

国防科技大学建校 70 周年专题

薪火传承、理工结合的 70 年

DOI: [10.7498/aps.72.180101](https://doi.org/10.7498/aps.72.180101)

国防科技大学物理学科起源于哈军工时期的物理教授会和原子工程系,专业积淀深厚、军事特色鲜明.七十年传承,始终面向国家重大战略特别是国防科技战略,为我国相关领域培养了一大批优秀人才.围绕国防高科技武器基础原理和新概念武器开展特色研究,在极端条件物态物性、强场超快、聚变能源、量子技术、武器物理等方面形成优势,孵化了核科学与技术、光学工程一级学科和量子信息、高能量密度物理等交叉学科,形成了基础研究与军事应用紧密结合、前沿探索与高水平人才培养有机统一、自主创新与开放合作相得益彰的鲜明特色,建成了一流的拔尖人才培养基地和前沿创新科研平台.在国防科技大学 70 年校庆之际,在国内对基础学科发展前所未有重视之时,国防科技大学对物理学科的支持力度也进入了全新时期,学科发展进入快车道,高水平成果不断涌现.

在《物理学报》编辑部的大力支持下,我们组织了“国防科技大学建校 70 周年专题”,主要集中在展示了极端条件和量子信息技术两个方向的部分成果.在极端条件物理方面,赵增秀等利用符合测量技术,展示了强飞秒激光场下二氧化碳二聚体的多体解离过程;康冬冬和戴佳钰等发展机器学习结合的大尺度精确原子尺度计算方法,研究了类地行星内部铁流体的离子输运性质;高城和吴建华等利用精确的多组态 Dirac-Fock 方法,计算了局域热平衡 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度,有助于 EUV 光刻光源的设计和研发;李永强等综述了近年来利用动力学平均场方法,开展光晶格超冷原子量子模拟的进展;王伟权和银燕等利用粒子模拟方法,结合机器学习,获得了钻孔辐射压加速机制下离子峰值能量;邹德滨等利用粒子模拟方法和蒙特卡罗方法,研究了强激光作用超薄氘靶产生中子的过程.在量子信息方面,邹宏新等综述了中国空间站冷原子光钟激光系统研究进展,该系统已于 2022 年 10 月 31 日随“梦天”实验舱成功发射;刘伟涛等综述了在室外环境中开展的关联成像中关于成像系统、信噪甄别技术和成像算法等方面的研究进展,并浅析了未来发展方向;江天等综述了典型的本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 的研究进展,着重阐述了量子反常霍尔效应、轴子绝缘体态和马约拉纳零能模等拓扑量子态,并展望了下一步研究方向;杨俊波等归纳了几种目前最常用的片上光互连器件的智能设计方法,并详细分析了智能化设计的片上光互连器件的几个重大研究进展与趋势;刘肯和朱志宏等综述总结了近年来在异质集成二维材料光子器件中进行非线性光学特性研究的最新进展(2023 年第 17 期已发表),阐述了基于转移方法和直接生长法制备的优势和技术难点,指明了发展趋势.

国防科技大学物理学科的发展始终与国防科技发展紧密相连,始终秉持“面向国防科技前沿基础,建设特色一流物理学科”的建设理念,坚持前沿创新,在培养一流人才的道路上继续前进.

(客座编辑:戴佳钰 赵增秀 国防科技大学)

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Preface to the special topic: The 70th anniversary of National University of Defense TechnologyDOI: [10.7498/aps.72.180101](https://doi.org/10.7498/aps.72.180101)

薪火传承、理工结合的70年

Preface to the special topic: The 70th anniversary of National University of Defense Technology

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 180101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.180101

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.180101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

对美国国家点火装置2010年以来实验设计思路的分析

Analysis of design principles of the experiments on the National Ignition Facility since 2010

物理学报. 2022, 71(13): 135202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220199>

快凝Ni₇₀Ag₃₀纳米颗粒中C15单元的识别

Numerical recognition of C15 unit in rapid solidification Ni₇₀Ag₃₀ nanoparticles

物理学报. 2022, 71(17): 176402 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220662>

利用Pr70Cu30晶界扩散改善烧结钕铁硼废料矫顽力的研究

Coercivity enhancement of waste Nd-Fe-B magnets by Pr70Cu30 grain boundary diffusion process

物理学报. 2018, 67(6): 067502 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172551>

光学超构材料专题编者按

Preface to the special topic: Optical metamaterials

物理学报. 2020, 69(15): 150101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.150101>

柔性电子专题编者按

Preface to the special topic: Flexible electronics

物理学报. 2020, 69(17): 170101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.170101>

前驱体膜处理工艺制备高性能碳基CsPbIBr₂钙钛矿太阳能电池

High-performance carbon-based CsPbIBr₂ perovskite solar cells fabricated by precursor film preparation process

物理学报. 2021, 70(22): 228801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211079>

国防科技大学建校 70 周年专题

室外环境中的关联成像研究进展*

常宸¹⁾²⁾³⁾ 孙帅¹⁾²⁾³⁾ 杜隆坤¹⁾²⁾³⁾ 聂镇武¹⁾²⁾³⁾ 何林贵¹⁾²⁾³⁾张翼¹⁾²⁾³⁾ 陈鹏¹⁾²⁾³⁾ 鲍可¹⁾²⁾³⁾ 刘伟涛^{1)2)3)†}

1) (国防科技大学理学院, 量子信息研究所, 长沙 410073)

2) (国防科技大学, 量子信息学科交叉中心, 长沙 410073)

3) (国防科技大学, 湖南省量子信息机理与技术重点实验室, 长沙 410073)

(2023 年 7 月 31 日收到; 2023 年 9 月 5 日收到修改稿)

光学成像是人类不可或缺的信息获取方式之一, 其在预警侦察、精确制导、交通运输和工业生产等军用和民用领域发挥着不可替代的作用. 在室外环境中, 由于背景光、杂散光和大气介质的影响, 光学成像的分辨率、信噪比和作用距离等受到限制. 近年来, 在光学、物理、信息论及计算机等多学科的交叉融合发展的支撑下, 新型光学成像技术不断涌现, 为发展远距离、大视场、高信息通量的室外光学成像带来新的契机. 关联成像作为新型主动成像技术之一, 具有高灵敏、抗干扰、信息并行获取等特点, 能够较好地应对室外光学成像中所面临的如远距离导致光功率急剧衰减、环境噪声干扰引起的低信噪比等问题, 并能在一定程度上减少散射、湍流等导致的图像模糊等问题, 是当前室外环境中光学成像的热门研究领域之一. 本文从光学成像原理出发, 分析室外环境中光学成像分辨率、信噪比、空间带宽积和成像距离的影响因素, 重点介绍和梳理室外关联成像在成像系统、信噪甄别技术和成像算法等方面的研究进展, 并浅析光学成像向更远距离、更广视场拓展的过程中需要研究的基础问题和待攻克的关键技术.

关键词: 关联成像, 量子光学, 室外环境, 成像系统**PACS:** 33.80.-b, 84.40.Ua, 42.30.-d**DOI:** 10.7498/aps.72.20231245

1 引言

成像是将客观景物转变为图像的过程, 是人类认识、改造世界的过程中不可或缺的工具. 从冷冻电镜细分蛋白分子结构到韦伯望远镜巡查宇宙瑰丽场景, 从飞秒脉冲测量超快过程到延迟摄影记录白云苍狗, 再从激光雷达助力自动驾驶到超声波图像洞察体内组织, 成像技术的进步在不断拓展人类的认知边界, 服务人类的生产生活, 并在医学诊断、智能制造、资源普查、环境保护和国防安全等领域发挥着关键性的支撑作用.

在成像过程中, 待成像物景反射、透射或辐射电磁波、声波或物质波等信息载体, 信息载体在介质中传播后被探测并解译, 进而在物景以外的时空点记录、恢复或再现物景图像. 根据信息载体的时空二元性, 成像可以分为时间域成像和空间域成像. 在空间域成像中, 根据信息载体所编码自由度的不同, 成像可以分为相位成像、强度成像、复振幅成像和偏振成像等. 根据信息载体的不同, 成像又分为声波成像、物质波成像 (电子成像^[1]、质子成像^[2-4]等)、电磁波谱段成像 (微波成像^[5-7]、THz 成像^[8-10]、红外成像^[11]、可见光成像、紫外成像^[12]等), 以及近年来出现的光声成像^[13,14]、微波光子成

* 国家自然科学基金 (批准号: 62275270, 62105365) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wtlm@nudt.edu.cn

像^[15,16]等. 根据探测手段和图像信息域的不同, 成像还可以分为空间域成像、傅里叶域成像等. 其中光学成像是以光波为载体, 利用成像系统和光电探测再现、恢复或重构物景图像. 由于图像提供的信息丰富且直观, 光学成像在天基遥感、地球测绘、预警侦察、自动驾驶等关系国计民生的重要领域中发挥着不可替代的作用.

在室外环境中, 弱回波、强噪声, 大气扰动等不利因素是各类光学成像手段所面临的共同挑战. 待成像场景通常较为复杂, 场景中物体以反射式物体为主, 其材料、结构、形状多变, 反射回波往往较弱. 此外, 由于成像距离较远, 大气介质对光的吸收与扩散进一步扩大了弱回波的难题. 较弱的回波通常携带了丰富物景的信息, 这好比“小马(弱回波)拉大车(大信息量)”, 图像恢复难度较大, 并且这个问题将随着成像距离的提升变得愈发困难. 同时, 在室外环境中, 来自其他目标或辐射体的杂散光不可避免, 常常降低目标回波信噪比. 此外, 光在大气介质中传播时的波前畸变也会导致目标空间信息混叠, 图像对比度和分辨率的退化严重. 总而言之, 要在远距离、广视域、强干扰、低信噪比和复杂场景条件下实时地获取大视场、高分辨、细节丰富的场景图像, 这对成像系统的灵敏度、抗噪性能、空间带宽积、鲁棒性都有极高的要求.

关联成像, 是一种起源于量子纠缠的主动成像技术, 利用光场二阶相干性对物体的图像进行重构. 和传统的光学成像不同, 关联成像技术具有高灵敏、抗干扰、无透镜成像、多维信息并行获取等潜在优势, 因此具备弱回波探测、低信噪比成像、突破分辨率极限等潜能, 从而实现远距离成像. 本文以室外环境中的光学成像为引, 从成像理论、光源、算法等角度对室外关联成像的研究进展介绍, 并对这一成像技术进行进一步的探讨与展望.

2 室外环境中的光学成像

2.1 光学成像的物理基础

光学成像的过程可以简化为: 基于包括光源、光学系统与探测装置等的成像系统, 对目标辐射或反(透)射光子进行探测与记录, 建立物像之间的“点对点”映射, 以此重现或恢复目标信息. 以高斯成像系统为例, 目标各点自发辐射或反(透)射的光子经由透镜后被光电探测器记录. 在这一过程

中, 根据单光子干涉的理论, 任意光子仅与自己发生干涉. 物体各点处光子在达到像面后, 经过相同的光程而在像点处发生相长干涉, 在其他点发生相消干涉. 大量光子在干涉面积内非相干叠加, 经系综平均形成规则艾里斑. 物体上光强越强的点, 单位时间内反(透)的光子数越多, 形成的艾里斑也越亮, 由此完成物面与像面点对点映射关系的建立. 此外, 这一映射关系也可通过算法恢复重构. 例如, 在共聚焦成像中, 点对点(斑)映射直接通过光场通过光学系统后的一阶干涉实现. 再如, 散射成像中, 点扩展函数是随机散斑, 点对点映射可以通过算法恢复.

光学成像的构型如图1所示. 目标物体反射(自身辐射的光场)通过光学系统到达探测器, 光场信息经过光电转换最终由计算机记录或恢复图像信息. 同时, 计算机控制光学系统和探测模块参数, 使获得的图像质量更优. 在主动光学成像中, 光场调控和光子态的制备通常也需要计算机的控制和优化. 因此, 成像实验所需的技术包括光源模块技术, 光路设计和搭建, 光场信号探测以及图像信息解译等.

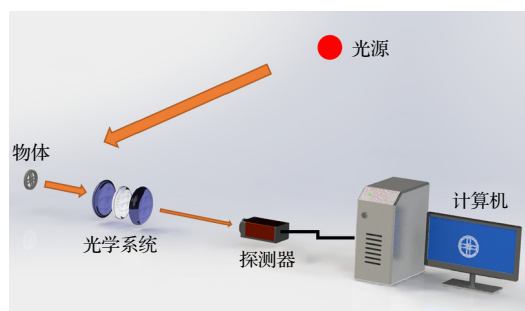


图1 光学成像构型示意图

Fig. 1. Schematic of optical imaging configuration.

在光学系统中, 光源的强度、波长、类型等决定了成像过程中能够用于传递物体信息的光子数及其所传递信息的类型, 间接影响着光学系统、探测器以及成像算法的选取与应用. 光学系统在光传播过程中往往起着调整、约束光子的作用, 使物像间满足成像关系的同时能有效提高光子的利用效率, 进而提高信号的信噪比. 此外, 光学系统与工作波长共同决定了成像结果的光学分辨率. 探测器负责记录光子的分布, 其灵敏度、探测效率、探测噪声等影响着成像信噪比、成像视场与图像分辨率, 在需进行多次测量的成像过程中, 探测器的响应速率也决定了成像速率. 对于部分光学成像过

程, 算法主要起到图像优化的作用, 通过对成像环境、重构图像等的分析选取合适的优化算法, 能够进一步提升成像质量. 而对于散射成像或关联成像等, 利用算法进行图像重构则是从探测器返回数据中反解物体信息必不可少的步骤, 算法的性能直接决定着图像重构的速率、重构图像的质量.

2.2 光学成像的像质要素

在对成像系统的性能进行定量评价时, 可靠的像质评价指标不可或缺. 在此我们对成像相关研究中所常见的像质评价指标, 包括分辨率、信噪比、对比度等进行简单的介绍.

成像分辨率 成像分辨率是对图像细节分辨能力的衡量. 成像系统的分辨率主要包括光学分辨率 (衍射极限) 与图像分辨率 (像素尺寸). 二者共同成为光学成像系统空间分辨率的制约因素.

光学分辨率是指通常指在衍射的影响下, 物体上两点间能被区分开的最小距离. 限制成像过程中光学分辨率的因素主要包括两个方面, 其一为光学系统的孔径尺寸; 其二为观察样本所用光源的波长. 在表征光学分辨率时, 通常需要考虑 3 个物理概念: “艾里斑”、“瑞利判据”、“阿贝衍射极限”. “艾里斑”是指通过一定尺寸的光学系统时, 由于衍射现象导致的多个亮暗相间的同心环, 其中心为点状光斑. “艾里斑”之间能否互相区分, 决定着图像中物体各点能否互相区分, 即 Rayleigh^[17] 于 1896 年提出的“瑞利判据”理论:

$$\delta = \frac{D_{\text{Airy}}}{2} = 1.22\lambda \frac{f}{D} = 0.61 \frac{\lambda}{NA}, \quad (1)$$

其中, D_{Airy} 为艾里斑的直径, λ 为光的波长, f 为

焦距, D 为通光孔径, $NA = D/(2f)$, 即为数值孔径, 数值孔径 NA 为量纲为一的量, 通常用于表示镜头收光能力的强弱, 进而决定了系统的光学分辨率. 值得说明的是, 瑞利判据严格意义上并不是一个基本的物理定律, 而是一个有些主观定义的值.

1873 年, Abbe^[18] 提出了著名的阿贝成像原理, 其显式地将成像过程分为两步, 即分频与合成. 成像系统对分辨率的限制作用就体现在频谱面的低通滤波效应, 其所对应的最小可分辨间距为

$$\delta = \lambda \frac{f}{D} = 0.5 \frac{\lambda}{NA}, \quad (2)$$

这就是频域角度出发, 得到的“阿贝衍射极限”.

如图 2 所示, “艾里斑、瑞利判据”与“阿贝衍射极限”分别从不同的角度衡量了成像系统的分辨能力.

在关联成像中, 成像分辨率还可对应于光场自相关所得单峰函数的半高全宽. 与传统成像所不同, 关联成像是基于光场间的高阶关联获取重构图像, 其重构图像中物体上两点能否分辨不再仅取决于光学系统, 更多地是由照明光场其自身的性质所决定. 照明光场中, 相邻像素间的相关性决定了区分重构图像中相邻各点间的难以程度. 显然, 当光场中相邻像素间的相关性越高, 重构图像中相邻点也越难以区分, 此时光场自相关函数的半高全宽越宽.

图像分辨率, 又称像素分辨率, 表述了图像中对于物体细节的呈现能力, 由单位图像 (或探测器阵列) 内像素点数决定. 随着光电数字化的发展, 图像需要通过图像传感器件进行数字化离散采样和记录. 因此, 光电探测器件的图像分辨率成为了

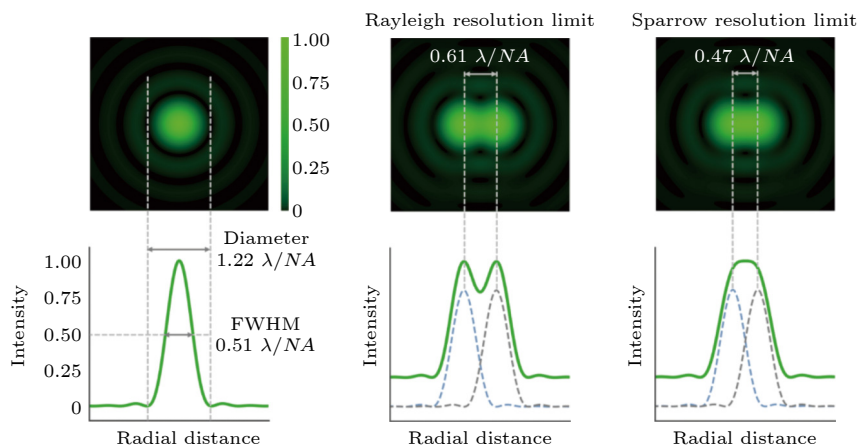


图 2 艾里斑、瑞利衍射以及阿贝衍射极限^[19]

Fig. 2. Limit of Airy disk, Rayleigh diffraction and Abbe diffraction^[19].

光学分辨率外制约系统空间分辨率的另一大因素. 在对光学图像进行离散化采样的过程中, 在每个采样点上, 局部区域内的辐照度被积分并被图像传感器所记录. 由香农-奈奎斯特采样定理可得, 采样间距必须大于信号中最高频率分量的两倍. 对于光学图像来说, 当探测器像素尺寸间距过大, 或采样过于稀疏时, 像素中的信息发生混叠, 造成图像分辨率的下降.

信噪比 (signal-to-noise ratio, SNR) 在光学成像中, 由于成像过程可分为数据采集与图像重构, 相应地将信噪比分为信号的信噪比与图像的信噪比. 前者是指所采集数据中信号光与噪声光的能量或功率之比, 可用于定性评估系统的成像能力, 后者是指系统所得重构图像中目标与背景噪声能量/功率之比, 可用于定量评价系统的成像质量. 光子是光学成像系统中的信息载体. 被探测的信号光子数越少, 光学系统可解耦的信息量越少. 在光子通量有限的情况下, 噪声会严重影响信息的解耦, 具体表现为图像的信噪比极低、信息缺失、甚至无法成像.

在信号信噪比中, 噪声光包括环境中非目标反(透)射的杂散光、探测器测量及信号传输过程中产生的散粒噪声与测量噪声等. 由此可得信号的信噪比为

$$\text{SNR} = \frac{N_p \times \text{QE}}{\sqrt{(N_s)^2 + (N_e)^2 + (N_d)^2}}, \quad (3)$$

其中 N_p 为光子数; QE 为探测器的量子效率; N_s , N_e 和 N_d 分别为散粒噪声、环境噪声和探测器噪声. 所以如何提高探测器的灵敏度, 降低探测器的测量噪声成为了光学成像中的一个重要课题.

对于图像信噪比, 我们将其中感兴趣区域 (region of interest, ROI) 像素的理想值视为图像中的信号真值, 其与实际重构图像的差异视为噪声, 此时可以定义图像信噪比为

$$\text{SNR} = \frac{\langle S \rangle - \langle N \rangle}{\text{SD}_{\text{img}}}, \quad (4)$$

其中 $\langle S \rangle$ 为信号均值, $\langle N \rangle$ 为噪声均值, SD_{img} 为图像的标准差. 一般来说, 信号的信噪比越高, 得到的图像信噪比就越高. 如何准确甄别信号与噪声、最大程度上抑制噪声也是一项极具挑战性的研究工作. 相对其他像质评价指标, 信噪比是相关研究中最常用的评价指标.

图像对比度 (contrast) 对比度指的是一幅图像中明暗区域最亮的白和最暗的黑之间不同亮度层级的差异. 差异范围越大代表对比越强烈, 差异范围越小代表对比越小. 常用的韦伯对比度表达式为

$$C_w = \frac{S_1 - S_2}{S_2}, \quad (5)$$

其中, S_1 为物体的亮度, S_2 为背景的整体亮度. 韦伯对比度表示在同种刺激下, 人感受到的刺激的动态范围正比于标准刺激的强度. 另有 Michelson 对比度:

$$C_m = \frac{S_1 - S_2}{S_1 + S_2}, \quad (6)$$

其与韦伯对比度有异曲同工之处.

对比度也是图像质量的一种衡量方式. 即使具有相同的信噪比, 但依然可能具有不同的对比度, 并呈现出较大的视觉差异.

图像衬噪比 (contrast-to-noise ratio, CNR)

与图像信噪比相似, CNR 是一类用于评价图像中信号与背景噪声差异的评价指标. 关联成像特别是赝热光关联成像中, 由于其原理决定即使无噪声情况下图像中非信号区域也会得到非零取值, 因此通常将相应的背景项扣除后再对信号与噪声进行比较. 即定义图像衬噪比 CNR 为

$$\text{CNR} = \frac{\langle T_o \rangle - \langle T_b \rangle}{\sqrt{\frac{1}{2} [\text{var}(T_o) + \text{var}(T_b)]}}, \quad (7)$$

其中 T_o 指重构图像中的目标区域, T_b 指重构图像中的背景区域.

结构相似性 (structural similarity index measure, SSIM) 从图像的亮度、对比度及结构等角度评估了重构图像与实际物体间的相似性. 其公式较为复杂, 在此不再列出. 由于 SSIM 计算结果取值范围固定为 0—1 (分别代表两张图像完全不同与完全相同), 因此该指标能够直观地表现重构图像质量. 但在 SSIM 中, 并未区分重构图像中的“信号”与“背景”, 故而在成像目标占视场尺寸较小时, 其评价结果更多地集中于对“背景区域”的评价, 无法很好地反映图像中目标物体的重构情况.

图 3 中以一张关联成像实验中所获得的重构图像为基础, 计算了其图像信噪比、对比度、衬噪比与结构相似性. 图 3(a) 为参考图像, 图 3(b) 和图 3(c)

分别为以涨落关联、差分关联算法所得的重构图像. 所得的评价结果为: 对于图 3(b), SNR 为 4.02, CNR 为 2.79, 对比度为 0.15, SSIM 为 0.09; 对于图 3(c), SNR 为 2.39, CNR 为 1.51, 对比度为 0.11, SSIM 为 0.05;

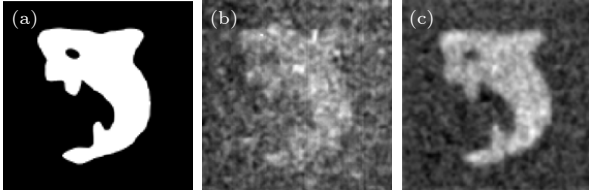


图 3 (a) 理想图像; (b) 涨落关联重构图像; (c) 差分关联重构图像

Fig. 3. (a) Ideal image; (b) reconstructed image by fluctuation correlation; (c) reconstructed image by differential ghost imaging.

2.3 室外环境对光学成像的影响

与室内环境相比, 室外环境对光学成像的影响主要体现在弱回波、强噪声、环境影响等方面.

弱回波 在传输过程中, 受大气中组分的影响, 不同波段的光波均会产生一定程度的衰减. 对于可见光波段, 由氮分子与氧分子所引起的瑞利散射不容忽视, 大气中某些原子的共振吸收也将进一步导致可见光波段的衰减. 对于红外波段, 分子的带吸收是其衰减的重要原因. 此外, 由气溶胶颗粒所导致的米氏散射也将导致光波能量的急剧衰减. 同时, 光波在传输过程中将不可避免地发生扩散. 根据激光雷达公式可知, 探测器所接收光的功率与距离四次方成反比.

此外, 在室外环境中成像目标多为反射式目标. 与反射式目标相比, 透射式目标的回波信号并未经过吸收或反射, 其扩散角度与单位面积内光强可近似视为未受物体影响. 而当目标为反射式目标时, 回波信号是由目标表面对光波的反射形成, 这一过程中物体表面将会发生对光波的吸收与反射, 能量损失无可避免. 与此同时, 目标的粗糙表面或反射角度将会加剧光波的扩散现象, 进一步加剧回波能量的衰减. 综合而言, 对于反射式目标, 其材料性质、反射类型、反射角度等因素决定了可收集的回波远远小于照射信号, 进一步恶化了室外环境中光学成像所面临的弱回波问题.

强噪声 在光学成像中, 背景光、散射光等会带来很强的噪声. 面对噪声的干扰, 常见的滤波降

噪手段包括频率滤波、时域滤波或空间滤波等. 在室外环境中, 日光覆盖了绝大多数光学成像所用的波段, 目标周边环境的反射光与目标回波具有相似的特征. 而在主动成像体系中, 散射介质引起的后向散射噪声与目标回波仅在时域上有着一定的区分. 对于此类环境光噪声, 难以借助单一的滤波手段进行有效地降噪, 同时也会进一步降低回波信号能量.

此外, 探测器自身在完成光电转换、信号传输的过程中会产生一定的量化误差与探测噪声. 当回波能量较高时此类噪声的影响往往可忽略不计, 但在室外环境下, 目标回波通常较弱, 此时此类噪声的影响将不容忽视.

大气环境影响 大气环境对成像的影响不仅体现在吸收与散射引起的光能量衰减, 还包括散射、气流或者湍流引起的像与物之间点对点关系的扭曲. 大气湍流是大气中一种典型的不规则的随机过程, 在远距离传播过程中, 其引起的折射率随机起伏对成像的影响不容忽视. 一种用于描述大气湍流的参数是大气结构常数 C_n^2 , 该参数表示大气折射率的起伏大小, 在环境温度、风速等影响下将会产生上下波动. 基于该参数, 研究人员提出了多种模型, 如 SLC-Day 模型^[20], H-V 模型 (Hufnagel-Valley model)^[21]、Greenwood 模型等^[22]. 雨雾等不良天气条件下, 大气散射显著增强, 光的直线传播被破坏, 从而物像之间的点对点对应快速退化, 同样导致成像质量下降. 针对散射或湍流的影响, 研究人员提出了如利用弹道光成像的光学相位共轭、反馈控制的波前整形、基于光学记忆效应的散射成像技术及深度学习等方法. 然而由于其影响的随机性和复杂性, 散射及湍流影响仍是室外光学成像中亟待解决的难题.

3 室外环境中的关联成像

3.1 关联成像原理

关联成像, 又称鬼成像, 是一种基于光场高阶关联的主动成像技术. 该技术通过对光源进行调制, 并基于所采集数据进行重构运算得到目标图像. 其起源可追溯至 Hanbury-Brown 和 Twiss (HBT) 实验^[23], 该实验原理如图 4 所示. 通过计算探测器 C_1 和 C_2 所接受的星光的干涉条纹, 计算其周期即可得到星体角.

