\ 0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (-iq_y + q_x) & \omega_0 & -\Lambda e^{6\pi i/3} \\ d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (iq_y - q_x) & 0 & -\Lambda e^{6\pi i/3} & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

$$\hat{H}_{d3} = \hat{U}^{-1} \hat{H}_{\lambda,3} \hat{U} = \begin{pmatrix} \omega_0 & -\Lambda e^{2\pi i/3} & 0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (-iq_y - q_x) \\ -\Lambda e^{4\pi i/3} & \omega_0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (iq_y + q_x) & 0 \\ 0 & d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (-iq_y + q_x) & \omega_0 & -\Lambda e^{4\pi i/3} \\ d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right) (iq_y - q_x) & 0 & -\Lambda e^{2\pi i/3} & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Предполагается, что данные матрицы действуют на элементы нового базиса

$$\mathbf{v}_d \equiv (u_a, u_b, v_a, v_b)^T.$$

В компактной форме все Гамильтонианы $\hat{H}_{d1,2,3}$ могут быть переписаны следующим образом:

$$\hat{H}_d^{4 \times 4} = \begin{pmatrix} \omega_0 & \Delta^* & 0 & \tilde{\Lambda} (-iq_y - q_x) \\ \Delta & \omega_0 & \tilde{\Lambda} (iq_y + q_x) & 0 \\ 0 & \tilde{\Lambda} (-iq_y + q_x) & \omega_0 & \Delta \\ \tilde{\Lambda} (iq_y - q_x) & 0 & \Delta^* & \omega_0 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Мы вводим параметр порядка Δ , являющийся функцией полярного угла $\theta = \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right)$ и выражающийся как $\Delta = -\Lambda e^{i\Theta(\theta)}$, где: $\Theta(\theta) = 2\pi/3$ ($\lambda = 1$); $\Theta(\theta) = 4\pi/3$ ($\lambda = 3$); $\Theta(\theta) = 6\pi/3$ ($\lambda = 2$). Также введена модифицированная Дираковская скорость $\tilde{\Lambda} = d_0 \left(\frac{3}{2}t + \Lambda \right)$.

После подстановки пространственных производных в операторы импульса $-i\partial_{x,y} = q_{x,y}$

Гамильтониан преобразуется к матричному виду в реальном пространстве (x, y) :

$$\hat{H}_d^{4 \times 4} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta^* & 0 & \tilde{\Lambda}(i\partial_x - \partial_y) \\ \Delta & 0 & \tilde{\Lambda}(-i\partial_x + \partial_y) & 0 \\ 0 & \tilde{\Lambda}(-i\partial_x - \partial_y) & 0 & \Delta \\ \tilde{\Lambda}(i\partial_x + \partial_y) & 0 & \Delta^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

В таблице 10 приведены сводные данные о преобразованиях базиса.

$\mathbf{v}_{cp} = \hat{U}_r^{-1} \mathbf{v}_1$	$\mathbf{v}_1 = \hat{U}_k \hat{U}_e \mathbf{v}_{\lambda 1}$	$\mathbf{v}_{\lambda 1} = \hat{U}_{\alpha[2,3]} \mathbf{v}_{\lambda[2,3]}$	$\mathbf{v}_{d[1,2,3]} = \hat{U} \mathbf{v}_{\lambda[1,2,3]}$
$\hat{H}_{\mathbf{v}_{cp}} = \hat{U}_r \hat{H}_{\mathbf{v}_1} \hat{U}_r^{-1}$	$\hat{H}_{\mathbf{v}_1} = \left(\hat{U}_k \hat{U}_e \right)^{-1} H_{\lambda,1} \hat{U}_k \hat{U}_e$	$\hat{H}_{\lambda 1} = \hat{U}_{\alpha[2,3]}^{-1} \hat{H}_{\lambda,[2,3]} \hat{U}_{\alpha[2,3]}$	$\hat{H}_{d[1,2,3]} = \hat{U}^{-1} \hat{H}_{\lambda,[1,2,3]} \hat{U}$

Таблица 10: Верхний ряд: два базиса одинаковой размерности связаны посредством матриц перехода. Нижний ряд: соответствующее изменение Гамильтонианов.

4.4 Преобразование базиса в Гамильтониане гибридной системы

В данном подразделе выводится эффективный Дираковский Гамильтониан из модели сильной связи (МСС), учитывающий как фотоны, так и фононы. Гамильтониан МСС в базисе $\mathbf{v}_1$ может быть расширен для включения как фотонной, так и фононной компонент следующим образом:

$$\hat{H}_{\mathbf{v}_1}^f = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\mathbf{v}_1} & \hat{Q} \\ \hat{Q}^\dagger & \hat{H}_p \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

где фотонная часть задается уравнением (4.2), а фононная часть представляет собой

$$\hat{H}_p = \begin{pmatrix} \omega_p & 0 \\ 0 & \omega_p \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Фононные степени свободы связаны с дипольными и квадрупольными фотонными состояниями с круговой поляризацией через коэффициенты q_1 и q_2 , соответственно. Фактически, связь с фононами вводится с использованием базиса циркулярных состояний $\mathbf{v}_{cp}$, а затем Гамильтониан преобразуется обратно в базис МСС $\mathbf{v}_1$ (более подробное описание данной процедуры представлено в работе [68]). Данное взаимодействие в решеточной модели описывается матрицей:

$$\hat{Q}^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{q_1}{\sqrt{6}} + \frac{q_2}{\sqrt{6}} & \frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} + \frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} & \frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} - \frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} & -\frac{q_1}{\sqrt{6}} + \frac{q_2}{\sqrt{6}} & -\frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} + \frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} & -\frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} - \frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} \\ \frac{q_1}{\sqrt{6}} + \frac{q_2}{\sqrt{6}} & -\frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} - \frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} & -\frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} + \frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} & -\frac{q_1}{\sqrt{6}} + \frac{q_2}{\sqrt{6}} & \frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} - \frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} & \frac{e^{\frac{i\pi}{3}} q_1}{\sqrt{6}} + \frac{e^{\frac{2i\pi}{3}} q_2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Ранее было получено, что $H_{\mathbf{v}_1} = \left(\hat{U}_k \hat{U}_e \right)^{-1} H_{\lambda,1} \hat{U}_k \hat{U}_e$. В случае системы с фононами данное выражение для перехода к базису, обозначенному как $\lambda, 1$, может быть обобщено следующим образом:

$$H_{\lambda,1}^f = \left(\hat{U}_k^f \hat{U}_e^f \right) H_{\mathbf{v}_1}^f \left(\hat{U}_k^f \hat{U}_e^f \right)^{-1},$$

где матрицы перехода с фононной частью (в матрицах для фотонной компоненты учтены подстановки $q_y \rightarrow -k_x$; $q_x \rightarrow -k_y$; $3d_0 \rightarrow a$) имеют вид:

$$\hat{U}_e^f = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{U}_k^f = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-id_0 k_x} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(-\frac{1}{2}\sqrt{3}d_0 k_y - \frac{3d_0 k_x}{2})} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(-\sqrt{3}d_0 k_y - d_0 k_x)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\sqrt{3}d_0 k_y} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{i(-\frac{1}{2}\sqrt{3}d_0 k_y + \frac{d_0 k_x}{2})} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Далее, для перехода к базисам, обозначенным как $\lambda, [2, 3]$, используется соотношение $H_{\lambda 1} = \hat{U}_{\alpha[2,3]}^{-1} \hat{H}_{\lambda,[2,3]} \hat{U}_{\alpha[2,3]}$:

$$H_{\lambda,[2,3]}^f = \hat{U}_{\alpha[2,3]}^f \hat{H}_{\lambda 1}^f \left(\hat{U}_{\alpha[2,3]}^f \right)^{-1},$$

где

$$\hat{U}_{\alpha 2}^f = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{U}_{\alpha 3}^f = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Используя ранее построенный канонический базис, мы вводим матрицу перехода в виде:

$$\hat{U}^f = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & w^2 & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & w^2 & 0 & w & 0 & 0 \\ 1 & 0 & w & 0 & w^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & w & 0 & w^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Данная матрица применяется к $\hat{H}_{\lambda,[1,2,3]}^f$, в результате чего получается

$$\hat{H}_{[d1,d2,d3]}^f = \left(\hat{U}^f \right)^{-1} \hat{H}_{\lambda,[1,2,3]}^f \hat{U}^f.$$

Далее рассматриваются малые волновые векторы $k_{x,y}a \ll 1$ для перехода к континуальному пределу и сохраняются только низкоэнергетические блоки Гамильтониана. При разложении до линейного порядка по k_x для области $\lambda = 1$ получается:

$$\hat{H}_{d1}^f = \begin{pmatrix} \hat{H}_{d1} & \hat{Q}_1^\dagger \\ \hat{Q}_1 & \hat{H}_p \end{pmatrix},$$

где $\hat{H}_{d1}$ задается уравнением (4.9), а матрица, описывающая связь фотонных и фононных компонент, имеет вид:

$$\hat{Q}_1 = \begin{pmatrix} q_2 e^{-2i\pi/3}/\sqrt{2} & q_2 e^{2i\pi/3}/\sqrt{2} & -q_1 e^{2i\pi/3}/\sqrt{2} & q_1 e^{-2i\pi/3}/\sqrt{2} \\ -q_1 e^{-2i\pi/3}/\sqrt{2} & q_1 e^{2i\pi/3}/\sqrt{2} & q_2 e^{2i\pi/3}/\sqrt{2} & q_2 e^{-2i\pi/3}/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Во второй области, $\lambda = 2$, Гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H}_{d2}^f = \begin{pmatrix} \hat{H}_{d2} & \hat{Q}_2^\dagger \\ \hat{Q}_2 & \hat{H}_p \end{pmatrix},$$

где $\hat{H}_{d2}$ задается уравнением (4.10) и

$$\hat{Q}_2 = \begin{pmatrix} q_2/\sqrt{2} & q_2/\sqrt{2} & -q_1/\sqrt{2} & q_1/\sqrt{2} \\ -q_1/\sqrt{2} & q_1/\sqrt{2} & q_2/\sqrt{2} & q_2/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

В третьей области, $\lambda = 3$, получаем:

$$\hat{H}_{d3}^f = \begin{pmatrix} \hat{H}_{d3} & \hat{Q}_3^\dagger \\ \hat{Q}_3 & \hat{H}_p \end{pmatrix},$$

где $\hat{H}_{d3}$ задается уравнением (4.11) и

$$\hat{Q}_3 = \begin{pmatrix} q_2 e^{-4i\pi/3}/\sqrt{2} & q_2 e^{4i\pi/3}/\sqrt{2} & -q_1 e^{4i\pi/3}/\sqrt{2} & q_1 e^{-4i\pi/3}/\sqrt{2} \\ -q_1 e^{-4i\pi/3}/\sqrt{2} & q_1 e^{4i\pi/3}/\sqrt{2} & q_2 e^{4i\pi/3}/\sqrt{2} & q_2 e^{-4i\pi/3}/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Данные матрицы описывают, как Гамильтониан действует на элементы нового базиса $\mathbf{v}_d$. Гамильтониан может быть записан в компактной форме следующим образом:

$$\hat{H}_d = \begin{pmatrix} \omega_0 & \Delta^* & 0 & \tilde{\Lambda}(-iq_y - q_x) & \Delta_2 & -\Delta_1 \\ \Delta & \omega_0 & \tilde{\Lambda}(iq_y + q_x) & 0 & \Delta_2^* & \Delta_1^* \\ 0 & \tilde{\Lambda}(-iq_y + q_x) & \omega_0 & \Delta & -\Delta_1^* & \Delta_2^* \\ \tilde{\Lambda}(iq_y - q_x) & 0 & \Delta^* & \omega_0 & \Delta_1 & \Delta_2 \\ \Delta_2^* & \Delta_2 & -\Delta_1 & \Delta_1^* & \omega_p & 0 \\ -\Delta_1^* & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_2^* & 0 & \omega_p \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Здесь, как и ранее, параметр порядка Δ является функцией полярного угла $\theta = \tan^{-1}(y/x)$ и задается выражением $\Delta(\theta, \lambda) = -\Lambda e^{i\Theta(\theta, \lambda)}$, где: $\Theta(\theta, \lambda = 1) = 2\pi/3$, $\Theta(\theta, \lambda = 3) = 4\pi/3$, $\Theta(\theta, \lambda = 2) = 2\pi$. Аналогично обозначены члены связи $\Delta_1 = q_1 e^{i\Theta(\theta)}/\sqrt{2}$ и $\Delta_2 = q_2 e^{i\Theta(\theta)}/\sqrt{2}$.

В явном виде выпишем систему уравнений, описывающую задачу на собственные значения $\omega \mathbf{v}_d = \hat{H}_d \mathbf{v}_d$ с Гамильтонианом $\hat{H}_d$ для собственного вектора $\mathbf{v}_d \equiv (u_a, u_b, v_a, v_b, p_1, p_2)^T$:

$$\Delta^* u_b + \tilde{\Lambda}(i\partial_x - \partial_y) v_b + \Delta_2 p_1 - \Delta_1 p_2 = (\omega - \omega_0) u_a, \quad (4.18a)$$

$$\Delta u_a + \tilde{\Lambda}(-i\partial_x + \partial_y) v_a + \Delta_2^* p_1 + \Delta_1^* p_2 = (\omega - \omega_0) u_b, \quad (4.18b)$$

$$\tilde{\Lambda}(-i\partial_x - \partial_y) u_b + \Delta v_b - \Delta_1^* p_1 + \Delta_2^* p_2 = (\omega - \omega_0) v_a, \quad (4.18c)$$

$$\tilde{\Lambda}(i\partial_x + \partial_y) u_a + \Delta^* v_a + \Delta_1 p_1 + \Delta_2 p_2 = (\omega - \omega_0) v_b, \quad (4.18d)$$

$$\Delta_2^* u_a + \Delta_2 u_b - \Delta_1 v_a + \Delta_1^* v_b + \omega_p p_1 = \omega p_1, \quad (4.18e)$$

$$-\Delta_1^* u_a + \Delta_1 u_b + \Delta_2 v_a + \Delta_2^* v_b + \omega_p p_2 = \omega p_2. \quad (4.18f)$$

4.5 Влияние потерь

Отличительная особенность фотонных мод – наличие радиационных потерь. Фононные моды подвержены омическим потерям. Эти факторы нарушают эрмитовость Гамильтониана, и мы изучим их влияние в данном разделе.

Для анализа потерь мы рассмотрели двухуровневую модель, упрощенно описывающую взаимодействие фотонов с фононами через коэффициент связи q_1 . Потери вводятся как мнимые диагональные члены Гамильтониана и находятся для невзаимодействующих фотонов и фононов. Для фононов $\gamma_p \approx 1.74$ мЭВ [68], для дипольной фотонной моды $\gamma_{\text{rad}} \approx 1$ мЭВ

(величины найдены нами численно из трехмерного моделирования):

$$\hat{H}_{\text{NH}} = \begin{pmatrix} (\omega_0 + M - i\gamma_{\text{rad}}) & q_1 \\ q_1 & (\omega_p - i\gamma_p) \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

здесь $M < 0$. Мы можем переписать данный Гамильтониан в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{NH}} = & \frac{(\omega_0 + M + \omega_p)}{2} - \frac{(\gamma_{\text{rad}} + \gamma_p)}{2}i \\ & + \begin{pmatrix} \left(\frac{(\omega_0 + M - \omega_p)}{2} - \frac{(\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p)}{2}i \right) & q_1 \\ q_1 & - \left(\frac{(\omega_0 + M - \omega_p)}{2} - \frac{(\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p)}{2}i \right) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

его собственные числа

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{2,3} = & \frac{(\omega_0 + M + \omega_p)}{2} - \frac{(\gamma_{\text{rad}} + \gamma_p)}{2}i \pm \sqrt{q_1^2 + \left(\frac{(\omega_0 + M - \omega_p)}{2} - \frac{(\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p)}{2}i \right)^2} \\ = & \frac{(\omega_0 + M + \omega_p)}{2} - \frac{(\gamma_{\text{rad}} + \gamma_p)}{2}i \pm \sqrt{q_1^2 + \frac{1}{4}(\omega_0 + M - \omega_p - i(\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p))^2}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Разность частот между данными состояниями определяется выражением:

$$\tilde{\omega}_2 - \tilde{\omega}_3 = 2\sqrt{q_1^2 - \frac{(\gamma_p - \gamma_{\text{rad}} + i(M + \omega_0 - \omega_p))^2}{4}}.$$

Если $\omega_0 + M = \omega_p$, или при конечных Δk , где параболическая дисперсионная кривая фотонной моды пересекается с плоской фононной зоной

$$(\omega_0 + M) - \frac{1}{2}v_D^2\Delta k^2 = \omega_p, \quad (4.22)$$

расщепление Раби между двумя модами записывается как $\Omega_R = 2\sqrt{q_1^2 + \frac{1}{4}(-i(\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p))^2} = \sqrt{4q_1^2 - (\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p)^2}$. Это расщепление является действительным при: $2q_1 > |\gamma_{\text{rad}} - \gamma_p|$. Для спектрального разрешения указанных состояний величина расщепления Раби Ω_R должна превышать полную ширину на полувысоте поляритонного резонанса, то есть $\Omega_R > \gamma_{\text{rad}} + \gamma_p$. Комбинируя это условие с ранее полученным, мы приходим к критерию реализации режима сильной связи: $2q_1^2 > \gamma_{\text{rad}}^2 + \gamma_p^2$.

Варьируя толщину слоя hBN, мы извлекаем параметры гибридной системы с потерями. Как показано на рис. 62, полученные значения интересующих нас коэффициентов в диапазоне толщин от 5 нм до 35 нм соответствуют условиям сильной связи. В частности, расщепление Раби составляет приблизительно 9.2 мэВ для слоев hBN толщиной 15 нм. Данная тенденция сохраняется до достижения толщины ~ 40 нм, при которой hBN переходит в режим, поддерживающий распространение волноводных мод.

В рамках феноменологической модели, описывающей открытую поляритонную систему

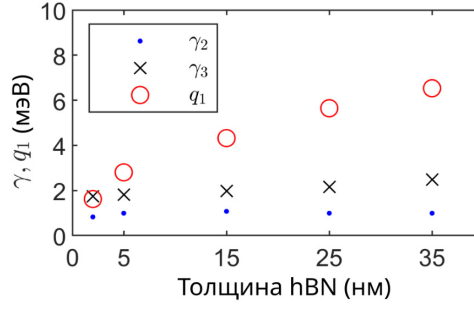


Рисунок 62: Коэффициент связи q_1 и потери $\gamma_{2,3}$ для двух низкочастотных фотонных мод с комплексными частотами $\tilde{\omega}_{2,3} \equiv \text{Re} \tilde{\omega}_{2,3} - i\gamma_{2,3}$.

в рамках теории связанных мод [105], только дипольная компонента фотонной волновой функции приводит к излучению в дальнюю зону. В базисе циркулярно поляризованных волн это соответствует добавлению диагональной матрицы $\text{diag}\{-i\gamma_{\text{рад}}, 0, -i\gamma_{\text{рад}}, 0\}$ к Гамильтониану (4.4).

В режиме сильной связи эти радиационные потери могут рассматриваться как возмущение и вводятся в диагональные элементы эффективного Гамильтониана (4.17) в подрешёточном базисе, аналогично омическим потерям для фононного резонанса.

$$\hat{H}_d^{\text{NH}} = \begin{pmatrix} -i\gamma_{\text{рад}}/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\gamma_{\text{рад}}/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\gamma_{\text{рад}}/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\gamma_{\text{рад}}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\gamma_{\text{p}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\gamma_{\text{p}} \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

При учёте таких потерь дополнительные поправки, возникающие при преобразованиях базиса Гамильтониана, оказываются величинами следующего порядка малости.

4.6 Локализованные собственные состояния

В данном разделе сначала анализируются свойства моды, локализованной на топологическом дефекте, а затем рассматриваются одномерные краевые состояния линейного дефекта как для чисто фотонных, так и для гибридных систем.

4.6.1 Моды топологического дефекта фотонной метаповерхности

Начнем с чисто фотонной системы и найдем локализованное собственное состояние Гамильтониана (4.13) на частоте ω_0 . Блоки Гамильтониана, соответствующие каждой из подрешеток, разделяются. Соответственно, ожидается, что моды будут локализованы только на одной из двух подрешеток.

Перепишем систему для каждой из областей в виде:

$$\Delta^* u_b + \tilde{\Lambda} (i\partial_x - \partial_y) v_b = 0, \quad (4.24a)$$

$$\Delta u_a + \tilde{\Lambda} (-i\partial_x + \partial_y) v_a = 0, \quad (4.24b)$$

$$\tilde{\Lambda} (-i\partial_x - \partial_y) u_b + \Delta v_b = 0, \quad (4.24c)$$

$$\tilde{\Lambda} (i\partial_x + \partial_y) u_a + \Delta^* v_a = 0, \quad (4.24d)$$

для вектора $(u_a, u_b, v_a, v_b)^T$.

Будем искать состояние, локализованное на подрешетке b , которое имеет вид

$$(u_a, u_b, v_a, v_b)^T \equiv (0, v, 0, u)^T$$

и удовлетворяет следующей системе уравнений:

$$\Delta u + \tilde{\Lambda} (-i\partial_x - \partial_y) v = 0, \quad (4.25a)$$

$$\tilde{\Lambda} (i\partial_x - \partial_y) u + \Delta^* v = 0. \quad (4.25b)$$

Предположим, что $v = u^*$:

$$-\Lambda e^{i\Theta(\theta)} u + \tilde{\Lambda} (-i\partial_x - \partial_y) u^* = 0, \quad (4.26a)$$

$$\tilde{\Lambda} (i\partial_x - \partial_y) u - \Lambda e^{-i\Theta(\theta)} u^* = 0. \quad (4.26b)$$

Используя подстановку $u = u_r + iu_i$, мы разделим вещественную и мнимую части

$$-\partial_y u_r - \partial_x u_i - L_r u_r - L_i u_i = 0, \quad (4.27a)$$

$$\partial_x u_r - \partial_y u_i + L_r u_i - L_i u_r = 0, \quad (4.27b)$$

где введено обозначение $L \equiv \Lambda e^{-i\Theta(\theta)} / \tilde{\Lambda}$.

Будем искать решение уравнений (4.27) в области, обозначенной как $\lambda = 2$, где $\Theta(\lambda = 2) = 2\pi$ или, что эквивалентно, $\Theta(\lambda = 2) = 0$, в виде: $[u_r, u_i] \propto [a_r, a_i] e^{\Lambda_e(y + \tan(\pi/6)x)}$, где $\Lambda_e > 0$. После подстановки данного выражения в систему (4.27a), мы решаем ее относительно масштаба локализации Λ_e , который оказывается равным $\left| \frac{\sqrt{3}\Lambda}{2\tilde{\Lambda}} \right|$. Отношение a_r и a_i определяется как $\frac{a_r}{a_i} = -2\text{sgn} \frac{\Lambda}{\tilde{\Lambda}} + \sqrt{3}$. Далее применяется аналогичная процедура для областей $\lambda = 1, 3$, где $\Theta(\lambda = 1) = 2\pi/3$, $\Theta(\lambda = 3) = 4\pi/3$. В этих двух секторах решение принимает вид $[u_r, u_i] \propto [a_r, a_i] e^{\Lambda_e(-y + \tan(\pi/6)x)}$ и $[u_r, u_i] \propto [a_r, a_i] e^{-\Lambda_e x}$ соответственно.