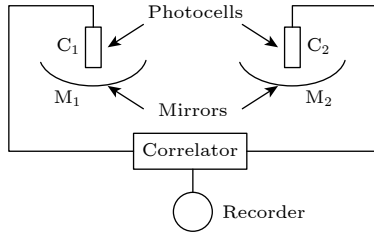


图 4 HBT 实验基础原理图^[23]
Fig. 4. Schematic diagram of HBT^[23].

在 HBT 实验中, 以 I_1 与 I_2 分别表示 C_1 和 C_2 的探测结果, 计算其内积可得

$$G^{(2)} = \langle I_1 I_2 \rangle = \langle E_1^* E_1 E_2^* E_2 \rangle, \quad (8)$$

此即光场的二阶关联函数, 其中 E_1, E_2, E_1^*, E_2^* 分别表示两个探测器光场的复振幅及其共轭. 将 (8) 式归一化可得

$$g^{(2)} = \frac{\langle E_1^* E_1 E_2^* E_2 \rangle}{\langle E_1^* E_1 \rangle \langle E_2^* E_2 \rangle} = \frac{\langle I_1 I_2 \rangle}{\langle I_1 \rangle \langle I_2 \rangle}. \quad (9)$$

由于在关联成像中, 光场各空间位置处强度相互独立且随机, 因此光场的二阶相关度可写作:

$$g^{(2)} = g \delta(x, y) + 1, \quad (10)$$

其中 g 为由光场自身所决定的常数, $\delta(x, y)$ 为冲激响应, x 和 y 分别代表空间坐标. 此时相干长度与图像像素尺寸相匹配, 若成像系统无需考虑散射等传播影响, 物像间形成严格的“点对点”一一对应.

以 $I_r(x, y)$ 表示某一时刻参考臂照明光场, $I_B(x, y)$ 表示同一时刻探测臂照明光场, $O(x, y)$ 表示目标物体的透过函数, 则桶探测器所采数据可表示为

$$B = \int_{xy} I_B(x, y) O(x, y) dx dy. \quad (11)$$

此时双臂数据的归一化二阶关联结果可写作:

$$\begin{aligned} GI &= \frac{\langle I_r(x, y) I_B(x, y) \rangle}{\langle I_r(x, y) \rangle \langle I_B(x, y) \rangle} \\ &= \frac{\langle I_r(x, y) \int_{xy} I_B(x, y) O(x, y) dx dy \rangle}{\langle I_r(x, y) \rangle \langle \int_{xy} I_B(x, y) O(x, y) dx dy \rangle} \\ &= \frac{\int_{xy} \langle I_r(x, y) I_B(x, y) \rangle O(x, y) dx dy}{\langle I_r(x, y) \rangle \langle I_B(x, y) \int_{xy} O(x, y) dx dy \rangle} \\ &= \frac{g}{T} O(x, y) + 1, \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $T = \int_{xy} O(x, y) dx dy$, T 为由目标决定的常数. 可见归一化的二阶关联结果与目标物体的透过函数间呈线性关系, 因而可将重构结果作为目标图像.

第 1 个具体的关联成像理论方案由 Klyshko^[24] 于 1988 提出, 并由 Shih^[25] 于 1995 年以参量下转换纠缠光实现首例关联成像原理验证实验. 随后经过近 30 年的发展, 在光源类型上逐渐出现了热光、赝热光甚至微波^[26]、物质波^[27] 等关联成像实验; 在成像架构上则在双臂关联成像之外衍生出了单臂 (计算) 关联成像^[28]; 在重构算法上, 在传统的强度/涨落关联算法外诞生了差分关联成像算法^[29]、归一化关联成像算法^[30], 以及压缩感知算法^[31–33] 与深度学习算法^[34–36]. 在相关研究所应用各类光源中, 自发参量下转换所得的纠缠光子数目过少, 自然存在的热光光强的相干时间或涨落时间太短, 相较之下, 以其他光源模拟热光所得的赝热光光源易于制备, 便于探测, 因此成为研究用的主流光源之一. 其中以激光经过旋转毛玻璃所形成的赝热光最为常见, 其实验架构如图 5 所示.

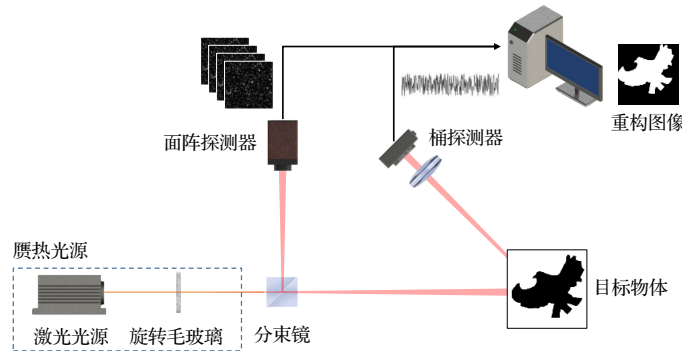


图 5 赝热光关联成像系统示意图
Fig. 5. Schematic diagram of ghost imaging based on pseudo-thermal light.

如图 5 所示, 激光经过毛玻璃后形成散斑场, 随后被分束镜分为参考臂与探测臂两束光路, 在参考臂光路中, 散斑场经由面阵探测器直接记录其空间分布, 在探测臂光路中, 散斑场经由目标反射后由桶探测器记录其光强. 面阵探测器没有对物体进行探测, 探测臂上仅进行单像素的能量探测, 不具有空间分辨能力, 因此这两个探测器单独均不能对物体进行成像. 但是借助光场的二阶关联特性, 在完成多次采样后借助重构算法, 对双臂所采集的数据进行关联运算则可得到目标的重构图像. 在计算关联成像中, 则是通过计算机生成光场的调制图样, 并借助数字微镜 (digital micromirror devices, DMD) 或空间光调制器 (spatial light modulator, SLM) 等调制器件生成相应的照明散斑场, 借此省略了对参考臂散斑场的记录需求, 从而取消了参考臂光路.

对于关联成像而言, 光场的二阶相干度相当于系统的点扩散函数. 成像结果中物体分布可以写作物体反射率函数和光场的二阶相干度的卷积, 所用光场二阶相干度的单峰特性保证了物和像的点对点的成像关系. 因此光源产生光场的二阶相干度分布是影响成像质量的重要因素. 以赝热光关联成像为例, 激光经旋转毛玻璃后的光场打在物体上形成散斑场, 散斑大小由激光照射在毛玻璃上的尺寸、激光波长和传播距离共同决定, 二阶相干度函数的峰值宽度就对应于散斑大小且决定了成像的分辨率. 根据关联成像的卷积关系可知, 成像的对比度由二阶相干度的对比度决定, 光场二阶相干度峰值越接近 2, 图像的对比度越高. 当然, 在任何成像系统中都不可避免受到外界噪声干扰, 关联成像中探测器及信号传输将会产生探测噪声、电噪声及量化噪声等, 光的传输也会引入相位噪声. 对于成像系统中传输路径上的噪声研究, 人们主要考虑大气湍流和散射介质的影响.

3.2 室外关联成像特点

与其他光学成像方式相比, 关联成像具有高灵敏探测、抗噪声干扰及多维信息获取等特点, 能够在一定程度上应对室外环境对成像的干扰, 同时可实现成型应用场景的扩展.

高灵敏探测 传统成像中是以阵列探测器收集待探测物体的空间分布信息, 回波光光子被分散到多个像元中完成探测, 存在光子数难以达到像元探

测阈值的可能性, 加之环境中其他噪声和散射介质的存在, 限制了成像灵敏度. 而在关联成像中对物体回波的探测则是以桶探测器为主. 桶探测器虽不具备空间分辨能力, 但将探测范围内全部光子进行记录, 因而使得关联成像系统具有更灵敏的探测能力, 在相同光源功率的条件下具备更远成像距离的潜力, 从而更好地应对室外成像场景下弱回波问题.

抗噪声干扰 室外成像环境中, 环境光噪声、目标周边的背景噪声等是影响成像质量的典型因素. 关联成像基于光场的高阶关联获取目标图像, 对照明光源的主动调控可视作是对物体进行编码, 对回波进行关联运算则是解码过程, 因此能够抑制与光源统计性质无关的光噪声. 利用关联成像主动照明这一特点, 结合时域、空域编码等技术可一定程度上去除背景噪声干扰, 实现低信噪比条件下的成像. 另外, 在数据采集过程中还可以根据已有数据反解物体信息, 并对后续照明光场的分布、类型等做出实时调整, 进一步提升抗噪声能力. 面对室外环境中的散射、湍流等干扰, 关联成像可借助对成像架构、算法等的优化设计, 或是与自适应光学相结合, 提高对大气干扰的抵抗能力.

多维信息获取 在实际应用中, 信息需求往往不仅仅局限于图像, 目标的距离、三维结构、运动状态也是重要信息. 作为一种主动成像方式, 关联成像能够对照明光场施以多维度并行编码从而同时获取多种信息. 可基于时域关联获得飞行时间从而完成进行测距, 或是仿照激光雷达/单光子成像的模式实现目标三维结构信息的获取, 空间时间综合编码还可以实现测速甚至同时完成对运动目标的追踪与成像^[37-41].

4 室外关联成像研究进展

室外关联成像系统依据其工作过程可分为光源调制、大气传输、回波探测与图像重构. 为提高成像质量, 扩展应用范围, 相应的研究也主要围绕这四部分展开.

4.1 赝热光源获取

如前文所述, 光源的强度、波长、类型决定了成像过程中能够用于传递物体信息的光子数及其所传递信息的类型, 间接影响着光学系统、探测器

以至于成像算法的选取与应用. 因此, 研制高刷新、高能量的赝热光源对室外关联成像至关重要. 关联成像系统常用的光源包括以旋转毛玻璃、空间光调制器或数字微镜器件等作为光场调制器件的赝热光源, 以高速光开关为核心技术的发光二极管 (light emitting diode, LED) 阵列, 以及近年来崭露头角的片上集成赝热光源等.

基于激光穿过旋转毛玻璃所得的赝热光源, 2016年, 中国科学院上海光学精密机械研究所 Gong 等^[42]采用脉宽 10 ns 的激光, 实现了三维激光关联成像雷达. 在 2016 和 2017 年, Deng 等^[43,44]将近红外 3D 成像雷达技术与关联成像、压缩感知理论相结合, 实现了基于近红外波段的 3D 激光关联成像雷达.

上述光源调制方式下的成像采用的是双光路形式, 参考臂接收端采用的是采样效率较低的面阵探测器. 采用其他光学调制装置, 如 DMD 或 SLM 代替旋转毛玻璃可以省略参考臂以减少采样时间、提高成像效率, 此即 2008 年 Shapiro^[28]提出的计算关联成像. 在该类成像系统中, 照明光场的散斑模式可预制后加载于 DMD 或 SLM 中, 因此研究人员得以对散斑模式进行主动设计与实时优化. 2016 年英国格拉斯哥大学以 DMD 调制过的激光做了三维关联成像实验^[45]. 后来 Rai 等^[46]提出了推扫式 GISC LiDAR (light detection and ranging) 系统, 也是用 DMD 对脉冲激光进行调制, 发射经预置和校准好的矩形散斑图案.

上述两种主流的光源调制模式均是以激光结合调制器件形成照明光场. 调制器件自身的刷新速率限制着光源的调制速率. 因此, 研究人员开始追求对光源直接进行调制, 而非经过调制器件调制. 2016 年, Shin 等^[47]研制的高帧速率 LED 阵列照明光源其刷新频率可达 500 kHz, 能够捕获动态场景的图像. 2017 年中国科学院西安光学精密机械研究所研制了一种片上集成多倍速率的脉冲激光器^[48], 利用了片上集成激光模式选择机制, 使其脉冲源的重频可达 GHz 量级, 也可用于室外远距离关联成像. 2019 年, 日本神户大学在此基础上提出了基于 VCSEL 光源的快速计算关联成像^[49]. 同年, 日本东京大学制备了硅基赝热光源^[50]. 此外, 本课题组自主研发了一种新型赝热光源, 显著提升了光场刷新率与能量利用率, 成功将成像速率提高一个数量级, 工作距离提升 30%.

4.2 大气影响下的关联成像

在室外成像场景下, 大气传输过程中所无法规避的能量衰减与湍流、气流等引起的折射率随机波动困扰着绝大多数光学成像手段. 为解决此类问题, 在关联成像的相关研究中出现了基于理论、硬件、架构、算法等多种方式方法, 验证并不断提高着这一成像技术的抗干扰成像能力.

2009 年, Cheng^[51]理论上推导了关联成像在大气湍流影响下的解析解, 并指出光源尺寸越小、湍流强度越大、传播距离越远都会使得图像质量的下降. 随后 Li 等^[52]推导了部分相干光源条件下通过大气湍流的关联成像公式, 得出与 Cheng^[51]一致的结论并指出物体与桶探测之间的湍流不会影响成像质量. 2010 年, Zhang 等^[53]利用随机相位屏模型通过数值仿真验证了在湍流条件下关联成像能够获得比直接成像更好的分辨率, 其实验结果如图 6 所示, 并于 2013 年在真实大气环境下进行了关联成像实验^[54], 其实验结果如图 7 所示, 实验上验证了关联成像相对直接成像具有更强的抵抗大气扰动的能力. 2011 年 Meyers 等^[55]提出了一种无湍流热光关联成像, 并进行了理论论证以及实验验证. 这一发现立即引发了广泛的关注. 2012 年 Sun 等^[30]指出 Meyers 等^[55]给出的无湍流关联成像理论推导以及实验验证只有在光源尺寸小于源平面湍流相干尺寸时才成立. 2011 年, Gong 和 Han^[56]研究了散射介质在物臂不同位置对二阶关联成像的影响. 当散射介质处于光源与物体之间时, 直接成像可以免受散射介质的干扰. 当散射介质处于物体与探测器之间时 (此时为桶探测器), 关联成像可以免受散射介质的干扰. 同年 Hardy 和 Shapiro^[57]提出了更具有实用价值的反射式关联成像, 并研究

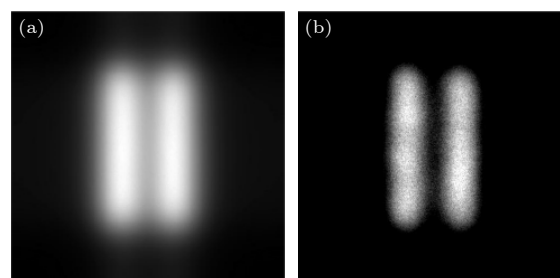


图 6 湍流干扰条件下直接成像与关联成像图像质量对比^[53] (a) 直接成像图像; (b) 关联成像图像

Fig. 6. Comparison of image quality between two imaging method^[53]: (a) Traditional non-correlated imaging; (b) ghost imaging.

了其在湍流条件下的分辨率、对比度、信噪比, 给出了和透射式关联成像一致的结论.

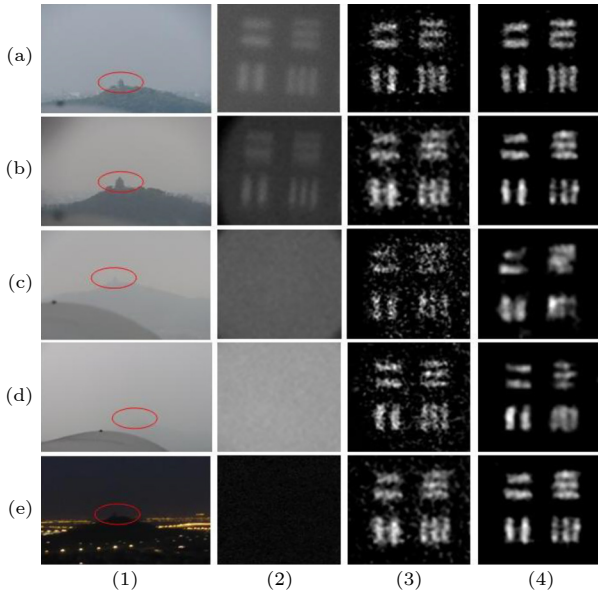


图 7 不同天气条件下直接成像与关联成像图像对比, 其中 (a)—(e) 分别代表晴朗、多云、小雨、中雾、夜晚天气对应; (1)—(4) 分别对应实地场景、传统成像、关联成像、基于总变分约束的关联成像^[54]

Fig. 7. Comparison of images between two imaging method in different weather: (a) Clear; (b) cloudy; (c) light rain; (d) moderately foggy; (e) night. Where (1) scenes of field experimental, (2) traditional imaging, (3) ghost imaging, (4) ghost imaging by TV (total variation)^[54].

2015 年, Xu 等^[58] 在不同散射强度下对比了传统成像与关联成像的抗散射能力, 其实验结果如图 8 所示. 随着散射强度的增加, 关联成像不仅可以保持成像分辨率不变, 而且相对传统成像可以有效抑制图像中的散射光的影响. 研究表明, 关联成

像相对传统成像在抗扰动方面具有一定的优势, 对物体与桶探测器之间的扰动免疫.

为降低大气环境对关联成像的影响, 研究人员分别在光源、系统、算法等不同角度对关联成像系统进行了相应的优化^[59,60]. 此外, 研究者们还积极将各种抗散射技术引入到关联成像中. 2012 年 Shi 等^[61] 将自适应光学技术引入关联成像中以解决大气湍流的问题, 其实验结果如图 9 所示, 图像质量相对传统关联成像有明显提升. 2021 年, Li 等^[62] 将偏振成像技术引入到关联成像中, 提出了基于直方图预处理的水下偏振差分关联成像方法. 该方法结合了偏振成像技术以及差分关联成像, 有效地提取出了在散射介质后面的物体图像并通过直方图预处理进一步加强图像对比度. 2022 年, Yuan 和 Chen^[63] 引入相位恢复算法来恢复受到严重散射影响的关联成像图像, 实现了对被散射介质包围物体图像的恢复.

近几年还有一些新颖关联成像抗扰动方案被相继提出. 2022 年 Lin 等^[64] 研究发现当物臂存在散射介质扰动时, 通过在参考臂加入与物臂散射介质特征相似的散射介质就可以补偿散射光场的扰动相位, 实现利用散射光的透过散射介质的关联成像. 2022 年, 孙帅等^[65] 提出了一种计算波前整形的孔径合成关联成像方案. 该方案基于计算关联成像, 以物体本身为导星利用特定的优化函数结合遗传算法在计算参考臂光场的同时加入相位补偿, 有效解决了光源的相位噪声带来的关联图像退化. 2020 年, Gao 等^[66] 使用高斯模糊核来模拟散射介质在关联成像光路不同位置时的散射场景, 并通过

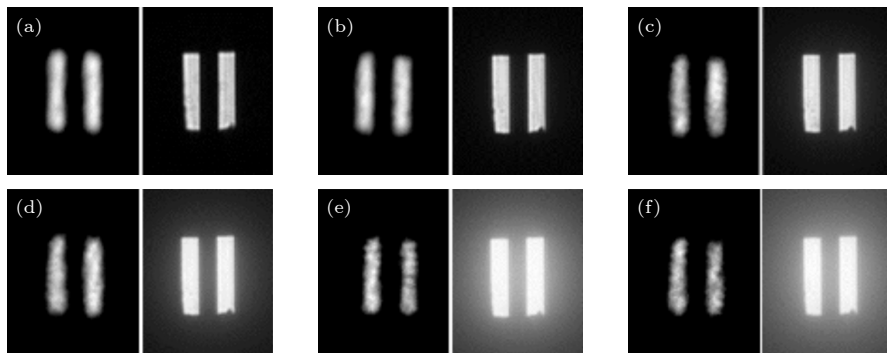


图 8 双缝直接成像与关联成像结果, 从 (a) 到 (f) 对应散射强度逐渐增加, $\beta=100\%$, 33.26% , 12.14% , 6.44% , 3.16% , 1.28% , β 表示散射介质的透过率, 每一对图像的左图为关联成像结果, 右图为传统直接成像结果^[58]

Fig. 8. Imaging results of a double slit achieved with both methods. From set (a) to (f), the strength of scattering is increasing, $\beta=100\%$, 33.26% , 12.14% , 6.44% , 3.16% , 1.28% , where β shows the transmission ratio of the scattering media as a measure of strength of scattering. For each set, the left one is the result of ghost imaging and the right one is that of traditional non-correlated imaging^[58].

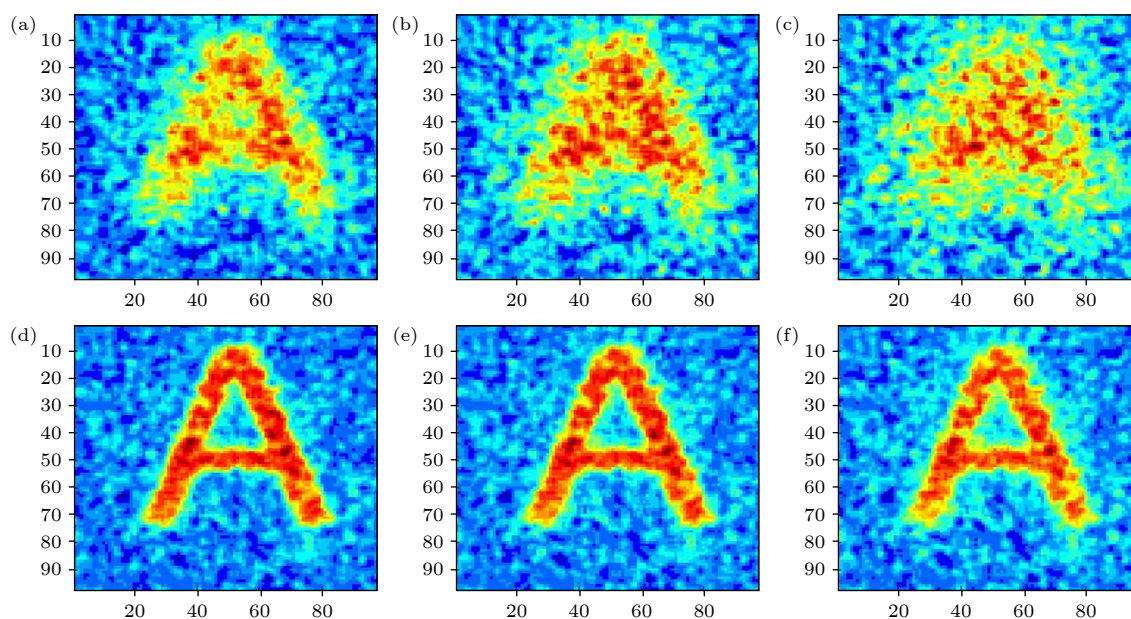


图9 字母“A”在不同强度大气湍流下的图像 (a)—(c) 湍流系数分别为 2.0, 3.2, 6.8 时常规关联成像图像; (d)—(f) 湍流系数为 2.0, 3.2, 6.8 时自适应关联成像图像^[61]

Fig. 9. Obtained images of letter “A” under different strength atmospheric turbulence: (a)—(c) Images of convention ghost imaging at turbulence coefficient of 2.0, 3.2 and 6.8, respectively; (d)—(f) images of adaptive optical ghost imaging at turbulence coefficient 2.0, 3.2 and 6.8, respectively^[61].

计算仿真的方式产生 DNN 网络的训练数据, 并实验验证了该 DNN 神经网络在面对不同位置的散射介质时依然能够恢复出目标图像. 由此可见, 关联成像具有高度的开放性与灵活性, 能够很好地与计算领域的新技术相结合, 取得更好的成像效果, 同时有效扩展了应用场景.

4.3 回波探测与信噪甄别

针对回波探测, 相关研究的侧重点在于提高回波信噪比, 实现高效、可靠的信噪甄别. 信噪甄别, 即从回波信号中尽可能识别、提取真实信号, 降低背景噪声干扰. 发展高探测效率、大探测面积、高动态范围的探测器有助于提高所接收的物体回波信号, 是提高信噪比的手段之一. 但此种手段仅能提高探测能力, 缺乏信噪甄别能力. 若噪声与物体回波信号具有一定的关联, 如散射介质引起的后向散射、环境中与物体回波同频率的噪声光, 仅提升探测能力并不能有效提高信噪比. 而在室外关联成像中, 此类噪声往往是干扰回波信号的主要噪声. 为获取高质量重构图像, 对信噪甄别技术的研究必不可少. 由于关联成像所具有的如光源可主动调控、成像与优化过程可一体化等特点, 基于成像架构或重构算法的信噪甄别研究也成为了研究的重要方面.

在时域对照明光场添加时域调制以实现信噪甄别是关联成像中行之有效的甄别技术之一. 2016 年, Deng 等^[43] 率先提出将脉冲压缩技术、相干探测技术与关联成像结合的方案. 通过将赝热光脉冲做啁啾幅度调制并分为两路, 一路光作为本地振荡, 另一路作为关联成像系统的照明光源, 最后用物体的回波和本振光进行相干探测, 实现了低信噪比下的关联成像. 此外, 也可以通过在光场调制的过程中加载周期脉冲信号作为标定, 以此在回波中滤除时序上与照明调制匹配的噪声^[66]. 而在已知目标空间距离的条件下, 基于时间门控技术^[67] 则可以降低非物体反射的噪声光子, 从而提高成像质量.

在频域对图像进行处理以提高成像质量的方式也是光学成像中常见的信噪甄别技术之一, 这一方法同样适用于室外关联成像. 在重构图像中, 物体的形状是由空间频率域中的低频率决定的, 而高频率则多表示物体细节, 噪声在空间域具有典型的均匀分布, 但在频率域中往往集中在高频区域. 在部分室外成像场景下, 信息获取能力有限的情况下, 通常选择放弃细节, 此时可通过对照明光场或重构图像进行频域变换及滤波, 选择性保留部分低频信息, 实现信噪甄别, 提高图像信噪比.

4.4 图像重构算法、架构优化

在关联成像中, 基于算法进行重构是获取目标图像最后也是最关键的一步, 算法是决定重构图像质量的主导因素之一, 也是这一成像技术能否顺利应用化的关键因素之一. 成像过程中所面临的弱回波、低信噪比、环境干扰等问题, 均可通过算法得到一定程度的解决. 因此, 对成像算法的优化一直是国内外各团队的研究重点. 在室外成像场景下, 关联成像算法研究目标主要集中于: 1) 回波信号信噪甄别; 2) 成像质量的提升; 3) 成像应用的扩展. 其中回波信号信噪甄别研究已在 4.3 节中单独列出, 在此不多赘述. 要介绍在提升成像质量、扩展成像应用等方面的重构算法研究.

1) 成像质量的提升

在关联成像中, 成像质量与采样数呈现正相关关系, 因此提高成像质量与降低采样数互为表里. 以最基础的强度关联为基础, 为实现成像质量的提高, 先后出现了差分关联成像、归一化关联成像、伪逆关联成像、奇异值分解关联成像、压缩感知算法及基于神经网络的重构算法等. 其中对于强度关联算法、差分关联算法与归一化关联算法, 可在重构过程中随时增加采样数据而中断重构成像过程; 对于伪逆关联成像、奇异值分解关联成像与压缩感知算法, 在重构时需先将参考臂数据整理为测量矩阵, 而后续若要追加采样数据, 则需重启重构过程; 而基于神经网络的重构算法由于其特殊性, 无法以上述标准进行分类.

强度关联算法 如前文所述, 关联成像是一种基于双臂光场的高阶关联, 借助关联运算以重构目标图像的成像技术, 其基础的重构公式为

$$O(x, y) = \langle I_R(x, y; i) I_B(i) \rangle, \quad (13)$$

即直接强度关联, 其中 $I_R(x, y; i)$ 为第 i 次采样中参考臂面阵探测器所得数据, $I_B(i)$ 则为第 i 次采样中探测臂桶探测器所得数据. 强度关联无需数据的预处理或额外的实验架构, 代码简洁、重构迅速, 然而其对光源稳定性、光场的均匀性及探测信噪比水平有着较高的要求. 因此, 以直接强度关联为基础, 衍生出了多种重构算法, 以提升图像重构性能.

根据光场相干度的定义将其改写为

$$O_{GI}(x, y) = \frac{\langle I_R(x, y; i) I_B(i) \rangle}{\langle I_R(x, y; i) \rangle \langle I_B(i) \rangle}, \quad (14)$$

即可得归一化的强度关联. 将公式由“除法”形式

改写为“减法”形式, 所得即为涨落关联算法的重构公式:

$$O_{GI}(x, y) = \langle I_R(x, y; i) I_B(i) \rangle - \langle I_R(x, y; i) \rangle \langle I_B(i) \rangle. \quad (15)$$

归一化强度关联及涨落关联重构公式中的分母/减数项可视为受照明光场平均强度影响的背景项, 因而除法/减法运算使得归一化强度关联与涨落关联能够在一定程度上排除照明光场不均匀所带来的影响, 提高图像对比度, 从而实现成像质量的提升.

差分关联成像算法与归一化关联成像算法

在关联成像中, 当目标为高透过率或反射率的目标物体时, 在有限次采样条件下, 原本依赖光强涨落所体现的物体信息淹没于较强的光场平均强度, 成像质量难免受到其影响. 为解决这一问题, Ferri 等^[29]于 2010 年提出了差分关联成像 (differential ghost imaging, DGI). 在差分关联算法中, 需将参考臂端将面阵探测器所采集数据求和以模拟桶探测器, 并将模拟结果引入到重构运算中, 其重构公式如下:

$$O_{DGI}(x, y) = \langle I_R(x, y; i) I_B(i) \rangle - \frac{\langle I_B(i) \rangle}{\langle \sum_{xy} I_R(x, y; i) \rangle} \left\langle I_R(x, y; i) \sum_{xy} I_R(x, y; i) \right\rangle, \quad (16)$$

其中 $\langle \sum_{xy} I_R(x, y; i) \rangle$ 项为模拟桶探测器测量值.

在差分关联成像的基础之上, Sun 等^[30]于 2012 年提出了归一化关联成像 (normalized ghost imaging, NGI), 其重构公式可概括为

$$O_{NGI}(x, y) = \frac{O_{DGI}(x, y)}{\langle I_R(x, y; i) \rangle}, \quad (17)$$

其中 $O_{NGI}(x, y)$ 为 DGI 所得重构图像.

对比归一化强度关联与强度关联算法, 可见 NGI 同样是引入了光场强度均值作为分母项以排除光场平均强度非均匀所带来的干扰, 从而在光场平均强度出现明显的涨落时, 在 DGI 的基础之上进一步提高成像质量. 图 10 为文献 [68] 中的结果图, 在同一条件下展示不同重构算法所得重构图像间的差异.

伪逆关联成像与奇异值分解关联成像

如前文所示, 具有正交性的光场能够较好地压制背景噪声及环境噪声. 当照明光场自身不具备正交性时, 则可通过算法对其进行处理, 通过正交变化, 为其“赋予”正交性.

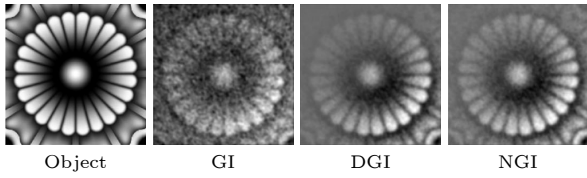


图 10 不同算法所得重构图像对比^[68]

Fig. 10. Images reconstructed by different algorithms^[68].

在伪逆关联成像 (pseudo-inverse ghost imaging, PGI) 中, 通过将采样过程中所得的全部照明光场整理为测量矩阵, 求解测量矩阵的伪逆矩阵, 将其与探测臂数据所整理而成的向量进行重构运算, 实现图像重构的同时有效提高成像的信噪比^[69,70]. 图 11 为文献 [69, 70] 的实验结果图, 直观地展现了伪逆鬼成像对成像质量的提升效果.

与 PGI 相似, 由 Zhang 等^[71] 于 2018 年提出的奇异值分解关联成像 (singular value decomposition ghost imaging, SVDGI) 同样实现了照明光场的“正交化”. 与 PGI 所不同的是, SVDGI 选择了奇异值正交分解这一方法来实现测量矩阵的“正交化”.

压缩感知算法 压缩感知 (compressive sensing, CS) 技术最初是为了突破香农采样定理, 以更低的采样频率实现原始信号的重构. 其理论基础为当具有稀疏性时, 通过非均匀采样可以远低于奈奎斯特采样率的采样数准确还原原始信号. 压缩感知算法最初由 Katz 等^[71] 于 2009 年引入关联成像, 随后白旭等^[72,73] 对不同类型的压缩感知算法进行了详尽的分析或优化.

压缩感知的流程可大致分为: 信号的稀疏表

示、非相干测量与信号重建. 信号的稀疏表示是指借助正交完备字典或过完备字典将原始测量信号以更为简洁的形式进行表达. 非相干测量是指测量矩阵与字典间的不相干. 信号的重建则是指利用凸优化算法、贪婪算法以及贝叶斯压缩感知重构算法等从稀疏信号中恢复出原始信号的过程, 根据所用的过完备字典或凸优化算法等不同, 基于压缩感知技术衍生出了多种不同的算法, 如基于稀疏约束压缩感知算法、正交追踪匹配算法、多选正交最小二乘算法等.

虽然不同类型的压缩感知算法其成像效果各不相同, 但总体而言, 相较于其他重构算法压缩感知算法在成像质量方面具有显著优势, 此外, 在重构的过程中压缩感知虽未改变每次采样中所获取的信息量, 但其理论基础则带来了“物体具有稀疏性”这一额外信息, 可视作降低了重构目标所需的总信息量, 因而能够降低成像所需的采样数. 此外, 这一约束也抑制了重构时光场像素间的相关性, 进而提高了成像分辨率. 遗憾的是相较于前述各类算法, 压缩感知算法在进行图像重构时所需的运算时间与空间远超其他算法, 且对探测噪声较为敏感, 限制了其在关联成像中的应用.

基于神经网络的关联成像重构算法 作为机器学习算法中最受欢迎的算法, 神经网络算法细分出了卷积神经网络、对抗神经网络、极限学习机等不同类型的算法, 其应用领域广泛涉及到信息科学、计算机科学、生物医学、数理科学等学科领域中. 算法的核心思路在于模拟神经系统, 搭建输入层、隐藏层、输出层三层结构的网络体系, 以大量

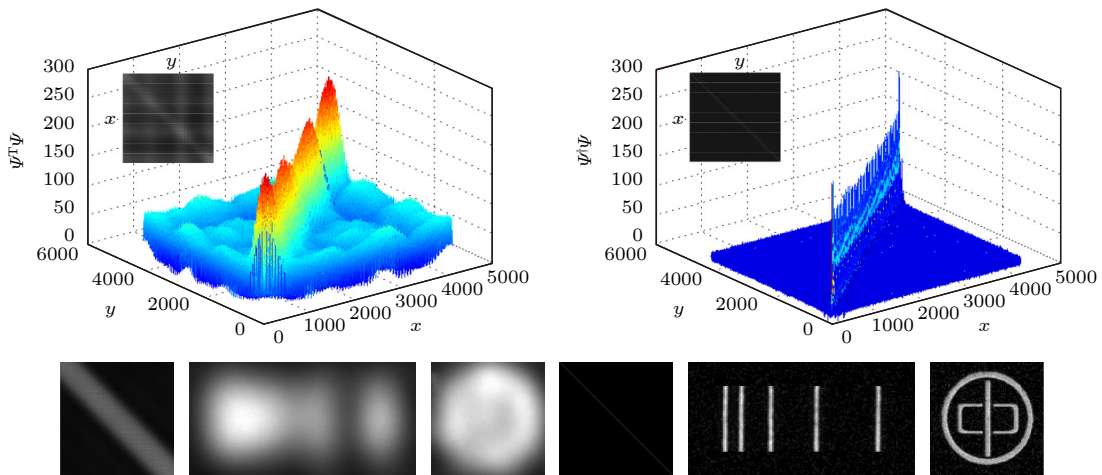


图 11 强度关联算法与伪逆鬼成像重构结果图^[69,70]

Fig. 11. Images reconstructed by GI and PGI^[69,70].

数据进行训练, 从而建立输入特征与所求结果间的对应关系. 这一类算法最初由中国科学院上海光学精密机械研究所司徒国海小组^[34]于2017年引入关联成像领域中, 随后 Shimobaba 等^[74]、Higham 等^[75]研究人员投入到了相关研究中.

与其他重构算法相比, 基于神经网络的重构算法其重构原理、效果都更为依赖所使用的网络其本身的性能, 而非关联成像这一技术其背后的物理原理, 故在此不进行详细讨论.

2) 成像应用的扩展

由于在关联成像中获取单张图像需要进行多次的采样, 在这一过程中难以确保目标与照明光场保持相对静止, 因此在室外成像条件下, 困扰关联成像应用的主要场景之一为对运动目标进行成像. 本节介绍两类对运动目标进行追踪与成像的关联成像方法.

基于图像的动目标成像算法 Sun 等^[37]提出了一种基于图像互相关的动目标成像算法 (cross-correlation-based ghost imaging, CBGI). 在该算法中, 研究人员将成像过程划分为多个阶段, 在每个阶段中基于采集数据进行一次图像重构, 其后计算相邻两阶段重构图像互相关. 互相关函数的峰值坐标中隐含了目标的位移与旋转角度信息, 据此可获取目标的空间状态, 从而后续成像过程中调整照

明光场, 使照明光场与运动目标保持相对静止, 在实现对运动目标追踪的同时实现了对动目标的高质量成像, 解决了动目标场景下高成像速率需求与关联成像大采样数需求间的矛盾. 其实验结果如图 12 所示. 图中 K 表示采样分段后, 当前成像所用的数据为从初始时刻到完成第 K 段采样的数据.

与之相类似, Zha 等^[39]提出了一种基于图像多阶矩的动目标成像算法. 与 CBGI 不同的是, 在该算法中, 通过对比每个阶段所得重构图像的低阶矩, 从而获取了在采样过程中目标物体的运动信息并据此调整后续光场, 实现对运动目标的成像与追踪. 其中目标空间位置信息由图像一阶矩计算可得, 目标的旋转角度由图像二阶矩计算可得. 在该方案中, 为精确计算目标的空间坐标及旋转角度, 研究人员采用了压缩感知算法进行图像重构以抑制背景噪声. 其实验结果如图 13 所示. 图中 K 表示采样分段后, 当前成像所用的数据为从初始时刻到完成第 K 段采样的数据.

基于桶探测信号的动目标成像算法 关联成像系统利用桶探测回波与参考光场的关联获取目标图像信息. 因此, 利用关联成像系统自身的回波信号变化也可以实现对运动目标的跟瞄追踪. Du 等^[41]提出了一种运动目标追踪与成像方法, 基于四象限探测器, 通过对关联成像系统自身的回波信

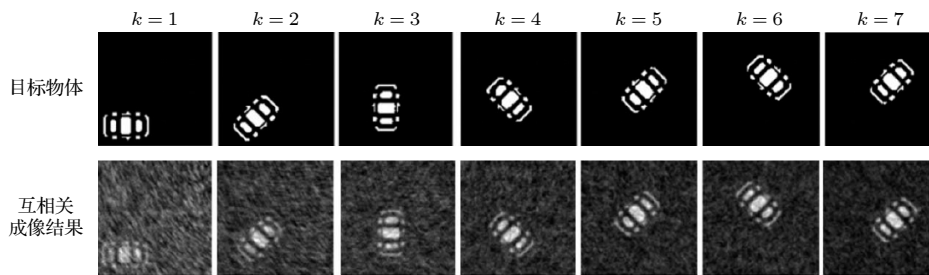


图 12 基于互相关的运动目标成像结果^[37]

Fig. 12. Results of CBGI with moving object^[37].

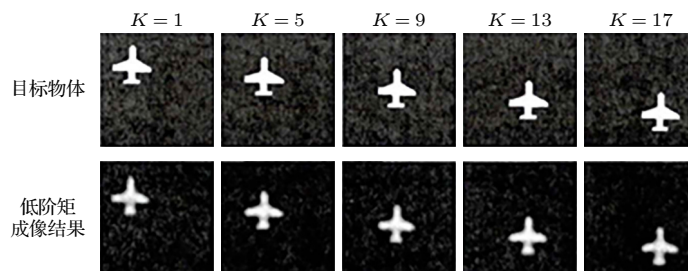


图 13 基于低阶矩的运动目标成像结果^[39]

Fig. 13. Results of GI based on low-order moments with moving object^[39].

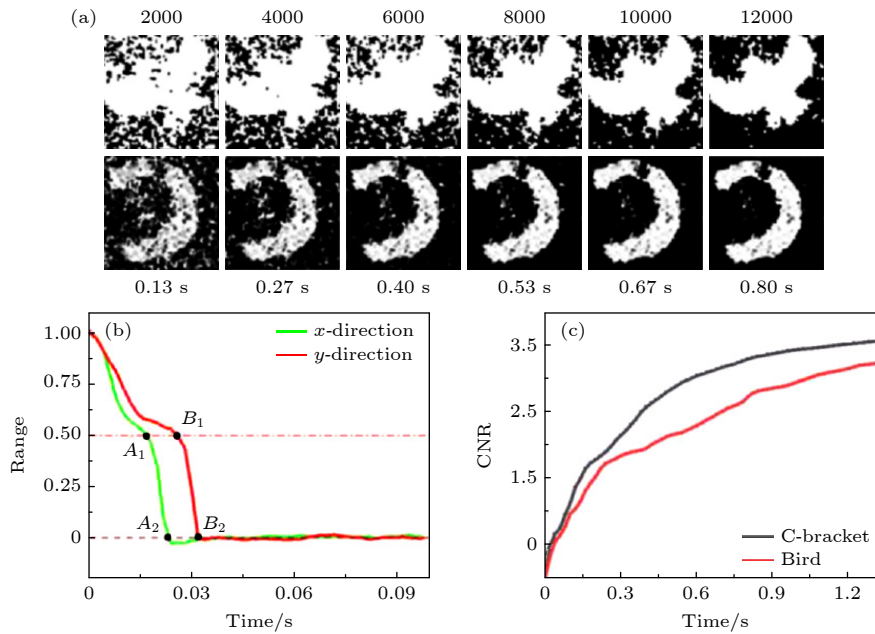


图 14 四象限跟踪成像方法实验结果^[41] (a) 成像结果; (b) 目标追踪结果; (c) 成像质量随时间变化曲线

Fig. 14. Experimental results of GI based on four-quadrant detector^[41]: (a) Results of imaging; (b) trajectory of the moving object; (c) quality of reconstructed images over time.

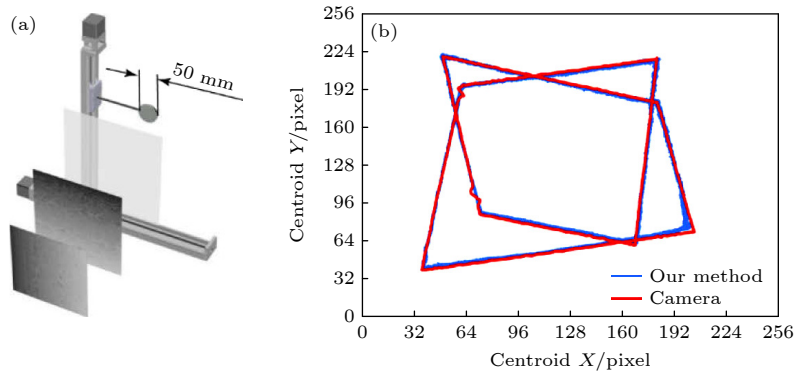


图 15 实时追踪方法实验结果^[40] (a) 实验架构示意图; (b) 相机追踪轨迹(红)与算法计算所得轨迹(蓝)

Fig. 15. Experimental results of the real-time online tracking of a moving object^[40]: (a) Experimental framework diagram; (b) camera tracking track (red) and algorithm calculated track (blue).

号特征及变化的测试分析确定其运动方向,并实时反馈以调整照明范围,实现对目标的实时跟踪与准静止成像.由于无需进行采样分段及图像重构,因此该方法极大地提升了追踪速度与精度.其实验结果如图 14 所示.

Zha 等^[40]提出了一种单像素成像方法的实时跟踪方法.在该方法中,照明光场被分为多组,每组中对同一张光场分别以匀强、水平递增、垂直递增的方式进行灰度调制,因此对于探测器所收集的回波进行相应强度计算,即可得成像区域图像的零阶矩与一阶矩,进而实时重建和跟踪快速移动物体的质心.其实验结果如图 15 所示.该方法仅实现

对目标的跟踪,无法进行成像.

5 室外关联成像技术研究展望

室外关联成像技术朝着更高分辨率、更大工作距离、更大视场、更高分辨率及全天时甚至全天候发展.面向实际应用,我们提出以下 4 个方面的发展建议.

1) 主被动成像方式相结合 与传统的被动成像方式相比,关联成像成像速率不佳且探测视场有限,其主要原因在于多次采样的需要及调制光源的刷新速率受限、照明范围受限.优点则在于信息维

度丰富、不受天时限制. 相比之下, 被动成像利用物体自身辐射或反射的环境光, 具有更广的探测视场且成像速率仅受信号积累需求限制. 因此将主被动成像方式相结合, 相互弥补对方的不足, 可以成为室外关联成像技术向应用发展的一个方向.

2) 研制高灵敏、高带宽探测器 在室外关联成像中, 远距离、大视场、高信噪比成像是其发展的必然需求. 依据雷达公式, 激光能量随着成像距离的增加而急剧下降, 因此高灵敏的探测器愈加重要. 另外, 为尽可能实现实时成像, 需要探测器在短时间内获得物体或场景的信息. 低光通量、短时间探测使得探测器捕获的光子数极为有限, 探测信号的信噪比极低. 因此研制高灵敏、高信息带宽的探测器尤为重要.

3) 研究高效信噪甄别技术与重构算法 高灵敏探测使得关联成像能够探测更微弱的回波信号, 赋予其比传统成像具有更远成像距离的潜力, 但这也意味着探测器对噪声同样更加敏感, 因而需要更精准的信噪甄别技术. 除了前文所述的匹配滤波、频域滤波、光场设计等方式外, 优秀降噪算法的开发也是重要的研究方向之一.

4) 发展抗大气干扰成像技术 室外成像中无法规避的另一个问题是大气环境对成像的影响. 大气湍流具有随机、易变、难预测的特点, 其对光场的扰动在一定程度上破坏了关联成像光场间的相关性, 降低成像分辨率的同时影响了图像质量. 如前文所述, 研究人员已于光源、算法、实验方案等方面展开了相关研究, 而为推进室外关联成像的研究与应用, 进一步发展相应的抗大气干扰成像技术有着重要意义.

6 结 语

在当前研究中, 关联成像的应用领域已扩展到图像加密、生物医学、遥感探测、雷达探测等多个领域. 关联成像特殊的硬件架构使得这一成像技术相较于其他光学成像方式, 在解决室外成像所面临的困境时具有一定的优势. 其所具有的主动照明、可控光场调控等特点有助于应对室外成像环境中弱回波、强噪声及大气干扰等问题. 而其所必须的算法重构过程使得在成像过程中可以对成像系统进行实时且具有针对性的调整, 以助其取得更好的成像效果. 但关联成像的成像速率、视场

及重构图像质量均有所限制, 制约了这一成像技术的应用化. 因此, 开展室外关联成像的相关研究, 进一步提升成像质量、扩展成像视场、压缩成像耗时, 促进其在室外探测与成像领域的应用有着重要意义.

参考文献

- [1] Li S, Cropp F, Kabra K, Lane T J, Wetzstein G, Musumeci P, Ratner D 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 114801
- [2] Han B, Liang Y Q 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 175202 (in Chinese) [韩波, 梁雅琼 2020 *物理学报* **69** 175202]
- [3] Mackinnon A J, Patel P K, Town R P, Edwards M J, Phillips T, Lerner S C, Price D W, Hicks D, Key M H, Hatchett S, Wilks S C, Borghesi M, Romagnani L, Kar S, Toncian T, Pretzler G, Willi O, Koenig M, Martinolli E, Lepape S, Benuzzi-Mounaix A, Audebert P, Gauthier J C, King J, Snavely R, Freeman R R, Boehlly T 2004 *Rev. Sci. Instrum.* **75** 3531
- [4] Mackinnon A J, Patel P K, Borghesi M, Clarke R C, Freeman R R, Habara H, Hatchett S P, Hey D, Hicks D G, Kar S, Key M H, King J A, Lancaster K, Neely D, Nikkro A, Norreys P A, Notley M M, Phillips T W, Romagnani L, Snavely R A, Stephens R B, Town R P J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 045001
- [5] Zhou T Y 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 055201 (in Chinese) [周天益 2019 *物理学报* **68** 055201]
- [6] Benedetti M, Franceschini G, Azaro R, Massa A 2007 *IEEE Antenn. Wirel. Pr.* **6** 271
- [7] Palmeri R, Bevacqua M T, Crocco L, Isernia T, Di Donato L 2017 *IEEE T. Antenn. Propag.* **65** 829
- [8] Dai B, Wang P, Zhou Y, You C W, Hu J S, Yang Z G, Wang K J, Liu JS 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 088701 (in Chinese) [代冰, 王朋, 周宇, 游承武, 胡江胜, 杨振刚, 王可嘉, 刘劲松 2017 *物理学报* **66** 088701]
- [9] Cao B H, Zhang M Y, Fan M B, Sun F S, Liu L 2022 *Chin. Opt.* **15** 405
- [10] Ding Li, Ding Xi, Ye Y Y, Zhu Y M 2017 *Chin. Opt.* **10** 114
- [11] Saumya T, Kianoush F, Georgina C, Rohit B 2022 *Appl. Spectrosc.* **76** 475
- [12] Lü H C, Zhao Y C, Yang G, Dong B W, Qi J, Zhang J Y, Zhu Z Z, Sun Y, Yu G H, Jiang Y, Wei H X, Wang J, Lu J, Wang Z H, Cai J W, Shen B G, Yang F, Zhang S J, Wang S G 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 096801 (in Chinese) [吕浩昌, 赵云驰, 杨光, 董博闻, 祁杰, 张静言, 朱照照, 孙阳, 于广华, 姜勇, 魏红祥, 王晶, 陆俊, 王志宏, 蔡建旺, 沈保根, 杨峰, 张申金, 王守国 2020 *物理学报* **69** 096801]
- [13] Vaithilingam S, Ma T J, Furukawa Y, Wygant I O, Zhuang X, De La Zerda A, Oralkan O, Kamaya A, Gambhir S, Jeffrey R, Khuri-yakub B 2009 *IEEE T. Ultrason. Ferr.* **56** 2411
- [14] Tan Y, Xia K Y, Ren Q S, Li C H 2017 *Opt. Express* **25** 8022
- [15] Li J H, Zhang F Z, Xiang Y, Pan S L 2021 *Opt. Express* **29** 31574
- [16] Li S M, Cui Z Z, Ye X W, Feng J, Yang Y, He Z Q, Cong R, Zhu D, Zhang F Z, Pan S L 2020 *Laser Photonics Rev.* **14** 1900239
- [17] Lord Rayleigh Sec. R S 1896 *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **42** 167
- [18] Abbe E 1873 *Archiv für Mikroskopische Anatomie* **9** 413

- [19] Zuo C, Chen Q 2022 *Chin. Opt.* **15** 1105
- [20] Jicha O, Peclac P, Stanislav Z, Grabner M, Kvicera V 2012 *Proceed. SPIE* **8535** 853509
- [21] Ronald R P, Richard J S 1994 *J. Opt. Soc. Am. A* **11** 288
- [22] Darryl P G 1977 *J. Opt. Soc. Am.* **67** 390
- [23] Hanbury Brown R, Twiss R Q 1956 *Nature* **177** 27
- [24] Klyshko D N 1988 *Sov. Phys. Usp.* **31** 74
- [25] Pittman T B, Shih Y H, Strekalov D V, Sergienko A V 1995 *Phys. Rev. A* **52** R3429
- [26] Gatti A, Brambilla E, Lugiato L A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 133603
- [27] Khakimov R I, Henson B M, Shin D K, Hodgman S S, Dall R G, Baldwin K G H, Truscott A G 2016 *Nature* **540** 100
- [28] Shapiro J H 2008 *Phys. Rev. A* **78** 061802
- [29] Ferri F, Magatti D, Lugiato L A, Gatti A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 253603
- [30] Sun B Q, Welsh S S, Edgar M P, Shapiro J H, Padgett M J 2012 *Opt. Express* **20** 16892
- [31] Gao Z Q, Cheng X M, Zhang L, Hu Y, Hao Q 2020 *J. Opt.* **22** 055704
- [32] Huo Y, He H, Chen F 2016 *Appl. Opt.* **55** 3356
- [33] Zhao S M, Zhuang P 2014 *Chin. Phys. B* **23** 054203
- [34] Lyu M, Wang W, Li G W, Zheng S S, Situ G H 2017 *Sci. Rep.* **7** 17865
- [35] Wang F, Wang C L, Chen M L, Gong W L, Zhang Y, Han S S, Situ G H 2022 *Light-Sci. Appl.* **11** 1
- [36] Zhai X, Cheng Z D, Hu Y D, Chen Y, Liang Z Y, Wei Y 2019 *Opt. Commun.* **448** 69
- [37] Sun S, Gu J H, Lin H Z, Jiang L, Liu W T 2019 *Opt. Lett.* **44** 5594
- [38] Wang Z H, Sun Y L, Liao J L, Wang C, Cao R, Jin L, Cao C Q 2021 *Opt. Express* **29** 39342
- [39] Yang D Y, Chang C, Wu G H, Luo B, Yin L F 2020 *Appl. Sci.* **10** 7941
- [40] Zha L B, Shi D F, Huang J, Yuan K, Meng W W, Yang W, Jiang R B, Chen Y F, Wang Y J 2021 *Opt. Express* **29** 30327
- [41] Du L K, Sun S, Jiang L, Chang C, Lin H Z, Liu W T 2023 *Phys. Rev. Appl.* **19** 054014
- [42] Gong W L, Zhao C Q, Yu H, Chen M L, Xu W D, Han S S 2016 *Sci. Rep.* **6** 26133
- [43] Deng C J, Gong W L, Han S S 2016 *Opt. Express* **24** 25983
- [44] Deng C J, Pan L, Wang C L, Gao X, Gong W L, Han S S 2017 *Photon. Res.* **5** 431
- [45] Sun M J, Edgar M P, Gibson G M, Sun B Q, Near L, Miles J. P 2016 *Nat. Commun.* **7** 12010
- [46] Rai T, Hashim F H, Huddin A B, Lbrahim M F, Hussain A 2020 *Electronics* **9** 741
- [47] Xu Z H, Chen W, Pennelas J, Padgett Miles, Sun M J 2018 *Opt. Express* **26** 2427
- [48] Wang W Q, Zhang W F, Sai T. C, Brent E. L, Yang Q H, Wang L R, Hu X H, Wang L, Wang G X, Wang Y S, Zhao W 2017 *ACS Photonics* **4** 1677
- [49] Nitta K, Yano Y, Kitada C, Matoba O 2019 *Appl. Sci.* **9** 4807
- [50] Yusuke K, Kento K, Rui T, Yasuyuki O, Yoshiaki N, and Takuo T 2019 *Opt. Express* **27** 3817
- [51] Cheng J 2009 *Opt. Express* **17** 7916
- [52] Li C, Wang T, Pu J, Zhu W, Rao R 2010 *Appl. Phys. B* **99** 599
- [53] Zhang P L, Gong W L, Shen X, Han S S 2010 *Phys. Rev. A* **82** 033817
- [54] Chen M L, Li E R, Gong W L, Bo Z W, Xu X Y, Zhao C Q, Shen X, Xu W D, Han S S 2013 *Opt. Photonics J.* **3** 83
- [55] Meyers R E, Deacon K S, Shih Y 2023 *Appl. Phys. Lett.* **122** 014001.
- [56] Gong W L, Han S S 2011 *Opt. Lett.* **36** 394
- [57] Hardy N D, Shapiro J H 2011 *Phys. Rev. A* **84** 063824
- [58] Xu Y K, Liu W T, Zhang E F, Li Q, Dai H Y, Chen P X 2015 *Opt. Express* **23** 32993
- [59] Meyers R E, Deacon K S, Tunick A D 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 061126
- [60] Gao Z, Yin J, Bai Y, Fu X 2020 *Appl. Opt.* **59** 8472
- [61] Shi D F, Fan C Y, Zhang P F, Zhang J H, Shen H, Qiao C H, Wang Y J 2012 *Opt. Express* **20** 27992
- [62] Li Y Z, Deng C J, Gong W L, Han S S 2021 *Acta Opt. Sin.* **41** 1511004
- [63] Yuan Y, Chen H 2022 *New J. Phys.* **24** 043034
- [64] Lin L X, Cao J, Zhou D, Cui H, Hao Q 2022 *Opt. Express* **30** 11243
- [65] Sun S, Nie Z W, Li Y G, Lin H Z, Liu W T, Chen P X 2022 *arXiv: 2208.08644v3*
- [66] Li D, Yang D, Sun S, Li Y G, Jiang L, Lin H Z, Liu W T 2021 *Opt. Express* **29** 31068
- [67] Guan J, Cheng Y, Chang G 2017 *Opt. Commun* **391** 82
- [68] Sun S, Liu W T, Gu J H, Lin H Z, Jiang L, Xu Y K, Chen P X 2019 *Opt. Lett.* **44** 5993
- [69] Gong W L 2015 *Photonics Res.* **3** 234
- [70] Zhang C, Guo S X, Cao J S, Guan J, Gao F L 2014 *Opt. Express* **22** 30063
- [71] Katz O, Bromberg Y, Silberberg Y 2009 *App. Phys. Lett* **95** 131110.
- [72] Zhang X, Meng X F, Yang X L, Wang Y R, Yin Y K, Li X Y, Peng X, He W H, Dong G Y, Chen H Y 2018 *Opt. Express* **26** 12948
- [73] Bai X, Li Y Q, Zhao S M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 044209 (in Chinese) [白旭, 李永强, 赵生妹 2013 *物理学报* **62** 044209]
- [74] Shimobaba T, Endo Y, Nishitsuji T, Takahashi T, Nagahama Y, Hasegawa S, Sano M, Hirayama R, Kakue T, Shiraki A, Ito T 2018 *Opt. Commun.* **413** 147
- [75] Higham C F, Murray-Smith R, Padgett M J, Edgar M P 2018 *Sci. Rep.* **8** 2369