Итак, результирующий профиль моды топологического дефекта в рамках Дираковской

модели имеет вид:

$$u(x, y) \propto \left(\sqrt{3} - 2 \operatorname{sgn} \frac{\Lambda}{\Lambda} + i \right) \begin{cases} \exp \left(\left| \frac{\sqrt{3}\Lambda}{2\Lambda} \right| (y + \tan(\pi/6)x) \right), & y < -\tan(\pi/3)x \cap y < 0; \lambda = 2; \\ \exp \left(\left| \frac{\sqrt{3}\Lambda}{2\Lambda} \right| (-y + \tan(\pi/6)x) \right), & y > \tan(\pi/3)x \cap y > 0; \lambda = 1; \\ \exp \left(-\left| \frac{\Lambda}{\Lambda} \right| x \right), & y < \tan(\pi/3)x \cap y > -\tan(\pi/3)x, \lambda = 3, \end{cases} \quad (4.28)$$

где произвольная константа может быть определена посредством надлежащей нормировки решения. Рис. 63 иллюстрирует пространственную структуру данного распределения.

Если разность фаз между соседними секторами имеет противоположный знак, то есть $2\pi/3$ вместо $(-2\pi/3)$, то данный случай описывает решетку с расширенной объемной элементарной ячейкой, $C > 1$, как показано на рис. 64. Для получения решения, расположенного в узлах нечетной (а) подрешетки вместо четной (b), требуется произвести замену секторов $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$ (что соответствует $y \rightarrow -y$) в соответствии с уравнением (4.24).

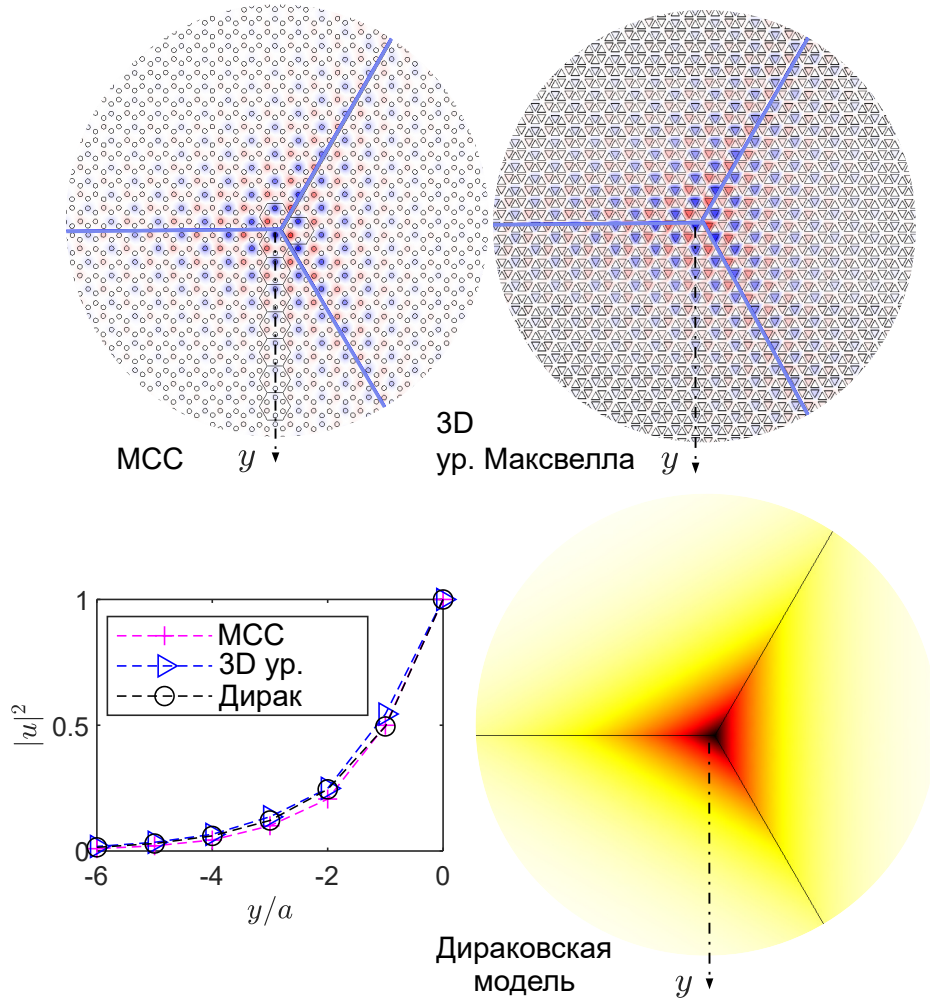


Рисунок 63: Распределение поля моды топологического дефекта в рамках метода сильной связи (МСС), полноволнового трехмерного моделирования метаповерхности (3D, показана H_z компонента) и континуальной Дираковской модели. Инкременты затухания вдоль оси y согласуются во всех трех моделях, что подтверждается графиком функции $|u|^2$.

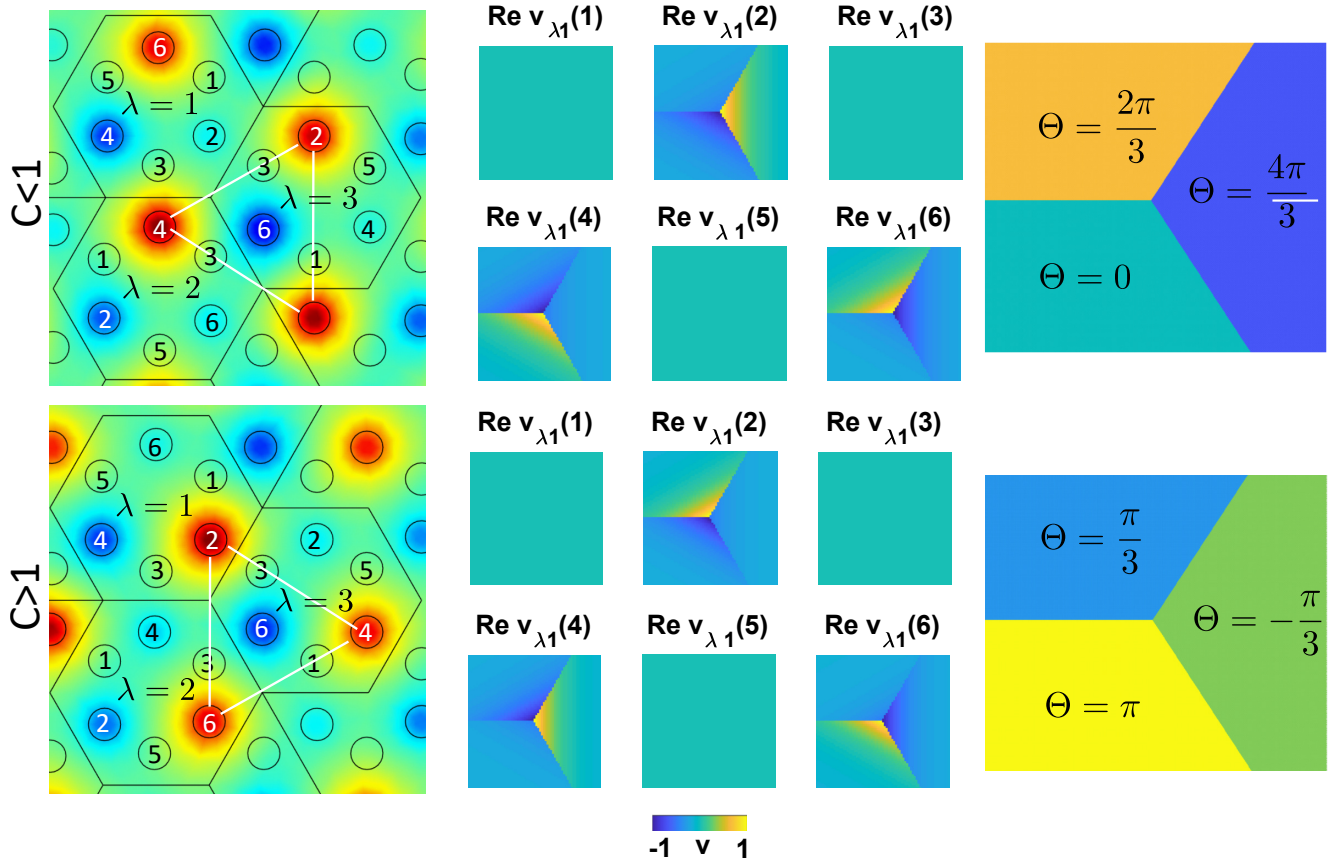


Рисунок 64: Сравнение профилей поля в модели сильной связи (левый столбец) и континуальной Дираковской модели (панели посередине). Профиль поля в МСС описывается волновой функцией, локализованной на узлах решетки. Нумерация элементов в гексагональных элементарных ячейках приведена для каждой из трех областей. Распределение, полученное путем преобразования аналитического решения (4.28), выведенного в рамках Дираковской модели, в базис реального пространства $v_{\lambda 1}$, является чисто действительным. Знак и амплитуда распределения поля на подрешетке в четных узлах согласуются с профилем МСС. В крайнем правом столбце отображены значения Θ .

4.6.2 Моды топологического дефекта гибридной метаповерхности

Для получения профиля моды топологического дефекта в случае взаимодействия фотонов и фононов в нашей задаче нужно проанализировать систему, описываемую уравнением (4.18), при $q_2 = 0$ и $u_a = v_a = 0$:

$$\Delta^* u_b + \tilde{\Lambda} (i\partial_x - \partial_y) v_b - \Delta_1 p_2 = 0, \quad (4.29a)$$

$$\Delta_1^* p_2 = (\omega_d - \omega_0) u_b, \quad (4.29b)$$

$$\tilde{\Lambda} (-i\partial_x - \partial_y) u_b + \Delta v_b - \Delta_1^* p_1 = 0, \quad (4.29c)$$

$$\Delta_1 p_1 = (\omega_d - \omega_0) v_b, \quad (4.29d)$$

$$\Delta_1^* v_b + \omega_p p_1 = \omega_d p_1, \quad (4.29e)$$

$$\Delta_1 u_b + \omega_p p_2 = \omega_d p_2, \quad (4.29f)$$

где искомая частота обозначена как ω_d . Из уравнений (4.29b) и (4.29d) следует $u_b = \Delta_1^* p_2 / (\omega_d - \omega_0)$ и $v_b = \Delta_1 p_1 / (\omega_d - \omega_0)$, и подставляя эти выражения в уравнение (4.29e), мы получаем следующее соотношение:

$$-\frac{q_1^2}{2} - \omega_d(\omega_p + \omega_0) + \omega_d^2 + \omega_0\omega_p = 0, \quad (4.30)$$

откуда находим частоту искомой моды:

$$\omega_d = \frac{(\omega_p + \omega_0) \pm \sqrt{(\omega_p + \omega_0)^2 - 4(-q_1^2/2 + \omega_0\omega_p)}}{2} = \frac{(\omega_p + \omega_0)}{2} \pm \frac{\sqrt{(\omega_p - \omega_0)^2 + 2q_1^2}}{2}, \quad (4.31)$$

где выбран положительный знак. Собственные частоты объемных мод гибридной системы при $q_2 = 0$ и $k = 0$ аналитически находятся путем вычисления собственных значений Гамильтониана трехуровневой модели ВНЗ:

$$\omega_1 = -M + \omega_0, \quad (4.32a)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(M + \omega_0 + \omega_p + \sqrt{(M + \omega_0 - \omega_p)^2 + 4q_1^2} \right), \quad (4.32b)$$

$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(M + \omega_0 + \omega_p - \sqrt{(M + \omega_0 - \omega_p)^2 + 4q_1^2} \right). \quad (4.32c)$$

Центр щели между двумя верхними объемными зонами имеет частоты:

$$\frac{\omega_1 + \omega_2}{2} = \frac{1}{4} \left(-M + 3\omega_0 + \omega_p + \sqrt{(M + \omega_0 - \omega_p)^2 + 4q_1^2} \right), \quad (4.33)$$

что позволяет предположить, что ω_d , рассчитанная по выражению (4.31), близка к середине запрещенной зоны между двумя верхними объемными ветками трехуровневой системы.

Из уравнений (4.29b) и (4.29d) следует $p_2 = u_b(\omega_d - \omega_0)/\Delta_1^*$ и $p_1 = v_b(\omega_d - \omega_0)/\Delta_1$. Подставим эти выражения в уравнения (4.29a) и (4.29c):

$$\Delta^* u_b + \tilde{\Lambda} (i\partial_x - \partial_y) v_b - \Delta_1 u_b(\omega_d - \omega_0)/\Delta_1^* = 0, \quad (4.34a)$$

$$\tilde{\Lambda} (-i\partial_x - \partial_y) u_b + \Delta v_b - \Delta_1^* v_b(\omega_d - \omega_0)/\Delta_1 = 0. \quad (4.34b)$$

Для исследуемой $\Theta(\theta)$: $\Delta_1/\Delta_1^* = e^{-i\Theta(\theta)}$ и, соответственно, $\Delta_1^*/\Delta_1 = e^{i\Theta(\theta)}$. Следовательно, при сопоставлении с предыдущим, чисто фотонным решением, следует заменить

$$\Delta \rightarrow \Delta - e^{i\Theta(\theta)}(\omega_d - \omega_0),$$

или, что эквивалентно, $\Lambda \rightarrow \Lambda + (\omega_d - \omega_0)$. Из уравнений (4.29b) и (4.29d) получаем соотношение между фотонной и фононной компонентами:

$$\left| \frac{u_b}{p_2} \right| = \left| \frac{v_b}{p_1} \right| = \frac{q_1}{\sqrt{2}(\omega_d - \omega_0)}. \quad (4.35)$$

Отметим, что введение модуляции в коэффициент связи, Δ_1 , между секторами является условием для существования моды гибридного топологического дефекта, при котором фотонная компонента остается расположенной на одной подрешетке, по аналогии с связанным состоянием с нулевой энергией в модели Джакива-Росси (Jackiw-Rossi).

Для модулированного массового члена $\Delta = -\Lambda e^{i\Theta(\theta)}$ в случае выбора тривиальной элементарной ячейки в объеме, где $\Lambda + t = -t_1$, $t = -t_2$, параметр Λ отрицателен ($\Lambda < 0$). Поскольку $\omega_d > \omega_0$ и $|\Lambda + (\omega_d - \omega_0)| < |\Lambda|$, масштаб локализации моды топологического дефекта в случае гибридной системы с фононами $L_d \propto 1/|\Lambda|$ увеличивается по сравнению с чисто фотонным случаем. Это связано с тем, что ширина запрещенной зоны в гибридной системе уменьшается.

Согласно уравнениям (4.31) и (4.32), в режиме сильной связи дипольная ветка смещается от начального положения при $(\omega_0 + M)$ из-за взаимодействия ($\propto \sqrt{2}|\Delta_1|$), формируя верхнюю поляритонную ветвь. При этом сдвиг моды топологического дефекта от середины запрещенной зоны ω_0 определяется меньшей константой связи $\propto |\Delta_1|$ в эффективной двухрезонансной модели, включающей фотонную моду и фононный резонанс на частоте ω_p .

4.6.3 Топологические характеристики

Для доказательства топологической природы исследуемой нами моды мы используем формализм Ванье аналогично работе [168]. Ключевым аспектом является связь между пространственным положением центров Ванье и квантованием топологического заряда.

Ванье центры (Wannier centers) представляют собой фундаментальную концепцию в физике твердого тела. В идеальной периодической структуре, согласно теореме Блоха, распределения полей описываются Блоховскими волнами. Но для многих задач более полезным оказывается описание мод в терминах локализованных функций, известных как функции Ванье (Wannier functions). Ванье функции образуют полный ортонормированный базис, который эквивалентен базису Блоховских волн (и по сути находится как Фурье-образы Блоховских функций). Ванье центр каждой функции характеризует положение "центра масс" распределения поля. В случае, когда система обладает периодичностью, Ванье центры могут быть расположены в центре элементов, составляющих решетку, или между ними, в зависимости от зонной структуры. В системах, нарушающих периодическую симметрию, например, в присутствии дефектов или на границах раздела, Ванье центры могут смещаться от идеальных положений, отражая изменение распределения полей. Именно смещение Ванье центров позволяет анализировать и визуализировать пространственное распределение "заряда" и его квантование. Заряд вводится для электронной плотности, но аналогичная величина может быть формально посчитана и для фотонной системы. Квантованные значения "заряда" – признак топологической природы исследуемых мод.

Для демонстрации квантования заряда, связанного с топологическим дефектом, были рассчитаны Ванье центры для двух различных конфигураций рассматриваемой системы, характеризующихся параметром кластеризации C . В первом случае ($C > 1$), Ванье центры визуализируются слева, а во втором случае ($C < 1$) – справа на рис. 65. На этих рисунках

каждый кружок соответствует единичному заряду.

Для решения задачи был проведен анализ, основанный на численном моделировании. В частности, была построена зависимость интенсивности поля в моде топологического дефекта (в рамках метода сильной связи) от координат для больших значений коэффициента кластеризации. Этот анализ позволил выделить области, в которых сосредоточена энергия электромагнитного поля, представленные в виде светящихся групп элементов (зеленые ломанные линии на рис. 65). Далее был произведен расчет заряда, локализованного вблизи этих групп, посредством суммирования вкладов от Ванье центров, соответствующих данным областям. Эти Ванье центры были выделены синим цветом.

Для $C = 0.7$ (слабая кластеризация) было получено следующее:

$$\text{Модуль заряда} = \left| \frac{3}{3} + \frac{3}{3} + \frac{3/3}{2} \right| = \frac{1}{2}. \quad (4.36)$$

Для $C = 1.2$ (сильная кластеризация):

$$\text{Модуль заряда} = \left| \frac{1}{2} + 1 + 1 + 1 + \frac{1}{2} + 1 \right| = \frac{1}{2}. \quad (4.37)$$

Таким образом, предложенный метод позволил подтвердить, что мода топологического дефекта характеризуется квантованным зарядом, равным $1/2$, это и доказывает ее топологическую природу.

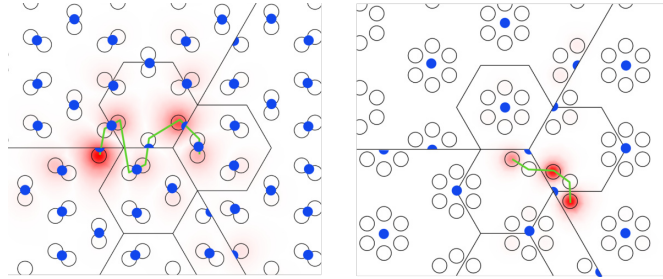


Рисунок 65: Центры Ванье (синие кружки) для топологического дефекта с $C > 1$ (слева, каждый синий кружок соответствует заряду 1) и $C < 1$ (справа, каждый кружок соответствует заряду 3). Чтобы визуализировать заряд, связанный с распределением поля, мы построили профили мод в режиме сильной кластеризации (распределение интенсивности показано красным). Поле преимущественно локализовано вдоль зигзагообразных линий, схематично обозначенных зелёным, на одной из подрешёток. Заряд учитывается mod 1 вблизи этих линий. В обоих случаях — $C > 1$, $C < 1$ — он равен $1/2$.

4.6.4 Фотонные краевые состояния

Целью данного подраздела является изучение краевых состояний, локализованных на линейном дефекте в суперячейке (рис. 58(b), справа).

Мы рассматриваем область, периодичную вдоль оси x и конечную вдоль оси y . Граница раздела расположена на линии $y = 0$ и формально характеризуется изменением фазы

параметра Δ . Это изменение фазы, в свою очередь, соответствует сшиванию областей с различными значениями λ .

Начнем с фотонной системы, не взаимодействующей с фононами, то есть $q_{1,2} = 0$. В частности, рассмотрим границу раздела вдоль линии $y = 0$ между областями с $\lambda = 1$ ($y > 0$) и $\lambda = 2$ ($y < 0$). Будем искать моды, распространяющиеся вдоль границы раздела $\propto e^{iq_x x}$ с гармонической временной зависимостью $\propto e^{-i\omega t}$:

$$\omega \begin{pmatrix} u_a(y) \\ u_b(y) \\ v_a(y) \\ v_b(y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta^*(y) & 0 & \tilde{\Lambda}(-q_x - \partial_y) \\ \Delta(y) & 0 & \tilde{\Lambda}(q_x + \partial_y) & 0 \\ 0 & \tilde{\Lambda}(q_x - \partial_y) & 0 & \Delta(y) \\ \tilde{\Lambda}(-q_x + \partial_y) & 0 & \Delta^*(y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_a(y) \\ u_b(y) \\ v_a(y) \\ v_b(y) \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

Эта задача может быть решена численно с использованием соответствующей дискретизации интервала y (см. Приложение D.4). Для того, чтобы найти аналитическое выражение дисперсии краевых состояний и масштаба их локализации, мы будем искать решение в виде $e^{-\kappa_y |y|}$ с $\kappa_y > 0$. В частности, для $y < 0$ подставим $e^{\kappa_y y}$ в систему (4.38) и получим Гамильтониан в виде:

$$\hat{H}_{\text{e.s.}}(y < 0) = \begin{pmatrix} -\omega_{\text{e.s.}} & -\Lambda & 0 & \tilde{\Lambda}(-q_x - \kappa_y) \\ -\Lambda & -\omega_{\text{e.s.}} & \tilde{\Lambda}(q_x + \kappa_y) & 0 \\ 0 & \tilde{\Lambda}(q_x - \kappa_y) & -\omega_{\text{e.s.}} & -\Lambda \\ \tilde{\Lambda}(-q_x + \kappa_y) & 0 & -\Lambda & -\omega_{\text{e.s.}} \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

в то время как для $y > 0$ мы подставляем $e^{-\kappa_y y}$ и получаем

$$\hat{H}_{\text{e.s.}}(y > 0) = \begin{pmatrix} -\omega_{\text{e.s.}} & -\Lambda e^{-2\pi i/3} & 0 & \tilde{\Lambda}(-q_x + \kappa_y) \\ -\Lambda e^{2\pi i/3} & -\omega_{\text{e.s.}} & \tilde{\Lambda}(q_x - \kappa_y) & 0 \\ 0 & \tilde{\Lambda}(q_x + \kappa_y) & -\omega_{\text{e.s.}} & -\Lambda e^{2\pi i/3} \\ \tilde{\Lambda}(-q_x - \kappa_y) & 0 & -\Lambda e^{-2\pi i/3} & -\omega_{\text{e.s.}} \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Непрерывность функций на границе при $y = 0$ подразумевает, что

$$(u_a(y), u_b(y), v_a(y), v_b(y))_{y \rightarrow -0}^T = (u_a(y), u_b(y), v_a(y), v_b(y))_{y \rightarrow +0}^T.$$

Следовательно, мы можем вычислить частоты краевых состояний из условия $\det(\hat{H}_{\text{e.s.}}(y < 0) + \hat{H}_{\text{e.s.}}(y > 0)) = 0$, которое приводит к дисперсионному соотношению:

$$\omega_{\text{e.s.}}(q_x) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Lambda^2 + 4q_x^2 \tilde{\Lambda}^2}, \quad (4.41)$$

также мы находим масштаб локализации $\det(\hat{H}_{\text{e.s.}}(y < 0) - \hat{H}_{\text{e.s.}}(y > 0)) = 0$,

$$\kappa_y = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{\Lambda}{\tilde{\Lambda}} \right|. \quad (4.42)$$

Данное выражение, не зависящее явно от q_x , связано с масштабом локализации моды топологического дефекта. Это указывает на то, что мода топологического дефекта формируется из одномерных краевых состояний, затухающих вдоль трёх пересекающихся границ раздела.

Результаты расчетов изображены на рис. 66.