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Research progress of correlation imaging under outdoor environment*

Chang Chen¹⁾²⁾³⁾ Sun Shuai¹⁾²⁾³⁾ Du Long-Kun¹⁾²⁾³⁾ Nie Zhen-Wu¹⁾²⁾³⁾
 He Lin-Gui¹⁾²⁾³⁾ Zhang Yi¹⁾²⁾³⁾ Chen Peng¹⁾²⁾³⁾
 Bao Ke¹⁾²⁾³⁾ Liu Wei-Tao^{1)2)3)†}

1) (*Institute for Quantum Science and Technology, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Interdisciplinary Center of Quantum Information, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

3) (*Hunan Key Laboratory of Mechanism and Technology of Quantum Information, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 31 July 2023; revised manuscript received 5 September 2023)

Abstract

Image, as a method of information acquisition, is indispensable for human beings, and it plays an irreplaceable role in military and civilian fields, such as detection and scouting, precision guidance, transportation, and industrial production. In the outdoor environment, the resolution, signal-to-noise ratio, and working distance of optical imaging are limited as result of the influence of background light, stray light, and atmospheric medium. In recent years, with the development of multi-discipline such as optics, physics, information theory, and computer science, the new optical imaging technologies continue to emerge, thus bringing new opportunities for outdoor optical imaging towards long-distance, large field of view and high information flux. As one of the new active imaging technologies, correlation imaging has the potential applications of robustness against turbulence and noise, and the possibility of beating the Rayleigh limit. It can deal with the problems better, such as sharp attenuation of optical power caused by long distances, detection of interference signals from environmental noise, and influence of turbulence. Based on the principle of optical imaging, this paper analyzes the factors affecting optical imaging, in terms of resolution, signal-to-noise ratio, spatial bandwidth product, and imaging distance under outdoor environment, focusing on the research progress of outdoor correlation imaging including imaging systems, signal-to-noise screening technology and imaging algorithm. In addition, we analyze the requirements of optical imaging for longer distances and broader field of view, and consider the fundamental problems and the key technologies.

Keywords: quantum correlation imaging, quantum optics, outdoor environment, imaging system

PACS: 33.80.-b, 84.40.Ua, 42.30.-d

DOI: [10.7498/aps.72.20231245](https://doi.org/10.7498/aps.72.20231245)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62275270, 62105365).

† Corresponding author. E-mail: wliu@nudt.edu.cn



室外环境中的关联成像研究进展

常宸 孙帅 杜隆坤 聂镇武 何林贵 张翼 陈鹏 鲍可 刘伟涛

Research progress of correlation imaging under outdoor environment

Chang Chen Sun Shuai Du Long-Kun Nie Zhen-Wu He Lin-Gui Zhang Yi Chen Peng Bao Ke
Liu Wei-Tao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 183301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20231245

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231245>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于光学相控阵双周期光场的关联成像

Correlated imaging based on biperiodic light field of optical phased array

物理学报. 2021, 70(23): 234203 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211208>

日光强度涨落自关联消湍流成像

Turbulence-free intensity fluctuation self-correlation imaging with sunlight

物理学报. 2019, 68(9): 094204 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182181>

基于相对论自由电子的量子物理

Relativistic free electrons based quantum physics

物理学报. 2022, 71(23): 233302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221289>

新型超导量子比特及量子物理问题的研究

Novel superconducting qubits and quantum physics

物理学报. 2018, 67(22): 228501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180845>

新型双通道差分偏振干涉成像系统

Novel dual channel polarization interference imaging system

物理学报. 2018, 67(10): 100701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172691>

一维超导传输线腔晶格中的拓扑相变和拓扑量子态的调制

Modulation of topological phase transitions and topological quantum states in one-dimensional superconducting transmission line cavities lattice

物理学报. 2022, 71(19): 194203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220675>

国防科技大学建校 70 周年专题

基于动力学平均场的光晶格超冷原子量子模拟*

谭辉¹⁾ 曹睿¹⁾ 李永强^{1)2)†}

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学, 极端条件物理与应用湖南省重点实验室, 长沙 410073)

(2023 年 4 月 29 日收到; 2023 年 6 月 17 日收到修改稿)

随着原子冷却技术与光晶格技术的发展, 光晶格与超冷原子气体组成的量子系统已经成为量子模拟中的有力工具. 光晶格纯净和高度可控的性质赋予其强大的调控能力, 如今, 人们可以模拟更复杂和有趣的物理现象, 从而加深对量子多体物理的认识. 本文综述了近年来本课题组利用玻色动力学平均场理论对强关联区间的光晶格玻色体系进行的一系列研究, 包括多组分玻色体系、高轨道玻色体系以及存在长程相互作用的体系等. 通过玻色动力学平均场理论的计算, 揭示了从弱相互作用区间到强相互作用区间出现的丰富物理现象, 包括不同磁序的量子相、多步凝聚、超固体相以及高轨道体系中的自旋-角动量耦合和阻挫效应.

关键词: 冷原子量子模拟, 玻色动力学平均场理论, 量子相变**PACS:** 37.10.Jk**DOI:** 10.7498/aps.72.20230701

1 引言

量子模拟简而言之就是利用其他可控的量子多体系统对真实复杂量子系统进行实验或理论研究的一种方法^[1]. 光晶格中的超冷原子气体由于系统参数可控和成熟的实验技术, 已经成为了一个完善的量子模拟实验平台^[2,3]. 光晶格通常是由相干激光束形成的, 通过控制激光的数目和角度来实现不同维度^[4-6]和不同结构^[7-11]的周期性晶格结构, 从而模拟固体中的晶格. 在光晶格中, 人们可以自由调节晶格深度^[6], 可以研究晶格无序性, 还可以设计出有等效磁场的系统, 其磁场强度可以达到目前固体物理实验室中最大磁场的数百倍^[12]. 除此之外, 人们可以精确控制激光的相对相位, 实现可编程的连续可调晶格系统, 这些实验技术大大拓展了光晶格的调控和模拟能力^[13,14]. 中性原子在激光的交变电场中被极化, 从而受到偶极力被陷俘在这

样的周期性光晶格中^[15]. 根据激光波长的不同, 光晶格中的原子被陷俘在波结或波腹, 这种相干激光束产生的周期性晶格势会产生一系列布洛赫能带. 一般而言, 原子在转移到光学晶格之前就被冷却到了足够低的温度, 因此在绝热地装载在光晶格后只有最低的布洛赫带被填充, 当晶格势足够深时, 该体系可以用一个简单的单能带紧束缚模型描述^[16], 该模型主要包含原子在格点上的相互作用以及在格点间的跃迁振幅, 通过调节晶格深度或者通过费什巴赫 (Feshbach) 共振^[17-19]改变跃迁振幅与原子间相互作用的比值大小可以观察到丰富的量子相.

1995 年, 玻色-爱因斯坦凝聚首次在实验中被观察到^[20,21], 六年后 Greiner 研究组^[6]成功将原子装载在光晶格中并观察到了著名的莫特绝缘相, 莫特绝缘相是一个典型的强关联相, 由于原子间的相互作用非常强, 原子局域在各个格点上, 每个格点上的粒子数都是整数. 这一想法最开始来自 Jaksch 和他的同事^[22], 他们提出光晶格中的原子可以模

* 国家自然科学基金 (批准号: 12074431, 12374252) 和湖南省杰出青年科学基金 (批准号: 2021JJ10044) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li_yq@nudt.edu.cn

拟固体材料中的电子行为,并模拟哈伯德模型.在 Greiner 等的实验之后,利用光晶格中的超冷原子进行量子模拟的实验和理论研究如雨后春笋般大量涌现.基于光晶格中超冷原子的量子模拟也成为了现代物理中不可或缺的一部分^[23–31].

随着实验技术的发展,人们开始对自旋玻色体系进行研究^[32],这里的自旋可以是原子不同的超精细态,也可以是不同类型的原子.在这样的体系中,自旋关联起着重要作用,并且会带来不同于标量玻色子体系的物理现象.在最近的实验中,旋量超冷玻色体系已经被实现了^[33–37],并出现了非常广泛的研究,如自旋混合^[38,39]、自旋波^[40,41]、自旋动力学^[42–46]、自旋图案^[47–49]以及相变^[50–52].这些实验为研究自旋关联凝聚体中的量子现象提供了新的路径,也激起了对光晶格中旋量玻色气体的进一步研究^[53–58].此外,研究表明:在外加磁场下,体系基态的简并被打破,自旋相互作用与原子间短程相互作用的竞争会引起丰富的强关联量子相^[31,32,59,60].

除了原子间的短程相互作用,长程相互作用也是强关联体系中的一个重要组成部分,具有长程相互作用的体系倾向于形成新的量子相^[61].长程相互作用通常出现在材料科学中,并与短程相互作用竞争导致空间调制相的出现^[62].在光晶格超冷原子体系中有两种方式可以带来长程相互作用:一是利用超冷原子间的偶极力^[61];二是将原子与高精度腔耦合,腔场自洽地将所有原子耦合在一起,可以等效地认为原子间具有长程相互作用^[63–66].偶极玻色-爱因斯坦凝聚体^[67]、极性分子^[68]和耦合到光学腔^[63,69]的玻色-爱因斯坦凝聚体的实验实现,为具有长程相互作用的量子气体的研究开辟了新的道路,也为研究具有新奇性质的量子相提供了更多的途径.

此外,轨道自由度也是量子材料中重要的组成部分,其与自旋自由度、电荷自由度等一起构成了量子材料的物理特性.对于轨道自由度的研究,极大地丰富了人们对于基础物理机制的认知.在冷原子量子模拟中,这种高轨道原子系统具有的空间各向异性,带来了丰富的物理现象^[70–79].在实验方面,随着技术的不断提高,高轨道冷原子的相关实验也取得了丰硕的成果.最早在实验室观测到 p 能带现象是 2007 年由 Bloch 研究组^[80]实现的,之后汉堡大学的 Hemmerich 小组^[81,82]利用二分晶格

(bipartite lattice) 实现了正方晶格的 p 轨道玻色凝聚,并观测到 p 能带玻色系统中存在 $p_x + ip_y$ 的手征超流.近年来,随着实验技术的不断提高,三角晶格、六角晶格的 p 轨道玻色系统和高轨道费米系统^[83,84]也已经被实现,并观察到了非常有趣的物理现象^[75,85–89].

总的来说,光晶格中的超冷原子为量子多体问题的模拟提供了理想的平台,在凝聚态物理、统计物理、量子化学、高能量物理等领域中都起着重要作用^[90].第 2 部分详细介绍玻色动力学平均场理论,该理论对于研究高维强关联体系是非常有效的.第 3, 4, 5 部分分别介绍了我们近几年在旋量玻色体系、存在长程相互作用体系、高轨道玻色体系的研究.最后是总结和展望.

2 玻色动力学平均场理论

在多体系统中,由于粒子间复杂的相互作用,整个体系是密切关联在一起的,因此理论求解是非常困难的.要处理多体系统,只能采取近似处理、数值求解的方法.目前研究多体系统的方法有平均场理论、密度矩阵重整化群、量子蒙特卡罗方法、动力学平均场理论(dynamical mean-field theory, DMFT)、精确对角化等.本文主要介绍玻色动力学平均场理论(Bosonic dynamical mean-field theory, BDMFT).

动力学平均场理论的研究始于 1989 年, Vollhardt 和 Metzner^[91] 研究发现无穷维下 Fermion-Hubbard 模型可以进行简化.同年, Hartmann^[92,93] 指出在无穷维下关联将变得局域,动量将不再重要,这种局域的关联具有动力学属性,任何非局域的关联效应都可以用一个静态的平均场描述.之后, 1991 年, Janiš^[94] 利用动力学干涉势近似理论给出了无穷维下 Hubbard 模型的格林函数和自能的泛函方程.在此基础上, Georges 与 Kotliar^[95] 利用 Anderson 杂质模型将 DMFT 的自洽方程推广到了 Hubbard 模型, DMFT 的基本框架构建完成.从 1989 年开始,到 1991 年结束,短短三年的时间,动力学平均场理论就建立完成,动力学平均场理论被广泛地用于材料计算、多体系统等,拓展了数值求解物理问题的计算方法,是处理多体问题的一种高效的计算手段.

动力学平均场的核心思想是无穷维极限下系统的局域性. 在无穷维度下, 自能是严格局域的, 系统的空间涨落被冻结, 只剩下了局域的量子涨落, 此时就可以将多体系统解耦成单体问题, 因此动力学平均场理论是一种考虑了局部量子涨落的数值方法, 如图 1^[96] 所示. 在无穷维度下自能是严格局域的, 因此动力学平均场理论对于低维度问题的计算误差比较大, 但随着研究发现, 二维、三维的多体系统中动力学平均场理论的结果也令人满意^[97-99]. 因此, 动力学平均场理论是计算二维及以上维度强关联、弱耦合区间的一个主要方法.

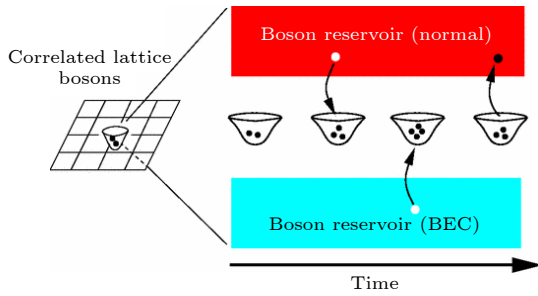


图 1 玻色动力学平均场示意图. 通过与普通玻色子热库和玻色-爱因斯坦凝聚热库耦合^[96], 多体格点问题退化为一个单格点问题

Fig. 1. Schematic picture of BDMFT. In BDMFT, the many-body lattice problem is reduced to a single lattice problem coupling with normal Bosonic reservoir and reservoir of Bose-Einstein condensate (BEC)^[96].

考虑一个一般的 Bose-Hubbard 模型, 其哈密顿量可写为

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \nu} \left(t_{\nu} \hat{b}_{i,\nu}^{\dagger} \hat{b}_{j,\nu} + \text{H.c.} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,\nu\mu} U_{\nu\mu} \hat{n}_{i,\nu} (\hat{n}_{i,\mu} - \delta_{\nu\mu}) - \sum_{i,\nu} \varepsilon_{\nu} \hat{n}_{i,\nu}, \quad (1)$$

其中 ν, μ 表示不同组分的玻色子, $\hat{b}_{i,\nu}^{\dagger}$ ($\hat{b}_{i,\nu}$) 是格点 i 上 ν 组分玻色子的产生 (湮灭) 算符, $\hat{n}_{i,\nu} \equiv \hat{b}_{i,\nu}^{\dagger} \hat{b}_{i,\nu}$ 是格点 i 处 ν 组分玻色子的粒子数算符, t_{ν} 为跃迁振幅, $\langle i, j \rangle$ 表示最近邻格点, $U_{\nu\mu}$ 和 ε_{ν} 分别是相互作用和化学势, $\delta_{\nu\mu}$ 为克罗内克符号. 在巨正则系综下, 可以把系统的配分函数写为^[96,100,101]

$$Z = \int \mathcal{D}[b^*, b] e^{-S[b^*, b]}, \quad (2)$$

式中, $\mathcal{D}[b^*, b] = \prod_{i,\nu} db_{i,\nu}^* db_{i,\nu}$, 此处的 $b_{i,\nu}$ 是一个复数场. 对应的作用量可写为

$$S[b^*, b] = \int_0^{\beta} d\tau \left(\sum_{i,\nu} b_{i,\nu}^*(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} b_{i,\nu}(\tau) + H(\tau) \right) = \int_0^{\beta} d\tau \left[\sum_{i,\nu} b_{i,\nu}^*(\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{i,\nu}(\tau) - \sum_{\langle i,j \rangle, \nu} t_{\nu} (b_{i,\nu}^*(\tau) b_{j,\nu}(\tau) + \text{c.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{i,\nu\mu} U_{\nu\mu} n_{i,\nu}(\tau) (n_{i,\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) \right], \quad (3)$$

式中, $\tau = it'$ 是根据时间 t' 定义的虚时; $H(\tau)$ 为虚时下的体系哈密顿量; $\beta = 1/(k_B T)$, 其中 k_B 为玻尔兹曼常数, T 为体系的温度. 可以将作用量分成 3 个部分 S_0 , ΔS 和 $S^{(0)}$, 其中, S_0 是只有格点 $i = 0$ 的有效作用量, 即

$$S_0 = \int_0^{\beta} d\tau \left[\sum_{\nu} b_{0,\nu}^*(\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{0,\nu}(\tau) + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu} U_{\nu\mu} n_{0,\nu}(\tau) (n_{0,\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) \right]; \quad (4)$$

ΔS 是仅包含了 $i = 0$ 格点与其周围格点的跃迁过程的作用量,

$$\Delta S = \int_0^{\beta} d\tau \sum_{i,\nu} -t_{\nu} (b_{0,\nu}^*(\tau) b_{i,\nu}(\tau) + \text{c.c.}) \equiv \int_0^{\beta} d\tau \Delta S(\tau); \quad (5)$$

最后的 $S^{(0)}$ 则包含了所有跟 $i = 0$ 格点无关的项,

$$S^{(0)} = \int_0^{\beta} d\tau \left[\sum_{i \neq 0, \nu} b_{i,\nu}^*(\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{i,\nu}(\tau) - \sum'_{\langle i,j \rangle, \nu} t_{\nu} (b_{i,\nu}^*(\tau) b_{j,\nu}(\tau) + \text{c.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq 0, \nu\mu} U_{\nu\mu} n_{i,\nu}(\tau) (n_{i,\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) \right], \quad (6)$$

式中的 \sum' 是除了 0 格点外所有的最近邻的求和符号. 因此, 可以将系统的配分函数写成

$$Z = \int \mathcal{D}[b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_0} \times \int \left(\mathcal{D}^{(0)} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-\Delta S} e^{-S^{(0)}} \right). \quad (7)$$

考虑到, $S^{(0)}$ 描述的系综平均值可以写成

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z^{(0)}} \int \mathcal{D}^{(0)} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] A e^{-S^{(0)}}, \quad (8)$$

代入 (7) 式, 配分函数被写成

$$Z = \int \mathcal{D} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_0} Z^{(0)} \langle e^{-\Delta S} \rangle_0, \quad (9)$$

将 $\langle e^{-\Delta S} \rangle_0$ 展开到二阶, 引入超流序参量 $\phi_{i,\nu}(\tau) = \langle b_{i,\nu}(\tau) \rangle_0$ 和连通格林函数

$$\mathbf{G}_{i\nu,j\mu}^{(0)}(\tau_1, \tau_2) = - \left\langle \left(\begin{array}{c} b_{i\nu}(\tau_1) - \langle b_{i\nu}(\tau_1) \rangle_0 \\ b_{i\nu}^*(\tau_1) - \langle b_{i\nu}^*(\tau_1) \rangle_0 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} b_{j\mu}^*(\tau_2) - \langle b_{j\mu}^*(\tau_2) \rangle_0 \\ b_{j\mu}(\tau_2) - \langle b_{j\mu}(\tau_2) \rangle_0 \end{array} \right)^T \right\rangle, \quad (10)$$

最终可以将配分函数写成

$$Z = Z^{(0)} \int \mathcal{D} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_0} \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\nu} -t_\nu [b_{0,\nu}^*(\tau) \phi_{i,\nu}(\tau) + b_{0,\nu}(\tau) \phi_{\nu,i}^*(\tau)] + \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{i,\nu} \sum_{j,\mu} t_\mu t_\nu \mathbf{G}_{i\nu,j\mu}^{(0)}(\tau_1, \tau_2) \right\}. \quad (11)$$

观察 (11) 式的形式, 可以定义一个有效的杂质格点 ($i=0$) 的配分函数

$$Z_{\text{imp}} \equiv \frac{Z}{Z^{(0)}} = \int \mathcal{D} [b_{0,\nu}^*, b_{0,\nu}] e^{-S_{\text{imp}}}, \quad (12)$$

其中杂质格点的作用量可写成

$$S_{\text{imp}} = - \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\nu\mu} \left(\begin{array}{c} b_{0\nu}^*(\tau_1) \\ b_{0\nu}(\tau_1) \end{array} \right)^T \mathbf{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(\tau_1 - \tau_2) \left(\begin{array}{c} b_{0\mu}(\tau_2) \\ b_{0\mu}^*(\tau_2) \end{array} \right) + \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_{\nu\mu} \frac{1}{2} U_{\nu\mu} n_{0\nu}(\tau) (n_{0\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) - \sum_{i,\nu} t_\nu (b_{0\nu}^*(\tau) \phi_{i,\nu}(\tau) + \text{c.c.}) \right\}, \quad (13)$$

(13) 式中引入了 Weiss 格林函数, 有

$$\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = (\partial_{\tau_1} \sigma_z - \varepsilon_\nu) \delta_{\nu\mu} + \mathbf{G}_{i\nu,j\mu}^{(0)}, \quad (14)$$

其中, σ_z 是泡利矩阵. 由于考虑的是高维情况, 为了使得此时动能不发散, 需要对跃迁项做变换 $t \rightarrow z\tilde{t}$, z 是配位数 [96,97,102]. 其原因是在计算最近邻跃迁的过程中, 会多出一个配位数 z , 因此在无穷维度下, 会出现动能发散的情况, 故需要在此处进行一个修正. 上面的这种将杂质格点从整个多体系统中解耦出来, 变成一个杂质格点与热浴耦合的方法, 被称为“空腔方法” [96,97,103].

在松原频率的表象下, Weiss 格林函数可写成

$$\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(i\omega_n) = (i\omega_n \sigma_z + \varepsilon_\nu) \delta_{\nu\mu} - t_\nu t_\mu \sum_{i,j}' \mathbf{G}_{i\nu,j\mu}^{(0)}(i\omega_n), \quad (15)$$

其中, $\omega_n = 2\pi n/\beta$ 是松原频率. Weiss 格林函数满足 Dyson 方程:

$$\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1} = \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) + \mathbf{G}_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n), \quad (16)$$

式中, Σ_{imp} 是杂质格点的自能; 杂质格点的格林函

数 $\mathbf{G}_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n)$ 满足

$$\mathbf{G}_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n) = \sum_k \frac{1}{i\omega_n \sigma_z + \varepsilon - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) - \varepsilon_k}, \quad (17)$$

其中, ε_k 是色散关系. 在这里, 近似认为自能是个局域的量, 即 $\Sigma(k, i\omega_n) \approx \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$. 这个近似在系统处于无穷维度时是严格成立的, 在高维下基本符合. 但这种近似无法处理由空间关联所带来的物理现象, 对于长程相互作用、自旋液体等物理问题无法得到很好的结果. 现在, Σ_{imp} 和 $\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(i\omega_n)$ 互相包含了对方, DMFT 的自洽回路已形成. 给 Weiss 格林函数一个试探值, 就可以求解作用量 (13) 式, 之后就求出自能 Σ_{imp} 等物理量, 利用 Dyson 方程 (16), 可以得到新的 $\mathcal{G}_{0,\nu\mu}^{-1}(i\omega_n)$, 构成一个自洽回路.

在上面的自洽过程中, 求解作用量是非常困难的, 因此比较好的方法是将作用量映射到可以求解的模型上. 这个可解的模型要能够较为完美地描述杂质格点与环境的物理状态, 对于杂质格点不仅要

考虑到单格点, 还需要考虑到其和环境的关联, Georges 和 Kotliar^[95] 提出 Anderson 杂质模型的

映射方法是现在 DMFT 广泛使用的方法. Anderson 杂质模型哈密顿量可写为^[103,104]

$$\hat{H}_A = - \sum_{\nu} z t_{\nu} \left(\phi_{\nu}^* \hat{b}_{\nu} + \text{H.c.} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\nu\mu} U_{\nu\mu} \hat{n}_{\nu} (\hat{n}_{\mu} - \delta_{\nu\mu}) - \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu} \hat{n}_{\nu} + \sum_l \varepsilon_l \hat{a}_l^{\dagger} \hat{a}_l + \sum_{l,\nu} \left(V_{\nu,l} \hat{a}_l^{\dagger} \hat{b}_{\nu} + W_{\nu,l} \hat{a}_l \hat{b}_{\nu} + \text{H.c.} \right), \quad (18)$$

(18) 式中, 相互作用部分和化学势直接从 Hubbard 模型中得到. 玻色-爱因斯坦凝聚的玻色子热库由超流序参量 ϕ_{ν} 描述, 普通玻色子的热库由一定数目的轨道表示, 其中 a_l^{\dagger} 和 ε_l 为轨道的产生算符和能量. 杂质格点通过正常跃迁振幅 $V_{\nu,l}$ 和反常跃迁振幅 $W_{\nu,l}$ 与轨道耦合起来, 因此 $\{\varepsilon_l, V_l, W_l\}$ 也被称为 Anderson 参数. 哈密顿量 (18) 的作用量分别有杂质部分作用量

$$S_{\text{loc}} = \int_0^{\beta} d\tau \left[\sum_{\nu} b_{\nu}^*(\tau) (\partial_{\tau} - \varepsilon_{\nu}) b_{\nu}(\tau) - z t_{\nu} (\phi_{\nu}^*(\tau) b_{\nu}(\tau) + \text{c.c.}) + \sum_{\nu,\mu} \frac{U_{\nu\mu}}{2} n_{\nu}(\tau) (n_{\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) \right] \quad (19)$$

和轨道部分作用量

$$S_0 = \int_0^{\beta} d\tau \sum_l \left\{ a_l^{\dagger}(\tau) (\varepsilon_l + \partial_{\tau}) a_l(\tau) + V_l [a_l^{\dagger}(\tau) b(\tau) + a_l(\tau) b^*(\tau)] + W_l [a_l(\tau) b(\tau) + a_l^{\dagger}(\tau) b^*(\tau)] \right\}. \quad (20)$$

将轨道部分积出去, Anderson 杂质模型的有效作用量可以写成

$$S_{\text{eff}} = - \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\nu,\mu} b_{\nu}^*(\tau_1) [(\partial_{\tau_1} \sigma_z - \mu_{\nu}) \delta_{\nu\mu} + \Delta_{\nu,\mu}(\tau_1, \tau_2)] b_{\mu}(\tau_2) + \left\{ \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\nu,\mu} \frac{1}{2} U_{\nu\mu} n_{\nu}(\tau) (n_{\mu}(\tau) - \delta_{\nu\mu}) - \sum_{\nu} z t_{\nu} (b_{\nu}^*(\tau) \phi_{\nu}(\tau) + \text{c.c.}) \right\}, \quad (21)$$

其中, 引入了南部表象

$$\mathbf{b}_{\nu}(\tau) = \begin{pmatrix} b_{\nu}(\tau) \\ b_{\nu}^*(\tau) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_{\nu}^*(\tau) = (b_{\nu}^*(\tau) \quad b_{\nu}(\tau)), \quad (22)$$

以及杂质函数矩阵

$$\Delta_{\nu,\mu}(\tau_1, \tau_2) = \begin{pmatrix} \Delta_{\nu,\mu}^1(\tau_1, \tau_2) & \Delta_{\nu,\mu}^2(\tau_1, \tau_2) \\ (\Delta_{\nu,\mu}^2)^*(\tau_1, \tau_2) & (\Delta_{\nu,\mu}^1)^*(\tau_1, \tau_2) \end{pmatrix}. \quad (23)$$

通过对比相互作用量, 在松原频率表象下, 有

$$\Delta_{\nu\mu}(i\omega_n) \hat{=} t_{\nu} t_{\mu} \sum'_{i,j} \mathbf{G}_{iv,j\mu}^0(i\omega_n), \quad (24)$$

此时杂质函数为

$$\Delta_{\nu\mu}^1(i\omega_n) \equiv - \sum_l \left(\frac{V_{\nu,l} V_{\mu,l}}{\varepsilon_l - i\omega_n} + \frac{W_{\nu,l} W_{\mu,l}}{\varepsilon_l + i\omega_n} \right), \quad \Delta_{\nu\mu}^2(i\omega_n) \equiv - \sum_l \left(\frac{V_{\nu,l} W_{\mu,l}}{\varepsilon_l - i\omega_n} + \frac{W_{\nu,l} V_{\mu,l}}{\varepsilon_l + i\omega_n} \right).$$

因此, 可以得到 Weiss 格林函数新的表达方式如下:

$$\mathcal{G}_{\lambda\nu}^{-1}(i\omega_n) = (i\omega_n \sigma_z + \mu_{\lambda}) \delta_{\nu,\mu} - \Delta_{\nu\mu}(i\omega_n). \quad (25)$$

对于 Anderson 杂质模型, 可以利用数值的方式求解这个单体哈密顿量. 在动力学平均场方法中, 这

种求解 Anderson 杂质模型所用不同的数值手段就叫做杂质求解器. 常用的杂质求解器有精确对角化^[105,106]、量子蒙特卡罗方法^[107]、数值重整化群^[108]等. 对应于不同的物理系统, 杂质求解器的选取非常重要. 通过杂质求解器求解 Anderson 杂质模型, 就可以得到哈密顿量的本征态和本征能量, 以及超

流序参量等物理量. 在 Lehmann 表象下, 可以用本征态和本征能量表示局域格林函数

$$G_{\text{imp},\nu\mu}^1(i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} \langle m | \hat{b}_\nu | n \rangle \langle n | \hat{b}_\mu^\dagger | m \rangle \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m + i\hbar\omega_n} + \beta\phi_\nu\phi_\mu^*,$$

$$G_{\text{imp},\nu\mu}^2(i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} \langle m | \hat{b}_\nu | n \rangle \langle n | \hat{b}_\mu | m \rangle \times \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m + i\hbar\omega_n} + \beta\phi_\nu\phi_\mu, \quad (26)$$

其中, $|m\rangle$ 为本征态, E_m 为对应的能量. 因此, 系统的自能可以写成

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \approx \Sigma_{\text{lat}}(i\omega_n) = i\omega_n\sigma_z + \varepsilon - \Delta - \mathbf{G}_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n), \quad (27)$$

此处, 考虑了自能近似, 即认为自能是局域的, 因此满足 $\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \approx \Sigma_{\text{lat}}(i\omega_n)$. 由 Dyson 方程 (16), 能够得到格点格林函数为

$$\mathbf{G}_{\text{lat}}(k, i\omega_n) = 1 / (i\omega_n\sigma_z + \varepsilon_\nu - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) - \varepsilon_k). \quad (28)$$

现在, 利用 Anderson 杂质模型构造的动力学平均场方法的自洽循环便完成了. 利用 Anderson 杂质模型, 成功绕开求解作用量来实现动力学平均场的自洽过程. 在 Anderson 杂质模型中, 动力学平均场的循环为: 先给出 Anderson 参数的试探值, 利用杂质求解器求解 Anderson 杂质模型哈密顿量, 便能够得到系统的本征态和本征能量, 进一步可以求得自能、超流序参量等物理量, 然后利用 (28) 式求得新的格点格林函数. 利用新求得的格点格林函数, 可以得到新的 Anderson 参量, 然后再重新循环上述过程, 直到满足自洽条件, 输出最终所求系统的物理量, 如图 2 所示.

虽然用 Anderson 杂质模型可以很好地求解动力学平均场, 但在真实的实验中, 由于外场或人工规范场, 冷原子系统并不是各向同性的. 因此, 需要对现在的动力学平均场理论进行进一步拓展. 类似于费米系统的实空间动力学平均场理论^[109,110], 我们发展了实空间玻色动力学平均场理论 (RBDMFT). 在实空间玻色子动力学平均场理论中, 虽然自能是局域的, 但各个空间位置的自能是不同的, 即 $\Sigma_{ij,\lambda\nu} = \Sigma_{\lambda\nu}^i \delta_{ij}$. 因此, 利用实空间动力学平均场理论, 可以求解各向异性的 Hubbard 模型, 并得到较好的结果.

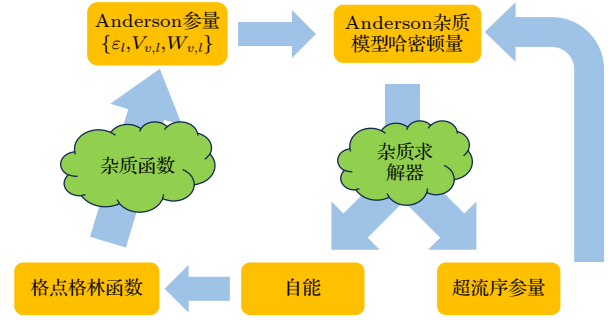


图 2 Anderson 杂质模型下动力学平均场方法的自洽循环示意图. 给 Anderson 参数初值, 利用杂质求解器求解 Anderson 杂质模型, 得到物理量和自能, 通过自能得到格点格林函数, 利用 Dyson 方程得到杂质函数, 从而得到新的 Anderson 参量, 构成自洽过程

Fig. 2. Schematic picture of BDMFT loop in Anderson impurity model. For an initial value of Anderson parameters, physical quantities and self-energy are obtained by solving the Anderson impurity model. After obtain lattice Green function through self-energy, impurity functions are attained. Finally, the loop is complete by fetched new Anderson parameters from impurity functions.

3 光晶格中多组分玻色子体系的磁性研究

3.1 三维光晶格中自旋-1 超冷玻色气体的磁性相变研究

随着超冷原子气体在光晶格中的实现, 理论研究也变得非常广泛, 量子蒙特卡罗方法和密度重整化群理论可以在一维情形下进行研究^[53-56], 而在三维体系中, 对强关联量子相的研究一般都是通过晶格规范理论预测^[111], 强耦合极限下的有效自旋模型^[112,113]以及静态平均场理论^[114-118]等方法. 而超越了静态平均场理论, 从弱耦合到强耦合极限下的量子多体相图还几乎没有人研究. 因此本课题组利用玻色动力学平均场理论研究了自旋-1 玻色体系中的量子相变^[119]. 在适当的晶格深度下, 自旋-1 的玻色子体系可以用紧束缚近似下的玻色-哈伯德模型描述:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} + \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma} \right) + \frac{1}{2} U_0 \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \frac{1}{2} U_2 \sum_i \left(\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i \right) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (29)$$

这里 $\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\hat{b}_{i,\sigma}$) 是格点 i 上超精细态 $m_F = \sigma$ 的产生 (湮灭) 算符; $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i,\sigma}$, 其中 $\hat{n}_{i,\sigma} \equiv \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma}$ 是

格点 i 处 σ 态的粒子数算符; $\hat{S}_i \equiv \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \mathbf{F}_{\sigma\sigma'} \hat{b}_{i,\sigma'}$ 为总自旋算符, $\mathbf{F}_{\sigma\sigma'}$ 是自旋-1 玻色子的自旋矩阵; μ 是体系的化学势; 此外还有最近邻格点间的跃迁振幅 t , 原子间的相互作用 U_0 以及自旋相互作用 U_2 .

对于这一哈密顿量, 我们基于玻色动力学平均场理论在铁磁自旋相互作用 ($U_2/U_0 > 0$) 的情形下计算了体系的零温相图. 通过定义不同的序参量如凝聚序参量 $\phi_\alpha^1 \equiv \langle \hat{b}_\alpha \rangle$ 、向列序参量 $\phi_{\alpha\beta}^2 \equiv \langle \hat{S}_\alpha^\dagger \hat{S}_\beta \rangle - \delta_{\alpha\beta}/3 \langle \hat{S}^2 \rangle$ 、对凝聚序参量 $\varphi_{\alpha\beta}^2 \equiv \langle \hat{b}_\alpha \hat{b}_\beta \rangle$ 以及局域磁化 $\mathbf{M} \equiv \langle \hat{S} \rangle$, 我们发现体系呈现非常多不同的量子相, 在格点上粒子数为奇数时, 体系形成向列相绝缘体 (nematic insulator, NI), 对应于 $\phi_\alpha^1 = 0, \phi_{\alpha\beta}^2 > 0, \mathbf{M} = 0$, 而在粒子数为偶数时, 体系形成自旋单态绝缘相 (spin-singlet insulator, SSI), 对应 $\phi_\alpha^1 = 0, \phi_{\alpha\beta}^2 = 0$. 并且随着铁磁相互作用的增强, SSI 的区域会逐渐增大, 相反 NI 的区域逐渐减小直至从体系消失并伴随着新的自旋单态凝聚相 (spin-singlet condensate, SSC) 的出现, 对应于 $\phi_\alpha^1 = 0, \phi_{\alpha\beta}^2 = 0, \langle \hat{S}^2 \rangle = 0, \mathbf{M} = 0, \Theta \equiv \langle -2\hat{b}_{-1}\hat{b}_1 + \hat{b}_0^2 \rangle \neq 0$, 如图 3^[119] 所示.

进一步地, 研究了温度对体系的影响, 并观察

到超流体可以通过一阶 (二阶) 相变被加热成具有偶 (奇) 填充的莫特绝缘体, 类似于 ^3He 中的 Pomeranchuk 效应. 我们发现有序态 (如向列绝缘相和自旋单态绝缘相) 的临界温度在现有的冷却方案范围内, 这表明有机会使用现有的实验技术直接观察这些相.

3.2 三维光晶格中磁场下自旋-1 超冷玻色气体的相变研究

研究多组分超冷原子气体的磁序和玻色-爱因斯坦凝聚体之间的联系是一个有趣的话题. 对于旋量气体, 理论上已经预测了多步凝聚^[120–125], 并在实验中被观察到了^[50,126,127]. 例如, 对于较小的塞曼场, 反铁磁相互作用定性地改变了相图并导致在超精细态 $m_F = \pm 1$ 态下的凝聚^[128], 然而对光晶格中自旋玻色气体的多步凝聚目前还没有人进行研究. 因此紧接着上面的工作, 本课题组基于玻色动力学平均场理论, 系统地研究了该自旋-1 玻色子体系在存在外部塞曼相互作用时的性质^[129]. 体系的哈密顿量与无磁场的自旋-1 玻色子体系相比, 多了线性塞曼能量 p 和二次塞曼能量 q 这两项:

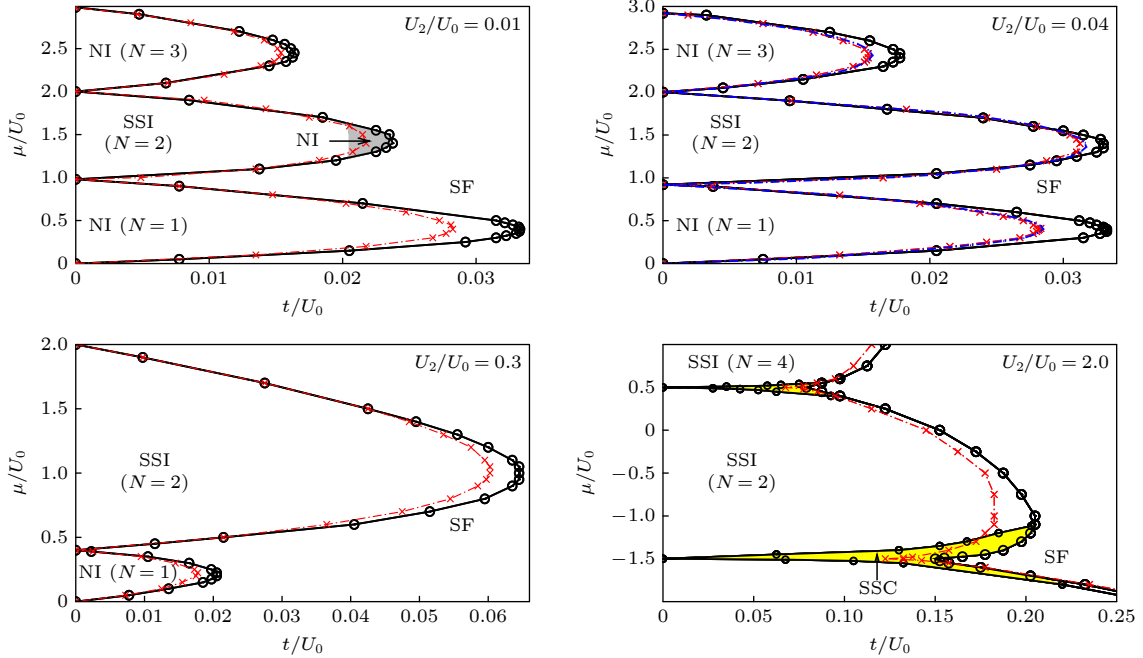


图 3 三维光晶格中自旋-1 超冷玻色子在不同反铁磁相互作用下的零温相图^[119], U_2/U_0 分别为 0.01, 0.04 (^{23}Na), 0.3, 和 2.0. 数据来源于 BDMFT (黑线), Gutzwiller (红线) 以及文献^[117] (蓝线) 中的计算. 体系中存在 4 种不同的相, 即超流相 (SF)、向列绝缘相 (NI)、自旋单态绝缘相 (SSI) 和自旋单态凝聚相 (SSC).

Fig. 3. Zero-temperature phase diagram for spin-1 ultracold bosons in a 3D cubic lattice^[119] for different antiferromagnetic interactions $U_2/U_0 = 0.01, 0.04$ (^{23}Na), 0.3, and 2.0, respectively, obtained via BDMFT (black circle), Gutzwiller (red cross) and in Ref. ^[117] (blue dashed). There are four different phases in these diagrams: superfluid (SF), nematic insulator (NI), spin-singlet insulator (SSI) and spin-singlet condensate (SSC).

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} + \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma} \right) \\
 & + \frac{U_0}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \\
 & + \frac{U_2}{2} \sum_i \left(\hat{S}_i^2 - 2\hat{n}_i \right) + p \hat{S}_{iz} \\
 & + q \sum_{i,\sigma} \sigma^2 \hat{n}_{i,\sigma} - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (30)
 \end{aligned}$$

这是由于外加磁场导致超精细态 ($m_F = 1, 0, -1$) 退简并的塞曼效应, 其中 $p = (E_{-1} - E_1)/2$, $q = (E_1 + E_{-1} - 2E_0)/2$, U_0 为原子间的相互作用, U_2 为自旋相互作用. 在这一体系中, 塞曼相互作用与自旋相互作用的竞争会出现非常多有趣的相. 对于反铁磁自旋相互作用, 以 ^{23}Na ($U_2/U_0 \approx 0.037$ [52]) 为例, 计算该体系的多体相图, 体系存在向列绝缘相、铁磁相、自旋单态绝缘相和不同类型的超流相. 计算表明二次塞曼项使得粒子数为偶数的区域出现了向列绝缘相, 在塞曼能量非常大时, 体系的莫特绝缘区完全处于向列莫特绝缘相. 对于铁磁自旋相互作用的情况, 以 ^7Li ($U_2/U_0 \approx -0.7$ [112]) 和 ^{87}Rb ($U_2/U_0 \approx -0.005$ [20]) 为例, 绘制了铁磁和向列绝缘相、超流体相等相图, 计算结果表明随着塞曼能量的增强, 铁磁绝缘相的区域逐渐由向列绝缘相取代. 此外, 我们还研究了这些量子相对热涨落的稳定性, 得到了有限温度下的相图.

同时, 对超流体的分步凝聚进行了研究, 给出了各个塞曼组分的临界凝聚温度 T_c 与纵向磁化强度的关系. 有趣的是, 在反铁磁相互作用下我们观察到了超精细态 $m_F = -1$ 组分的临界温度随着纵向磁化强度的非连续变化: 随着纵向磁化强度的增加, 临界温度首先降低至 0, 然后逐渐增长到某一最大值后再逐渐降为 0; 而对于铁磁相互作用, 超精细态 $m_F = 0$ 的临界凝聚温度 T_c 会首先减小到某一极小值点, 然后增长到某一极大值, 最后减小到 0. 这反映了强关联超冷玻色气体的独特性质.

3.3 自旋碱金属与碱土金属混合体系的磁性研究

量子磁性在固态系统中起着重要作用, 揭示量子多体系统磁序背后的机制一直是理论研究和实验研究的热点. 最近, 超冷旋量玻色子的异核混合物已经在实验上被实现, 如旋量碱金属原子的异核混合物 [130]、旋量碱金属和碱土金属原子的混合物 [131,132],

然而在光晶格中还没有对旋量碱金属和碱土金属原子混合体系的研究. 在 3.1 节和 3.2 节中研究了自旋-1 玻色子体系的基态相图, 以及该体系存在磁场时的性质. 本节主要研究三维光晶格中自旋-1 碱金属原子与自旋-0 碱土金属原子混合体系的基态相图 [133]. 体系的哈密顿量由紧束缚近似下的玻色-哈伯德模型描述:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & - \sum_{\langle ij \rangle, \nu, \sigma} t_{\nu\sigma} \left(\hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\nu\sigma} + \text{H.c.} \right) \\
 & + \sum_{i,\sigma} U_{12} \hat{b}_{i,2\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,1\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,1\sigma} \hat{b}_{i,2\sigma} \\
 & + \sum_i \left[\frac{1}{2} U_1 \hat{n}_{i,1} (\hat{n}_{i,1} - 1) + \frac{1}{2} U_1' (\hat{S}_{i,1}^2 - 2\hat{n}_{i,1}) \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} U_2 \hat{n}_{i,2} (\hat{n}_{i,2} - 1) - \mu_1 \hat{n}_{i,1} - \mu_2 \hat{n}_{i,2} \right], \quad (31)
 \end{aligned}$$

其中, $\hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger$ ($\hat{b}_{i,\nu\sigma}$) 是格点 i 处对于超精细态 σ 的 ν 种类原子的产生 (湮灭) 算符. $\hat{n}_{i,\nu} = \sum_\sigma \hat{n}_{i,\nu\sigma}$, $\hat{n}_{i,\nu\sigma} = \hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\nu\sigma}$ 为粒子数算符, $\hat{S}_{i,1} = \sum_{\sigma\sigma'} \hat{b}_{i,\nu\sigma}^\dagger \cdot \Gamma_{\sigma\sigma'} \hat{b}_{i,\nu\sigma'}$ 是自旋-1 粒子的自旋算符. $\Gamma_{\sigma\sigma'}$ 为常用的自旋-1 的矩阵, μ_ν 表示 ν 种类粒子的化学势, $t_{\nu\sigma}$ 为近邻格点间的隧穿振幅. U_1 为自旋-1 粒子间的相互作用, U_1' 为自旋相互作用, 此外还有自旋-0 粒子间的相互作用 U_2 以及自旋-1 和自旋-0 粒子间的相互作用 U_{12} . 我们的研究主要围绕两种原子间的相互作用展开, 并计算了体系的基态相图, 如图 4 [133] 所示.

首先研究种间相互作用 U_{12} 对相图的影响. 对于较小的种间相互作用 $U_{12} < \sqrt{U_1 U_2}$, 两种原子是互相混合的. 但是对于较大的种间相互作用 $U_{12} > \sqrt{U_1 U_2}$, 体系会出现相分离. 当种间相互作用减小时, $n = 1$ 的区域会减小, 而 $n = 2$ 的区域会增大. 这是因为在 $U_{12} \ll U_{1,2}$ 的条件下, $n = 2$ 的区域更容易形成自旋单重态. 对于较大的种间相互作用 $U_{12}/U_1 = 2$, 我们观察到体系出现了相分离. 这里只得到了自旋-1 ^{87}Rb 原子的相图. 作为比较, 也用 Gutzwiller 平均场理论计算了自旋-1 和自旋-0 混合体系的基态相图, 如图 4 [133] 中的红线所示. Gutzwiller 的计算结果是小于 BDMFT 的计算结果的, 这正是由于 BDMFT 包含了量子涨落.

为了更好地描述 ^{87}Rb 和 ^{84}Sr 的混合体系, 我们把 ^{87}Rb 当作自旋 \downarrow , 把 ^{84}Sr 当作自旋 \uparrow . 计算表明, 系统在填充数 $n \equiv n_{\text{Rb}} + n_{\text{Sr}} = 1$ ($n_{\text{Rb}} = n_{\text{Sr}} = 0.5$) 时具有非零的磁性, $M_{\text{tot}} \neq 0$, 而在填充数 $n = 2$

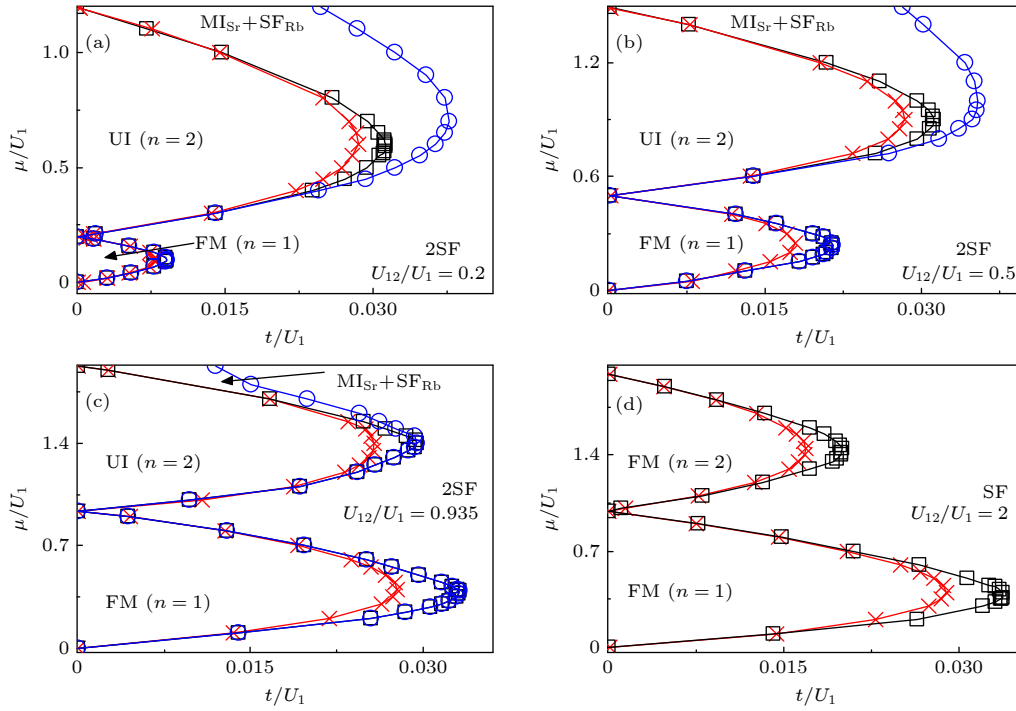


图 4 三维光晶格中由 BDMFT 计算得到的自旋-1 ^{87}Rb ($U'_1/U_1 = -0.0046$) 和自旋-0 ^{84}Sr 异核玻色子混合体系在不同种间相互作用 $U_{12}/U_1 = 0.2, 0.5, 0.935$ 和 2 下的基态相图^[133]. 格点上粒子填充数为 1 时, 系统处在铁磁绝缘相. 格点上粒子填充数为 2 时, 体系为无序绝缘相. 此外随着隧穿振幅的增大会出现两种不同的超流相. 其中具有铁磁相互作用的三组分自旋-1 ^{87}Rb 原子也处在铁磁相. 注意, 当种间相互作用特别大 ($U_{12}/U_1 = 2$) 时, 系统中只有自旋 1 的玻色子. 作为比较, 红色线条是 Gutzwiller 平均场理论的计算结果. 其他参数为 $t \equiv t_{1\sigma} \approx 0.97t_{20}$, $U_2/U_1 = 1.26$

Fig. 4. Phase diagrams of heteronuclear mixtures of ultracold spin-1 ^{87}Rb (spin-dependent interaction $U'_1/U_1 = -0.0046$) and spin-0 ^{84}Sr bosons in a three dimensional (3D) cubic lattice for different interspecies interactions $U_{12}/U_1 = 0.2, 0.5, 0.935$ and 2, obtained by BDMFT^[133]. The system favors ferromagnetic insulating phase (FM) at filling $n = 1$, unorder insulating phase (UI) at $n = 2$, and two types of superfluid ($\text{MI}_{\text{Sr}} + \text{SF}_{\text{Rb}}$, and 2SF), where the three-components of spin-1 ^{87}Rb demonstrate ferromagnetic order as a result of ferromagnetic interactions. Note here that the system favors phase separation for $U_{12}/U_1 = 2$, and here we only show the phase diagram of spin-1 bosons. For comparisons, the red cross is obtained by Gutzwiller mean-field theory. The other parameters $t = t_{1\sigma} \approx 0.97t_{20}$, and $U_2/U_1 = 1.26$.