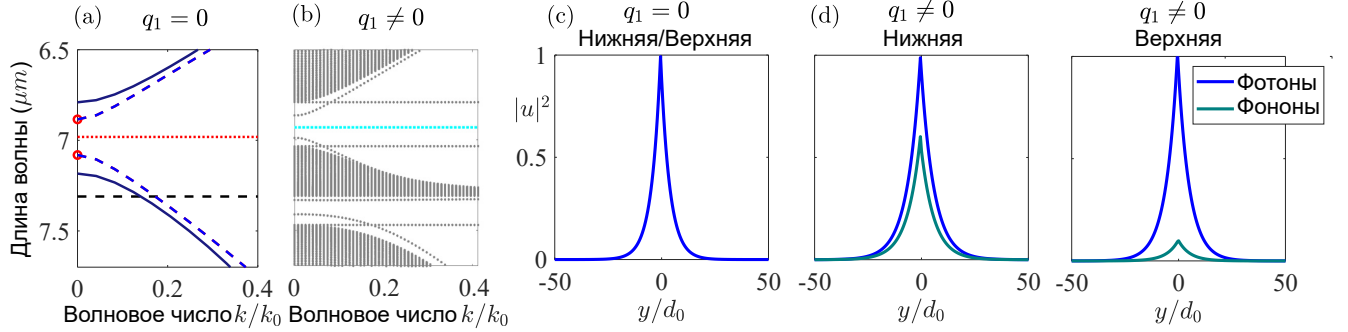


Рисунок 66: Зонная структура суперячейки гибридной системы (как на рис. 58(b), справа), рассчитанная в рамках эффективного континуального Дираковского описания (4.18): (a) — чисто фотонная система ($q_1 = 0$) и (b) — гибридная система ($q_1 \neq 0$). На (a) сплошные синие кривые показывают объемную фотонную дисперсию, полученную из 2D модели ВНЗ, $\omega(k) = \omega_0 \pm \sqrt{(M - \beta k^2)^2 + v_D^2 k^2}$. Красные точки отмечают численно полученные длины волн краевых состояний линейного дефекта при $k = 0$. Черная пунктирная линия показывает фоновый уровень ω_p . Синие пунктирные линии — это дисперсионные кривые краевых состояний $\omega_{e.s.}(q_1 = 0) = \omega_0 \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Lambda^2 + 4k^2 \tilde{\Lambda}^2}$. Красная пунктирная линия — частота в середине запрещенной зоны ω_0 при $q_1 = 0$. На (c) изображены поперечные профили фотонных краевых мод $|u_a|^2 = |u_b|^2 = |v_a|^2 = |v_b|^2$. (b): численный спектр суперячейки с линейным дефектом при $q_1 \neq 0$ (серые точки), показывающий как объемные, так и краевые состояния. Голубая пунктирная линия — ω_d , заданная выражением (4.31). На (d) мы строим соответствующие профили краевых мод при $k = 0$. Фотонная компонента $|u_a|^2 = |u_b|^2 = |v_a|^2 = |v_b|^2$ изображена синим цветом, а фононная $|p_1|^2 = |p_2|^2$ — зеленым. Параметры как на рис. 61.

4.6.5 Гибридные краевые состояния

Далее мы вводим фоновые степени свободы в Гамильтониан и рассматриваем систему, заданную уравнением (4.18). Мы снова решаем стационарную задачу для данной системы численно, применяя аналогичную схему дискретизации для корректного вычисления производных, как и для чисто фотонной системы. Рассчитанная зонная структура показана на рис. 66, где мы отображаем интенсивности фотонных и фоновых компонент.

Для фотонных компонент на границе раздела накладываются условия непрерывности. В отличие от моды точечного дефекта, все компоненты u_a , u_b , v_a , v_b краевой моды линейного дефекта ненулевые и характеризуются равными интенсивностями (рис. 66). Они имеют как действительную, так и мнимые части и симметричны относительно границы раздела. Фононная компонента моды верхней ветви является симметричной функцией относительно границы раздела, тогда как для нижней ветви она антисимметрична. Кроме того, краевая мода верхней ветви менее фононная, с $\text{Re } p_1 = \text{Im } p_2 = 0$ и $\text{Re } p_2 = \text{Im } p_1$. С другой стороны, нижняя

краевая мода демонстрирует более выраженную фононную компоненту, с $\text{Re } p_1 = \text{Im } p_2 = 0$ и $\text{Re } p_2 = -\text{Im } p_1$.

4.7 Поляризационные свойства

В данном разделе мы покажем, что поляризация дальнего поля моды топологического дефекта является спиральной. Ключевым аспектом является взаимная киральность направления вращения спирали для дефекта, образованного соединением доменов с тривиальной и нетривиальной объемной элементарной ячейкой.

4.7.1 Поляризация в ближнем поле

Мы начнем с исследования ближнего поля, и в данном разделе мы докажем, что мода топологического дефекта характеризуется спиральной поляризацией.

Под спиральной поляризацией мы понимаем следующее распределение векторного поля:

$$2|S\rangle = e^{i\varphi_0} (e^{i\varphi}|LCP\rangle \pm ie^{-i\varphi}|RCP\rangle) \equiv a_{LCP}|LCP\rangle + a_{RCP}|RCP\rangle, \quad (4.43)$$

где $|LCP\rangle$ и $|RCP\rangle$ обозначают левую и правую круговые поляризации, соответственно. Верхний/нижний знак соответствует вращению вектора поля в противоположных направлениях.

Мы докажем, что выражение (4.43) справедливо для найденной нами моды топологического дефекта. Для этого мы обратимся к результатам, полученным в методе сильной связи. Мы анализируем распределение полей в ближайших к началу координат элементах. В общей сложности мы рассматриваем 18 чисел ($u_{1,2,3}^c$), взятых из 3 гексагональных кластеров по 6 элементов в каждом из доменов. Мы применяем преобразование $\tilde{u}_{1,2,3}^c = U_r U_e^{-1} U_{\alpha=1,2,3}^{-1} u_{1,2,3}^c$ к спин-базисному представлению и выбираем компоненты $\tilde{u}_{1,2,3}^c(2) \equiv a_{LCP}$, $\tilde{u}_{1,2,3}^c(4) \equiv a_{RCP}$, соответствующие циркулярно поляризованным дипольным полям. Затем мы строим амплитуду и фазу этих двух коэффициентов, $a_{LCP} = |a_{LCP}|e^{i\varphi_{LCP}}$, $a_{RCP} = |a_{RCP}|e^{i\varphi_{RCP}}$, по трем доменам, чтобы показать, что уравнение (4.43) действительно применимо к нашей моде, демонстрируя следующие характеристики:

1. Модули примерно равны в каждом из трех доменов, $|a_{RCP}| \approx |a_{LCP}|$.
2. Разность фаз между коэффициентами в соседних доменах составляет $2\pi/3$ для $|LCP\rangle$ и $(-2\pi/3)$ для $|RCP\rangle$.
3. Разность фаз между $|RCP\rangle$ и $|LCP\rangle$ равна

$$\varphi_{LCP} - \varphi_{RCP} = \mp \frac{\pi}{2} + 2\varphi(\lambda), \quad (4.44)$$

где $\varphi(\lambda)$ - полярный угол центров элементарных ячеек, ближайших к центру координат, определяемый как $[\varphi(1), \varphi(2), \varphi(3)] = [2\pi/3, 4\pi/3, 2\pi]$. Эти три свойства амплитудного и фазового распределений последовательно отображены на рис. 67.

Таким образом, мы показали, что в ближнем поле мода имеет спиральную поляризацию, причем направление вращения определяется типом объемной элементарной ячейки

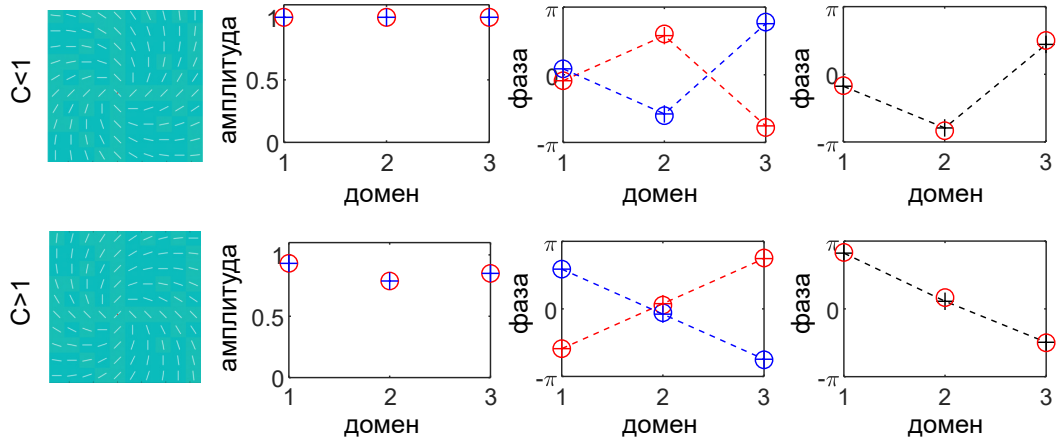


Рисунок 67: Доказательство вихревого характера поляризации моды топологического дефекта на основе расчёта её пространственной структуры в ближнем поле в рамках метода сильной связи. Верхний ряд соответствует сжатой решётке (тривиальная топология объемной элементарной ячейки, $C < 1$), нижний ряд — расширенной решётке (нетривиальная топология объемной элементарной ячейки, $C > 1$). Первый столбец показывает поляризацию векторного поля $\mathbf{E}$, компоненты которого определены следующим образом: $E_x = A_+ + A_-$, $E_y = i(A_+ - A_-)$, где $A_+ = \mp i e^{-i\varphi}$, $A_- = e^{i\varphi}$, что соответствует схематичному изображению спиралей. Верхний/нижний знак в выражении для A_+ соответствует верхнему/нижнему изображению. Второй столбец: амплитуда коэффициентов $|a_{\text{LCP}}|$ (красные кружки) и $|a_{\text{RCP}}|$ (синие крестики). Третий столбец: фазы φ_{LCP} (красные кружки), φ_{RCP} (синие кружки), $\varphi_{\text{LCP}}(\lambda = 1) + \frac{2\pi}{3}(\lambda - 1)$ (красные крестики), $\varphi_{\text{RCP}}(\lambda = 1) - \frac{2\pi}{3}(\lambda - 1)$ (синие крестики). Четвёртый столбец: разность фаз $\varphi_{\text{LCP}} - \varphi_{\text{RCP}}$ (чёрные крестики), $2\varphi \pm \frac{\pi}{2}$ (красные кружки).

(расширенная/сжатая).

4.7.2 Характеристики дальнего поля

Для начала мы обратились к результатам полномасштабного трёхмерного моделирования. Используя численно полученное распределение поля, мы восстановили диаграмму направленности излучения моды в дальней зоне, характеризующуюся наличием сингулярности в нормальном направлении (результаты представлены на рис. 68, левый столбец).

Далее мы покажем метод построения диаграммы направленности непосредственно из аналитического решения уравнения (4.28). В настоящем исследовании мы фокусируемся исключительно на фотонной степени свободы.

Так как вклад в излучение в дальнее поле вносит только дипольная компонента (квадрупольная не вносит вклад в излучаемое поле), мы снова перейдем в базис циркулярно-поляризованных дипольных и квадрупольных мод $\mathbf{v}_{cp}$.

Мы знаем явный вид пространственного распределения u (выражение (4.28)) Полный шестикомпонентный вектор в Дираковском базисе определен как $f_d = (0, 0, 0, u^*, 0, u)^T$. Далее мы осуществляем несколько последовательных трансформаций:

1. $f_\lambda = \hat{U} f_d$;
2. $f_{\lambda 1} = \hat{U}_{\alpha[2,3]}^{-1} f_\lambda$, где мы использовали $\hat{U}_{\alpha 2}$ или $\hat{U}_{\alpha 3}$ в зависимости от области;

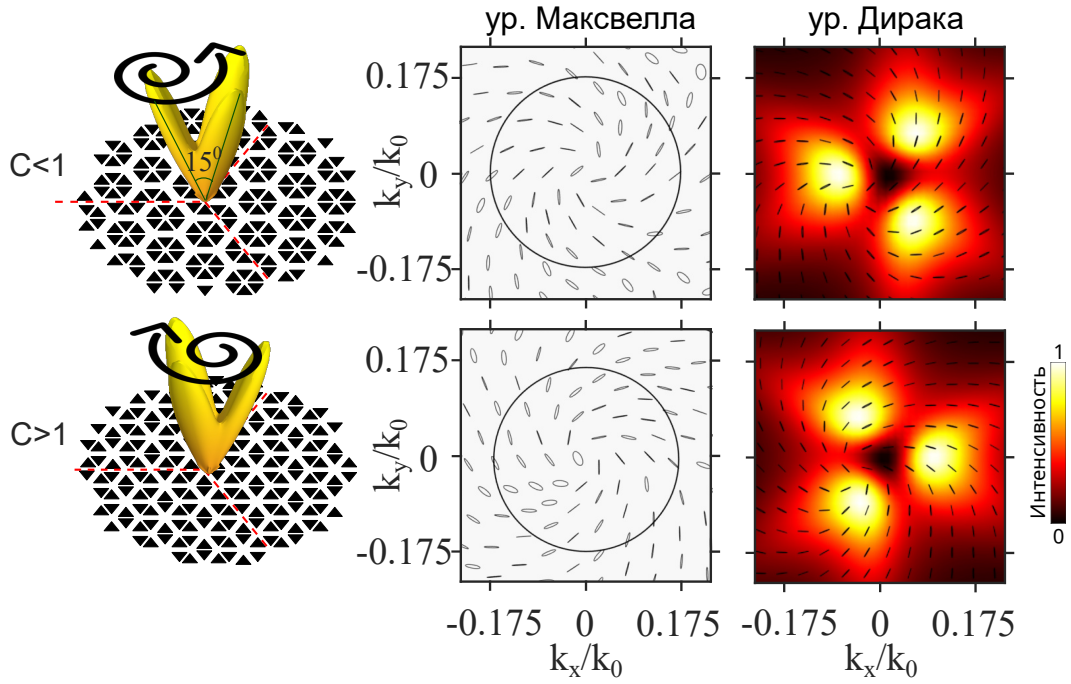


Рисунок 68: Дальнее поле моды топологического дефекта. Верхний ряд соответствует тривиальной решетке, а нижний – нетривиальной. Первый и второй столбцы слева – результаты, полученные из трехмерного моделирования в рамках уравнений Максвелла. Правый столбец – из решения уравнения (68).

$$3. f_{v1} = (\hat{U}_k \hat{U}_e)^{-1} f_{\lambda 1};$$

$$4. f_{cp} = \hat{U}_r f_{v1}.$$

В результате этих преобразований мы находим шестикомпонентный вектор $f_{cp} = \varphi(x, y, n)$, где $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ – номер компоненты. Вторая и четвертая компонента – это дипольные составляющие. Итак, искомая излучаемая часть электрического поля $\mathbf{E}$ представляет собой

$$E_x = \varphi(x, y, 4) + \varphi(x, y, 2), \quad (4.45a)$$

$$E_y = i(\varphi(x, y, 4) - \varphi(x, y, 2)). \quad (4.45b)$$

Чтобы визуализировать поляризацию, мы рассчитали параметры Стокса, определенные как:

$$S_0 = |c_x|^2 + |c_y|^2, \quad (4.46a)$$

$$S_1 = |c_x|^2 - |c_y|^2 \equiv S_0 \cos 2\chi \cos 2\theta, \quad (4.46b)$$

$$S_2 = 2 \operatorname{Im}(c_x^* c_y) \equiv S_0 \cos 2\chi \sin 2\theta, \quad (4.46c)$$

$$S_3 = 2 \operatorname{Re}(c_x^* c_y) \equiv S_0 \sin 2\chi, \quad (4.46d)$$

здесь $c_{x,y} = \mathcal{F}[E_{x,y}]$ – Фурье-образы. Затем мы можем построить поляризационные эллипсы, длина полуосей которых – $\sqrt{S_0} \sin \chi$ и $\sqrt{S_0} \cos \chi$. Направление главной оси определяется поворотом на угол θ . Поляризация мод топологического дефекта, полученная таким путем, построена на рис. 68 в правом столбце.

4.8 Гетерогенные доменные стенки

Мы рассмотрим гетерогенные интерфейсы, включающие линейные дефекты и/или топологические доменные стенки между доменами сжатых и расширенных гексамеров с зигзагообразными и *armchair* границами.

Для численных расчетов зонных структур рассматриваемых электродинамических систем мы перешли к двумерным (2D) расчетам с введением эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\text{эфф}} = 6.86$. При таком значении диэлектрической проницаемости зонная структура объемной элементарной ячейки в 2D полностью соответствует результатам полного волнового трёхмерного моделирования.

В этом моделировании были применены периодические Блоховские граничные условия в вертикальном направлении (как на рис. 69) с волновым числом k . Мы находили собственные моды стационарных уравнений Максвелла.

Сначала мы изучаем изолированные интерфейсы, как показано на рис. 69. Моды линейного дефекта были подробно рассмотрены нами в предыдущих главах – на рисунке показана зонная структура суперячейки. В запрещенной зоне для объемных состояний возникают краевые ветки, между которыми открывается щель. Для границы *armchair* в спектре краевых мод тоже есть щель, но уже меньшей ширины. Наконец, зигзагообразная доменная стенка характеризуется бесщелевыми краевыми ветками с линейной дисперсией.

Если система включает два интерфейса, а расстояние между ними относительно мало, краевые моды гибридизуются, и в результате их дисперсионные кривые заметно смещаются от середины запрещенной зоны ближе к объемным зонам. При больших расстояниях взаимодействие между модами на двух интерфейсах ослабевает, так что дисперсионные диаграммы двух слабо связанных интерфейсов почти не изменяются по сравнению с изолированными.

4.8.1 Возбуждение угловых состояний

В данном разделе мы продемонстрируем способ возбуждения предложенных угловых мод. Для этого мы введем зигзагообразную доменную стенку между тривиальным и нетривиальным доменом, тем самым будем рассматривать гетерогенный интерфейс, как в предыдущей главе. Расстояние между зигзагообразной доменной стенкой и линейным дефектом было выбрано достаточно большим, чтобы избежать сильной гибридизации краевых мод обоих интерфейсов (что соответствует гетерогенной стенке 3 на рис. 69). Получившаяся геометрия имеет трапецевидную форму, как показано на рис. 70. В вершинах трапеции расположены точечные дефекты, являющиеся киральными партнерами друг друга (что схематично изображено спиралями с различным направлением кручения). На зигзагообразной доменной стенке располагается точечный источник. Направление распространения краевого возбуждения (вдоль оси x) зависит от направления вращения круговой поляризации в источнике, так как соответствующие краевые моды зигзагообразной доменной стенки являются спин-поляризованными. При возбуждении на резонансной частоте точечного дефекта направленное распространение краевой волны вдоль зигзагообразной доменной стенки приводит к возбуждению моды топологического дефекта, локализованной в одном из Y-соединений, что

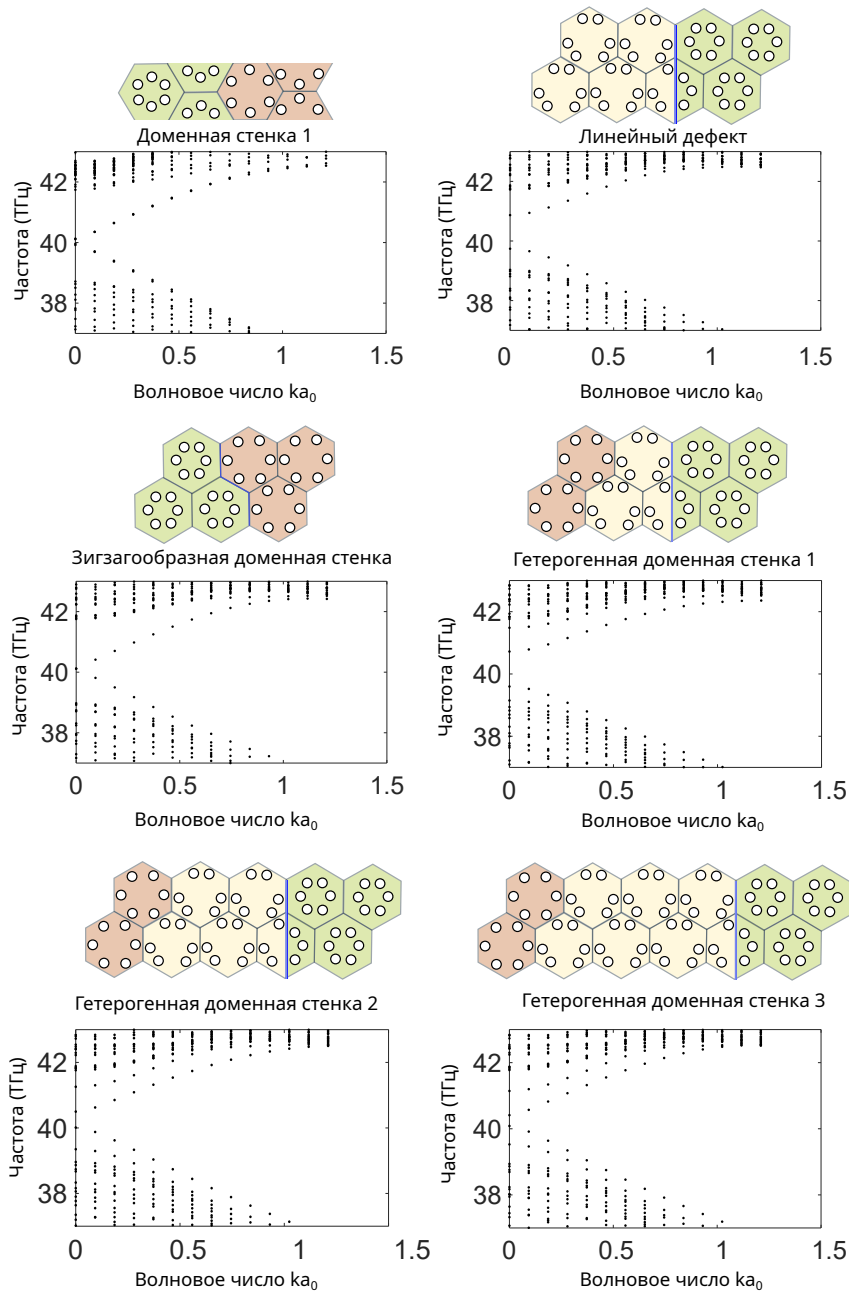


Рисунок 69: Зонные структуры (черные точки) суперячеек, включающих различные интерфейсы. Соответствующие геометрии вблизи интерфейсов показаны на вставках. Собственные частоты рассчитаны для 2D фотонных кристаллов с треугольными отверстиями.

отражено в результатах моделирования, представленных на рис. 70.

Моделирование проводилось для чисто фотонной системы в двумерной геометрии с эффективными параметрами, как в предыдущем разделе. Но аналогичные результаты получаются и в гибридных платформах [A10].

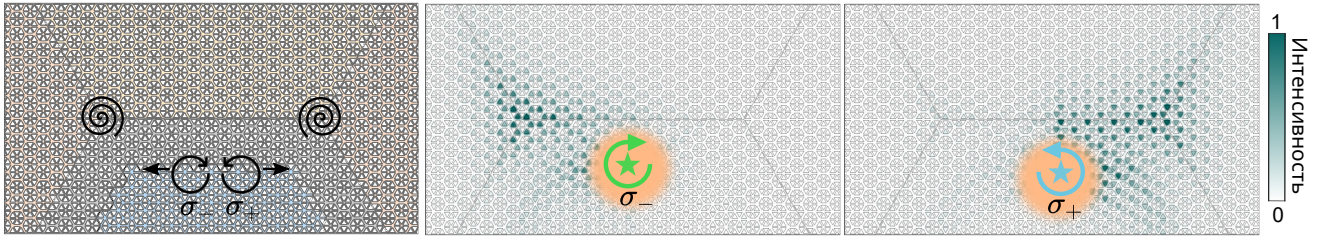


Рисунок 70: Слева: вид сверху трапециевидной геометрии, включающей гетерогенный интерфейс: линейный дефект и зигзагообразную доменную стенку. Области сжатых (серый и желтый, $C = 0.95$) и расширенных (синий, $C = 1.05$) гексамеров выделены цветом. Круговые стрелки иллюстрируют источники с круговой поляризацией, расположенные на доменной стенке, которые возбуждают краевые моды (визуализируются прямыми стрелками), распространяющиеся в противоположных направлениях в зависимости от вида возбуждения. Посередине и справа: результаты численного моделирования при возбуждении источником с правой (левой) круговой поляризацией, обозначенным как $\sigma_{\pm}$, соответственно, на резонансной частоте точечного дефекта. Показан квадрат модуля компоненты магнитного поля H_z .