时磁性为零, $M_{\text{tot}} = 0$, 这里 n_{Sr} (n_{Rb}) 表示 ^{84}Sr (^{87}Rb) 在格点上的填充数. 也就是说整个体系在格点上粒子数为 1 时处于铁磁绝缘相, 在粒子填充数为 2 时处于无序绝缘相. 这其中的物理规律可以通过在强相互作用下推导的玻色-玻色混合体系的有效自旋模型来理解. 当格点上粒子填充数为 1 时, 由于几乎相同的隧穿振幅 $t_{1\sigma} \approx t_{2\sigma}$, 铁磁自旋耦合占据主导, 因此体系表现为铁磁序. 而当格点上粒子数为 2 时, 由于种间相互作用 $U_{12} \ll U_{1,2}$, 自旋涨落被抑制, 于是体系表现为无序绝缘相. 在远离莫特绝缘区时, 随着隧穿振幅的增大, 密度涨落成为主导, 系统经历量子相变进入超流相 $\phi_{\nu\sigma} \neq 0$. 并且由于质量的不平衡, 质量较大的 Rb 会先解除局域化 ($\text{MI}_{\text{Sr}} + \text{SF}_{\text{Rb}}$), 之后随着隧穿振幅的继续增大, 两种原子都会处于非局域化的状态 (2SF).

此外还研究了在三维光晶格中具有反铁磁相

相互作用的 ^{23}Na ($U'_1/U_1 = 0.037$) 和 ^{84}Sr 原子的混合体系. 对于 ^{23}Na 和 ^{84}Sr 原子的混合体系, 在填充数为 1 的区域是铁磁相 (FM), 在填充数为 2 的区域是无序相 (UI). 有趣的是自旋-1 ^{23}Na 原子在填充数为 1 和 2 的情形都展示了从向列绝缘相到极化超流相的相变, 这与单独将 ^{23}Na 原子放在光晶格中偶数填充的情形是不一样的.

4 具有长程相互作用的光晶格体系的研究

4.1 偶极玻色气体中的超固态相研究

为了实现由两体相互作用诱导的超固体相 (supersolid, SS), 人们在极性分子^[68, 134–140]、磁性^[16,67,141]和里德伯原子^[142–150]上付出了巨大的努力, 然而理论上提出的方案通常在实验上都难以实现. 本课题组提出一种可行的方案, 研究了二维光晶格中双

组分玻色混合体系的超固态相^[151], 其中一个组分通过非共振激光被耦合到了里德伯态, 因此在这一组分之间存在长程相互作用, 如图 5^[151] 所示.

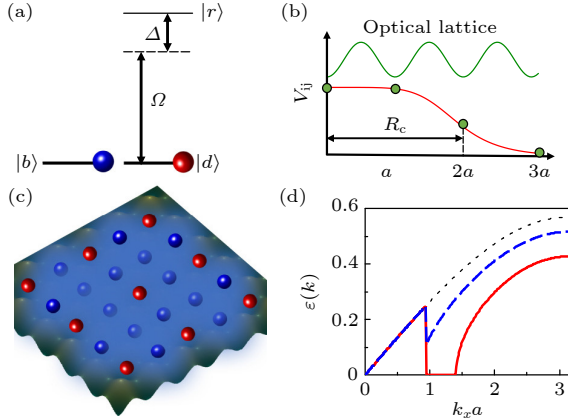


图 5 (a) 考虑两个电子基态 $|b\rangle$ (蓝色), $|d\rangle$ (红色) 和一个里德伯态 $|r\rangle$. 一束非共振激光 (拉比频率为 Ω , 失谐量为 Δ) 将态 $|d\rangle$ 与 $|r\rangle$ 耦合. (b) 里德伯态 $|d\rangle$ 间的软核型相互作用势 V_{ij} (红线). 软核半径 R_c 可以大于晶格间距 a , 图中展示的是 $R_c = 2a$ 的情形. (c) 被修饰原子处于有序密度波 (DW) 时的裸态处于 SS. (d) 裸态的 Roton 不稳定性. 声子的 Bogoliubov 色散关系 (沿 k_x 轴) 被种间相互作用显著地改变. 当种间相互作用 U_{bd} 增加时, 会出现类 Roton 不稳定性, 表明基态相由均匀的超流体转变为超固体. 图中 $U_{bd}/U = 0$ (点线), $U_{bd}/U = 0.45$ (虚线), $U_{bd}/U = 1$ (实线), 其他参数为 $k_y = 0, V/U = 0.4$, 和 $t/U = 0.04$ ^[151]

Fig. 5. (a) Two electronic ground states $|b\rangle$ (blue) and $|d\rangle$ (red) and a Rydberg state $|r\rangle$ are considered. An off-resonant laser (with Rabi frequency Ω and detuning Δ) weakly couples the state $|d\rangle$ to $|r\rangle$. (b) The soft-core shape interaction potential V_{ij} (red) between atoms in the Rydberg dressed state $|d\rangle$. The soft-core radius R_c can be larger than the lattice spacing a . Here, $R_c = 2a$ is shown. (c) SS of the bare state when dressed atoms are in an ordered density wave (DW). (d) Roton instability of the bare species. The Bogoliubov dispersion relation (along the k_x axis) of phonons is significantly modified by the interspecies interaction. A rotonlike instability emerges when the interspecies interaction U_{bd} is increased, indicating that the groundstate phase changes from a homogeneous superfluid to supersolid. We show $U_{bd}/U = 0$ (dotted line), $U_{bd}/U = 0.45$ (dashed line), and $U_{bd}/U = 1$ (solid line). Other parameters are $k_y = 0, V/U = 0.4$, and $t/U = 0.04$ ^[151].

在适当深的光晶格中, 体系由一个单带双组分哈伯德模型描述:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{\sigma} \left(\hat{b}_{i, \sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j, \sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_{i < j} V_{ij} \hat{n}_{i, d} \hat{n}_{j, d} - \sum_i \left[\frac{1}{2} \sum_{\sigma \sigma'} U_{\sigma \sigma'} \hat{n}_{i, \sigma} (\hat{n}_{i, \sigma'} - \delta_{\sigma \sigma'}) - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} \hat{n}_{i, \sigma} \right], \quad (32)$$

这里算符下标 $\sigma = d$ 表示处于里德伯态的原子, 下标 $\sigma = b$ 表示另一组分的原子, t_{σ} 表示 σ 组分原子的跃迁振幅, V_{ij} 表示不同格点间原子的相互作用, $U_{\sigma \sigma'}$ 为同一格点上同种或不同种原子间的相互作用.

基于实空间玻色动力学平均场理论, 计算了该体系的完整相图. 在强耦合极限下 (即原子间的短程相互作用远大于动能) 体系倾向于形成莫特绝缘相或密度波相 (density wave phase). 有趣的是我们发现了一个原子总密度分布不均匀的密度波相 ($n_{i, b} = 1, n_{i, d} = 2$), 它打破了晶格平移对称性. 在远离莫特区的其他地方, 如中间区域, 观察到两种从莫特绝缘相到超固体相的量子相变, 即未耦合的基态从莫特绝缘态到裸态形成的超固体 (SS1) 的相变, 而被修饰的原子仍然处于莫特绝缘态. 进一步增加隧穿振幅 t , 两种原子都进入了超固体相 (SS2). 有趣的是, 在模拟中观察到一个明显的超固体区域, 这是两种原子间相互作用的结果, 表明与单组分情况^[152] 相比, 在现实实验中直接观察到这些相变过程的概率更高. 事实上, 还观察到 SS1 和 SS2 的宽度随种间相互作用的减小而缩小, 对于较小的种间相互作用 U_{bd} , SS1 相消失了. 此外还发现, 虽然裸态原子只具有短程相互作用, 但是另外一种原子间的长程相互作用依旧移动了 MI 和 SS1 之间的相变.

最后在 $t \gg U_{\sigma \sigma'}$ 的弱相互作用区间, 体系形成原子总密度分布均匀的超流态, 并且两种原子的密度分布也是均匀的. 这是由于剧烈的密度涨落破坏了晶体序, 因此体系只能形成密度分布均匀的超流态.

4.2 光腔中的超辐射相研究

2010 年, Baumann 等^[63] 实现了玻色-爱因斯坦凝聚体与光腔耦合的开放系统中的 Dicke 量子相变, 并观察到了自组织相的出现. 该相变是由凝聚体原子之间的无限长程相互作用驱动的, 由涉及腔模和泵浦光场的双光子过程引起. 简单来说, 均匀原子密度中的量子涨落使得所应用的横向驻波激光中的光子被集体散射到腔模中. 反过来, 散射到腔中的光子又非线性地作用于原子, 并放大了 BEC 密度的涨落. 当泵浦光功率小于临界泵浦光功率时, 腔模中的光子数为 0, 原子凝聚在低动量态上. 在横向激光的临界泵浦功率以上, 低动量态的原子被散射到高动量态, 系统经历可逆的零温量

子相变成为完美和有序的晶体. 近年来在这一领域出现了非常多的研究, 包括对多模光腔^[153–155]、极限环^[156]、时间晶体^[157]、拓扑相变^[158]以及对非厄米趋肤效应^[159]的研究. 理论上, 通过改变激光频率与腔共振的关系, 可以将腔诱导的原子间相互作用从吸引调到排斥, 在蓝失谐驱动的高精细腔中也出现了非常多有趣的研究, 如对 Su-Schrieffer-Heeger 模型^[160]、时间晶体^[161–164]、p-轨道自组织相^[165]以及结构相变的研究^[166].

本课题组研究了超冷玻色气体与蓝失谐激光驱动的高精细腔的耦合体系, 探索该体系在弱相互作用与强相互作用区间可能出现的量子相^[167]. 实验装置如图 6^[167]所示.

^{87}Rb 原子被装载在耗散 $\kappa = 40\omega_r$ 的高精细单模光腔中, ω_r 是反冲频率. 原子由垂直于腔模方向, 即 y 方向的两束对向传播的波长为 780.1 nm 的蓝失谐激光驱动, 这可以通过一束激光和反射镜实现. 这两束对向传播激光强度的不平衡由镜子的反射率控制 $\eta \equiv E_-/E_+$, 这里 E_+ 和 E_- 分别为入射光和反射光的振幅. 在第 3 个方向, 也就是 z 方向, 用一束非常强的激光来冻结原子的运动自由度. 体系由下面的玻色-哈伯德模型描述:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{(ij),\sigma} J_{\sigma\sigma}^{ij} \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} - \sum_{i,\sigma} \mu_\sigma \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} - \hbar \Delta_c \hat{a}^\dagger \hat{a} \\ & + \sum_{i,\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \frac{U_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}}{2} \hat{b}_{i,\sigma_1}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma_2}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma_3} \hat{b}_{i,\sigma_4} + \hat{V}_1 + \hat{V}_2, \end{aligned} \quad (33)$$

式中 $J_{\sigma_1\sigma_2}^{ij}$ 是格点上 ($i = j$) 和最近邻格点间 ($i \neq j$) 的跃迁振幅; μ_σ 为化学势; \hat{a}^\dagger (\hat{a}) 是光子的产生 (湮灭) 算符; $U_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}$ 为原子间的相互作用; 失谐量 $\Delta_c = \omega_p - \omega_c$, 其中 ω_p 为泵浦光频率, ω_c 为腔模的频率; 泵浦光和腔模间的散射项为

$$\begin{aligned} \hat{V}_1 = & \frac{1+\eta}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \sum_{ij} (-1)^i \\ & \times (J_{sd}^{ij} \hat{b}_{i,s}^\dagger \hat{b}_{j,d} + J_{p_x p_y}^{ij} \hat{b}_{i,p_x}^\dagger \hat{b}_{j,p_y} + \text{H.c.}), \\ \hat{V}_2 = & -i \frac{1-\eta}{2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \sum_{ij} (-1)^i \\ & \times (J_{sp_x}^{ij} \hat{b}_{i,s}^\dagger \hat{b}_{j,p_x} + J_{p_y d}^{ij} \hat{b}_{i,p_y}^\dagger \hat{b}_{j,d} + \text{H.c.}). \end{aligned}$$

通常来说在光腔系统中, 主要过程为泵浦光和腔模通过原子而发生的散射过程, 散射项的宇称和系统的维度起着重要作用. 在红失谐光的条件下, 由于散射项是偶宇称的, 原子处在 s-轨道. 然而在蓝失

谐体系中, 由于散射项为奇宇称, 原子可以从 s-轨道散射到更高的轨道. 在我们考虑的二维蓝失谐体系中, 原子可以被散射到奇宇称的 p-轨道和偶宇称的 d-轨道, 形成稳定的强关联高轨道相. 如图 6(c)^[167]所示, 由于 \hat{V}_1 在 x 和 y 方向都是奇宇称的, 因此它会改变轨道在 x 和 y 方向的宇称, 从而将原子从 s-轨道散射到 d-轨道以及从 p_x -轨道散

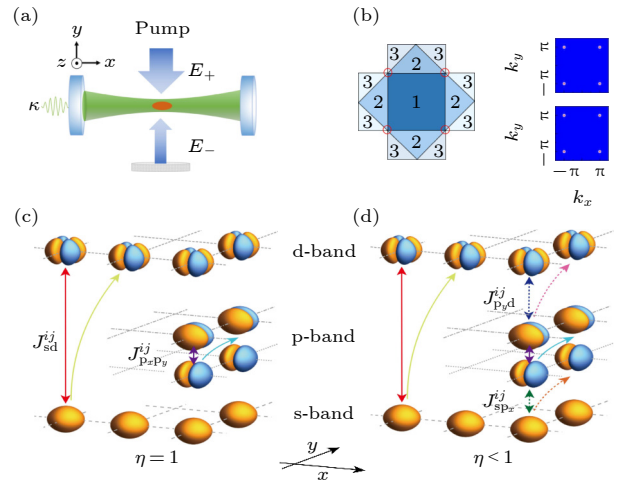


图 6 原子在光腔中耦合高轨道态示意图^[167] (a) 原子被陷停在光腔中, 由一束不平衡因子 $\eta = E_-/E_+$ 的横向泵浦光驱动; (b) 四方晶格的布里渊区示意图, 原子从动量态 $\mathbf{k} = (0, 0)$ 被散射到 (π, π) , 右侧上下两幅图分别为 p-轨道和 d-轨道能带原子的动量分布图; (c), (d) 腔模和泵浦光之间的主要散射过程, 其引起了高轨道激发. 通过控制参数 $\eta = 1$ (c), 原子可以选择性地被散射到偶宇称的 d-轨道态, 当 $\eta < 1$ (d), 原子被散射到奇宇称的 p-轨道态. 此处 J_{sd}^{ij} , $J_{p_x p_y}^{ij}$, 和 $J_{p_y d}^{ij}$ 分别表示 s-轨道和 d_{xy} -轨道, p_x -轨道和 p_y -轨道, s-轨道和 p_x -轨道, p_y -轨道和 d_{xy} -轨道在格点 i 和格点 j 间由散射引起的轨道反转跃迁

Fig. 6. Populating higher-orbital states with ultracold atoms in an optical cavity^[167]. (a) Atoms are prepared in an optical cavity, pumped by a blue-detuned laser in the transverse direction with an imbalance parameter $\eta = E_-/E_+$. (b) Brillouin zone of the square lattice, where atoms are scattered from the quasimomentum state $\mathbf{k} = (0, 0)$ to the excite state (π, π) , with quasimomentum distributions for the p- and d-orbital bands shown in right upper and lower panels, respectively; (c), (d) dominating scattering processes of atoms induced by cavity, leading to higher-orbital excitations. By controlling η , atoms can be selectively scattered into the even-parity d_{xy} -orbital state with a single node in both x and y directions for $\eta = 1$ (c), or into the odd-parity p-orbital state with a single node only in one direction for $\eta < 1$ (d). Here, J_{sd}^{ij} , $J_{p_x p_y}^{ij}$, $J_{sp_x}^{ij}$, and $J_{p_y d}^{ij}$ denote cavity induced orbital-flip hoppings between sites i and j for the s- and d_{xy} -orbitals, p_x - and p_y -orbitals, s- and p_x -orbitals, and p_y - and d_{xy} -orbitals, respectively.

射到 p_y -轨道. 如图 6(d)^[167] 所示, \hat{V}_2 在 x 方向是奇宇称, 在 y 方向是偶宇称, 因此它只改变轨道在 x 方向的宇称, 从而将原子从 s -轨道散射到 p_x -轨道以及从 p_y -轨道散射到 d -轨道. 有趣的是, 与红失谐泵浦光体系超辐射相伴随着电荷-密度波的出现不同, 在蓝失谐的腔中, 由于散射导致的轨道-翻转隧穿, 自组织相的形成伴随着轨道-密度波的出现.

总的来说我们发现在二维光晶格中, 通过改变泵浦光的反射率, 原子可以被散射到偶宇称的 d -轨道能带和奇宇称的 p -轨道能带, 形成稳定的高轨道自组织超流相和莫特-绝缘相, 这提供了一种新的调控高轨道现象的机制.

5 光晶格中的高轨道玻色子体系研究

5.1 旋转对称性增强的 p 轨道玻色子自旋和角动量的耦合

p 轨道冷原子系统的实验实现给研究轨道自由度提供了一个有利的工具. 在轨道物理中, 一个有趣的方向是自旋-轨道耦合. 在之前的冷原子实验中, 人们借助激光构建人工规范场, 从而实现了冷原子系统中的自旋-轨道耦合^[168–191]. 自然而然地, 对于高轨道玻色系统, 其中的自旋自由度和轨道自由度的相互作用会不会带来有趣的物理效应^[192,193]? 本课题组首先研究了正方晶格中的两组分 p 能带玻色系统, 相较于之前的相关研究^[71,72,77], 引入了自旋自由度, 希望研究自旋角动量与轨道角动量的相互作用^[194]. $\hat{p}_{\nu\sigma,r}$ 表示格点 r 位置的湮灭算符, $\nu = x, y$ 表示 p_x 和 p_y 轨道自由度, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 表示不同的组分 (赝自旋). 为了简便, 引入旋量 $\hat{\Phi}_{\nu,r} = [\hat{p}_{\nu\uparrow,r}, \hat{p}_{\nu\downarrow,r}]^T$, 哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{r,m} t_{//} \hat{\Phi}_{m,r}^\dagger \hat{\Phi}_{m,r+e_m} - \sum_{r,m} t_{\perp} \hat{\Phi}_{m,r}^\dagger \hat{\Phi}'_{m,r+e_m} \\ & + \text{H.c.} + \frac{U_0}{2} \sum_r \left[\frac{2}{3} : \hat{n}^2 : - \frac{1}{3} : \hat{L}_z^2 : + \frac{1}{3} : \hat{S}^2 : \right] \\ & + \frac{U_2}{2} \sum_r \left[\frac{1}{3} : \hat{n}^2 : - \frac{1}{3} : \hat{L}\hat{S}_z^2 : + \left(: \hat{S}_z^2 : - \frac{1}{3} : \hat{S}^2 : \right) \right], \end{aligned} \quad (34)$$

其中, 平行或垂直两个最近邻格点方向的 p 轨道玻色子的跃迁振幅分别为 $t_{//}$ 和 t_{\perp} . $t_{//}$ 的旋量湮灭

算符为 $\hat{\Phi}_{m,r} \equiv [(\hat{p}_{x\uparrow,r}e_x + \hat{p}_{y\uparrow,r}e_y) \cdot e_m, (\hat{p}_{x\downarrow,r}e_x + \hat{p}_{y\downarrow,r}e_y) \cdot e_m]^T$, 对应的单位矢量有 $e_1 = e_x$, t_{\perp} 的旋量湮灭算符为 $\hat{\Phi}'_{m,r} \equiv [(\hat{p}_{x\uparrow,r}e_x + \hat{p}_{y\uparrow,r}e_y) \cdot e'_m, (\hat{p}_{x\downarrow,r}e_x + \hat{p}_{y\downarrow,r}e_y) \cdot e'_m]^T$, 对应的单位矢量为 $e'_1 = e_y$. 相互作用强度为 $U_{\alpha=0,2} = c_{\alpha} \int d^3r w_{\mu}^{\alpha}$, w_{μ} 为局域万尼尔函数, 引入 $U_{//} = U_0 + U_2$ 和 $U_{\perp} = U_0 - U_2$, 分别对应于同组分相互作用和不同组分相互作用. $\hat{n} = \sum_{\mu} \hat{\Phi}_{\mu}^\dagger \hat{\Phi}_{\mu}$ 是粒子数密度算符, $\hat{L}_z = [i\hat{\Phi}_y^\dagger \hat{\Phi}_x + \text{H.c.}]$ 和 $\hat{S} = \sum_{\mu} \hat{\Phi}_{\mu}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \hat{\Phi}_{\mu}$ 分别是角动量算符和自旋算符, 自旋-轨道耦合算符为 $\hat{L}\hat{S}_z = [i\hat{\Phi}_y^\dagger \sigma_z \hat{\Phi}_x + \text{H.c.}]$.

当不同组分相互作用 $U_{\perp} = 0$ 或等效为 $U_0 = U_2$ 时, (34) 式退化为与自旋无关的 p 轨道玻色-哈伯德模型, 此时系统在弱相互作用时的基态正是 $p_x \pm ip_y$ 的手征玻色凝聚. 为了便于描述系统的基态, 引入角动量携带算符 $\hat{\Phi}_{\pm}(\mathbf{q}) = \sum_r e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [(-)^{r_x} \hat{\Phi}_{x,r} \pm i(-)^{r_y} \hat{\Phi}_{y,r}]$, 此时系统的四重简并基态可写为 $1/\sqrt{N_{\uparrow}!N_{\downarrow}!} [\hat{\Phi}_{\pm\uparrow}^\dagger(0)]^{N_{\uparrow}} [\hat{\Phi}_{\pm\downarrow}^\dagger(0)]^{N_{\downarrow}} |0\rangle$, 其中 $|0\rangle$ 是真空态. 按照算符 \hat{L}_z 和 $\hat{L}\hat{S}_z$ 将基态表示为

$$\begin{aligned} \left[\sum_r (-1)^{r_x+r_y} \hat{L}_z \right] |\chi_{\pm}^c\rangle &= \pm N |\chi_{\pm}^c\rangle, \\ \left[\sum_r (-1)^{r_x+r_y} \hat{L}\hat{S}_z \right] |\chi_{\pm}^s\rangle &= \pm N |\chi_{\pm}^s\rangle, \end{aligned} \quad (35)$$

在 $U_2 = 0$ 时, \hat{L}_z 和 $\hat{L}\hat{S}_z$ 的本征值是系统的好量子数. 但当 $U_2 \neq 0$ 时,

$$[\hat{L}_z, \hat{S}^2] = 0, \quad [\hat{L}\hat{S}_z, \hat{S}^2] \neq 0, \quad (36)$$

此时态 $|\chi_c\rangle$ 仍是守恒量, 而 $|\chi_s\rangle$ 则不再守恒. 由于相互作用的调制, 系统的基态变成了 $|\chi_s\rangle$. 此时, 系统的基态便出现了自发的自旋角动量耦合 $\langle \hat{L}\hat{S}_z \rangle = \pm\rho$, 称之为 SAI 相 (spin angular-momentum interwined superfluid). 在这种相中, 原子的轨道角动量与自旋角动量锁定在了一起, 即自旋向上的原子的轨道角动量为 $p_x + ip_y$, 自旋向下的原子的轨道角动量锁定为 $p_x - ip_y$, 如图 7(a)^[194] 所示.

为了证明上述的理论预测, 采用玻色动力学平均场理论来计算系统基态, 得到的基态相图如图 7(d) 和图 7(e)^[194] 所示. 可以看出, SAI 相是系统处于超流态时的基态, 而在强相互作用区间的基态分别是无序绝缘态 (UI) 和有序绝缘态 (OI). 为了证明 SAI 态的鲁棒性, 分别计算了不同相互作用

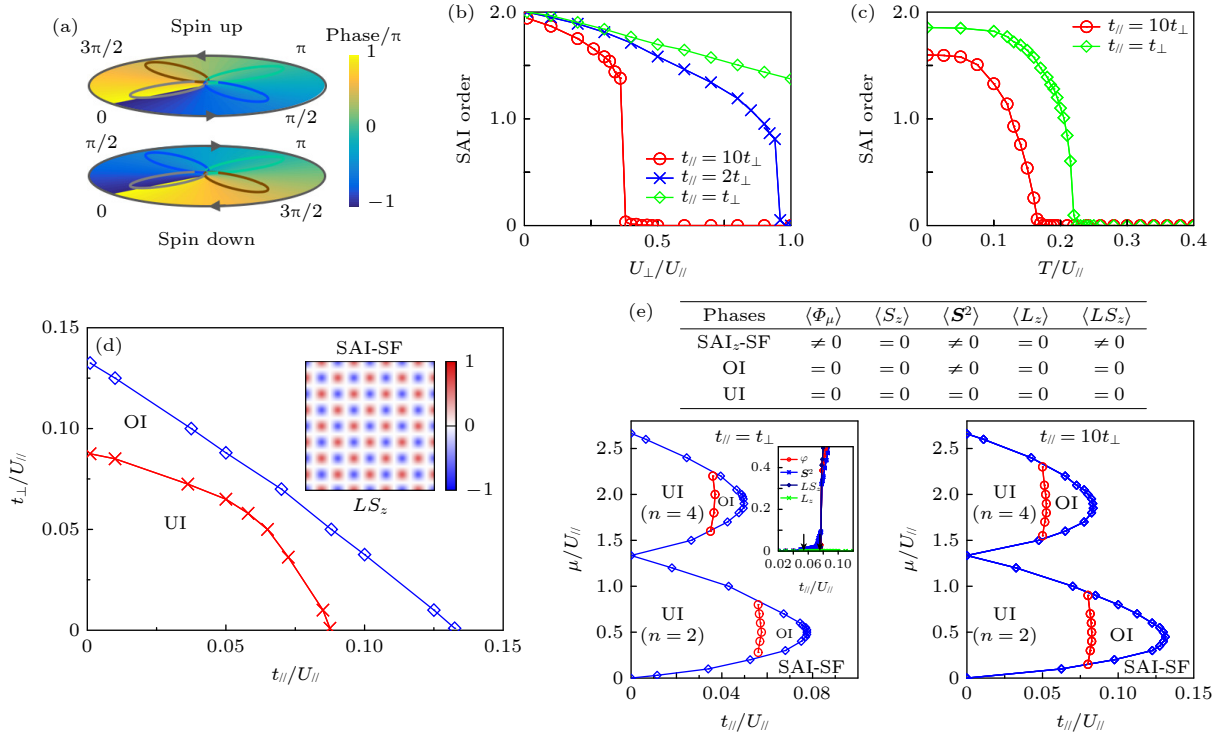


图 7 (a) SAI 相的示意图, 在 SAI 相中, 由于自发的自旋-轨道耦合, 粒子的自旋自由度和轨道自由度相互锁定; (b) 在不同相互作用强度下, SAI 相的稳定性; (c) 在不同的温度下, SAI 相的稳定性; (d) 粒子数填充 $\langle n \rangle = 2$ 时, 玻色动力学平均场方法得到的两组分 p 轨道玻色系统基态相图, 相互作用强度设置为 $U_{//} = U_{\perp}$; (e) 表为不同相之间序参量的表征, 下左图和右图分别为 $t_{//}/t_{\perp} = 1$ 和 10 时, 不同填充数情况下基态相图, 下左图的插图为相变时序参量的变化. 相互作用强度设置为 $U_{//} = U_{\perp}$ [194]

Fig. 7. (a) Pictorial illustration of SAI order. In presence of spontaneous spin angular-momentum coupling, the phase of spatial wave-function is entangled with the internal degrees of freedom of an atom in each optical lattice site. (b) Stability of SAI order against interaction quantum fluctuations. (c) Stability of SAI order against thermal fluctuations. (d) Phase diagram of the spinful p-orbital system with an even integer filling. The phase diagram is obtained via BDMFT. The atomic filling is fixed at $\langle n \rangle = 2$, we set $U_{//} = U_{\perp}$. (e) Table is the characterization of different quantum phase. Left and right picture are phase diagrams of spinful p-orbital bosons at generic fillings for $t_{//}/t_{\perp} = 1$ and 10. The inset in left shows the evolution of the order parameters. We use interaction strengths $U_{//} = U_{\perp}$ [194].

用比例 $U_{\perp}/U_{//}$ 和不同的热涨落下, SAI 相的相变曲线, 如图 7(b) 和图 7(c)[194] 所示. 同时计算了不同的跃迁比例下, 整个系统的基态相图, 也证明了 SAI 相的稳定性.

5.2 六角光晶格中自旋诱导的轨道阻挫效应研究

p 轨道超冷原子提供了一个研究轨道自由度和自旋自由度相互作用的理想平台, 但对于复杂的晶格体系中的自旋、轨道自由度的相互作用仍然是一个有趣的问题, 在复杂的晶格中, 由于晶格的几何结构会带来阻挫效应, 这种阻挫效应会带来丰富的物理现象 [78,195–201]. 本课题组进一步研究六角晶格中两组分 p 能带玻色系统, 探索不同的晶格结构对这种自旋-轨道耦合现象的影响 [202]. 系统的哈密顿量与 (34) 式一样, 但是单位矢量需要做修

正, 其中 e_m 改为 $e_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{3}}{2} e_x + \frac{1}{2} e_y$ 和 $e_3 = -e_y$, 而 e'_m 变成 $e'_{1,2} = -\frac{1}{2} e_x \pm \frac{\sqrt{3}}{2} e_y$ 和 $e'_3 = e_x$, 具体如图 8(a)[202] 所示.

首先研究在强相互作用下, 系统的基态量子相的表征. 为了理解强关联区间的物理, 引入轨道极化矢量 $\mathcal{P}_{\sigma,r} = [\langle \hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^x \rangle, \langle \hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^y \rangle, \langle \hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^z \rangle]$, 其中 $\hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^x \equiv \frac{1}{2} (\hat{p}_{x\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{x\sigma,r} - \hat{p}_{y\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{y\sigma,r})$, $\hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^y \equiv \frac{1}{2} (\hat{p}_{x\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{y\sigma,r} - \hat{p}_{y\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{x\sigma,r})$ 和 $\hat{\mathcal{P}}_{\sigma,r}^z \equiv \frac{1}{2i} (\hat{p}_{x\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{y\sigma,r} - \hat{p}_{y\sigma,r}^\dagger \hat{p}_{x\sigma,r})$. 当 $U_{//} = U_{\uparrow,\downarrow} \geq U_{\uparrow\downarrow} = U_{\perp} > 0$, 最低的 Mott 填充为 $n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = 2$, 此时在跃迁振幅为零的极限时, 系统的单格点基态为 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|p_{x\uparrow}, p_{y\downarrow}\rangle - |p_{x\downarrow}, p_{y\uparrow}\rangle)$, 说明在深的 Mott 绝缘区系统没有轨道极化 $\mathcal{P}_{\uparrow,\downarrow} = 0$. 当略微增加跃迁振幅时, 可以通过二阶微扰的方法得到一个有效哈密顿量. 为了强调相互

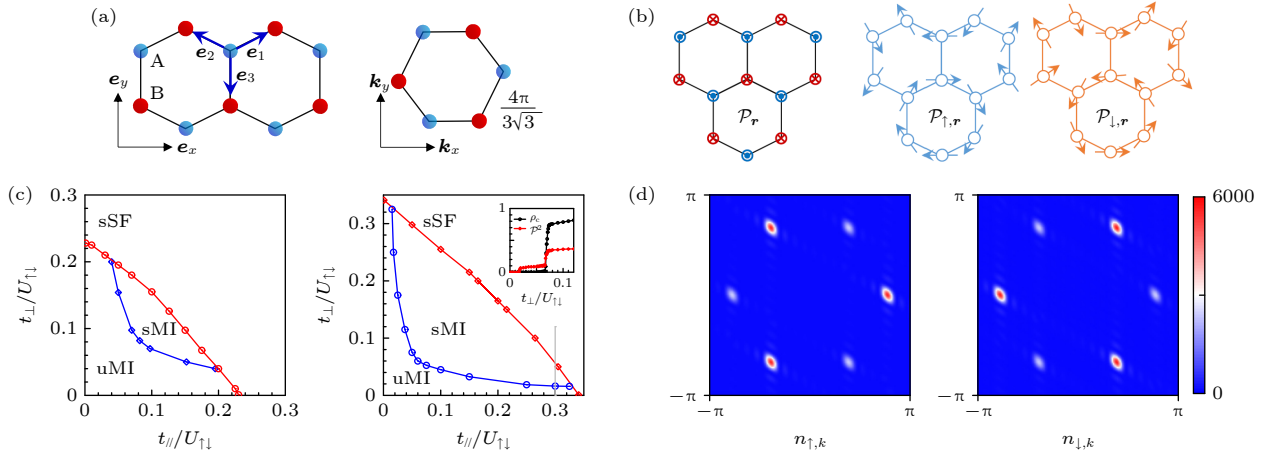


图 8 (a) 左图为二维六角晶格的几何结构, 晶格的格矢为 \mathbf{e}_m , 右图为晶格的第一布里渊区. (b) 强关联区间轨道极化矢量 \mathcal{P} 在实空间的分布图. 左图为无自旋玻色子的 Ising 型结构, 中间和右图分别为自旋向上、自旋向下玻色子的平面内轨道涡旋结构. (c) 粒子填充数 $\langle n \rangle = 2$ 时, 实空间玻色动力学平均场得到的两组分六角晶格 p 轨道玻色系统多体基态相图. 左图和右图的相互作用分别为 $U_\uparrow = U_\downarrow = U_{\uparrow\downarrow}$ 和 $U_\uparrow = U_\downarrow = 2U_{\uparrow\downarrow}$. 右图的插图为右图灰色垂直线路径下, 序参量的相应变化. (d) 不同自旋组分在动量空间下密度的分布^[202]

Fig. 8. (a) Geometry of two-dimensional hexagonal lattice with lattice vector \mathbf{e}_m (left), and the first Brillouin zone (right). (b) Cartoons of real-space orbital polarization \mathcal{P} for strongly interacting many-body phases in p-orbital bands of the two-dimensional (2D) hexagonal lattice, where left picture is spinless bosons demonstrate out-of-plane Ising-type orbital order, middle and right are spinful case in-plane orbital textures. (c) Hopping-dependent phase diagrams of spinful bosonic gases in p-orbital bands of a 2D hexagonal lattice for fixed filling $\langle n \rangle = 2$, obtained via real-space bosonic dynamical mean-field theory. The left and right are set $U_\uparrow = U_\downarrow = U_{\uparrow\downarrow}$ and $U_\uparrow = U_\downarrow = 2U_{\uparrow\downarrow}$. Inset picture is the evolution of order parameter along the gray vertical line. (d) Momentum-space distributions of density $n_{\sigma, \mathbf{k}}$ ^[202].

作用的效应, 冻结自旋- \downarrow 的自由度, 而仅考虑自旋- \uparrow 组分, 在 $t_{//} \approx t_\perp$ 时, 得到有效哈密顿量为

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{m, r \in A} J_x \hat{P}_{\uparrow, r}^x \hat{P}_{\uparrow, r+\mathbf{e}_m}^x, \quad (37)$$

其中, $J_x < 0$, $\hat{P}_{\uparrow, r}$ 是与键的方向 \mathbf{e}_m 相关的. 自旋- \uparrow 的有效自旋模型说明, 在缺少自旋自由度的时候, 强关联区间 Mott 相应是一个反铁磁性, 而自旋自由度将会诱导出平面内的轨道阻挫相, 如图 8(b)^[202] 所示. 在跃迁振幅为零时, 系统是无轨道极化的自旋单态, 而在强关联区间的量子相是轨道阻挫相, 说明在 Mott 绝缘态时也存在一个相变.

为了验证上述结果, 采用实空间玻色动力学平均场方法进行数值计算, 得到的结果如图 8(c)^[202] 所示. 在 Mott 绝缘区, 当 $t_{//} \approx t_\perp$ 时, Mott 相表征为 $\mathcal{P}^2 \neq 0$ 的 sMI 相 (spin-orbital intertwined Mott-insulating), 对应的动量空间密度凝结在 $Q_\pm = \pm \frac{4\pi}{9} (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2)$, 见图 8(d)^[202]. 系统还存在两个量子相, 一个是 Mott 区的无轨道极化 $\mathcal{P}^2 = 0$ 的 uMI 相 (unordered Mott-insulating), 另一个是 $\mathcal{P}^2 \neq 0$ 和 $\rho_c \neq 0$ 的 sSF 相 (spin-orbital intertwined superfluid).

6 结论与展望

本文主要回顾了本课题组利用玻色动力学平均场理论对光晶格中强关联玻色体系进行的一系列研究. 主要结果可以概括为: 基于 BDMFT 计算了三维光晶格中自旋-1 超冷玻色气体在零温和有限温下的相图, 发现了自旋单态凝聚相的存在, 并观察到超流体可以通过一阶 (二阶) 相变被加热成具有偶 (奇) 填充的莫特绝缘体. 在存在磁场时, 基态简并被打破, 体系中存在非常丰富的量子相, 如向列相、铁磁相、自旋单态绝缘相、极化超流以及轴对称破缺超流, 此外还观察到了多步凝聚. 进一步计算了自旋-1 碱金属原子与自旋-0 碱土金属原子混合体系的零温相图, 发现系统表现出非零磁性长程序, 当填充数 $n = 1$ 时表现为二阶莫特绝缘-超流体相变, 当填充数 $n = 2$ 时, 表现为一阶莫特绝缘-超流体相变, 还观察到了由于质量不平衡带来的两步莫特绝缘-超流体相变. 在对长程相互作用的研究中, 首先利用里德伯原子进行了研究, 发现了两种不同的超固体相, 随后在原子与高精度腔耦合的体系中通过控制泵浦光的反射, 实现了耦合到不同轨道的超辐射相. 最后对高轨道玻色体系进行

了研究,首先在正方晶格中提出了一种基于多体关联和自发对称性破缺的自旋-轨道角动量耦合的新机制,然后在六角晶格中研究了阻挫效应,基于对称分类,发现轨道阻挫和强相互作用之间的相互作用导致了奇异的莫特绝缘相和自旋轨道交织的超流体相.

总的来说,基于BDMFT对光晶格中超冷玻色体系的自旋自由度、轨道自由度和长程相互作用进行了研究,这些体系中存在丰富的量子相,以及自旋-轨道角动量耦合效应、阻挫效应等,揭示了丰富的量子多体物理现象.目前我们的研究还只是对稳态的研究,在未来的研究中,将发展非平衡动力学平均场理论,对光晶格中的强关联非平衡体系进行研究.

参考文献

- [1] Chu S 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 685
- [2] Cohen-Tannoudji C N 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 707
- [3] Phillips W D 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 721
- [4] Orzel C, Tuchman A K, Fenselau M L, Yasuda M, Kasevich M A 2001 *Science* **291** 2386
- [5] Greiner M, Bloch I, Mandel O, Hänsch T W, Esslinger T 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 160405
- [6] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Bloch I 2002 *Nature* **415** 39
- [7] Taie S, Ozawa H, Ichinose T, Nishio T, Nakajima S, Takahashi Y 2015 *Sci. Adv.* **1** e1500854
- [8] Jotzu G, Messer M, Desbuquois R, Lebrat M, Uehlinger T, Greif D, Esslinger T 2014 *Nature* **515** 237
- [9] Becker C, Soltan-Panahi P, Kronjäger J, Dörscher S, Bongs K, Sengstock K 2010 *New J. Phys.* **12** 065025
- [10] Jo G B, Guzman J, Thomas C K, Hosur P, Vishwanath A, Stamper-Kurn D M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 045305
- [11] Viebahn K, Sbroscia M, Carter E, Yu J C, Schneider U 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 110404
- [12] Goldman N, Budich J C, Zoller P 2016 *Nat. Phys.* **12** 639
- [13] Xu M, Kendrick L H, Kale A, Gang Y, Ji G, Scalettar R T, Lebrat M, Greiner M 2022 *Nature* **620** 971
- [14] Wei D, Adler D, Srakaew K, Agrawal S, Weckesser P, Bloch I, Zeiher J 2023 *Phys. Rev. X* **13** 021042
- [15] Grimm R, Weidemjeller M, Ovchinnikov Y B 2000 *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics* (San Diego: Academic Press) pp95–170
- [16] Aikawa K, Frisch A, Mark M, Baier S, Rietzler A, Grimm R, Ferlaino F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 210401
- [17] Inouye S, Andrews M R, Stenger J, Miesner H J, Stamper-Kurn D M, Ketterle W 1998 *Nature* **392** 151
- [18] Stwalley W C 1976 *Phys. Rev. Lett.* **37** 1628
- [19] Courteille P, Freeland R S, Heinzen D J, van Abeelen F A, Verhaar B J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 69
- [20] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E, Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [21] Davis K B, Mewes M O, Andrews M R, van Druten N J, Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969
- [22] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [23] Bloch I, Dalibard J, Zwerger W 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 885
- [24] Bloch I, Dalibard J, Nascimbène S 2012 *Nat. Phys.* **8** 267
- [25] Dutta O, Gajda M, Hauke P, et al. 2015 *Rep. Prog. Phys.* **78** 066001
- [26] Gross C, Bloch I 2017 *Science* **357** 995
- [27] Schäfer F, Fukuhara T, Sugawa S, Takasu Y, Takahashi Y 2020 *Nat. Rev. Phys.* **2** 411
- [28] Altman E, Brown K R, Carleo G, et al. 2021 *PRX Quantum* **2** 017003
- [29] Fraxanet J, Salamon T, Lewenstein M 2022 *arXiv: 2204.08905 [quant-ph]*
- [30] Choi J Y 2023 *J. Korean Phys. Soc.* **82** 875
- [31] Lewenstein M, Sanpera A, Ahufinger V, Damski B, Sen(De) A, Sen U 2007 *Adv. Phys.* **56** 243
- [32] Stamper-Kurn D M, Ueda M 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1191
- [33] Stamper-Kurn D M, Andrews M R, Chikkatur A P, et al. 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2027
- [34] Stenger J, Inouye S, Stamper-Kurn D M, Miesner H J, Chikkatur A P, Ketterle W 1998 *Nature* **396** 345
- [35] Hall D S, Matthews M R, Ensher J R, Wieman C E, Cornell E A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1539
- [36] Matthews M R, Hall D S, Jin D S, et al. 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 243
- [37] Barrett M D, Sauer J A, Chapman M S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 010404
- [38] Law C K, Pu H, Bigelow N P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5257
- [39] Pu H, Law C K, Raghavan S, Eberly J H, Bigelow N P 1999 *Phys. Rev. A* **60** 1463
- [40] McGuirk J M, Lewandowski H J, Harber D M, Nikuni T, Williams J E, Cornell E A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 090402
- [41] Gu Q, Bongs K, Sengstock K 2004 *Phys. Rev. A* **70** 063609
- [42] Chang M S, Hamley C D, Barrett M D, et al. 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 140403
- [43] Schmaljohann H, Erhard M, Kronjäger J, et al. 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 040402
- [44] Widera A, Gerbier F, Fölling S, Gericke T, Mandel O, Bloch I 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 190405
- [45] Widera A, Gerbier F, Fölling S, Gericke T, Mandel O, Bloch I 2006 *New J. Phys.* **8** 152
- [46] Chang M S, Qin Q, Zhang W, You L, Chapman M S 2005 *Nat. Phys.* **1** 111
- [47] Vengalattore M, Leslie S R, Guzman J, Stamper-Kurn D M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 170403
- [48] Kronjäger J, Becker C, Soltan-Panahi P, Bongs K, Sengstock K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 090402
- [49] Eto Y, Saito H, Hirano T 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 185301
- [50] Jacob D, Shao L, Corre V, Zibold T, De Sarlo L, Mimoun E, Dalibard J, Gerbier F 2012 *Phys. Rev. A* **86** 061601
- [51] Zhao L, Jiang J, Tang T, Webb M, Liu Y 2014 *Phys. Rev. A* **89** 023608
- [52] Zhao L, Jiang J, Tang T, Webb M, Liu Y 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 225302
- [53] Batrouni G G, Rousseau V G, Scalettar R T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 140402
- [54] Apaja V, Syljuasen O F 2006 *Phys. Rev. A* **74** 035601
- [55] Rizzi M, Rossini D, De Chiara G, Montangero S, Fazio R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 240404
- [56] Bergkvist S, McCulloch I P, Rosengren A 2006 *Phys. Rev. A* **74** 053419
- [57] Mazurenko A, Chiu C S, Ji G, et al. 2017 *Nature* **545** 462
- [58] Sun H, Yang B, Wang H Y, Zhou Z Y, Su G X, Dai H N, Yuan Z S, Pan J W 2021 *Nat. Phys.* **17** 990

- [59] Wu C 2006 *Mod. Phys. Lett. B* **20** 1707
- [60] Mobarak M, Pelster A 2013 *Laser Phys. Lett.* **10** 115501
- [61] Trefzger C, Menotti C, Capogrosso-Sansone B, Lewenstein M 2011 *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **44** 193001
- [62] De'Bell K, MacIsaac A B, Whitehead J P 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 225
- [63] Baumann K, Guerlin C, Brennecke F, Esslinger T 2010 *Nature* **464** 1301
- [64] Maschler C, Mekhov I B, Ritsch H 2008 *Eur. Phys. J. D* **46** 545
- [65] Ritsch H, Domokos P, Brennecke F, Esslinger T 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 553
- [66] Mivehvar F, Piazza F, Donner T, Ritsch H 2021 *Adv. Phys.* **70** 1
- [67] Griesmaier A, Werner J, Hensler S, Stuhler J, Pfau T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 160401
- [68] Ni K K, Ospelkaus S, de Miranda M H G, et al. 2008 *Science* **322** 231
- [69] Zhang X, Chen Y, Wu Z, Wang J, Fan J, Deng S, Wu H 2021 *Science* **373** 1359
- [70] Wu C 2009 *Mod. Phys. Lett. B* **23** 1
- [71] Liu W V, Wu C 2006 *Phys. Rev. A* **74** 013607
- [72] Wu C, Liu W V, Moore J, Sarma S D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 190406
- [73] Isacsson A, Girvin S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 053604
- [74] Kock T, Hippler C, Ewerbeck A, Hemmerich A 2016 *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **49** 042001
- [75] Soltan-Panahi P, Lühlmann D S, Struck J, Windpassinger P, Sengstock K 2012 *Nat. Phys.* **8** 71
- [76] Zhou Q, Porto J V, Das Sarma S 2011 *Phys. Rev. A* **84** 031607
- [77] Li X, Liu W V 2016 *Rep. Prog. Phys.* **79** 116401
- [78] Liu B, Zhang P, Gao H, Li F 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 015303
- [79] Pinheiro F, Bruun G M, Martikainen J P, Larson J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 205302
- [80] Müller T, Fölling S, Widera A, Bloch I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 200405
- [81] Wirth G, Ölschläger M, Hemmerich A 2011 *Nat. Phys.* **7** 147
- [82] Kock T, Ölschläger M, Ewerbeck A, Huang W M, Mathey L, Hemmerich A 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 115301
- [83] Hachmann M, Kiefer Y, Riebesehl J, Eichberger R, Hemmerich A 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 033201
- [84] Kiefer Y, Hachmann M, Hemmerich A 2023 *Nat. Phys.* **19** 794
- [85] Jin S, Zhang W, Guo X, Chen X, Zhou X, Li X 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 035301
- [86] Jin S, Chen X, Zhou X 2022 *Front. Phys.* **10** 957151
- [87] Wang X Q, Luo G Q, Liu J Y, Liu W V, Hemmerich A, Xu Z F 2021 *Nature* **596** 227
- [88] Wang X Q, Luo G Q, Liu J Y, et al. 2022 arXiv: 2211.05578 [cond-mat.quant-gas]
- [89] Huang G H, Xu Z F, Wu Z 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 185301
- [90] Georgescu I M, Ashhab S, Nori F 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 153
- [91] Metzner W, Vollhardt D 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 324
- [92] Müller-Hartmann E 1989 *Z. Phys. B: Condens. Matter* **74** 507
- [93] Müller-Hartmann E 1989 *Z. Phys. B: Condens. Matter* **76** 211
- [94] Janiš V 1991 *Z. Phys. B: Condens. Matter* **83** 227
- [95] Georges A, Kotliar G 1992 *Phys. Rev. B* **45** 6479
- [96] Byczuk K, Vollhardt D 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235106
- [97] Georges A, Kotliar G, Krauth W, Rozenberg M J 1996 *Rev. Mod. Phys.* **68** 13
- [98] Limelette P, Wzietek P, Florens S, et al. 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 016401
- [99] Vollhardt D 1993 *Correlated Electron Systems* (Singapore: World Scientific) pp57–117
- [100] Vollhardt D 2010 *AIP Conf. Proc.* **1297** 339
- [101] Negele J, Orland H 1998 *Quantum Many-Particle System* (Boca Raton: CRC Press) pp47–68
- [102] Snoek M, Hofstetter W 2013 *Quantum Gases: Finite Temperature and Non-Equilibrium Dynamics* (Singapore: World Scientific) pp355–365
- [103] Hubener A, Snoek M, Hofstetter W 2009 *Phys. Rev. B* **80** 245109
- [104] Li Y 2012 *Ph. D. Dissertation* (Frankfurt am Main: Johann Wolfgang Goethe-Universität)
- [105] Caffarel M, Krauth W 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1545
- [106] Rozenberg M, Kotliar G, Kajueter H, Thomas G, Rapkine D, Honig J, Metcalf P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 105
- [107] Hirsch J E, Fye R M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 2521
- [108] Wilson K G 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** 773
- [109] Helmes R W, Costi T A, Rosch A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 056403
- [110] Snoek M, Titvinidze I, Töke C, Byczuk K, Hofstetter W 2008 *New J. Phys.* **10** 093008
- [111] Demler E, Zhou F 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 163001
- [112] Imambekov A, Lukin M, Demler E 2003 *Phys. Rev. A* **68** 063602
- [113] Snoek M, Zhou F 2004 *Phys. Rev. B* **69** 094410
- [114] Tsuchiya S, Kurihara S, Kimura T 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043628
- [115] Ashhab S 2005 *J. Low Temp. Phys.* **140** 51
- [116] Pai R V, Sheshadri K, Pandit R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 014503
- [117] Kimura T, Tsuchiya S, Kurihara S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 110403
- [118] Natu S S, Pixley J H, Das Sarma S 2015 *Phys. Rev. A* **91** 043620
- [119] Li Y, He L, Hofstetter W 2016 *Phys. Rev. A* **93** 033622
- [120] Lang G, Witkowska E 2014 *Phys. Rev. A* **90** 043609
- [121] Isoshima T, Ohmi T, Machida K 2000 *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** 3864
- [122] Zhang W, Yi S, You L 2003 *New J. Phys.* **5** 77
- [123] Zhang W, Yi S, You L 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043611
- [124] Kis-Szabó K, Szépfalussy P, Szirmai G 2007 *Phys. Lett. A* **364** 362
- [125] Phuc N T, Kawaguchi Y, Ueda M 2011 *Phys. Rev. A* **84** 043645
- [126] Liu Y, Jung S, Maxwell S E, Turner L D, Tiesinga E, Lett P D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 125301
- [127] Jiang J, Zhao L, Webb M, Liu Y 2014 *Phys. Rev. A* **90** 023610
- [128] Frapolli C, Zibold T, Invernizzi A, Jiménez-García K, Dalibard J, Gerbier F 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 050404
- [129] Zan X, Liu J, Han J, Wu J, Li Y 2018 *Sci. Rep.* **8** 9143
- [130] Li X, Zhu B, He X, Wang F, Guo M, Xu Z F, Zhang S, Wang D 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 255301
- [131] Barbé V, Ciamei A, Pasquiou B, Reichsöllner L, Schreck F, Żuchowski P S, Hutson J M 2018 *Nat. Phys.* **14** 881
- [132] Ciamei A, Szczepkowski J, Bayerle A, et al. 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 26221
- [133] Tan H, Han J, Yuan J, Li Y 2020 *Phys. Rev. A* **101** 063611
- [134] Moses S A, Covey J P, Miecinkowski M T, Yan B, Gadway B, Ye J, Jin D S 2015 *Science* **350** 659
- [135] Deighmayr J, Grochola A, Repp M, Mörtilbauer K, Glick C, Lange J, Dulieu O, Wester R, Weidemüller M 2008 *Phys.*