4.9 Выводы по главе

В данной главе нами были изучены связанные поляритонные состояния, локализованные вблизи топологического дефекта в Кекуле-структурированной кремниевой метаповерхности, покрытой тонким слоем гексагонального нитрида бора. В ходе моделирования собственных мод такой гибридной системы в рамках уравнений Максвелла найдено спектрально изолированное угловое состояние, интенсивность поля в котором спадает с увеличением расстояния от топологического дефекта. Диаграмма направленности излучения данной моды в дальней зоне имеет трёхлепестковую форму и характеризуется наличием поляризационной сингулярности в нормальном направлении. Помимо этого, излучение обладает нетривиальной спиральной поляризационной структурой, направление кручения в которой определяется коэффициентом Кекуле кластеризации.

Предложена эффективная Дираковская модель, позволяющая описать пространственное распределение и поляризацию моды топологического дефекта как в ближнем, так и в дальнем поле. Введение Кукеле-модуляции в рамках этой модели математически эквивалентно появлению параметра порядка, подобного тому, что встречается в теории сверхпроводимости, и который приводит к формированию энергетической щели в спектре. Данная модель является общей для множества физических систем, что подтверждает универсальность подхода и применимость его к широкому классу топологических систем.

Полученные результаты имеют не только важное фундаментальное значение и позволяют глубже понять механизмы формирования топологических состояний высокого порядка в гибридных системах, включающих фотонные и фононные компоненты, но и значительный прикладной потенциал. Предложенная метаповерхность позволяет управлять светом на субволновых масштабах, включая резонансное удержание, спин-селективное возбуждение и направленное излучение структурированных мод в дальнюю зону. Такие свойства откры-

вают перспективы использования данной платформы в различных областях современной оптики. В частности, система может быть применена в интегральной оптике для создания компактных источников излучения с заданной поляризационной структурой, а также в высокочувствительных сенсорах, где локализованные моды могут реагировать на малые изменения диэлектрической проницаемости окружающей среды. Кроме того, предложенная система может стать соединительным элементом между фононными модами материалов и структурированным электромагнитным излучением, что открывает перспективы для новых оптических технологий в среднем ИК диапазоне.

Заключение

В заключение ещё раз приведём основные результаты диссертационной работы:

1. В континуальной модели с использованием Дираковских уравнений получено, что в случае пренебрежения пространственной дисперсией краевой импульс, распространяющийся вдоль топологической доменной стенки, представляет собой нелинейную простую волну с укручающимся по мере распространения задним фронтом. Затем в уравнения введена пространственная дисперсия, продемонстрировано формирование квазисолитонных структур и аналитически найден их пространственный профиль. Про моделировано распространение света в физической системе, описываемой данной моделью: оптических решетках, изготовленных с помощью фемто-секундной лазерной записи в кварцевом стекле. Расчеты проведены в рамках параксиального уравнения, показано хорошее согласие с развитой теорией.

2. С помощью анализа модуляционной неустойчивости малоамплитудных длинноволновых возмущений к краевой моде, локализованной на доменной стенке, определена область параметров, обеспечивающая устойчивость данного решения. Численное моделирование эволюции возмущённой краевой волны в реалистичной фотонной решётке из одномодовых диэлектрических волноводов подтвердило адекватность теоретической модели: наблюдаемая динамика возмущений качественно и количественно согласуется с предсказаниями теории.

3. Разработан метод получения эволюционного уравнения в частных производных для комплексной огибающей волнового пакета, распространяющегося вдоль топологической доменной стенки в нелинейной оптической решётке, с помощью регрессионных алгоритмов. Ключевая идея состоит в разделении физических процессов на линейные и нелинейные эффекты. Это разделение связано с настройкой начального значения интенсивности краевой волны. При этом для решения задачи в нелинейном случае предполагается, что линейная часть модели известна. Показано, что для параметров, соответствующих слабой дисперсии, определяющим фактором, искажающим форму начального симметричного Гауссовского импульса, является нелинейная групповая скорость, приводящая к асимметрии профиля в ходе распространения. Для режима сильной дисперсии решающую роль играет нелинейный набег фазы, приводящий к симметричному сжатию пучка и росту его максимальной интенсивности.

4. Показано, что сценарии развития модуляционной неустойчивости в киральной квадратной решетке с нелинейностью Керровского типа определяются топологическими свойствами энергетических зон. Анализ инкремента модуляционной неустойчивости позволяет установить топологию зонной структуры (тривиальна она или нетривиальна). С целью определения аномальных топологических фаз Флоке предложен метод, основанный на исследовании нелинейной динамики псевдоспина.

5. Разработан метод определения топологических свойств фотонных решеток, часть собственных мод которых подвержена радиационным потерям, на основе анализа эволюции пространственно локализованного возбуждения. Создана нейронная сеть, определяющая топологические характеристики по измеренной интенсивности на выходе массива волноводов.

6. Предложена эффективная трёхуровневая Дираковская модель, включающая две фотонные (дипольную и квадрупольную) и одну фононную компоненты, позволяющая описать

моды топологического дефекта в Кекуле-структурированной кремниевой метаповерхности, покрытой тонким слоем гексагонального нитрида бора. Найдена спектрально изолированная мода, локализованная на топологическом дефекте. Получено пространственное распределение этой моды и её поляризация в ближнем и дальнем поле. В дальней зоне диаграмма направленности излучения имеет трёхлепестковую форму и содержит поляризационную сингулярность с нетривиальной спиральной структурой. Результаты, полученные в рамках эффективной модели, подтверждаются полномасштабным моделированием с помощью уравнений Максвелла.

Список сокращений

BHZ	— Берневега-Хьюза-Чжана (Bernevig-Hughes-Zhang) (модель)
hBN	— гексагональный нитрид бора (hexagonal boron nitride)
Si	— кремний (silicon)
SBN	— кристалл стронция-бария-ниобата (strontium barium niobate)
TMDCs	— переходные металлдихалькогениды (transition metal dichalcogenides)
SSH	— Су-Шриффера-Хигера (Su-Schrieffer-Heeger) (модель)
VH	— Valley-Hall (долинный эффект Холла)
ДТОС	— динамическая точка обращения симметрии
МО	— машинное обучение
МСС	— метод сильной связи
НДМ	— нелинейная модель Дирака
НУШ	— нелинейное уравнение Шрёдингера
ТВС	— точка высокой симметрии
УЧП	— уравнение в частных производных
КЭХ	— квантовый эффект Холла

Список публикаций по теме диссертации

- [A1] Smirnova D. A., Smirnov L. A., Smolina E. O., Angelakis D. G., Leykam D. Gradient catastrophe of nonlinear photonic valley-Hall edge pulses // *Physical Review Research*. — 2021. — Vol. 3, no. 4. — P. 043027.
- [A2] Leykam D., Smolina E., Maluckov A., Flach S., Smirnova D. A. Probing band topology using modulational instability // *Physical Review Letters*. — 2021. — Vol. 126, no. 7. — P. 073901.
- [A3] Maluckov A., Smolina E., Leykam D., Gündoğdu S., Angelakis D. G., Smirnova D. A. Nonlinear signatures of Floquet band topology // *Physical Review B*. — 2022. — Vol. 105, no. 11. — P. 115133.
- [A4] Smolina E. O., Smirnov L. A., Leykam D., Smirnova D. A. Self-steepening-induced stabilization of nonlinear edge waves at photonic valley-Hall interfaces // *Physical Review A*. — 2023. — Vol. 108. — P. L061501.
- [A5] Smolina E., Smirnov L., Leykam D., Nori F., Smirnova D. Identifying topology of leaky photonic lattices with machine learning // *Nanophotonics*. — 2024. — Vol. 13, no. 3. — P. 271-281.
- [A6] Smirnova D., Komissarenko F., Vakulenko A., Kiriushchekina S., Smolina E., Guddala S., Allen M., Allen J., Alù A., Khanikaev A. B. Polaritonic states trapped by topological defects // *Nature Communications*. — 2024. — Vol. 15, no. 1. — P. 6355.
- [A7] Smolina E., Smirnov L., Leykam D., Nori F., Smirnova D. Data-driven model reconstruction for nonlinear wave dynamics. // *Physical Review Research*. — 2025. — Vol. 7. — P. 023314.
- [A8] Смолина Е., Смирнов Л. Применение машинного обучения для построения моделей нелинейной динамики волновых пакетов на фотонных топологических интерфейсах // *Нелинейные волны-2024: Тезисы докладов*. — 2024. — С. 244.
- [A9] Smirnov L. A., Smolina E. O., Leykam D., Smirnova D. A. Identifying Topology of Photonic Lattices with Machine and Deep Learning // *2023 Conference on Lasers and Electro-Optics Europe and European Quantum Electronics Conference (CLEO/Europe-EQEC)*. — IEEE, 2023. — P. 1-1.
- [A10] Smirnova D., Komissarenko F., Vakulenko A., Kiriushchekina S., Smolina E., Guddala S., Alù A., Khanikaev A. Trapped phonon-polariton modes induced by topological defects in mid-IR metasurfaces integrated with hexagonal boron nitride // *Metamaterials, Metadevices, and Metasystems 2023*. — SPIE, 2023. — PC126460V.
- [A11] Smolina E., Smirnov L., Kulikov N., Smirnova D. Classifying Topology in Waveguide Lattices using Deep Learning // *10th International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures*. — 2023. — P. 435-436.

- [A12] Смолина Е., Смирнов Л., Смирнова Д. Модуляционная неустойчивость топологических краевых волн в нелинейных фотонных решётках // Невская фотоника-2023: Тезисы докладов. — 2023. — С. 193.
- [A13] Федотовских Е., Смолина Е., Смирнов Л. Применение машинного обучения для получения эволюционных уравнений для огибающих волновых полей в топологических фотонных решётках // Невская фотоника-2023: Тезисы докладов. — 2023. — С. 234.
- [A14] Smolina E., Smirnov L., Smirnova D. Edge states and modulation instability in nonlinear photonic topological lattices // 9th International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. — 2022. — P. 390-391.
- [A15] Смолина Е., Смирнов Л., Смирнова Д. Краевые волны и модуляционная неустойчивость в нелинейных фотонных топологических решётках // Енисейская фотоника-2022: Тезисы докладов. — 2022. — Т. 2. — С. 77-78.
- [A16] Смолина Е., Смирнова Д. Моды топологических дефектов в кекуле-структурированных метаповерхностях // Енисейская фотоника-2022: Тезисы докладов. — 2022. — Т. 2. — С. 90-91.
- [A17] Смолина Е., Хорькин А., Смирнова Д., Куликов Н., Смирнов Л. Определение топологических фаз фотонных решёток // Нелинейные волны-2022: Тезисы докладов. — 2022. — С. 252-253.
- [A18] Смолина Е., Смирнова Д., Смирнов Л. Нелинейная динамика импульсных сигналов, распространяющихся вдоль топологических доменных стенок // Сборник трудов конференции «Нижегородская сессия молодых ученых-2021». — 2021. — С. 226-229.
- [A19] Смолина Е., Смирнов Л., Смирнова Д. Распространение нелинейных волновых импульсов вдоль топологических доменных стенок // Нелинейные волны-2020: Тезисы докладов. — 2020. — С. 242-243.
- [A20] Смолина Е., Смирнов Л., Смирнова Д. Распространение нелинейных волновых пакетов вдоль топологических доменных стенок // Труды XXIV научной конференции по радиофизике. — 2020. — С. 256-258.

Список литературы

- [1] Marpaung D., Yao J., Capmany J. Integrated microwave photonics // *Nature Photonics*. — 2019. — Vol. 13, no. 2. — P. 80–90.
- [2] Quantum circuits with many photons on a programmable nanophotonic chip / Arrazola J. M., Bergholm V., Bradler K., Bromley T. R., Collins M. J., Dhand I., Fumagalli A., Gerrits T., Goussev A., Helt L. G., et al. // *Nature*. — 2021. — Vol. 591, no. 7848. — P. 54–60.
- [3] Doerr C. R. Silicon photonic integration in telecommunications // *Frontiers in Physics*. — 2015. — Vol. 3. — P. 37.
- [4] Fathpour S., Jalali B. Silicon photonics for telecommunications and biomedicine. — CRC Press, 2011.
- [5] Photonics for artificial intelligence and neuromorphic computing / Shastri B. J., Tait A. N., Ferreira de Lima T., Pernice W. H., Bhaskaran H., Wright C. D., and Prucnal P. R. // *Nature Photonics*. — 2021. — Vol. 15, no. 2. — P. 102–114.
- [6] Three-dimensional photonic integration for ultra-low-energy, high-bandwidth interchip data links / Daudlin S., Rizzo A., Lee S., Khilwani D., Ou C., Wang S., Novick A., Gopal V., Cullen M., Parsons R., et al. // *Nature Photonics*. — 2025. — P. 1–8.
- [7] Enteshari A., Kavehrad M. Transmission strategies for high-speed access over Category-7A copper wiring // 2008 Canadian Conference on Electrical and Computer Engineering / IEEE. — 2008. — P. 001065–001068.
- [8] Gupta T. Copper interconnect technology. — Springer Science & Business Media, 2010.
- [9] Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: topological insulators // *Reviews of Modern Physics*. — 2010. — Vol. 82, no. 4. — P. 3045–3067.
- [10] Haldane F. D. M., Raghu S. Possible Realization of Directional Optical Waveguides in Photonic Crystals with Broken Time-Reversal Symmetry // *Physical Review Letters*. — 2008. — Vol. 100. — P. 013904.
- [11] Raghu S., Haldane F. D. M. Analogs of quantum-Hall-effect edge states in photonic crystals // *Physical Review A*. — 2008. — Vol. 78. — P. 033834.
- [12] Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states / Wang Z., Chong Y., Joannopoulos J. D., and Soljacic M. // *Nature*. — 2009. — Vol. 461, no. 7265. — P. 772–775.
- [13] Lu L., Joannopoulos J. D., Soljacic M. Topological photonics // *Nature photonics*. — 2014. — Vol. 8, no. 11. — P. 821–829.

- [14] Topological photonics / Ozawa T., Price H. M., Amo A., Goldman N., Hafezi M., Lu L., Rechtsman M. C., Schuster D., Simon J., Zilberberg O., et al. // *Reviews of Modern Physics*. — 2019. — Vol. 91, no. 1. — P. 015006.
- [15] Nonlinear topological photonics / Smirnova D., Leykam D., Chong Y., and Kivshar Y. // *Applied Physics Reviews*. — 2020. — June. — Vol. 7, no. 2. — P. 021306.
- [16] Roadmap on topological photonics / Price H., Chong Y., Khanikaev A., Schomerus H., Maczewsky L. J., Kremer M., Heinrich M., Szameit A., Zilberberg O., Yang Y., et al. // *Journal of Physics: Photonics*. — 2022. — Vol. 4, no. 3. — P. 032501.
- [17] A brief review of topological photonics in one, two, and three dimensions / Lan Z., Chen M. L., Gao F., Zhang S., and Sha W. E. // *Reviews in Physics*. — 2022. — Vol. 9. — P. 100076.
- [18] Segev M., Bandres M. A. Topological photonics: Where do we go from here? // *Nanophotonics*. — 2020. — Vol. 10, no. 1. — P. 425–434.
- [19] Khanikaev A. B., Alu A. Topological photonics: robustness and beyond // *Nature Communications*. — 2024. — Vol. 15, no. 1. — P. 931.
- [20] Nonlinear control of electromagnetic topological edge states / Dobrykh D., Yulin A., Slobozhanyuk A., Poddubny A., and Kivshar Y. S. // *Physical Review Letters*. — 2018. — Vol. 121, no. 16. — P. 163901.
- [21] Nontrivial coupling of light into a defect: the interplay of nonlinearity and topology / Xia S., Jukic D., Wang N., Smirnova D., Smirnov L., Tang L., Song D., Szameit A., Leykam D., Xu J., et al. // *Light: Science And Applications*. — 2020. — Vol. 9, no. 1. — P. 1–10.
- [22] Mukherjee S., Rechtsman M. C. Observation of Floquet solitons in a topological bandgap // *Science*. — 2020. — Vol. 368, no. 6493. — P. 856–859.
- [23] Topological gap solitons in a 1D non-Hermitian lattice / Pernet N., St-Jean P., Solnyshkov D., Malpuech G., Zambon N. C., Real B., Jamadi O., Lemaître A., Morassi M., Gratiet L. L., et al. // *arXiv preprint arXiv:2101.01038*. — 2021.
- [24] Klitzing K. v., Dorda G., Pepper M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance // *Physical Review Letters*. — 1980. — Vol. 45, no. 6. — P. 494.
- [25] Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential / Thouless D. J., Kohmoto M., Nightingale M. P., and den Nijs M. // *Physical Review Letters*. — 1982. — Vol. 49, no. 6. — P. 405.
- [26] Moore J. E., Balents L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures // *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*. — 2007. — Vol. 75, no. 12. — P. 121306.

- [27] Photonic anomalous quantum Hall effect / Mittal S., Orre V. V., Leykam D., Chong Y. D., and Hafezi M. // *Physical Review Letters*. — 2019. — Vol. 123, no. 4. — P. 043201.
- [28] Realization of Anomalous Floquet Insulators in Strongly Coupled Nanophotonic Lattices / Afzal S., Zimmerling T. J., Ren Y., Perron D., and Van V. // *Physical Review Letters*. — 2020. — Vol. 124. — P. 253601.
- [29] Observation of photonic anomalous Floquet topological insulators / Maczewsky L. J., Zeuner J. M., Nolte S., and Szameit A. // *Nature Communications*. — 2017. — Vol. 8. — P. 13756.
- [30] Photonic Floquet topological insulators / Rechtsman M. C., Zeuner J. M., Plotnik Y., Lumer Y., Podolsky D., Dreisow F., Nolte S., Segev M., and Szameit A. // *Nature*. — 2013. — Vol. 496. — P. 196.
- [31] A quantized microwave quadrupole insulator with topologically protected corner states / Peterson C. W., Benalcazar W. A., Hughes T. L., and Bahl G. // *Nature*. — 2018. — Vol. 555, no. 7696. — P. 346–350.
- [32] Topoelectrical-circuit realization of topological corner modes / Imhof S., Berger C., Bayer F., Brehm J., Molenkamp L. W., Kiessling T., Schindler F., Lee C. H., Greiter M., and Neupert T. // *Nature Physics*. — 2018. — Vol. 14, no. 9. — P. 925–929.
- [33] Photonic topological Anderson insulators / Stutzer S., Plotnik Y., Lumer Y., Titum P., Lindner N. H., Segev M., Rechtsman M. C., and Szameit A. // *Nature*. — 2018. — Vol. 560, no. 7719. — P. 461–465.
- [34] Advances and applications on non-Hermitian topological photonics / Yan Q., Zhao B., Zhou R., Ma R., Lyu Q., Chu S., Hu X., and Gong Q. // *Nanophotonics*. — 2023. — Vol. 12, no. 13. — P. 2247–2271.
- [35] Nonreciprocal lasing in topological cavities of arbitrary geometries / Bahari B., Ndao A., Vallini F., El Amili A., Fainman Y., and Kanté B. // *Science*. — 2017. — Vol. 358. — P. 636–640.
- [36] Room-temperature lasing from nanophotonic topological cavities / Smirnova D., Tripathi A., Kruk S., Hwang M.-S., Kim H.-R., Park H.-G., and Kivshar Y. // *Light: Science & Applications*. — 2020. — July. — Vol. 9, no. 1.
- [37] Third-harmonic generation in photonic topological metasurfaces / Smirnova D., Kruk S., Leykam D., Melik-Gaykazyan E., Choi D.-Y., and Kivshar Y. // *Physical Review Letters*. — 2019. — Vol. 123, no. 10. — P. 103901.
- [38] Topologically-protected four-wave mixing enhanced by tailoring topological edge states / Dong J.-K., Dong J., Li H., Zou B., and Zhang Y. // *Optics Express*. — 2024. — Vol. 32, no. 26. — P. 45613–45622.

- [39] A topological nonlinear parametric amplifier / Sohn B.-U., Huang Y.-X., Choi J. W., Chen G. F., Ng D. K., Yang S. A., and Tan D. T. // *Nature Communications*. — 2022. — Vol. 13, no. 1. — P. 7218.
- [40] Nonlinearity-induced photonic topological insulator / Maczewsky L. J., Heinrich M., Kremer M., Ivanov S. K., Ehrhardt M., Martinez F., Kartashov Y. V., Konotop V. V., Torner L., Bauer D., and Szameit A. // *Science*. — 2020. — Vol. 370. — P. 701–704.
- [41] Self-localized states in photonic topological insulators / Lumer Y., Plotnik Y., Rechtsman M. C., and Segev M. // *Physical Review Letters*. — 2013. — Vol. 111, no. 24. — P. 243905.
- [42] Instability of bosonic topological edge states in the presence of interactions / Lumer Y., Rechtsman M. C., Plotnik Y., and Segev M. // *Physical Review A*. — 2016. — Vol. 94, no. 2. — P. 021801.
- [43] Leykam D., Chong Y. D. Edge solitons in nonlinear-photonic topological insulators // *Physical Review Letters*. — 2016. — Vol. 117, no. 14. — P. 143901.
- [44] Topological bulk solitons in a nonlinear photonic Chern insulator / Li R., Kong X., Hang D., Li G., Hu H., Zhou H., Jia Y., Li P., and Liu Y. // *Communications Physics*. — 2022. — Vol. 5, no. 1. — P. 275.
- [45] Kartashov Y. V., Skryabin D. V. Modulational instability and solitary waves in polariton topological insulators // *Optica*. — 2016. — Vol. 3, no. 11. — P. 1228–1236.
- [46] Zhang Y., Kartashov Y. V., Ferrando A. Interface states in polariton topological insulators // *Physical Review A*. — 2019. — Vol. 99. — P. 053836.
- [47] Nonlinear topological valley Hall edge states arising from type-II Dirac cones / Zhong H., Xia S., Zhang Y., Li Y., Song D., Liu C., and Chen Z. // *Advanced Photonics*. — 2021. — Vol. 3, no. 5. — P. 056001.
- [48] Ablowitz M. J., Curtis C. W., Zhu Y. Localized nonlinear edge states in honeycomb lattices // *Physical Review A*. — 2013. — Vol. 88. — P. 013850.
- [49] Ablowitz M. J., Curtis C. W., Ma Y.-P. Linear and nonlinear traveling edge waves in optical honeycomb lattices // *Physical Review A*. — 2014. — Vol. 90. — P. 023813.
- [50] Vector topological edge solitons in Floquet insulators / Ivanov S. K., Kartashov Y. V., Szameit A., Torner L., and Konotop V. V. // *ACS Photonics*. — 2020. — Vol. 7. — P. 735–745.
- [51] Bragg solitons in topological Floquet insulators / Ivanov S. K., Kartashov Y. V., Maczewsky L. J., Szameit A., and Konotop V. V. // *Optics Letters*. — 2020. — Vol. 45. — P. 2271–2274.

- [52] Inverse design of photonic topological state via machine learning / Long Y., Ren J., Li Y., and Chen H. // *Applied Physics Letters*. — 2019. — Vol. 114, no. 18.
- [53] Kudyshev Z. A., Shalaev V. M., Boltasseva A. Machine learning for integrated quantum photonics // *ACS Photonics*. — 2020. — Vol. 8, no. 1. — P. 34–46.
- [54] Machine learning and the physical sciences / Carleo G., Cirac I., Cranmer K., Daudet L., Schuld M., Tishby N., Vogt-Maranto L., and Zdeborova L. // *Reviews of Modern Physics*. — 2019. — Vol. 91, no. 4. — P. 045002.
- [55] Wiecha P. R., Muskens O. L. Deep learning meets nanophotonics: a generalized accurate predictor for near fields and far fields of arbitrary 3D nanostructures // *Nano Letters*. — 2019. — Vol. 20, no. 1. — P. 329–338.
- [56] High speed simulation and freeform optimization of nanophotonic devices with physics-augmented deep learning / Chen M., Lupoiu R., Mao C., Huang D.-H., Jiang J., Lalanne P., and Fan J. A. // *ACS Photonics*. — 2022. — Vol. 9, no. 9. — P. 3110–3123.
- [57] Mapping the global design space of nanophotonic components using machine learning pattern recognition / Melati D., Grinberg Y., Kamandar Dezfouli M., Janz S., Cheben P., Schmid J. H., Sánchez-Postigo A., and Xu D.-X. // *Nature Communications*. — 2019. — Vol. 10, no. 1. — P. 4775.
- [58] Machine learning for nanophotonics / Malkiel I., Mrejen M., Wolf L., and Suchowski H. // *MRS Bulletin*. — 2020. — Vol. 45, no. 3. — P. 221–229.
- [59] Deep learning enabled inverse design in nanophotonics / So S., Badloe T., Noh J., Bravo-Abad J., and Rho J. // *Nanophotonics*. — 2020. — Vol. 9, no. 5. — P. 1041–1057.
- [60] Deep learning in nano-photonics: inverse design and beyond / Wiecha P. R., Arbouet A., Girard C., and Muskens O. L. // *Photonics Research*. — 2021. — Vol. 9, no. 5. — P. B182–B200.
- [61] Inverse design in quantum nanophotonics: combining local-density-of-states and deep learning / Liu G.-X., Liu J.-F., Zhou W.-J., Li L.-Y., You C.-L., Qiu C.-W., and Wu L. // *Nanophotonics*. — 2023. — Vol. 12, no. 11. — P. 1943–1955.
- [62] Topological phenomena at defects in acoustic, photonic and solid-state lattices / Lin Z.-K., Wang Q., Liu Y., Xue H., Zhang B., Chong Y., and Jiang J.-H. // *Nature Reviews Physics*. — 2023. — Vol. 5, no. 8. — P. 483–495.
- [63] A second wave of topological phenomena in photonics and acoustics / Zhang X., Zangeneh-Nejad F., Chen Z.-G., Lu M.-H., and Christensen J. // *Nature*. — 2023. — Vol. 618, no. 7966. — P. 687–697.
- [64] Xie B.-Y., You O., Zhang S. Photonic topological pump between chiral disclination states // *Physical Review A*. — 2022. — Vol. 106, no. 2. — P. L021502.

- [65] Bulk–disclination correspondence in topological crystalline insulators / Liu Y., Leung S., Li F.-F., Lin Z.-K., Tao X., Poo Y., and Jiang J.-H. // *Nature*. — 2021. — Vol. 589, no. 7842. — P. 381–385.
- [66] Roadmap on structured light / Rubinsztein-Dunlop H., Forbes A., Berry M. V., Dennis M. R., Andrews D. L., Mansuripur M., Denz C., Alpmann C., Banzer P., and Bauer T. // *Journal of Optics*. — 2016. — Vol. 19, no. 1. — P. 013001.
- [67] Experimental observation of topological Z2 exciton-polaritons in transition metal dichalcogenide monolayers / Li M., Sinev I., Benimetskiy F., Ivanova T., Khestanova E., Kiriushchikina S., Vakulenko A., Guddala S., Skolnick M., and Menon V. // *Nature Communications*. — 2021. — Vol. 12, no. 1. — P. 4425.
- [68] Topological phonon-polariton funneling in midinfrared metasurfaces / Guddala S., Komissarenko F., Kiriushchikina S., Vakulenko A., Li M., Menon V. M., Alu A., and Khanikaev A. B. // *Science*. — 2021. — Vol. 374, no. 6564. — P. 225–227.
- [69] Realization of reflectionless potentials in photonic lattices / Szameit A., Dreisow F., Heinrich M., Nolte S., and Sukhorukov A. // *Physical Review Letters*. — 2011. — Vol. 106, no. 19. — P. 193903.
- [70] Writing waveguides in glass with a femtosecond laser / Davis K. M., Miura K., Sugimoto N., and Hirao K. // *Optics letters*. — 1996. — Vol. 21, no. 21. — P. 1729–1731.
- [71] Control of directional evanescent coupling in fs laser written waveguides / Szameit A., Dreisow F., Pertsch T., Nolte S., and Tünnermann A. // *Optics express*. — 2007. — Vol. 15, no. 4. — P. 1579–1587.
- [72] Ultrafast processes for bulk modification of transparent materials / Itoh K., Watanabe W., Nolte S., and Schaffer C. B. // *MRS bulletin*. — 2006. — Vol. 31, no. 8. — P. 620–625.
- [73] Bloch-Zener oscillations in binary superlattices / Dreisow F., Szameit A., Heinrich M., Pertsch T., Nolte S., Tünnermann A., and Longhi S. // *Physical Review Letters*. — 2009. — Vol. 102, no. 7. — P. 076802.
- [74] Observation of two-dimensional superlattice solitons / Heinrich M., Kartashov Y., Ramirez L., Szameit A., Dreisow F., Keil R., Nolte S., Tünnermann A., Vysloukh V., and Torner L. // *Optics Letters*. — 2009. — Vol. 34, no. 23. — P. 3701–3703.
- [75] Observation of two-dimensional surface solitons in asymmetric waveguide arrays / Szameit A., Kartashov Y., Dreisow F., Pertsch T., Nolte S., Tünnermann A., and Torner L. // *Physical Review Letters*. — 2007. — Vol. 98, no. 17. — P. 173903.
- [76] Observation of surface solitons in chirped waveguide arrays / Szameit A., Kartashov Y., Dreisow F., Heinrich M., Pertsch T., Nolte S., Tünnermann A., Vysloukh V., and Torner L. // *Optics Letters*. — 2008. — Vol. 33, no. 10. — P. 1132–1134.

- [77] Fresnel's laws in discrete optical media / Szameit A., Trompeter H., Heinrich M., Dreisow F., Peschel U., Pertsch T., Nolte S., Lederer F., and Tünnermann A. // *New Journal of Physics*. — 2008. — Vol. 10, no. 10. — P. 103020.
- [78] Wave localization at the boundary of disordered photonic lattices / Szameit A., Kartashov Y., Zeil P., Dreisow F., Heinrich M., Keil R., Nolte S., Tünnermann A., Vysloukh V., and Torner L. // *Optics Letters*. — 2010. — Vol. 35, no. 8. — P. 1172–1174.
- [79] Decay control via discrete-to-continuum coupling modulation in an optical waveguide system / Dreisow F., Szameit A., Heinrich M., Pertsch T., Nolte S., Tünnermann A., and Longhi S. // *Physical Review Letters*. — 2008. — Vol. 101, no. 14. — P. 143602.
- [80] Anderson localization in optical waveguide arrays with off-diagonal coupling disorder / Martin L., Di Giuseppe G., Perez-Leija A., Keil R., Dreisow F., Heinrich M., Nolte S., Szameit A., Abouraddy A., Christodoulides D., and Saleh B. // *Optics Express*. — 2011. — Vol. 19, no. 14. — P. 13636–13646.
- [81] Anderson cross-localization / Stutzer S., Kartashov Y., Vysloukh V., Tünnermann A., Nolte S., Lewenstein M., Torner L., and Szameit A. // *Optics Letters*. — 2012. — Vol. 37, no. 10. — P. 1715–1717.
- [82] Femtosecond waveguide writing: a new avenue to three-dimensional integrated optics / Nolte S., Will M., Burghoff J., and Tuennermann A. // *Applied Physics A*. — 2003. — Vol. 77, no. 1. — P. 109–111.
- [83] Engineering integrated photonics for heralded quantum gates / Meany T., Biggerstaff D., Broome M., Fedrizzi A., Delanty M., Steel M., Gilchrist A., Marshall G., White A., and Withford M. // *Scientific Reports*. — 2016. — Vol. 6, no. 1. — P. 25126.
- [84] Quasi-incoherent propagation in waveguide arrays / Szameit A., Dreisow F., Hartung H., Nolte S., Tünnermann A., and Lederer F. // *Applied Physics Letters*. — 2007. — Vol. 90, no. 24. — P. 241113.
- [85] Synthesizing multi-dimensional excitation dynamics and localization transition in one-dimensional lattices / Maczewski L., Wang K., Dovgij A., Miroshnichenko A., Moroz A., Ehrhardt M., Heinrich M., Christodoulides D., Szameit A., and Sukhorukov A. // *Nature Photonics*. — 2020. — Vol. 14, no. 2. — P. 76–81.
- [86] Imaging topological edge states in silicon photonics / Hafezi M., Mittal S., Fan J., Migdall A., and Taylor J. // *Nature Photonics*. — 2013. — Vol. 7, no. 12. — P. 1001–1005.
- [87] Silicon photonic platform for passive waveguide devices: materials, fabrication, and applications / Su Y., Zhang Y., Qiu C., Guo X., and Sun L. // *Advanced Materials Technologies*. — 2020. — Vol. 5, no. 8. — P. 1901153.

- [88] Low-loss SOI photonic wires and ring resonators fabricated with deep UV lithography / Dumon P., Bogaerts W., Wiaux V., Wouters J., Beckx S., Van Campenhout J., Taillaert D., Luyssaert B., Bienstman P., Van Thourhout D., et al. // IEEE Photonics Technology Letters. — 2004. — Vol. 16, no. 5. — P. 1328–1330.
- [89] Thompson L. F. An introduction to lithography. — ACS Publications, 1983.
- [90] Parity-time-symmetric microring lasers / Hodaei H., Miri M.-A., Heinrich M., Christodoulides D. N., and Khajavikhan M. // Science. — 2014. — Vol. 346, no. 6212. — P. 975–978.
- [91] Topological insulator laser: Experiments / Bandres M. A., Wittek S., Harari G., Parto M., Ren J., Segev M., Christodoulides D. N., and Khajavikhan M. // Science. — 2018. — Vol. 359. — P. eaar4005.
- [92] Maruo S., Nakamura O., Kawata S. Three-dimensional microfabrication with two-photon-absorbed photopolymerization // Optics Letters. — 1997. — Vol. 22, no. 2. — P. 132–134.
- [93] Three-dimensional μ -printing: An enabling technology / Hohmann J. K., Renner M., Waller E. H., and von Freymann G. // Adv. Opt. Mater. — 2015. — Vol. 3, no. 11. — P. 1488–1507.
- [94] Artificial gauge field switching using orbital angular momentum modes in optical waveguides / Jorg C., Queralto G., Kremer M., Pelegri G., Schulz J., Szameit A., von Freymann G., Mompart J., and Ahufinger V. // Light: Science and Applications. — 2020. — Vol. 9, no. 1. — P. 150.
- [95] Discrete solitons in photorefractive optically induced photonic lattices / Efremidis N. K., Sears S., Christodoulides D. N., Fleischer J. W., and Segev M. // Physical Review E. — 2002. — Vol. 66, no. 4. — P. 046602.
- [96] Observation of discrete solitons in optically induced real time waveguide arrays / Fleischer J. W., Carmon T., Segev M., Efremidis N. K., and Christodoulides D. N. // Physical Review Letters. — 2003. — Vol. 90, no. 2. — P. 023902.
- [97] Observation of two-dimensional discrete solitons in optically induced nonlinear photonic lattices / Fleischer J. W., Segev M., Efremidis N. K., and Christodoulides D. N. // Nature. — 2003. — Vol. 422, no. 6928. — P. 147–150.
- [98] Observation of discrete vortex solitons in optically induced photonic lattices / Neshev D. N., Alexander T. J., Ostrovskaya E. A., Kivshar Y. S., Martin H., Makasyuk I., and Chen Z. // Physical Review Letters. — 2004. — Vol. 92, no. 12. — P. 123903.
- [99] Two-dimensional soliton in cubic fs laser written waveguide arrays in fused silica / Szameit A., Burghoff J., Pertsch T., Nolte S., Tunnermann A., and Lederer F. // Optics Express. — 2006. — Vol. 14, no. 13. — P. 6055–6062.

- [100] Dynamic defects in photonic Floquet topological insulators / Jorg C., Letscher F., Fleischhauer M., and von Freymann G. // New Journal of Physics. — 2017. — Vol. 19, no. 8. — P. 083003.
- [101] Topological metasurface: from passive toward active and beyond / You J. W., Lan Z., Ma Q., Gao Z., Yang Y., Gao F., Xiao M., and Cui T. J. // Photonics Research. — 2023. — Vol. 11, no. 3. — P. B65–B102.
- [102] Topological metasurfaces / Smirnova D., Kiriushchikina S., Vakulenko A., and Khanikaev A. B. // Optical Materials Express. — 2024. — Vol. 14, no. 8. — P. 2065–2082.
- [103] Direct observation of topological edge states in silicon photonic crystals: Spin, dispersion, and chiral routing / Parappurath N., Alpegiani F., Kuipers L., and Verhagen E. // Science Advances. — 2020. — Vol. 6, no. 10. — P. eaaw4137.
- [104] Optical switching of topological phase in a perovskite polariton lattice / Su R., Ghosh S., Liew T. C., and Xiong Q. // Science Advances. — 2021. — Vol. 7, no. 21. — P. eabf8049.
- [105] Far-field probing of leaky topological states in all-dielectric metasurfaces / Gorlach M. A., Ni X., Smirnova D. A., Korobkin D., Zhirihin D., Slobozhanyuk A. P., Belov P. A., Alù A., and Khanikaev A. B. // Nature Communications. — 2018. — Vol. 9, no. 1. — P. 909.
- [106] Topological edge states and gap solitons in the nonlinear Dirac model / Smirnova D. A., Smirnov L. A., Leykam D., and Kivshar Y. S. // Laser & Photonics Reviews. — 2019. — Vol. 13. — P. 1900223.
- [107] $\mathcal{PT}$ phase transitions of edge states at $\mathcal{PT}$ symmetric interfaces in non-Hermitian topological insulators / Ni X., Smirnova D., Poddubny A., Leykam D., Chong Y., and Khanikaev A. B. // Physical Review B. — 2018. — Vol. 98. — P. 165129.
- [108] Hotte-Kilburn A., Bianucci P. Integrated topological photonics in one dimension // Advances in Physics: X. — 2025. — Vol. 10, no. 1. — P. 2476417.
- [109] Ren Y., Qiao Z., Niu Q. Topological phases in two-dimensional materials: a review // Reports on Progress in Physics. — 2016. — Vol. 79, no. 6. — P. 066501.
- [110] Xue H., Yang Y., Zhang B. Topological valley photonics: physics and device applications // Advanced Photonics Research. — 2021. — Vol. 2, no. 8. — P. 2100013.
- [111] Valley photonic crystals / Liu J.-W., Shi F.-L., He X.-T., Tang G.-J., Chen W.-J., Chen X.-D., and Dong J.-W. // Advances in Physics: X. — 2021. — Vol. 6, no. 1. — P. 1905546.
- [112] Guglielmon J., Rechtsman M. C. Broadband topological slow light through higher momentum-space winding // Physical Review Letters. — 2019. — Vol. 122. — P. 153904.

- [113] Sauer E., Vasco J. P., Hughes S. Theory of intrinsic propagation losses in topological edge states of planar photonic crystals // *Physical Review Research*. — 2020. — Vol. 2. — P. 043109.
- [114] Quantifying the robustness of topological slow light / Arregui G., Gomis-Bresco J., Sotomayor-Torres C. M., and Garcia P. D. // *Physical Review Letters*. — 2021. — Vol. 126. — P. 027403.
- [115] Wang Y., You J. W., Panoiu N. C. All-optical control of topological valley transport in graphene metasurfaces // *Optics Express*. — 2023. — Vol. 31. — P. 10401.
- [116] Anderson D., Lisak M. Nonlinear asymmetric self-phase modulation and self-steepening of pulses in long optical waveguides // *Physical Review A*. — 1983. — Vol. 27. — P. 1393.
- [117] Panoiu N. C., Liu X., Osgood R. M. J. Self-steepening of ultrashort pulses in silicon photonic nanowires // *Optics Letters*. — 2009. — Vol. 34. — P. 947–949.
- [118] Ultrafast nonlinear optics in gas-filled hollow-core photonic crystal fibers / Travers J. C., Chang W., Jold J., Joly N. Y., and Russell P. S. J. // *Journal of the Optical Society of America B*. — 2011. — Vol. 28. — P. A11–A26.
- [119] Husko C., Colman P. Giant anomalous self-steepening in photonic crystal waveguides // *Physical Review A*. — 2015. — Vol. 92. — P. 013816.
- [120] Observation of photonic topological valley Hall edge states / Noh J., Huang S., Chen K. P., and Rechtsman M. C. // *Physical Review Letters*. — 2018. — Vol. 120, no. 6. — P. 063902.
- [121] PySINDy: A comprehensive Python package for robust sparse system identification / Kaptanoglu A. A., de Silva B. M., Fasel U., Kaheman K., Goldschmidt A. J., Callahan J., Delahunt C. B., Nicolaou Z. G., Champion K., Loiseau J.-C., Kutz J. N., and Brunton S. L. // *Journal of Open Source Software*. — 2022. — Vol. 7, no. 69. — P. 3994.
- [122] PySINDy: A Python package for the sparse identification of nonlinear dynamical systems from data / de Silva B., Champion K., Quade M., Loiseau J.-C., Kutz J., and Brunton S. // *Journal of Open Source Software*. — 2020. — Vol. 5, no. 49. — P. 2104.
- [123] Data-driven discovery of partial differential equations / Rudy S. H., Brunton S. L., Proctor J. L., and Kutz J. N. // *Science Advances*. — 2017. — Vol. 3, no. 4. — P. e1602614.
- [124] Kaheman Kadierdan K. J. N., L. B. S. SINDy-PI: a robust algorithm for parallel implicit sparse identification of nonlinear dynamics // *Journal of Open Source Software*. — 2020. — Vol. 476, no. 476. — P. 20200279.
- [125] Du M., Chen Y., Zhang D. DISCOVER: Deep identification of symbolically concise open-form partial differential equations via enhanced reinforcement learning // *Physical Review Research*. — 2024. — Vol. 6, no. 1. — P. 013182.

- [126] Cranmer M. Interpretable machine learning for science with PySR and SymbolicRegression.jl // arXiv preprint arXiv:2305.01582. — 2023.
- [127] Discovering equations that govern experimental materials stability under environmental stress using scientific machine learning / Naik R. R., Tiihonen A., Thapa J., Batali C., Liu Z., Sun S., and Buonassisi T. // npj Computational Materials. — 2022. — Vol. 8, no. 1. — P. 72.
- [128] Data-driven model discovery of ideal four-wave mixing in nonlinear fibre optics / Ermolaev A. V., Sheveleva A., Genty G., Finot C., and Dudley J. M. // Scientific Reports. — 2022. — Vol. 12, no. 1. — P. 12711.
- [129] Brunton S. L., Proctor J. L., Kutz J. N. Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems // Proceedings of the National Academy of Sciences. — 2016. — Vol. 113, no. 15. — P. 3932–3937.
- [130] Identification of moment equations via data-driven approaches in nonlinear Schrodinger models / Yang S., Chen S., Zhu W., and Kevrekidis P. G. // Frontiers in Photonics. — 2024. — Vol. 5.
- [131] Valley Hall edge solitons in a photonic graphene / Tang Q., Ren B., Kompanets V. O., Kartashov Y. V., Li Y., and Zhang Y. // Optics Express. — 2021. — Vol. 29, no. 24. — P. 39755–39765.
- [132] Schapire R. E. The Boosting Approach to Machine Learning: An Overview // Nonlinear Estimation and Classification / ed. by Denison D. D., Hansen M. H., Holmes C. C. et al. — New York, NY : Springer New York, 2003. — P. 149–171.
- [133] Rabi-like oscillation of photonic topological valley Hall edge states / Zhong H., Kartashov Y. V., Zhang Y., Song D., Zhang Y., Li F., and Chen Z. // Optics Letters. — 2019. — Vol. 44, no. 13. — P. 3342–3345.
- [134] Measurement of topological invariants in a 2D photonic system / Mittal S., Ganeshan S., Fan J., Vaezi A., and Hafezi M. // Nature Photonics. — 2016. — Vol. 10, no. 3. — P. 180–183.
- [135] Bardyn C.-E., Huber S. D., Zilberberg O. Measuring topological invariants in small photonic lattices // New Journal of Physics. — 2014. — Vol. 16, no. 12. — P. 123013.
- [136] Experimental measurement of the Berry curvature from anomalous transport / Wimmer M., Price H. M., Carusotto I., and Peschel U. // Nature Physics. — 2017. — Vol. 13, no. 6. — P. 545–550.
- [137] Nonlinear dirac cones / Bomantara R. W., Zhao W., Zhou L., and Gong J. // Physical Review B. — 2017. — Vol. 96, no. 12. — P. 121406.
- [138] Topological characterization of periodically driven quantum systems / Kitagawa T., Berg E., Rudner M., and Demler E. // Physical Review B. — 2010. — Vol. 82. — P. 235114.

- [139] Goldman N., Dalibard J. Periodically Driven Quantum Systems: Effective Hamiltonians and Engineered Gauge Fields // *Physical Review X*. — 2014. — Vol. 4. — P. 031027.
- [140] Driving protocols for a Floquet topological phase without static counterpart / Quelle A., Weitenberg C., Sengstock K., and Morais Smith C. // *New Journal of Physics*. — 2017. — Vol. 19. — P. 113010.
- [141] Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems / Rudner M. S., Lindner N. H., Berg E., and Levin M. // *Physical Review X*. — 2013. — Vol. 3. — P. 031005.
- [142] Graf G. M., Tauber C. Bulk-edge correspondence for two-dimensional floquet topological insulators // *Annales Henri Poincare*. — 2018. — Vol. 19. — P. 709.
- [143] Dal Lago V., Atala M., Foa Torres L. E. F. Floquet topological transitions in a driven one-dimensional topological insulator // *Physical Review A*. — 2015. — Vol. 92. — P. 023624.
- [144] Topology and broken symmetry in Floquet systems / Harper F., Roy R., Rudner M. S., and Sondhi S. L. // *Annual Review of Condensed Matter Physics*. — 2020. — Vol. 11. — P. 345.
- [145] Rudner M. S., Lindner N. H. Band structure engineering and non-equilibrium dynamics in Floquet topological insulators // *Nature Reviews Physics*. — 2020. — Vol. 2. — P. 229.
- [146] Topological effects in integrated photonic waveguide structures / Kremer M., Maczewsky L. J., Heinrich M., and Szameit A. // *Optical Materials Express*. — 2021. — Vol. 11. — P. 1014.
- [147] Leykam D., Rechtsman M. C., Chong Y. D. Anomalous Topological Phases and Unpaired Dirac Cones in Photonic Floquet Topological Insulators // *Physical Review Letters*. — 2016. — Vol. 117. — P. 013902.
- [148] Experimental observation of anomalous topological edge modes in a slowly driven photonic lattice / Mukherjee S., Spracklen A., Valiente M., Andersson E., Ohberg P., Goldman N., and Thomson R. R. // *Nature Communications*. — 2017. — Vol. 8. — P. 13918.
- [149] Mukherjee S., Rechtsman M. C. Observation of unidirectional solitonlike edge states in nonlinear Floquet topological insulators // *Physical Review X*. — 2021. — Vol. 11. — P. 041057.
- [150] Jurgensen M., Mukherjee S., Rechtsman M. C. Quantized Nonlinear Thouless Pumping // *Nature*. — 2021. — Vol. 596. — P. 63–66.
- [151] Zhu W., Chong Y., Gong J. Symmetry analysis of anomalous Floquet topological phases // *Physical Review B*. — 2021. — Vol. 104, no. 2. — P. L020302.
- [152] Rudner M. S., Levitov L. Topological transition in a non-Hermitian quantum walk // *Physical Review Letters*. — 2009. — Vol. 102, no. 6. — P. 065703.

- [153] Leykam D., Smirnova D. A. Probing bulk topological invariants using leaky photonic lattices // Nature Physics. — 2021. — Vol. 17, no. 5. — P. 632–638.
- [154] Direct observation of topology from single-photon dynamics / Wang Y., Lu Y.-H., Mei F., Gao J., Li Z.-M., Tang H., Zhu S.-L., Jia S., and Jin X.-M. // Physical Review Letters. — 2019. — Vol. 122, no. 19. — P. 193903.
- [155] Direct probe of topological invariants using Bloch oscillating quantum walks / Ramasesh V. V., Flurin E., Rudner M., Siddiqi I., and Yao N. Y. // Physical Review Letters. — 2017. — Vol. 118, no. 13. — P. 130501.
- [156] Zhang P., Shen H., Zhai H. Machine learning topological invariants with neural networks // Physical Review Letters. — 2018. — Vol. 120, no. 6. — P. 066401.
- [157] Identifying quantum phase transitions using artificial neural networks on experimental data / Rem B. S., Kaming N., Tarnowski M., Asteria L., Flaschner N., Becker C., Sengstock K., and Weitenberg C. // Nature Physics. — 2019. — Vol. 15, no. 9. — P. 917–920.
- [158] Holanda N., Griffith M. Machine learning topological phases in real space // Physical Review B. — 2020. — Vol. 102, no. 5. — P. 054107.
- [159] Tan D. T. Topological silicon photonics // Advanced Photonics Research. — 2021. — Vol. 2, no. 9. — P. 2100010.
- [160] Van der Maaten L., Hinton G. Visualizing data using t-SNE. // Journal of Machine Learning Research. — 2008. — Vol. 9, no. 11.
- [161] Photonic Dirac cavities with spatially varying mass term / Chen K., Komissarenko F., Smirnova D., Vakulenko A., Kiriushchikina S., Volkovskaya I., Guddala S., Menon V., Alu A., and Khanikaev A. B. // Science Advances. — 2023. — Vol. 9, no. 12. — P. eabq4243.
- [162] Dirac-vortex topological cavities / Gao X., Yang L., Lin H., Zhang L., Li J., Bo F., Wang Z., and Lu L. // Nature Nanotechnology. — 2020. — Vol. 15, no. 12. — P. 1012–1018.
- [163] Reconfigurable hyperbolic polaritonics with correlated oxide metasurfaces / Aghamiri N. A., Hu G., Fali A., Zhang Z., Li J., Balendhran S., Walia S., Sriram S., Edgar J. H., Ramanathan S., et al. // Nature Communications. — 2022. — Vol. 13, no. 1. — P. 4511.
- [164] Photonics with hexagonal boron nitride / Caldwell J. D., Aharonovich I., Cassaboiss G., Edgar J. H., Gil B., and Basov D. N. // Nature Reviews Materials. — 2019. — Vol. 4, no. 8. — P. 552–567.
- [165] Polaritons in layered two-dimensional materials / Low T., Chaves A., Caldwell J. D., Kumar A., Fang N. X., Avouris P., Heinz T. F., Guinea F., Martin-Moreno L., and Koppens F. H. // Nature Materials. — 2017. — Vol. 16, no. 2. — P. 182–194.

- [166] Sanvitto D., Kena-Cohen S. The road towards polaritonic devices // Nature Materials. — 2016. — Vol. 15, no. 11. — P. 1061–1073.
- [167] Basov D., Fogler M., de Abajo F. Polaritons in van der Waals materials // Science. — 2016. — Vol. 354, no. 6309. — P. aag1992.
- [168] Topological phases of photonic crystals under crystalline symmetries / Vaidya S., Ghorashi A., Christensen T., Rechtsman M. C., and Benalcazar W. A. // Physical Review B. — 2023. — Vol. 108, no. 8. — P. 085116.
- [169] Shen S. Q. Topological Insulators. — Berlin : Springer, 2012. — Vol. 174.
- [170] Su W.-P., Schrieffer J. R., Heeger A. J. Solitons in polyacetylene // Physical Review Letters. — 1979. — Vol. 42, no. 25. — P. 1698.
- [171] Serov V. Numerical methods for solving non-stationary quantum mechanical problems. — Saratov : New wind, 2011.
- [172] Susskind L. Lattice fermions // Physical Review D. — 1977. — Vol. 16, no. 10. — P. 3031.

А Приложение 1: Свойства димеризованной графеноподобной решетки

А.1 Вывод низкоэнергетического эффективного Гамильтониана для димеризованной графеновой решетки

Мы рассматриваем структуру типа графен, которая представляет собой треугольную решетку с двумя элементами в элементарной ячейке и таким образом состоит из двух подрешеток: A и B . Пусть a_0 – расстояние между соседними узлами решетки. Два базисных вектора Бравэ можно ввести как $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$, где $a = \sqrt{3}a_0$ – период решетки. Чтобы найти базисные вектора зоны Бриллюэна $\mathbf{b}_{1,2}$, используем определение: $(\mathbf{b}_i, \mathbf{a}_j) = 2\pi\delta_{ij}$, откуда следует $\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{3a_0}(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{3a_0}(0, 1)$. Зона Бриллюэна представляет собой шестиугольник с двумя неэквивалентными углами $\mathbf{K}_\pm = \frac{4\pi}{3a}(\pm 1, 0) \equiv K(\pm 1, 0)$.

Предположим, что взаимодействие между соседними резонансными элементами (волновыми или резонаторами), расположенными в такой фотонной решётке, может быть рассмотрено аналогично тому, как это делается в электронных структурах, – с использованием метода сильной связи. Будем искать решение в виде $\Psi_{A,B} = \psi_{1,2}e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ в подрешетках A и B .

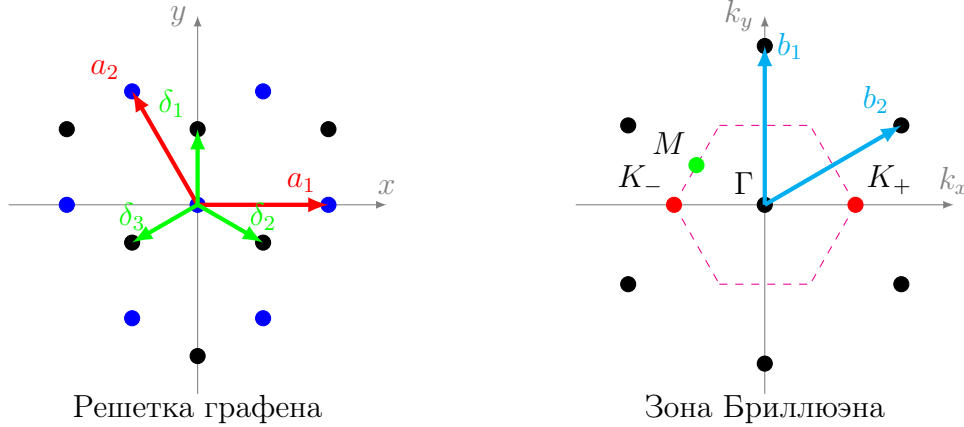


Рисунок А1: Слева: решетка графена, A (синий) и B (черный) – треугольные подрешетки. Элемент подрешетки типа A имеет три соседних элемента, все они принадлежат подрешетке B и отстоят на вектора $\delta_1 = (0, a_0)$, $\delta_2 = (\sqrt{3}a_0/2, -a_0/2)$, $\delta_3 = (-\sqrt{3}a_0/2, -a_0/2)$. Аналогично любой элемент подрешетки B имеет три соседних элемента из подрешетки A , отстоящих на вектора $-\delta_1, -\delta_3, -\delta_2$. Справа: соответствующая зона Бриллюэна. Отмечены точки высокой симметрии (Γ , K , M).

На основании данного подхода эволюция полей по координате z (или во времени t) определяется уравнением $i\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi$, где волновые функции $\psi_{1,2}$ и собственные значения ω могут быть найдены из двух уравнений

$$-\kappa(e^{i\mathbf{k}\delta_1} + e^{i\mathbf{k}\delta_2} + e^{i\mathbf{k}\delta_3})\psi_2 = (\omega - \omega_A)\psi_1; \quad (\text{A.1a})$$

$$-\kappa(e^{-i\mathbf{k}\delta_1} + e^{-i\mathbf{k}\delta_2} + e^{-i\mathbf{k}\delta_3})\psi_1 = (\omega - \omega_B)\psi_2. \quad (\text{A.1b})$$

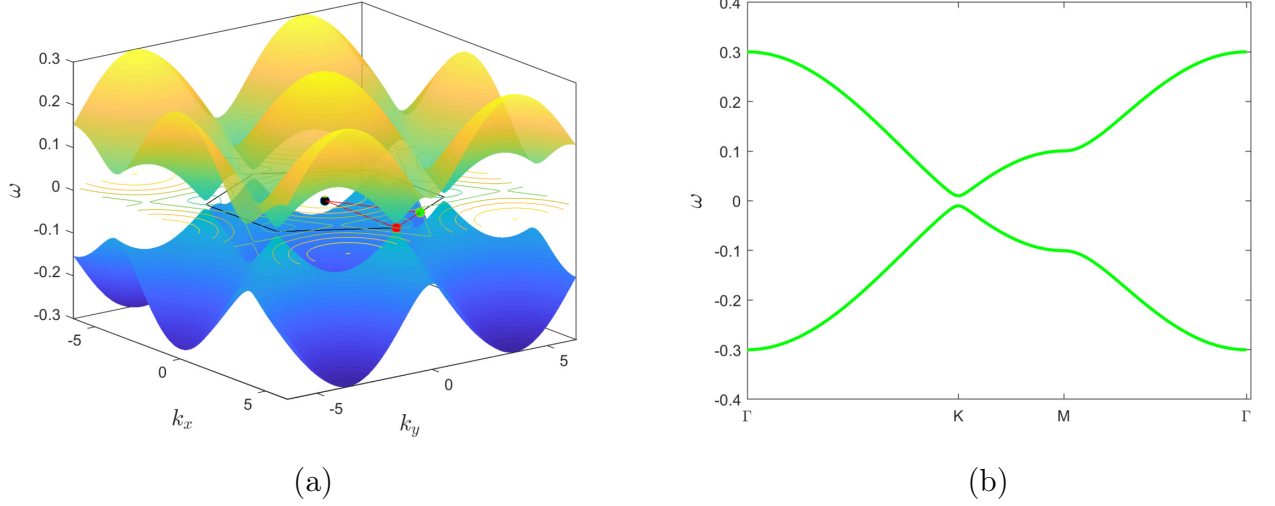


Рисунок A2: (a): трёхмерное изображение зонной структуры димеризованного графена с параметрами: период решетки $a = 1$, эффективная масса $M = 0.01$, $\omega_A = -\omega_B = 0.01$ – (a). (b): дисперсия вдоль главных направлений зоны Бриллюэна, отмеченных на панели (a) красным треугольником. Точки Γ , K , M соответствуют введенным на рис. A1.

Отметим, что эта система может быть выведена непосредственно из параксиального уравнения для решетки одномодовых волноводов, если искать решение в виде

$$\mathcal{E} = \left(\sum_A \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_A} \right) \psi_1 + \left(\sum_B \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_B} \right) \psi_2 \quad (\text{A.2})$$

и предполагать, что мода, локализованная в волноводе с центром в точке $\mathbf{R}$, имеет вид $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$.

Подставляя координаты векторов в (A.1), мы получаем

$$-\varkappa \left(e^{ik_y a_0} + 2e^{-ik_y a_0/2} \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a_0 \right) \psi_2 = \omega \psi_1; \quad (\text{A.3a})$$

$$-\varkappa \left(e^{-ik_y a_0} + 2e^{ik_y a_0/2} \cos \frac{\sqrt{3}}{2} k_x a_0 \right) \psi_1 = \omega \psi_2, \quad (\text{A.3b})$$

где введён параметр $\varkappa$ – коэффициент туннелирования, а $\omega_{A,B}$ – собственные частоты. Решая задачу на отыскание собственных чисел, мы найдём дисперсию объемных мод в форме

$$\omega_{\pm} = \omega_0 \pm \sqrt{M^2 + \varkappa^2 (1 + 4 \cos^2(k_x a/2) + 4 \cos(k_x a/2) \cos(k_y a \sqrt{3}/2))}, \quad (\text{A.4})$$

где $\omega_0 = (\omega_A + \omega_B)/2$ – средняя частота, и $M = (\omega_A - \omega_B)/2$ – эффективная масса, характеризующая расстройку частот. Димеризация открывает запрещенную зону $(-|M|, |M|)$ в двух долинах – окрестностях точек $K_{\pm}$. Около точек Дирака ($k_x = \pm K + \delta k_x, \delta k_y = 0$)

уравнение (A.4) приводит к

$$\omega_{\pm} = \omega_0 \pm \sqrt{M^2 + \frac{3}{4}\kappa^2 a^2 \delta k_x^2}. \quad (\text{A.5})$$

Без потери общности положим среднюю частоту $\omega_0 = 0$ и в дальнейших выкладках будем считать, что ω является отклонением от средней частоты.

В окрестности точек Дирака $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} + \delta\mathbf{k}$, где $\delta\mathbf{k}$ – малое возмущение, мы можем записать эффективный Гамильтониан:

$$\hat{H}_{K_{\pm}}(\delta\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M & v_D(\pm\delta k_x - i\delta k_y) - \mu(\delta k_x \pm i\delta k_y)^2 \\ v_D(\pm\delta k_x + i\delta k_y) - \mu(\delta k_x \mp i\delta k_y)^2 & -M \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

где $v_D = \frac{\sqrt{3}}{2}\kappa a$ – скорость Дирака и $\mu = \frac{\kappa a^2}{8}$.

A.2 Линейные краевые моды на доменных стенках модели сильной связи

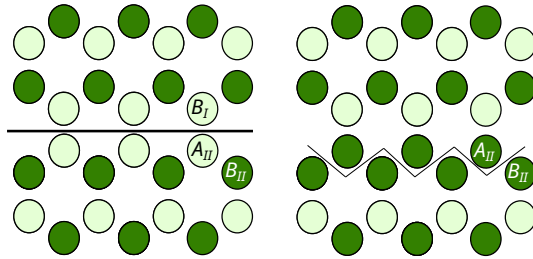


Рисунок A3: Геометрии графеновой решетки с зигзагообразными границами: слева – тип I, справа – тип II.

Обратимся теперь к фотонной топологической решетке на основе димеризованного графена, бесконечной по горизонтальной оси x и ограниченной по вертикальной оси y – *суперячейке*. Предполагая периодичность по оси x в этой системе, мы рассмотрим полосу, состоящую из двух доменов с зигзагообразными границами двух типов (zig-zag и bearded в англоязычной литературе, доменная стенка типа I и доменная стенка типа II). Доменная стенка образована инверсией знака эффективной массы на интерфейсе, как показано на рис. A3. Метод сильной связи для данной решетки может быть записан в виде системы дискретных уравнений:

$$\begin{cases} \omega\psi_{I,A}(n) = -\kappa\psi_{I,B}(n+1) - 2\kappa\cos(k\rho)\psi_{I,B}(n) + M\psi_{I,A}(n); & n = 0, 1, 2, \dots, N-1, \\ \omega\psi_{I,B}(n) = -\kappa\psi_{I,A}(n-1) - 2\kappa\cos(k\rho)\psi_{I,A}(n) - M\psi_{I,B}(n); & n = 1, 2, \dots, N, \\ \omega\psi_{II,A}(n) = -\kappa\psi_{II,B}(n-1) - 2\kappa\cos(k\rho)\psi_{II,B}(n) - M\psi_{II,A}(n); & n = 1, 2, \dots, N, \\ \omega\psi_{II,B}(n) = -\kappa\psi_{II,A}(n+1) - 2\kappa\cos(k\rho)\psi_{II,A}(n) + M\psi_{II,B}(n), & n = 0, 1, 2, \dots, N-1, \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

где $k \equiv k_x$ импульс в направлении x -ориентированной границы, $\rho = a/2$, $\psi_{s,j}(n)$ поле в

элементах n, j , расположенных в верхней и нижней решетках $s = I, II$, индекс $j = A, B$ соответствует разным подрешеткам, n – номер димера.

Уравнения для элементов на доменной стенке для зигзагообразной границы первого типа:

$$\begin{cases} \omega\psi_{I,B}(0) = -\varkappa\psi_{II,A}(0) - 2\varkappa\cos(k\rho)\psi_{I,A}(0) - M\psi_{I,B}(0); \\ \omega\psi_{II,A}(0) = -\varkappa\psi_{I,B}(0) - 2\varkappa\cos(k\rho)\psi_{II,B}(0) - M\psi_{II,A}(0). \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Для доменной стенки второго типа рассматриваемую систему следует модифицировать в точке $(0, A)$ (A.8) в полупространстве II. Это эквивалентно замене $-M \rightarrow M$ в соответствующем уравнении либо добавлению слагаемого $+2M\delta_{n,0}$.

Полоса ограничена по вертикальной оси, что формально соответствует следующим граничным условиям на внешних границах

$$\psi_{I/II,B/A}(N+1) = 0. \quad (\text{A.9})$$

Будем искать краевые состояния, локализованные на доменной стенке первого типа (z) и второго (b) в виде:

$$\begin{aligned} \psi_{I,A}^{(z)}(n) &= a_I^{(z)} e^{-\varkappa^{(z)}(n+1)a}, & \psi_{I,B}^{(z)}(n) &= b_I^{(z)} e^{-\varkappa^{(z)}na}, \\ \psi_{II,A}^{(z)}(n) &= a_{II}^{(z)} e^{-\varkappa^{(z)}na}, & \psi_{II,B}^{(z)}(n) &= b_{II}^{(z)} e^{-\varkappa^{(z)}(n+1)a}, \\ \psi_{I,A}^{(b)}(n) &= a_I^{(b)} e^{-\varkappa^{(b)}na}, & \psi_{II,B}^{(b)}(n) &= b_{II}^{(b)} e^{-\varkappa^{(b)}na}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Здесь параметр $(\varkappa^{(z,b)})^{-1}$ характеризует масштаб спада волновой функции. Из симметрии системы следует соотношение

$$b_I^{(z)} = E a_{II}^{(z)}, \quad b_{II}^{(b)} = E a_I^{(b)}, \quad E = \pm 1,$$

где знак $E = \pm 1$ соответствует симметричным/антисимметричным решениям относительно доменной стенки. Используя выражение (A.10) и граничные условия, мы получаем дисперсионные соотношения для краевых волн для обоих типов доменных стенок

$$\beta_b = -2\varkappa E \cos k\rho \pm \sqrt{\varkappa^2 + M^2}, \quad \beta_z = -\varkappa E \pm \sqrt{M^2 + 4\varkappa^2 \cos^2(k\rho)}.$$

Мы сравниваем свойства $\beta_{b,z}$ в таблице 11. Также спектр краевых состояний может быть

	тип I	тип II
β (МСС)	$\varkappa - \sqrt{M^2 + 4\varkappa^2 \cos^2(ka/2)}$	$2\varkappa \cos(ka/2) + \sqrt{M^2 + \varkappa^2}$
$\beta(k \rightarrow K_+)$	$\varkappa - \sqrt{M^2 + \varkappa^2} - \frac{\varkappa^2 \sqrt{3} \delta ka}{2(\sqrt{M^2 + \varkappa^2})}$	$-\varkappa - \varkappa \frac{\sqrt{3}}{2} \delta ka + \sqrt{\varkappa^2 + M^2}$
$ \varkappa \ll M $	$-\varkappa \frac{\sqrt{3}}{2} \delta ka$	$-\varkappa \frac{\sqrt{3}}{2} \delta ka$

Таблица 11: Сравнение дисперсионных соотношений для интерфейсов двух типов.

получен численно. Для этого нужно найти собственные числа Гамильтониана, отвечающего

полосе с зигзагообразными границами, состоящей из двух доменов. Данная матрица может быть составлена с помощью уравнений (А.7).

Заметим, что соответствие между континуальной моделью и методом сильной связи устанавливается соотношением

$$\frac{\psi_1(II)}{\psi_2(II)} = \frac{\psi_1(I)}{\psi_2(I)} = \pm 1 = \frac{a_I}{b_I} = \frac{a_{II}}{b_{II}}, \quad (\text{А.11})$$

которое может быть интерпретировано как граничное условие на интерфейсе, разделяющем среды I и II , то есть на доменной стенке.

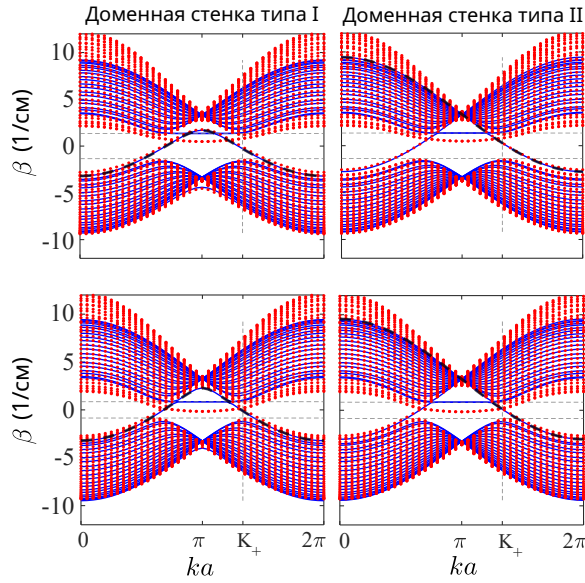


Рисунок А4: Зонная структура $\beta(k)$ для суперячейки с зигзагообразными доменными стенками типа I (слева) и II (справа). Красными точками построен спектр, сдвинутый на $b_0 = -8$ 1/см, полученный в рамках параксиального уравнения. Сплошные линии синего цвета — спектр в рамках МСС решетки с параметрами: $\varkappa = 3.05$ 1/см, $M = 1.35$ 1/см (верхний ряд); $\varkappa = 3.145$ 1/см, $M = 0.85$ 1/см (нижний ряд). Черные пунктирные линии изображают дисперсию краевых состояний, $\beta_b = 2\varkappa \cos(ka/2) + \sqrt{M^2 + \varkappa^2}$ (доменная стенка типа II), $\beta_z = \varkappa - \sqrt{4\varkappa^2 \cos^2(ka/2)^2 + M^2}$ (доменная стенка типа I). Параметры для верхнего ряда совпадают с перечисленными в таблице 1, для нижнего ряда мы рассмотрели другой контраст показателей преломления $n_A = 2.66 \times 10^{-3}$; $n_B = 2.74 \times 10^{-3}$, который характеризуется меньшей шириной щели и лучшим соответствие континуальному пределу $\varkappa \gg M$.

В Приложение 2: Основные уравнения фотоники

В.1 Стационарное уравнение Максвелла для фотонных кристаллов

В данной главе мы рассмотрим основные уравнения электродинамики фотонных платформ, а также приведем их упрощения, необходимые для дальнейшего анализа фотонных структур с периодической диэлектрической проницаемостью.

В отсутствие источников, уравнения Максвелла для линейной, изотропной и безызлучательной среды имеют вид в СИ:

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (\text{B.1})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0, \quad (\text{B.2})$$

$$\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Здесь $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ – электрическое и магнитное поля, соответственно; $\epsilon(\mathbf{r})$ – диэлектрическая проницаемость среды; ϵ_0 и μ_0 – диэлектрическая и магнитная проницаемости вакуума.

Для упрощения анализа, представим электрическое и магнитное поля в виде гармонических функций:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}, \quad (\text{B.5})$$

где ω – частота. Подставляя эти выражения в уравнения (B.4), мы получим:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.6})$$

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (\text{B.7})$$

Здесь $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ – скорость света в вакууме.

В рассматриваемом нами случае фотонные кристаллы, описанные в главе 4, представляют собой двумерную периодическую структуру в плоскости xy . Мы предполагаем, что профиль мод вдоль оси z задан. Тогда можно разделить электромагнитные поля на две ортогональные поляризации:

1. **ТЕ поляризация:** $\mathbf{E}^{TE} = E_x(x, y)\hat{\mathbf{x}} + E_y(x, y)\hat{\mathbf{y}}$, $\mathbf{H}^{TE} = H_z(x, y)\hat{\mathbf{z}}$.
2. **ТМ поляризация:** $\mathbf{E}^{TM} = E_z(x, y)\hat{\mathbf{z}}$, $\mathbf{H}^{TM} = H_x(x, y)\hat{\mathbf{x}} + H_y(x, y)\hat{\mathbf{y}}$.

Для данных поляризаций задача на собственные значения проще всего решается для скалярных полей $H_z(x, y)$ и $E_z(x, y)$ соответственно.

В.2 Параксиальное уравнение

Далее мы остановимся на фундаментальных уравнениях, описывающих распространение электромагнитных волн в фотонных решетках с Керровской нелинейностью: из уравнений Максвелла в параксиальном приближении получим нелинейное уравнение Шрёдингера для

огибающей волнового пакета.

Для этого мы предположим, электрическое поле имеет вид $\mathbf{E} = \mathcal{E}(x, y, z)e^{ik_0z - i\omega t}\mathbf{e}$, где $\mathbf{e}$ – единичный вектор в плоскости, перпендикулярной оси z , коллинеарный вектору электрического поля; $k_0 = \frac{2\pi n_0}{\lambda}$ – волновое число, n_0 – фоновый показатель преломления среды, $\mathcal{E}(x, y, z)$ – медленно меняющаяся функция переменной z , где плавность определяется неравенством $|\partial_{zz}\mathcal{E}| \ll |k_0\partial_z\mathcal{E}|$. Иногда в литературе эта функция называется *комплексной огибающей*. Заметим, что при записи поля в таком виде мы подразумеваем справедливость параксиального приближения, означающего, что проекция волнового вектора на параксиальное направление (z) значительно превышает проекции на направления x, y ($k_{x,y} \ll k_z \approx k_0$). Рассматриваемая нами система, фотонная решетка, является пространственно неоднородной структурой, диэлектрическая проницаемость которой зависит от координат в плоскости (x, y) так, что $\varepsilon(x, y) = \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon(x, y)$, где $\varepsilon_0 \equiv \text{const}$ и $|\Delta\varepsilon(x, y)| \ll 1$ – малый параметр. Пусть функция $\Delta\varepsilon(x, y)$ меняется слабо на масштабах длины волны ($\partial_{x,y}\Delta\varepsilon(x, y) \ll \frac{2\pi}{k_0}$), что позволяет пренебречь всеми пространственными производными от диэлектрической проницаемости и записать соотношение $\text{div}(\varepsilon\mathbf{E}) = \text{div}(\mathbf{E}) = 0$, то есть $\text{rotrot}\mathbf{E} = -\Delta\mathbf{E}$.

Используя все введенные предположения, мы можем из уравнений Максвелла вывести *параксиальное уравнение Гельмгольца* для комплексной огибающей:

$$-\Delta_{\perp}\mathcal{E} + (k_0^2 - \varepsilon\omega^2/c^2)\mathcal{E} = 2ik_0\partial_z\mathcal{E}.$$

Запишем показатель преломления в виде суммы постоянной фоновой части n_0 и малой добавки Δn , обусловленной координатной зависимостью геометрической формы решётки: $n(x, y) = n_0 + \Delta n$, $|\Delta n| \ll n_0$, $\Delta n \approx \Delta\varepsilon/2$, $k_0 = \frac{\omega}{c}n_0$. Тогда мы можем преобразовать (B.2):

$$i\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial z} + \frac{1}{2k_0}\Delta_{\perp}\mathcal{E} + \frac{k_0\Delta n}{n_0}\mathcal{E} = 0. \quad (\text{B.8})$$

Малая добавка к фоновому показателю преломления Δn может описывать не только геометрическую форму решетки $n_L(x, y)$, но и нелинейные эффекты $n_2|\mathcal{E}|^2$, то есть $\Delta n = n_L(x, y) + n_2|\mathcal{E}|^2$.

Если в качестве конкретного примера фотонной решётки мы рассматриваем систему одномерных эллиптических волноводов с полуосями L_x ; L_y , расположенных в узлах периодической решетки с координатами (x_n, y_m) , то изменение показателя преломления из-за геометрической формы представимо в виде $n_L(x, y) = n_A \sum_{n,m} S(x - x_n^A, y - y_m^A) + n_B \sum_{n,m} S(x - x_n^B, y - y_m^B)$, суммирование ведется по узлам решетки с координатами x_n, y_m , для Гауссовых волноводов $S(x, y) = e^{-x^2/L_x^2 - y^2/L_y^2}$ [120]. Индексы A и B соответствуют подрешеткам.

С Приложение 3: Топологические характеристики

В этом приложении мы рассмотрим математический формализм, позволяющий описать особенности зонной структуры фотонных топологических решёток.

Топология – раздел математики, изучающий свойства геометрических объектов, сохраняющиеся при непрерывных деформациях их формы. Эти неизменные свойства могут быть выражены в виде числовых характеристик, называемых топологическими инвариантами, которые принимают целочисленные значения.

Для наглядной иллюстрации рассмотрим классификацию множества двумерных поверхностей в трёхмерном пространстве. Топологическим инвариантом здесь является число отверстий g : $g = 0$ для сферы, $g = 1$ для тора (образован из сферы приклеиванием $g = 1$ "ручек") и так далее. Два объекта с различными значениями g не могут быть преобразованы друг в друга путем непрерывных деформаций без разрывов и склеек.

Существует фундаментальная математическая теорема — теорема Гаусса–Бонне, связывающая локальные геометрические свойства поверхности (кривизну κ) с глобальными топологическими (число отверстий g). Эта теорема утверждает, что полная гауссова кривизна двумерной замкнутой поверхности всегда является целым числом и может быть выражена через g :

$$\int_{S_{tot}} \kappa dS = 4\pi(1 - g). \quad (C.1)$$

Объекты, характеризующиеся одинаковыми значениями топологических инвариантов, являются топологически эквивалентными, иными словами, находятся в одной топологической фазе. Изменение значения топологического инварианта свидетельствует о топологическом фазовом переходе, который сопровождается качественным изменением свойств системы.

Топология в фотонике определена зонной структурой фотонной решетки в пространстве волновых векторов. Топологическим инвариантом является число Черна (см. математическое описание ниже). Две энергетические зоны считаются топологически эквивалентными, если одна может быть преобразована в другую без закрытия запрещённой зоны (щели) между ними. Таким образом, фазовый переход сопровождается закрытием щели и дальнейшим переворотом зон.

При введении интерфейса между двумя материалами, находящимися в различных топологических фазах, на границе раздела возникают краевые состояния. Эти состояния не чувствительны к локальным возмущениям и дефектам, что делает их топологически защищёнными. Существует связь между числом таких краевых состояний n , возникающих на интерфейсе, и разностью топологических инвариантов материалов, образующих этот интерфейс ($C_{1,2}$): $n = |C_1 - C_2|$. Эта связь известна как объемно-граничное соответствие [13].

Число Черна принимает целые дискретные значения, и система оказывается устойчивой к малым изменениям параметров среды, не меняющим топологический инвариант. Это означает, что топологические свойства (в данном случае, связанные с краевыми состояниями) сохраняются даже при наличии беспорядка или дефектов, что делает такие системы

перспективными для применения в фотонных устройствах.

С.1 Фаза Берри и топологический инвариант

Гамильтониан, описывающий распространение света в фотонных решётках, является периодической функцией координат в силу периодичности входящего в него показателя преломления.

Пусть Гамильтониан H зависит от набора параметрических переменных $\mathbf{R}$. Введем в исследуемую систему адиабатически медленную зависимость параметров от времени $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}(t)$ и рассмотрим циклическую эволюцию от начального момента времени $t = 0$ до такого T , что $\mathbf{R}(t = 0) = \mathbf{R}(t = T)$. В рамках адиабатического приближения предполагается, что состояние $|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle$ в любой момент времени t будет соответствовать тому же энергетическому уровню, в котором оно было приготовлено в начальный момент времени $t = 0$.

Введем ортогональный базис из мгновенных собственных состояний, определенный для каждого из моментов времени t [169]:

$$H(\mathbf{R}(t)) |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{R}(t)) |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle,$$

здесь функции $|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle$, являющиеся нормированными невырожденными собственными состояниями, определены с точностью до произвольного фазового множителя: $|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle \rightarrow e^{i\chi(\mathbf{R})} |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle$.

В случае адиабатических изменений параметров во времени решение задачи $i\partial_t|\Phi(t)\rangle = H(\mathbf{R}(t))|\Phi(t)\rangle$ можно записать с использованием базиса из мгновенных собственных состояний:

$$|\Phi(t)\rangle = e^{i\gamma_c(t)} \exp \left[-i \int_0^t dt' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t')) \right] |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle,$$

где интеграл $\int_0^t dt' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t'))$ по смыслу является динамической фазой, описывающей эволюцию собственного состояния в соответствии с уравнением Шрёдингера. На свойствах $\gamma_n(t)$, фазы, являющейся решением $\partial_t \gamma_n(t) = i \langle u_n(t) | \partial_t | u_n(t) \rangle$, мы остановимся подробнее.

Для начала сделаем замену переменных и перейдем от интегрирования по времени t к интегрированию в пространстве параметров $\mathbf{R}$,

$$\gamma_n = i \int_0^t \left\langle u_n(\mathbf{R}(t')) \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right| u_n(\mathbf{R}(t')) \right\rangle \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t'} dt' = i \int_{\mathcal{C}} \left\langle u_n(\mathbf{R}) \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right| u_n(\mathbf{R}) \right\rangle d\mathbf{R}. \quad (\text{C.2})$$

Это выражение записано в виде, зависящем только от того, как меняются параметры системы $\mathbf{R}$, и интегрирование ведется вдоль замкнутого контура, определенного в пространстве $\mathbf{R}$. Важно подчеркнуть, что значение этой величины не зависит от конкретной динамики эволюции – ни от скорости изменения параметров, ни от временной зависимости $\mathbf{R}(t)$. Определяющим является лишь геометрический путь (конечные значения измененных параметров), пройденный системой в пространстве параметров, то есть по смыслу величина γ_n является геометрической фазой.

В выражении (С.2) вводят величину $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle u_n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} | u_n(\mathbf{R}(t)) \rangle$ – вектор, который в литературе называют *векторным потенциалом Берри*. Эта величина удовлетворяет калибровочному преобразованию $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\chi$ (при $|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle \rightarrow e^{i\chi(\mathbf{R})} |u_n(\mathbf{R}(t))\rangle$), и является аналогом векторного потенциала из электромагнетизма (подробнее об электромагнитных аналогиях см. таблицу 12).

Фаза χ , фигурирующая в калибровочном преобразовании, изменится на величину $\chi(\mathbf{R}(t=T)) - \chi(\mathbf{R}(t=0))$ в ходе эволюции системы от начального момента времени $t=0$ до конечного $t=T$. При динамике вдоль замкнутой траектории $\mathcal{C}$ (в случае выполнения $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$), из условия однозначности функции $|u_n(\mathbf{R}(t))\rangle$ следует

$$\chi(\mathbf{R}(T)) - \chi(\mathbf{R}(0)) = 2m\pi,$$

где m является целым числом. При этом γ_n при применении калибровочного преобразования изменяется как

$$\gamma'_n = i \int_{\mathcal{C}} \left\langle u_n(\mathbf{R}) \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right| u_n(\mathbf{R}) \right\rangle d\mathbf{R} - \int_{\mathcal{C}} \frac{\partial \chi(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} d\mathbf{R} = \gamma_n - [\chi(\mathbf{R}(T)) - \chi(\mathbf{R}(0))],$$

как мы видим, фаза γ_n при смене калибровки меняется на величину, кратную 2π , то есть является калибровочно инвариантной с точностью до $2\pi l$, где $l \in \mathbb{Z}$. Мы можем выбрать такую калибровку, что $\gamma'_n = \gamma_n$.

Введённая нами геометрическая фаза также называется *фазой Берри*:

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}).$$

В топологической физике вводят *кривизну Берри* $\Omega^n(\mathbf{R})$ (аналог магнитного поля в электромагнетизме), которая выражается через векторный потенциал Берри

$$\Omega^n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}).$$

Компоненты $\Omega^n(\mathbf{R})$ могут быть записаны в тензорном виде

$$\Omega_{\mu\nu}^n(\mathbf{R}) = \partial_{\mu} (A_n)_{\nu} - \partial_{\nu} (A_n)_{\mu} = i (\langle \partial_{\mu} u_n(\mathbf{R}) | \partial_{\nu} u_n(\mathbf{R}) \rangle - \langle \partial_{\nu} u_n(\mathbf{R}) | \partial_{\mu} u_n(\mathbf{R}) \rangle),$$

что есть антисимметричный тензор второго ранга. В таблице 12 мы перечисляем все параметры Берри и их свойства, обсужденные ранее.

Далее мы перейдем от формальных переменных к физическому пространству волновых векторов $\mathbf{k}$, то есть Гамильтониан $H_{\mathbf{k}}$ зависит от $\mathbf{k}$, а $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{k}$.

Как мы знаем, согласно теореме Блоха собственные состояния такого Гамильтониана $H_{\mathbf{k}}$ представимы в виде

$$|\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle,$$

где $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ также является периодической функцией, причем $H_{\mathbf{k}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$,

Фаза Берри	Векторный потенциал Берри	Кривизна Берри
$\gamma_n = i \oint_C \langle u_n(\mathbf{R}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} u_n(\mathbf{R}) \rangle d\mathbf{R}$	$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle u_n(\mathbf{R}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} u_n(\mathbf{R}) \rangle$	$\boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}) = \nabla \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})$
калибровочно инварианта с точностью до $2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$ $\chi(\mathbf{R}(T)) - \chi(\mathbf{R}(0)) = 2\pi m$,	калибровочно неинвариантен $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \frac{\partial \chi(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}}$	калибровочно инварианта $\nabla \times \nabla \chi = 0$
Аналогична магнитному потоку $\Phi = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})$	Аналогичен векторному потенциалу $\mathbf{A}(\mathbf{r})$	Аналогична магнитному полю $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$

Таблица 12: Аналогии параметров Берри с величинами из физики электромагнетизма.

$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ определяет зонную структуру в пространстве волновых векторов $\mathbf{k}$.

Тогда кривизна Берри n -той зоны переписывается в виде

$$\boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_n(\mathbf{k}) | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle$$

и показывает, как собственное состояние изменяется как функция квазиволнового вектора $\mathbf{k}$ внутри зоны Бриллюэна. Заметим, зона Бриллюэна периодична по двум направлениям k_x , k_y , то есть является тором.

Мы можем ввести параметр, аналогичный полной гауссовой кривизне поверхности, фигурирующей в (С.1), а именно – интеграл кривизны Берри по первой зоне Бриллюэна:

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{k}).$$

Эта величина называется *числом Черна*, топологическим инвариантом, и может принимать только целые значения, что мы покажем далее.

Используя теорему Стокса и возвращаясь в пространство параметров $\mathbf{R}$, мы можем переписать число Черна:

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = \gamma_n / 2\pi,$$

при интегрировании по замкнутому контуру можно выбрать такую калибровку, в которой фаза Берри зануляется. При этом число Черна не всегда равно нулю, так как теорему Стокса можно применять, только если нет особенностей подынтегрального выражения внутри контура. Если присутствует особенность, то нужно разбить область интегрирования на области без сингулярностей:

$$\int_{S_{\text{tot}}} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}) = \int_{S_1} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}) + \int_{S_2} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}) = \gamma_n + \gamma'_n = 2\pi C_n,$$

где входящие в данное выражение интегралы определены как:

$$\gamma_n = \oint_{C_1} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n = \int_{S_1} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}); \quad \gamma'_n = \oint_{C_2} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}'_n = \int_{S_2} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}) = -\gamma_n + 2\pi m,$$

в последнем равенстве использовано, что $\mathcal{C}_1 = -\mathcal{C}_2$ (для замкнутой поверхности) и γ_n может отличаться от γ'_n на $2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$, так как интегрирование в обоих случаях ведется по одному контуру, физические наблюдаемые должны быть теми же самыми, но калибровка может быть другой. В итоге получим

$$\int_{\mathcal{S}_{\text{tot}}} d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{R}) = \gamma_n + \gamma'_n = 2\pi C_n = 2\pi m,$$

то есть число Черна является целочисленной величиной, топологическим инвариантом. Из вывода этого факта также следует, что если число Черна отлично от нуля, то не существует калибровки, в которой функция изменяется непрерывно по всей зоне Бриллюэна.

Чтобы изменить целочисленную величину, число Черна, надо закрыть или открыть щель, что нельзя сделать с помощью малых возмущений, в этом и есть суть топологической защищенности.

Число Черна определяет глобальные свойства, потому что получено путём интегрирования локальной кривизны Берри по всей зоне Бриллюэна. Отметим, что число Черна говорит не о свойствах зоны Бриллюэна как двумерной поверхности в трёхмерном пространстве (число дырок), а об особенностях собственных функций и зонной структуры.

В качестве конкретного примера мы рассмотрим Гамильтониан двухуровневой системы, который в общем виде записывается как:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_i d_i(\mathbf{k}) \sigma_i = \begin{pmatrix} d_z & d_x - id_y \\ d_x + id_y & -d_z \end{pmatrix},$$

где σ_i – матрицы Паули.

Энергетический спектр системы состоит из двух уровней:

$$E_{\pm} = \pm |\mathbf{d}|, \quad |\mathbf{d}| = \sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2}.$$

Соответствующие нормированные собственные векторы имеют вид:

$$|u_+(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{d}|(|\mathbf{d}| + d_z)}} \begin{pmatrix} |\mathbf{d}| + d_z \\ d_x - id_y \end{pmatrix}, \quad |u_-(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2|\mathbf{d}|(|\mathbf{d}| - d_z)}} \begin{pmatrix} d_z - |\mathbf{d}| \\ d_x - id_y \end{pmatrix}.$$

Мы можем написать явное выражение для векторного потенциала Берри

$$\mathbf{A}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\pm 1}{2|\mathbf{d}(\mathbf{k})|(|\mathbf{d}(\mathbf{k})| + d_z)} \left(d_y \frac{\partial d_x}{\partial \mathbf{k}} - d_x \frac{\partial d_y}{\partial \mathbf{k}} \right)$$

и кривизны Берри в случае, когда $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$

$$\boldsymbol{\Omega}^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \frac{1}{2} \left[\frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^3} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{d} \times \partial_{k_y} \mathbf{d}) \right] \mathbf{e}_z.$$

Нетривиальная топология определяется числом Черна, которое представляет собой интеграл по зоне Бриллюэна от кривизны Берри. Это число принимает целые значения

и характеризует, как векторное поле $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ охватывает начало координат при обходе всей зоны Бриллюэна. Ненулевое число Черна возникает только тогда, когда вектор $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ обращается в ноль хотя бы в одной точке — именно там кривизна Берри имеет особенность, создающую нетривиальный поток. Если же $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ не меняет знак и не обращается в ноль, то соответствующее отображение является тривиальным, и число Черна равно нулю.

С использованием этих соотношений построены топологические характеристики, перечисленные в разделе 1.4.2.

С.2 Топологические свойства модели VH

Применим развитый формализм к модели VH 1.4.2. Рассмотрим Гамильтониан:

$$\mathcal{H}_{\text{VH}}(\mathbf{k}) = v_D (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y) + M \sigma_z = \sum_i d_i(\mathbf{k}) \hat{\sigma}_i. \quad (\text{C.3})$$

Для упрощения дальнейших выкладок положим $v_D = 1$, тогда введенный вектор $\mathbf{d}$ имеет координаты $d_1 = k_x$; $d_2 = k_y$; $d_3 = M$. Выражение для векторного потенциала Берри:

$$(A_n)_x = \frac{k_y}{2(k^2 + M(M - \sqrt{k^2 + M^2}))}; \quad (A_n)_y = -\frac{k_x}{2(k^2 + M(M - \sqrt{k^2 + M^2}))}. \quad (\text{C.4})$$

С использованием этих соотношений можно выразить кривизну Берри через эффективную массу и модуль волнового числа:

$$\Omega^n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = \left(\frac{\partial(A_n)_y}{\partial k_x} - \frac{\partial(A_n)_x}{\partial k_y} \right) \mathbf{e}_z = \frac{M}{2(k^2 + M^2)^{3/2}} \mathbf{e}_z. \quad (\text{C.5})$$

Данное выражение позволяет определить число Черна:

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d^2\mathbf{k} \Omega^n(\mathbf{k}) = \int_0^\infty k dk \frac{M}{2(k^2 + M^2)^{3/2}} = -M \frac{1}{2\sqrt{k^2 + M^2}} \Big|_0^\infty = \text{sgn}(M)/2.$$

Таким образом, топология решетки на основе димеризованного графена определяется знаком эффективной массы M . Инверсии знака эффективной массы $M(y) = \begin{cases} M_0, & y > 0; \\ -M_0, & y < 0, \end{cases}$ соответствует соединение двух материалов с различными значениями топологического инварианта. Значит, вследствие объемно-краевого соответствия на интерфейсе существует одно краевое состояние с бесщелевым спектром.

Дополнительно мы можем определить топологические свойства модели МСС (А.1), для этого мы использовали формулу для кривизны Берри в виде

$$\Omega^n(\mathbf{k})_z = -2 \sum_{u'_n \neq n} \frac{\text{Im} \langle u_n | v_{k_x} | u'_n \rangle \langle u'_n | v_{k_y} | u_n \rangle}{(E_n - E_{n'})^2} \quad (\text{C.6})$$

и построили рис. С1.

В окрестности точек высокой симметрии $K_\pm$ уравнение (С.6) описывает поведение

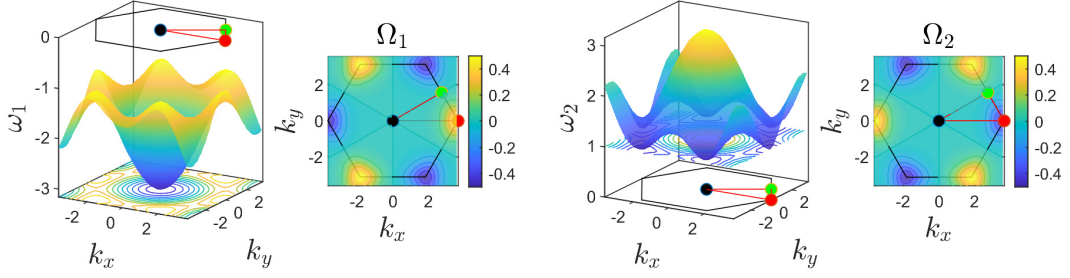


Рисунок C1: Кривизна Берри $\Omega^n(\mathbf{k})_3 \equiv \Omega_n$ и соответствующие энергетические зоны ω_n . Результаты получены для МСС (уравнение (A.1)), для численного построения кривизны Берри используется формула (C.6). Параметры $M = 1$, $a_0 = 2/3$, $\varkappa = 1$.

кривизны Берри $\Omega_n = \frac{v_D^2 M}{2(v_D^2(k_x - K_\pm)^2 + v_D^2 k_y^2 + M^2)^{3/2}}$, где $M = 1$, $a_0 = 2/3$, $\varkappa = 1$.

С.3 Одномерная модель SSH и её топологические свойства

Одномерная модель Су-Шриффера-Хигера (SSH) представляет собой фундаментальную теоретическую конструкцию, в которой можно исследовать нетривиальные топологические свойства. Первоначально предложенная для описания полиацетилена [170] W. P. Su, J. R. Schrieffer, и A. J. Heeger, эта модель стала классическим примером простейшего топологического изолятора. Молекулярная структура полиацетилена характеризуется чередованием длинных и коротких межатомных связей, что отражает димеризацию кристаллической решётки. В рамках решёточных уравнений это соответствует чередованию коэффициентов связи, как на рис. C2.

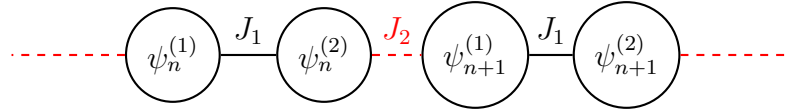


Рисунок C2: Схематическое изображение решетки SSH, описываемой уравнением (C.8).

Мы начнем с вывода дисперсионных соотношений для одномерных решеток SSH. Рассмотрим сначала бесконечную систему, которая описывается следующей системой уравнений:

$$i \frac{\partial \psi_m}{\partial z} = J_1 \psi_{m-1} + J_2 \psi_{m+1}, \quad m - \text{четное}; \quad (\text{C.7a})$$

$$i \frac{\partial \psi_m}{\partial z} = J_2 \psi_{m-1} + J_1 \psi_{m+1}, \quad m - \text{нечетное}, \quad (\text{C.7b})$$

где J_1 и J_2 – коэффициенты связи между соседними элементами решетки.

Элементарная ячейка данной структуры содержит два элемента, что позволяет переписать систему в терминах двухкомпонентного вектора $[\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}]$, где n – номер элементарной ячейки:

$$i\frac{\partial\psi_n^{(1)}}{\partial z} = J_1\psi_n^{(2)} + J_2\psi_{n-1}^{(2)}; \quad i\frac{\partial\psi_n^{(2)}}{\partial z} = J_2\psi_{n+1}^{(1)} + J_1\psi_n^{(1)}. \quad (\text{C.8a})$$

Применяя преобразование Фурье $[\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}] \sim [\Psi_1, \Psi_2] \exp\{in\kappa_y L_y\}$, где L_y – пространственный период решетки, а κ_y – волновое число, к уравнениям (C.8), мы получаем Гамильтониан в импульсном представлении:

$$\hat{H}^{\text{SSH}}(\kappa_y) = \begin{pmatrix} 0 & J_1 + J_2 e^{-i\kappa_y L_y} \\ J_1 + J_2 e^{i\kappa_y L_y} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.9})$$

Собственные значения этого Гамильтониана определяют зонную структуру системы и могут быть использованы для анализа топологических свойств модели. Для начала обсудим симметрии оператора (C.9).

Инверсионная симметрия: Модель обладает инверсионной симметрией (симметрия обращения координаты):

$$I \hat{H}^{\text{SSH}}(\kappa_y) I^{-1} = \hat{H}^{\text{SSH}}(-\kappa_y), \quad I = \sigma_x, \quad (\text{C.10})$$

где σ_x – матрица Паули. Физически это означает инвариантность системы при замене подрешёток $A \leftrightarrow B$ и обращении импульса $\kappa_y \rightarrow -\kappa_y$.

Киральная (подрешёточная) симметрия: SSH-модель также обладает киральной симметрией:

$$U_C \hat{H}^{\text{SSH}} U_C^{-1} = -\hat{H}^{\text{SSH}}, \quad U_C = \sigma_z, \quad (\text{C.11})$$

что отражает отсутствие прямых переходов внутри одной подрешётки ($A \rightarrow A$ или $B \rightarrow B$). Из условия киральной симметрии следует, что если $|\psi\rangle$ – собственный вектор гамильтониана с энергией E , то $U_C|\psi\rangle$ – собственный вектор с энергией $-E$. Таким образом, энергетический спектр *симметричен относительно нулевой энергии*. Это означает, что состояние с нулевой энергией (если оно существует в системе) может быть либо невырожденным (в случае нечётного числа уровней), либо иметь пару с противоположной энергией. В открытых цепочках это приводит к возникновению *состояний с точно нулевой энергией* на границах системы. Существование таких краевых состояний не зависит от деталей потенциала или возмущений, сохраняющих киральную симметрию. Это делает их топологически защищёнными.

Собственные числа Гамильтониана C.9

$$\beta^{(\pm)} = \pm \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos \kappa_y L_y} \equiv \pm \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos \varkappa}$$

определяют постоянные распространения объемных мод. Здесь мы ввели обозначение безразмерного волнового числа $\varkappa = \kappa_y L_y$.

Щель в спектре закрывается в точке $\kappa_y L_y = \pi$ при $J_1 = J_2$ и в $\kappa_y = 0$ при $J_1 = -J_2$.

В окрестности границы зоны Бриллюэна $\kappa_y L_y = \pi + \delta k L_y$ мы можем ввести эффективный

Гамильтониан Дираковского вида

$$H_D(\delta k) = -|J_1 - J_2|\hat{\sigma}_x + v_D\hat{\sigma}_y\delta k, \quad (\text{C.12})$$

где Дираковская скорость $v_D = \sqrt{J_1 J_2} L_y$. Величина щели при этом зависит от контраста коэффициентов связи $\Delta_g = 2|J_1 - J_2|$.

С.4 Топологические свойства SSH решетки

Для одномерных топологических структур с инверсионной симметрией топологический инвариант, характеризующий различные топологические фазы, — это фаза Зака. Фаза Зака — это геометрическая фаза, которая возникает при адиабатическом изменении волнового вектора k по всей первой зоне Бриллюэна:

$$\varphi_n^z = i \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \langle u_n(k) | \partial_k | u_n(k) \rangle dk, \quad (\text{C.13})$$

где $u_n(k)$ — нормированный собственный вектор для n -ой зоны. Соответствующее число намотки (winding number) для зоны равно $W = \varphi_n^z / \pi$. Когда фаза Зака для двух зон равна 0, структура является тривиальной, и краевые состояния отсутствуют. Однако, когда фаза Зака равна π , решетка становится топологически нетривиальной, и существуют топологически защищённые краевые состояния.

Для SSH системы собственные векторы для $E = \pm d$ можно также записать как:

$$|u_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |u_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix},$$

где $\varphi = \arctan(d_2/d_1)$. Вектор $\mathbf{d}(k) = (d_1(k), d_2(k), 0)$ описывает замкнутую кривую. При этом число намотки:

$$W = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d_1 \partial_k d_2 - d_2 \partial_k d_1}{d_1^2 + d_2^2} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_k \varphi dk; \quad \varphi_n^z = \pi W.$$

Обсудим связь топологических характеристик с псевдоспином. При адиабатическом изменении волнового вектора k от $-\pi$ до π , вектор $\mathbf{d}(k)$ совершает движение в плоскости (d_1, d_2) , а вместе с ним вращается и псевдоспин $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$. Если параметры J_1 и J_2 таковы, что система находится в нетривиальной топологической фазе ($|J_2| > |J_1|$), то вектор $\mathbf{d}(k)$ охватывает начало координат при обходе всей зоны Бриллюэна, и псевдоспин делает *полный оборот* вокруг этой точки. Число полных оборотов, которые делает псевдоспин при изменении k от $-\pi$ до π равняется W .

Иногда в практических расчетах используют альтернативную дискретную формулу для (C.13):

$$\varphi_n^z = \text{Im} \log \prod_{i=1}^N \langle u_{n\mathbf{k}_i} | u_{n\mathbf{k}_{i+1}} \rangle.$$

Д Приложение 4: Некоторые численные методы

Д.1 Метод операторной экспоненты

Для численного моделирования динамики в рамках системы нелинейных Дираковских уравнений (2.11) мы использовали *метод операторной экспоненты* (*the split-step (Fourier) method*), основанный на представлении экспоненты от суммы операторов в виде произведения экспонент. Такой метод часто используется для решения эволюционных уравнений с нелинейностью, а также для уравнений с Гамильтонианом, представимым в виде суммы операторов, для каждого из которых по отдельности решить неявное уравнение оказывается легко.

Чтобы описать реализацию данного метода, перепишем систему (2.11) в форме:

$$i\partial_t\psi = [H_0 + V]\psi; \quad H_0 = \begin{pmatrix} 0 & -(i\partial_x + \partial_y) \\ -(i\partial_x - \partial_y) & 0 \end{pmatrix}; \quad V = \begin{pmatrix} M - g|\psi_1|^2 & 0 \\ 0 & -M - g|\psi_2|^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1})$$

Эволюция начального распределения ψ_0 за время dt представима в виде

$$\psi = \exp(-i(H_0 + V)dt)\psi_0 = \exp\left(-i\frac{dt}{2}H_0\right) \exp(-idtV) \exp\left(-i\frac{dt}{2}H_0\right) \psi_0. \quad (\text{D.2})$$

Здесь первый множитель $\exp(-i\frac{dt}{2}H_0)$ может быть посчитан в Фурье-пространстве (где Фурье-образы f_k функции $f(x, y)$ определены как $f_k = \int dx dy f(x, y) e^{ik_x x + ik_y y}$) путём замены $\partial_{x,y} = ik_{x,y}$.

Затем мы находим собственные значения этой матрицы и соответствующие собственные векторы, чтобы привести её к диагональному виду J :

$$J = P^{-1}H_0P, \quad P = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_x + ik_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x - ik_y}{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.3})$$

здесь P – матрица линейного преобразования к новому базису.

Этот переход позволяет посчитать экспоненту от оператора по стандартной формуле:

$$\exp\left(-i\frac{dt}{2}H_0\right) = P \exp\left(-i\frac{dt}{2}J\right) P^{-1}.$$

Поскольку V – диагональная матрица, её вклад в (D.2) можно посчитать сразу без дополнительных преобразований.

Метод операторной экспоненты условно устойчив, то есть устойчив только при выполнении определенного соотношения между шагом по времени (dt) и шагом по пространственной координате (h) [171]. Можно показать, что при небольших значениях коэффициента нелинейности g должно выполняться неравенство:

$$dt < h^2/2.$$

D.2 Метод распространения лучей

Далее мы опишем метод моделирования эволюции волнового пучка вдоль оси z в рамках параксиального уравнения – *метод распространения лучей (beam propagation method, BPM)*. При этом считается заданным распределение поля при $z = 0$ в виде $\mathcal{E}(x, y, z = 0)$.

Для реализации этого метода необходимо перейти в Фурье-пространство. Мы введем преобразование Фурье по координатам (x, y) следующим образом: $\mathcal{F}\{f(x, y)\} = f(k_x, k_y) = \int dx dy f(x, y) e^{ik_x x + ik_y y}$ и получим параксиальное соотношение переноса для уравнения (B.8):

$$H_e = \frac{\mathcal{E}(k_x, k_y; z)}{\mathcal{E}(k_x, k_y; 0)} = \exp\left\{\left[\frac{-i(k_x^2 + k_y^2)z}{2k_0}\right]\right\}, \quad (\text{D.4})$$

позволяющее выразить изменение, которое претерпевает распределение, заданное при $z = 0$ ($\mathcal{E}(k_x, k_y; 0)$ – его Фурье-образ), после прохождения трассы длиной z вследствие дифракционных эффектов. Таким образом, естественно ввести *дифракционный оператор* в виде $\hat{D} \equiv \frac{i}{2k_0} \Delta_\perp$. Оставшиеся в параксиальном уравнении слагаемые, обусловленные геометрической формой решетки и нелинейностью, можно записать в виде пространственно-неоднородного нелинейного оператора $\hat{N}_s \equiv i \frac{k_0 \Delta n}{n_0}$, где $\Delta n = n_L(x, y) + n_2 |\mathcal{E}|^2$. В терминах введенных операторов $\hat{D}$, $\hat{N}_s$ параксиальное уравнение переписывается в виде: $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} = (\hat{D} + \hat{N}_s) \mathcal{E}$.

Следовательно, изменение распределения после прохождения через малый участок Δz можно записать как:

$$\mathcal{E}(x, y; z + \Delta z) \approx \exp\left\{(\hat{N}_s \Delta z)\right\} \exp\left\{(\hat{D} \Delta z)\right\} \mathcal{E}(x, y; z) = \quad (\text{D.5})$$

$$= \mathcal{F}^{-1} \left\{ \exp \left[\frac{-i(k_x^2 + k_y^2) \Delta z}{2k_0} \right] \mathcal{F}\{\mathcal{E}(x, y; z)\} \right\} \exp(i \Delta n k_0 \Delta z / n_0). \quad (\text{D.6})$$

Эта формула интерпретирует BPM. Её следует последовательно применять для каждого Δz от точки $z = 0$ вплоть до точки $z = L_z$, задающей полную длину трассы распространения.

D.3 Метод разложения по плоским волнам

Данный численный метод позволяет рассчитывать зонную структуру и собственные моды системы в рамках стационарного параксиального уравнения в линейном случае ($n_2 = 0$). Мы применяем его для суперячеек, то есть прямоугольных областей, периодичных по оси x . Мы ищем собственные моды в Блоховской форме $\mathcal{E} = u(x, y) e^{i\beta z + ikx}$, где $u(x, y) = u(x + \mathcal{L}_x, y)$ – периодическая функция, k – блоховский волновой вектор и $\beta(k) = \beta(k + \frac{2\pi}{\mathcal{L}_x})$ – постоянная распространения, также являющаяся периодической функцией, $\mathcal{L}_x$ – размер суперячейки вдоль оси x . Подставляя такой вид распределения в ур. (B.8) и не учитывая нелинейные эффекты, мы получим задачу на отыскание собственных значений в форме:

$$\beta u = \frac{1}{2k_0} ((\partial_x + ik)^2 + \partial_y^2) u + \frac{k_0}{n_0} n_L(x, y) u. \quad (\text{D.7})$$

Зонная структура, определяемая величиной $\beta(k)$, может быть получена численно с использованием *метода разложения по плоским волнам (plane wave expansion method (PWE))*, применяемого для суперячейки с доменной стенкой, как на рис. 11 (б). При этом реалистичная решетка конечных размеров будет состоять из нескольких суперячеек по оси x и одной по оси y .

Данный численный метод основан на разложении функций, входящих в уравнение, по плоским Блоховским волнам:

$$n_L(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_L(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}; \quad u(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} u(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (\text{D.8})$$

здесь $\mathbf{G}$ – волновой вектор обратной решетки. Подставляя разложение (D.8) в (D.7), мы получим уравнение для амплитуды Блоховской волны $u(\mathbf{G})$:

$$\beta u(\mathbf{G}) = \frac{1}{2k_0} \left(-(G_x + k)^2 - G_y^2 \right) u(\mathbf{G}) + \frac{k_0}{n_0} \sum_{\mathbf{G}'} n_L(\mathbf{G} - \mathbf{G}') u(\mathbf{G}'). \quad (\text{D.9})$$

Мы рассматриваем суперячейку прямоугольной формы с размерами вдоль осей абсцисс и ординат $\mathcal{L}_x$ и $\mathcal{L}_y$ соответственно. Векторами элементарных трансляций обратной решетки $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ (радиус-вектор до любого узла обратной решетки представим в виде $\mathbf{G} = m\mathbf{g}_1 + n\mathbf{g}_2$, где $m, n \in \mathbb{Z}$) являются $\mathbf{g}_1 = \left(\frac{2\pi}{\mathcal{L}_x}; 0 \right)^T$, $\mathbf{g}_2 = \left(0; \frac{2\pi}{\mathcal{L}_y} \right)^T$. Для целых значений n и m при таком определении $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ граничные условия для функций u и n_L периодичны в направлениях x и y :

$$u(x + \mathcal{L}_x, y) = u(x, y + \mathcal{L}_y) = u(x, y); \quad n_L(x + \mathcal{L}_x, y) = n_L(x, y + \mathcal{L}_y) = n_L(x, y). \quad (\text{D.10})$$

D.4 Дискретизация по Сасскинду

Дискретизация по Сасскинду [172] является методом решеточной аппроксимации дифференциальных операторов, сохраняющим эрмитовость Гамильтониана. Этот подход особенно полезен при моделировании топологических изоляторов и других квантовых систем с дискретной симметрией [9]. В качестве иллюстрации метода рассмотрим его применение для нахождения спектра системы ВНЗ с доменной стенкой, соответствующей инверсией знака эффективной массы M на линии $y = 0$:

$$\begin{aligned} \omega \psi_1 &= (k_x - \partial_y) \psi_2 + M \psi_1 + |\beta|(-k_x^2 + \partial_y^2) \psi_1; \\ \omega \psi_2 &= (k_x + \partial_y) \psi_1 - M \psi_2 - |\beta|(-k_x^2 + \partial_y^2) \psi_2, \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

здесь $M(y > 0) = +M_0 > 0$; $M(y < 0) = -M_0 < 0$. Дискретизация производных выполняется следующим образом:

$$\partial_y \psi_2 \rightarrow \frac{\psi_2^{m+1} - \psi_2^m}{\Delta}, \quad \partial_y \psi_1 \rightarrow \frac{\psi_1^m - \psi_1^{m-1}}{\Delta},$$

где $\psi_2^m = \psi_2(m\Delta)$ и $\psi_1^m = \psi_1((m - 1/2)\Delta)$. Таким образом, функция ψ_2 определяется в узлах решетки, тогда как ψ_1 – в средних точках между узлами. Пространственная координата y дискретизуется стандартным образом: $y = \Delta m$, где $m \in [-N + 1, N]$, что соответствует полной ширине системы вдоль оси y : $W = 2N\Delta$.

Дискретная версия системы уравнений принимает вид:

$$\omega\psi_1^m = \left(-\frac{\psi_2^{m+1} - \psi_2^m}{\Delta} + k_x\psi_2^m \right) + M\psi_1^m + \frac{|\beta|}{\Delta^2}(-k_x^2\Delta^2\psi_1^m + \psi_1^{m+1} - 2\psi_1^m + \psi_1^{m-1}), \quad (\text{D.12})$$

$$\omega\psi_2^m = \left(\frac{\psi_1^m - \psi_1^{m-1}}{\Delta} + k_x\psi_1^m \right) - M\psi_2^m - \frac{|\beta|}{\Delta^2}(-k_x^2\Delta^2\psi_2^m + \psi_2^{m+1} - 2\psi_2^m + \psi_2^{m-1}). \quad (\text{D.13})$$

Эту систему можно представить в матричной форме как задачу на собственные значения:

$$\omega\Psi = \hat{H}\Psi,$$

где $\Psi = (\psi_1^{-N+1}, \dots, \psi_1^N, \psi_2^{-N+1}, \dots, \psi_2^N)$ – вектор размерности $2 \cdot 2N$, а Гамильтониан раскладывается на четыре слагаемых:

$$\hat{H} = \hat{U} + \hat{P} + \hat{M} + \hat{P}_2.$$

Здесь $\hat{P}$ описывает первые производные:

$$\hat{P} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} 0 & -\hat{D}_+ + \hat{I} + k_x\Delta\hat{I} \\ \hat{I} - \hat{D}_- + k_x\Delta\hat{I} & 0 \end{pmatrix},$$

где $\hat{D}_+$ и $\hat{D}_-$ – матрицы с единицами на первой наддиагонали и поддиагонали соответственно. Член $\hat{P}_2$ соответствует вторым производным:

$$\hat{P}_2 = \frac{|\beta|}{\Delta^2} \begin{pmatrix} -k_x^2\Delta^2\hat{I} - 2\hat{I} + \hat{D}_+ + \hat{D}_- & 0 \\ 0 & k_x^2\Delta^2\hat{I} + 2\hat{I} - \hat{D}_+ - \hat{D}_- \end{pmatrix},$$

а эффективная масса описывается как:

$$\hat{M} = M \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hat{I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hat{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{I} \end{pmatrix},$$

и включает в себя доменную стенку при $y = 0$.

На рис. D1 представлены результаты численного анализа системы, заданной на отрезке $-L \leq y \leq L$, включающем доменную стенку при $y = 0$. На левой панели изображен рассчитанный спектр системы, а на правой панели показана пространственная структура состояний в запрещенной зоне вблизи $k_x = 0$. Штриховые черные линии соответствуют теоретическим кривым, полученным из аналитического решения для профиля краевого состояния, которое

локализовано в области доменной стенки:

$$\psi_{+M_0}(y) = \frac{\bar{C}_2}{\kappa_2 - \kappa_1} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} (\bar{\kappa}_2 + \kappa_2) e^{-\kappa_1 y} - \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} (\bar{\kappa}_2 + \kappa_1) e^{-\kappa_2 y} \right), \quad (\text{D.14})$$

$$\psi_{-M_0}(y) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \bar{C}_2 e^{\bar{\kappa}_2 y}, \quad (\text{D.15})$$

где $\kappa_{1,2} = \frac{1}{2|\beta|} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4|\beta|M_0} \right)$ и $\bar{\kappa}_{1,2} = \frac{1}{2|\beta|} \left(\pm 1 + \sqrt{1 + 4|\beta|M_0} \right)$. При этом выражение для краевого состояния на открытой границе для $y > L$ (соответствует красным линиям на рис. D1):

$$\psi_{\pm}(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} (e^{-\kappa_1(L-y)} - e^{-\kappa_2(L-y)}),$$

где $\kappa_{1,2} = \frac{1}{2|\beta|} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4|\beta|M} \right)$.

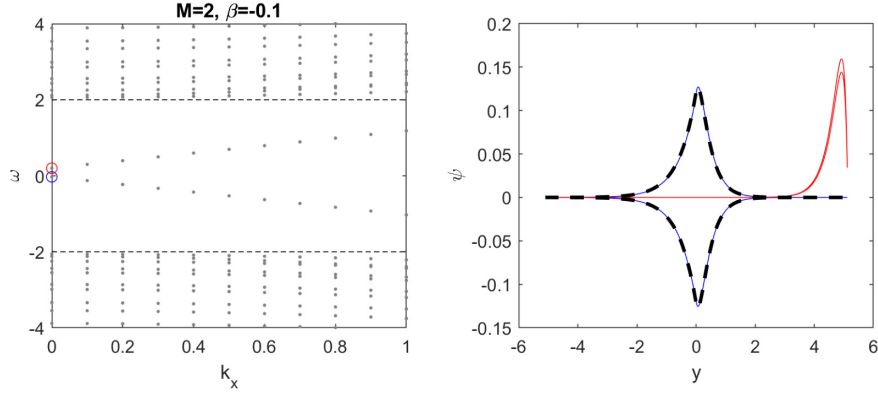


Рисунок D1: Слева: численно полученный спектр системы. Справа: пространственное распределение состояний в запрещенной зоне вблизи $k_x = 0$; черные штриховые линии показывают теоретические зависимости (D.14). Параметры: $|M| = 2$, $|\beta| = 0.1$. Синие линии – профиль краевого состояния, локализованного на доменной стенке, красные линии – локализованного на открытой границе.