- Rev. Lett.* **101** 133004
- [136] Takekoshi T, Reichsöllner L, Schindewolf A, et al. 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 205301
- [137] Molony P K, Gregory P D, Ji Z, et al. 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 255301
- [138] Park J W, Will S A, Zwierlein M W 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 205302
- [139] Capogrosso-Sansone B, Trefzger C, Lewenstein M, Zoller P, Pupillo G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 125301
- [140] Pollet L, Picon J D, Büchler H P, Troyer M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 125302
- [141] Lu M, Burdick N Q, Youn S H, Lev B L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 190401
- [142] Henkel N, Cinti F, Jain P, Pupillo G, Pohl T 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 265301
- [143] Mattioli M, Dalmonte M, Lechner W, Pupillo G 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 165302
- [144] Dalmonte M, Lechner W, Cai Z, Mattioli M, Läuchli A M, Pupillo G 2015 *Phys. Rev. B* **92** 045106
- [145] Iskin M, Freericks J K 2009 *Phys. Rev. A* **79** 053634
- [146] Angelone A, Mezzacapo F, Pupillo G 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 135303
- [147] Baier S, Mark M J, Petter D, Aikawa K, Chomaz L, Cai Z, Baranov M, Zoller P, Ferlaino F 2016 *Science* **352** 201
- [148] Cinti F, Maer T, Lechner W, Pupillo G, Pohl T 2014 *Nat. Commun.* **5** 3235
- [149] Seo B, Huang M, Chen Z, Parit M K, He Y, Chen P, Jo G B 2022 arXiv: 2210.01586 [cond-mat.quant-gas]
- [150] Wu X, Wang Z, Yang F, Gao R, Liang C, Tey M K, Li X, Pohl T, You L 2023 arXiv: 2305.20070 [cond-mat.quant-gas]
- [151] Li Y, Geißler A, Hofstetter W, Li W 2018 *Phys. Rev. A* **97** 023619
- [152] Pupillo G, Micheli A, Boninsegni M, Lesanovsky I, Zoller P 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 223002
- [153] Guo Y, Kroeze R M, Marsh B P, Gopalakrishnan S, Keeling J, Lev B L 2021 *Nature* **599** 211
- [154] Kroeze R M, Marsh B P, Lin K Y, Keeling J, Lev B L 2023 *PRX Quantum* **4** 020326
- [155] Masalaeva N, Ritsch H, Mivehvar F 2023 arXiv: 2305.16244 [cond-mat.quant-gas]
- [156] Gao P, Zhou Z W, Guo G C, Luo X W 2023 *Phys. Rev. A* **107** 023311
- [157] Nie X, Zheng W 2023 *Phys. Rev. A* **107** 033311
- [158] Fraxanet J, Dauphin A, Lewenstein M, et al. 2023 arXiv: 2305.03409 [cond-mat.quant-gas]
- [159] Li H, Wu H, Zheng W, Yi W 2023 arXiv: 2305.03891 [cond-mat.quant-gas]
- [160] Mivehvar F, Ritsch H, Piazza F 2016 *Phys. Rev. Lett.* **118** 073602
- [161] Griesser T, Ritsch H 2011 *Opt. Express* **19** 11242
- [162] Keßler H, Cosme J G, Hemmerling M, Mathey L, Hemmerich A 2019 *Phys. Rev. A* **99** 053605
- [163] Kongkhambut P, Skulte J, Mathey L, Cosme J G, Hemmerich A, Keßler H 2022 *Science* **377** 670
- [164] Dreon D, Baumgärtner A, Li X, Hertlein S, Esslinger T, Donner T 2022 *Nature* **608** 494
- [165] Zupancic P, Dreon D, Li X, Baumgärtner A, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 233601
- [166] Li X, Dreon D, Zupancic P, et al. 2021 *Phys. Rev. Research* **3** L012024
- [167] Tan H, Han J, Zheng W, Yuan J, Li Y 2022 *Phys. Rev. A* **106** 023315
- [168] Liu X J, Borunda M F, Liu X, Sinova J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 046402
- [169] Liu X J, Law K T, Ng T K 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 086401
- [170] Liu X J, Liu Z X, Cheng M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 076401
- [171] Dalibard J, Gerbier F, Juzeliūnas G, Öhberg P 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1523
- [172] Wang P, Yu Z Q, Fu Z, Miao J, Huang L, Chai S, Zhai H, Zhang J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 095301
- [173] Cheuk L W, Sommer A T, Hadzibabic Z, Yefsah T, Bakr W S, Zwierlein M W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 095302
- [174] DeMarco M, Pu H 2015 *Phys. Rev. A* **91** 033630
- [175] Chen H R, Lin K Y, Chen P K, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 113204
- [176] Zhang D, Gao T, Zou P, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 110402
- [177] Chiu N C, Kawaguchi Y, Yip S K, Lin Y J 2020 *New J. Phys.* **22** 093017
- [178] Chen X L, Peng S G, Zou P, Liu X J, Hu H 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033152
- [179] Chen K J, Wu F, Peng S G, Yi W, He L 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 260407
- [180] Chen K J, Wu F, Hu J, He L 2020 *Phys. Rev. A* **102** 013316
- [181] Chen L, Pu H, Zhang Y 2016 *Phys. Rev. A* **93** 013629
- [182] Wang L L, Ji A C, Sun Q, Li J 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 193401
- [183] Chen K J, Wu F, He L, Yi W 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 033023
- [184] Cao R, Han J, Wu J, Yuan J, He L, Li Y 2022 *Phys. Rev. A* **105** 063308
- [185] Zhai H 2015 *Rep. Prog. Phys.* **78** 026001
- [186] Zhang L, Liu X J 2018 *Synthetic Spin-Orbit Coupling in Cold Atoms* (Singapore: World Scientific) pp1–87
- [187] Galitski V, Spielman I B 2013 *Nature* **494** 49
- [188] Wu Z, Zhang L, Sun W, Xu X T, Wang B Z, Ji S C, Deng Y, Chen S, Liu X J, Pan J W 2016 *Science* **354** 83
- [189] Huang L, Meng Z, Wang P, Peng P, Zhang S L, Chen L, Li D, Zhou Q, Zhang J 2016 *Nat. Phys.* **12** 540
- [190] Wang Z Y, Cheng X C, Wang B Z, et al. 2021 *Science* **372** 271
- [191] Ji Q, Zhang R, Zhang W 2020 *Phys. Rev. A* **102** 063313
- [192] You J S, Liu I K, Wang D W, Gou S C, Wu C 2016 *Phys. Rev. A* **93** 053623
- [193] Li X, Nan J, Pan X 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 263002
- [194] Li Y, Yuan J, Hemmerich A, Li X 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 093401
- [195] Semeghini G, Levine H, Keesling A, et al 2021 *Science* **374** 1242
- [196] Balents L 2010 *Nature* **464** 199
- [197] Nisoli C, Moessner R, Schiffer P 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1473
- [198] Keselman A, Balents L, Strykh O A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 187201
- [199] Hébert F, Cai Z, Rousseau V G, Wu C, Scalettar R T, Batrouni G G 2013 *Phys. Rev. B* **87** 224505
- [200] Lewenstein M, Liu W V 2011 *Nat. Phys.* **7** 101
- [201] Struck J, Ölschläger C, Targat R L, et al. 2011 *Science* **333** 996
- [202] Li Y, Yuan J, Zhou X, Li X 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 033274

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Quantum simulation of ultracold atoms in optical lattice based on dynamical mean-field theory*

Tan Hui¹⁾ Cao Rui¹⁾ Li Yong-Qiang^{1)2)†}

1) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Hunan Key Laboratory of Extreme Matter and Applications, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 29 April 2023; revised manuscript received 17 June 2023)

Abstract

With the development of atomic cooling technology and optical lattice technology, the quantum system composed of optical lattice and ultracold atomic gas has become a powerful tool for quantum simulation. The purity and highly controllable nature of the optical lattice give it a strong regulatory capability. Therefore, more complex and interesting physical phenomena can be simulated, which deepens the understanding of quantum many-body physics. In recent years, we have studied different Bose systems with strong correlations in optical lattice based on the bosonic dynamical mean-field theory, including multi-component system, high-orbit bosonic system, and long-range interaction system. In this review, we introduce the research progress of the above mentioned. Through the calculation by using bosonic dynamical mean-field theory which has been generalized to multi-component and real space versions, a variety of physical phenomena of optical crystal lattice Bose system in weak interaction intervals to strong interaction intervals can be simulated. The phase diagram of spin-1 ultracold bosons in a cubic optical lattice at zero temperature and finite temperature are drawn. A spin-singlet condensate phase is found, and it is observed that the superfluid can be heated into a Mott insulator with even (odd) filling through the first (second) phase transition. In the presence of a magnetic field, the ground state degeneracy is broken, and there are very rich quantum phases in the system, such as nematic phase, ferromagnetic phase, spin-singlet insulating phase, polar superfluid, and broken-axisymmetry superfluid. In addition, multistep condensations are also observed. Further, we calculate the zero-temperature phase diagram of the mixed system of spin-1 alkali metal atoms and spin-0 alkali earth metal atoms, and find that the system exhibits a non-zero magnetic ordering, which shows a second-order Mott insulation-superfluid phase transition when the filling number is $n = 1$, and a first-order Mott insulation-superfluid phase transition when the filling number is $n = 2$. The two-step Mott-insulating-superfluid phase transition due to mass imbalance is also observed. In the study of long-range interactions, we first use Rydberg atoms to find two distinctive types of supersolids, and then realize the superradiant phase coupled to different orbits by controlling the reflection of the pump laser in the system coupled to the high-finesse cavity. Finally, we study the high-orbit Bose system. We propose a new mechanism of spin angular-momentum coupling with spinor atomic Bosons based on many-body correlation and spontaneous symmetry breaking in a two-dimensional optical lattice, and then study the orbital frustration in a hexagonal lattice. We find that the interaction between orbital frustration and the strong interaction results in exotic Mott and superfluid phases with spin-orbital intertwined orders.

Keywords: quantum simulation of ultracold atoms, bosonic dynamical mean-field theory, quantum phase transition

PACS: 37.10.Jk

DOI: 10.7498/aps.72.20230701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12074431, 12374252) and the Science Foundation for Distinguished Young Scholars of Hunan Province, China (Grant No. 2021JJ10044).

† Corresponding author. E-mail: li_yq@nudt.edu.cn



基于动力学平均场的光晶格超冷原子量子模拟

谭辉 曹睿 李永强

Quantum simulation of ultracold atoms in optical lattice based on dynamical mean-field theory

Tan Hui Cao Rui Li Yong-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 183701 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230701

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

光腔中两组分玻色-爱因斯坦凝聚体的受激辐射特性和量子相变

Stimulated radiation characteristics and quantum phase transition for two-component Bose-Einstein condensate in optical cavity

物理学报. 2018, 67(18): 183701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180971>

Jaynes-Cummings晶格模型和Rabi晶格模型的量子相变

The quantum phase transition in the Jaynes-Cummings lattice model and the Rabi lattice model

物理学报. 2021, 70(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202066>

双轨道Hubbard模型的动力学平均场理论研究

Dynamical mean-field theory of two-orbital Hubbard model

物理学报. 2022, 71(14): 147103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220286>

各向异性ruby晶格中费米子体系的Mott相变

Mott transition of fermions in anisotropic ruby lattice

物理学报. 2021, 70(23): 230305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210963>

一维扩展量子罗盘模型的拓扑序和量子相变

Topological orders and quantum phase transitions in a one-dimensional extended quantum compass model

物理学报. 2018, 67(19): 190301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180855>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

国防科技大学建校 70 周年专题

中国空间站冷原子光钟激光系统*

刘云¹⁾²⁾ 王文海¹⁾²⁾ 贺德晶¹⁾²⁾ 周勇壮¹⁾²⁾ 沈咏¹⁾²⁾ 邹宏新^{1)2)†}

1) (国防科技大学理学院, 量子信息研究所, 长沙 410073)

2) (量子信息机理与技术湖南省重点实验室, 长沙 410073)

(2023 年 3 月 18 日收到; 2023 年 4 月 26 日收到修改稿)

中国研制的世界首台空间冷原子光钟于 2022 年 10 月 31 日随“梦天”实验舱成功发射, 进入中国空间站. 紧凑稳定的激光系统是实现光钟空间应用的关键环节. 本课题组提出类同步调谐方案, 研制了高性能外腔半导体激光器, 能同时满足空间光钟对激光器调谐范围、线宽和力学热学稳定性的要求. 采用注入锁定和锥形放大器进行激光功率放大, 满足了空间光钟对激光功率的要求. 本文简要介绍了空间冷原子光钟的系统构成、激光器方案和电控系统, 并对光钟激光系统面临的问题和发展方向进行了总结和展望.

关键词: 冷原子光钟, 中国空间站, 激光系统, 控制系统**PACS:** 42.55.Px, 07.60.-j**DOI:** 10.7498/aps.72.20230412

1 引言

原子钟以原子量子化的能级作为基准, 具有远超传统计时工具的精度, 目前已在现代守时系统和卫星导航系统中得到广泛应用^[1]. 在太空实现高精度原子钟的稳定运行, 将有助于与地面钟组建立频率比对链路, 构建更高精度时频体系^[2]. 在航天器上搭载原子钟可以为深空探测提供高精度导航定位^[3]. 对太空中不同引力势场处的原子钟进行频率比对可以实现对广义相对论的高精度验证^[4].

目前在太空中运转的较为成熟的原子钟均是基于热原子, 受多普勒频移和碰撞频移等因素影响, 无法充分发挥原子钟的精度优势. 为了进一步提升精度, 2016 年中国科学院上海光学精密机械研究所研制了世界首台在轨运行的激光冷却原子钟^[5]. 2019 年美国宇航局 (National Aeronautics and Space Administration, NASA) 喷气推进实验室研

制了基于囚禁离子的深空原子钟^[6]. 这些钟虽然相比传统热原子钟准确度和稳定度都大幅提高, 但其钟跃迁频率只在微波频段, 进一步提升的空间有限. 光钟的钟跃迁频率相比微波钟高 4—5 个数量级, 在准确度和稳定度方面都具有显著优势, 因此受到广泛关注. 2006 年, 欧洲航天局 (European Space Agency, ESA) 开启了“空间光频原子钟” (SOC) 项目, 目前已实现了锶 (Sr) 原子和镱 (Yb) 原子可移动光晶格钟的演示验证^[7,8]. 俄罗斯航天局 (Russian Federal Space Agency) 也计划进行空间光钟测试, 目前已完成可移动 Yb 离子光钟原型机^[9]. 2021 年, 日本理化学研究所 (RIKEN) 研制了高精度可搬运 Sr 原子光钟, 有望进一步开展空间应用研究^[10]. 中国科学院国家授时中心于 2016 年开始空间光钟研究, 并于 2018 年完成了小型化 Sr 原子光钟物理系统的研制^[11].

激光器是光钟系统的核心部件. 空间光钟必须能够抵抗火箭发射过程中的巨大振动, 同时质量、尺寸、能耗等还受到严苛限制. 这就要求其激光系

* 国家自然科学基金 (批准号: 62105368, 62275268) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hxzou@nudt.edu.cn

统也具有极佳的紧凑性、能效比和稳定性. 目前的商用激光器可以满足地面指标要求, 但无法空间使用. 激光器在航天领域的应用始自 NASA 的一系列空间科学试验计划, 自 2001 年, MOLA, GLAS, CALIPSO, MLA, LOLA 等高精度科学测量装置进入太空进行相关物理参数测量, 但这些项目里采用的都是调 Q 脉冲 Nd:YAG 激光器^[12]. 2012 年, 为了探测大气层 CO₂ 和 O₂ 含量和分布情况, 研究气候变暖问题, 发射了基于分布反馈式 (distributed feed back, DFB) 激光器和光纤放大的连续激光器, 证明光纤激光器可以应用于航天系统^[13]. 2015 年, 法国空间研究中心 (National Centre for Space Studies) 和巴黎天文台 (Paris Observatory) 等单位联合发表了一篇关于 PHARAO 计划激光器的设计方案^[14]. 这个计划是为了将冷原子钟送到国际空间站, 整个光路系统围绕 Cs 原子所需要的 852 nm 波长, 将多台外腔半导体激光器 (external cavity diode lasers, ECDL) 利用光学锁相环连到一起, 其 ECDL 采用猫眼结构. 2016 年, 德国光梳生产厂家 Menlo-System 联合多家德国单位将飞秒光梳送上了太空^[15], 用于将来基于卫星的精密计量. 系统将飞秒光梳锁在 Cs 原子钟上, 然后对 Rb 原子饱和吸收稳频的 780 nm 激光器进行频率精确测量. 这里的 780 nm 激光器是采用集成化的 DFB 激光器来实现的, 他们将激光管、隔离器、光纤准直器和射频调制电路集成到了一起. 2017 年, 柏林洪堡大学 (Humboldt University of Berlin) 等单位合作实现了 K³⁹ 所需 766.7 nm 外腔反馈半导体激光器, 并将两台激光器进行拍频锁定, 完成了太空验证实验^[16]. 激光器与前面所介绍的激光器完全不一样, 其直接将激光芯片集成到系统中, 芯片两边镀膜, 一边通过体全息布拉格光栅 (volume holographic Bragg grating, VHBG) 反射回来形成反馈, 然后主激光从另外一边射出, 并通过集成的透镜、隔离器和准直器耦合到光纤中输出. 对于 Sr 原子光钟, 所需要的波长种类较多, 目前都没有成熟 DFB 或分布式布拉格反射器 (distributed Bragg reflector, DBR) 光源, 且不在光纤增益波长范围之类, 因此只能采用非线性频率变换的方式产生, 导致体积和功耗等指标无法满足空间站要求. 2019 年, 德国联邦物理技术研究院 (Physikalisch Technische Bundesanstalt) 研制了一种基于电光调制器 (electro-optic modulator, EOM) 调制的紧凑型 ECDL^[17],

可以同时产生二级冷却光和搅拌光, 但该方案并未进行振动测试. 同年, 意大利比萨大学 (University of Pisa) 针对紧凑型 Sr 原子光钟研制了一种基于 Pr:GLF 晶体的半导体泵浦固体激光器^[18], 但同样未进行振动测试. 本次梦天舱中搭载的光钟系统所采用的超稳激光采用的是基于干涉滤光片的 ECDL^[19]. 该方案结构稳定, 抗振性能强, 但自由运行时线宽较宽, 且连续调谐范围小, 因此并不适用于其他波长的激光器. 本文介绍一种采用类同步调谐方案的 ECDL, 可以在保证调谐范围的同时获得较窄的线宽, 以及良好的力学稳定性和热学稳定性, 能够满足空间光钟的需要.

2 空间 Sr 原子光钟系统构成

中国空间站 Sr 原子光钟的系统构成如图 1 所示. 整套光钟共由 5 个单元构成, 包括: 光学单元、物理单元、电控单元、空间光梳系统和窄线宽激光器. 其中物理单元主要由放置 Sr 原子样品的真空系统和波长计构成. 真空系统中的 Sr 原子炉加热到 400 °C 后经过差分管和塞曼减速线圈, 进入主真空腔体后被磁光阱 (MOT) 陷俘. 物理单元中的波长计主要用于对系统的 6 路激光进行波长测量, 并将测量结果通过网口传输给电控单元. 物理单元中还有电荷耦合器件 (CCD) 相机和光电倍增管 (PMT) 探测器, 其结果同样传输给电控单元. 电控单元是整个系统的中央控制单元, 其不仅负责与其他各个单机进行通信和协调工作, 同时包含了对激光器、声光调制器 (AOM)、磁场线圈和光开关等的驱动, 以及时序控制.

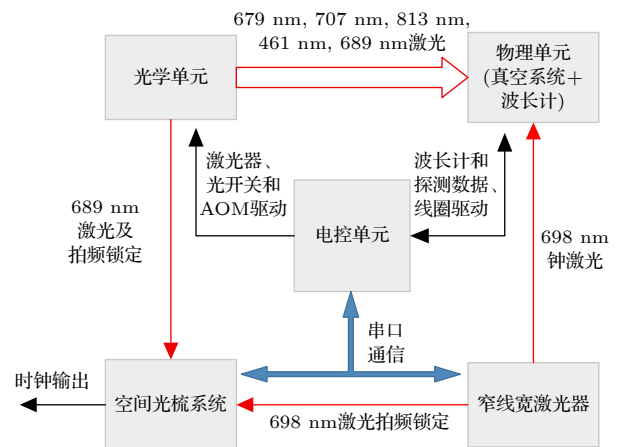


图 1 Sr 原子空间光钟系统方框图

Fig. 1. Schematic of Sr atom space optical clock system.

激光器是光钟里的核心部件, 对于空间光钟而言, 激光器能否满足航天要求是空间光钟能否成功发射的关键. Sr 原子相应的能级如图 2 所示. Sr 原子光钟系统需要 6 种不同输出波长的激光器, 其中波长 461 nm 激光用于 Sr 原子塞曼减速与多普勒冷却, 679 nm 激光用于多普勒冷却的重泵浦光, 707 nm 激光用于重泵浦光和暗态消除, 689 nm 窄线宽激光器用于 Sr 原子二级冷却和原子扰动, 698 nm 窄线宽激光器用于 Sr 原子的钟跃迁探测, 813 nm 激光用于光晶格的产生.

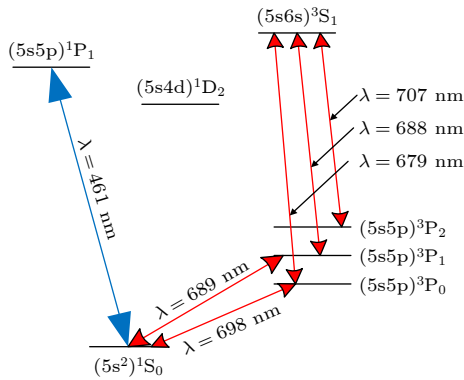


图 2 Sr 原子光钟系统所需 6 种不同波长激光
Fig. 2. Lasers at six wavelengths in Sr atom optical clock system.

光学单元总共包含了 679, 707, 813, 461, 689 nm 5 个波长的激光器和对应的集成光路. 所有激光通过光纤连接到物理单元, 进行原子的激光冷却和光晶格装载. 窄线宽激光器是一个独立的单元, 其将 698 nm 激光器锁定到 ULE 腔上, 并进行精密控温和隔振后, 一方面输送到物理单元进行 Sr 原子钟谱探测, 另一方面通过光纤输送到空间光梳单元作为光梳的光学参考基准. 空间光梳是经过加固和处理后的光纤光梳系统, 重复频率 200 MHz, 同时锁定到氢钟和窄线宽激光器上, 产生 100 MHz 的微波信号进行使用. 锁定后的空间光梳还作为 689 nm 的锁定参考源, 用于稳定和线宽压窄光学单元中的 689 nm 激光器. 窄线宽激光器和空间光梳分别通过串口与电控单元相连, 接收指令并上报单机状态, 最终配合光钟电控完成整套光钟的闭环运行.

光钟的 5 个单元都采用独立机箱安装, 所有单元之间采用光纤和电缆连接. 整个光钟由电控系统进行协调和控制分别实现原子的产生、减速、俘获、一级冷却、二级冷却、光晶格装载和钟谱探测

等功能, 同时电控系统还负责对各台激光器进行控制、频率稳定, 对超稳激光和光梳子系统输入的信号进行处理等功能. 最后光钟的时间信号从飞秒光梳输出, 进行传输和其他应用.

3 光钟激光器

受体积和功耗限制, 空间光钟系统所有激光器均选用半导体激光器. 激光器直接输出功率不足时则采用注入或半导体锥形放大 (tapered amplifier, TA) 的方式提升功率. 因此整个激光系统除 698 nm 钟激光器外, 包含了 5 台种子激光器、5 台注入激光器以及 1 台半导体 TA 放大器.

3.1 种子激光器

所有种子激光器均采用 Littman 结构光栅外腔反馈半导体激光器方案. 本文提出类同步调谐光栅 ECDL 方案, 用柔性铰链结构支架代替传统的悬臂梁结构支架, 能够模拟反射光栅或直角棱镜围绕虚拟轴点旋转, 并且大大缩短了旋臂长度^[20]. 该方案在保证激光器满足同步调谐条件, 获得宽泛无跳模调谐性能的同时, 使得激光器外形小巧、结构紧凑, 抗振性能得到有效提升, 可应用于航空航天、武器装备或其他环境恶劣的工业领域. 图 3 为 Littman 结构类同步调谐 ECDL 结构图, 包括输出窗口 5、激光二极管压环 6、激光二极管 7、激光二极管卡座 8、准直透镜卡座 9、准直透镜 10、反射光栅 11、三角棱镜 12、柔性铰链结构支架 13、压电陶瓷 14、压电陶瓷安装套 15 和高反镜 16. 另外, 1—4 项分别为激光器外底板、控制器接口和控温陶瓷, 未在图中体现出来, 可以参考发明专利^[21].

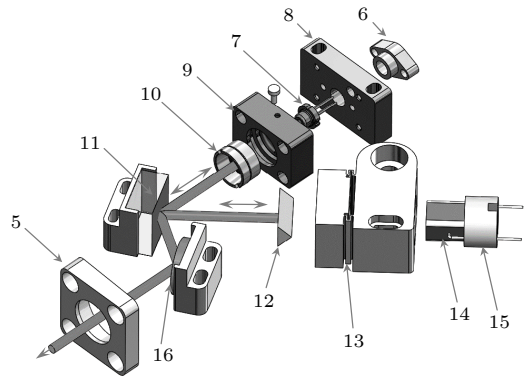


图 3 Littman 结构类同步调谐 ECDL 结构图
Fig. 3. Exploded view of Littman-configuration ECDL with synchronous-tuning-like scheme.

Littman 结构光栅 ECDL 的工作原理图如图 4 所示, 其中反射镜平面和光栅平面延长线的交点为最佳调谐旋转点 Q , 在激光管的输出耦合端面镀了增透膜的情况下, 想要获得连续不跳模调谐, 必须保持反射光栅与外腔的选模条件同步进动, 同时满足光栅方程与外腔驻波条件. 这里通过改变 PZT 支点的位置和调节两个柔性链的长度来满足类同步调谐条件, 最终达到最优的调谐效果.

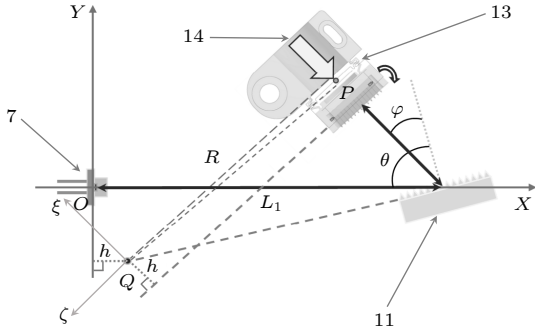


图 4 Littman 结构光栅 ECDL 的工作原理图 (P , 压电陶瓷作用点; θ , 光栅入射角; φ , 光栅一级衍射角; R , 理想旋转半径; L_2 , 实际旋转半径; h , 调谐点与 Y 轴的垂直距离; Q , 调谐支点)

Fig. 4. Functional schematic of Littman-configuration ECDL. (P , PZT action point; θ , grating incident angle; φ , first order diffraction angle of grating; R , ideal rotation radius; L_2 , actual rotation radius; h , the distance between the pivot point and the Y coordinate axis; Q , pivot point).

3D 机械结构装配图如图 5 所示. 其中图 5(a) 是整个种子激光器的安装爆炸图, 最左边的小镜架是窗口片和整形棱镜对; 图 5(b) 是主体部分安装完成后的结构图; 图 5(c) 是最终装配完成后的激光器效果图. 该激光器实际质量为 279 g 左右, 可以满足空间站的体积、质量和抗振性要求.

3.2 注入激光器

用于一级冷却的 461 nm 激光器需要功率在 600 mW 以上, 市面上只有倍频激光器可以满足这个要求. 但倍频激光器因其原理上的局限性, 无法同时满足低功耗、小体积和轻量化等约束条件, 不能用于空间站 Sr 原子光钟系统. 本系统采用种子激光器和注入激光器相结合的方式实现 461 nm 激光器的功率放大. 用于 Sr 原子二级冷却的 689 nm 激光同样存在功率不够的问题, 也是采用注入放大的方式来满足使用要求.

注入放大激光器原理很简单, 就是一个单管激光二极管结合精密控温来实现, 很多文献都有报道^[22], 这里不详细介绍其原理, 只简单介绍一下本文采用的注入激光器结构, 如图 6 所示. 图 6(a) 是注入激光器爆炸图, 激光二极管放入紫铜热沉中固定, 安装准直透镜将光束调成平行光, 然后通过整形棱镜对输出. 图 6(b) 和图 6(c) 则是装配完成的结构图.

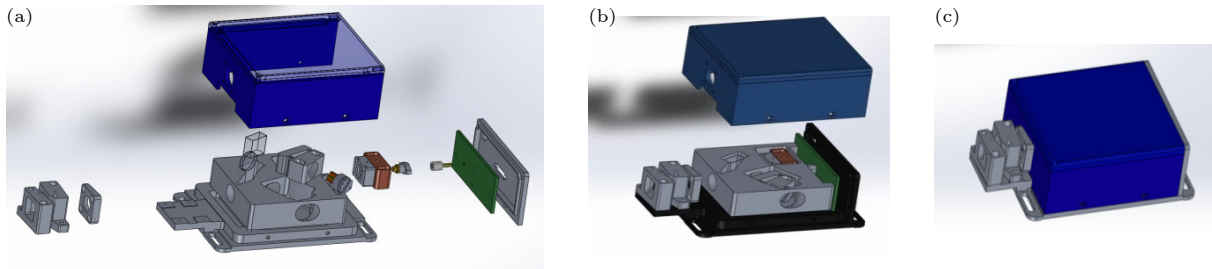


图 5 种子激光器结构装配图
Fig. 5. Assembly view of seed laser.

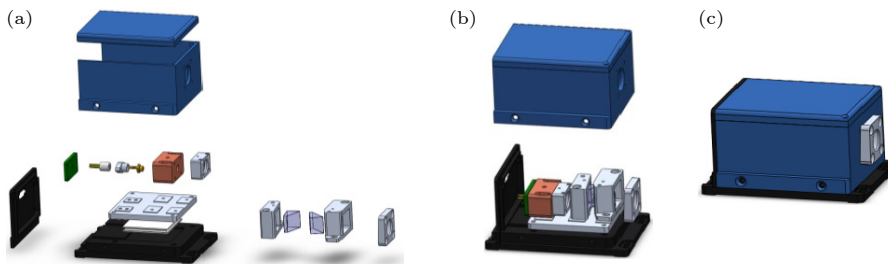


图 6 注入激光器结构装配图
Fig. 6. Assembly view of injection locked laser.

3.3 半导体 TA 放大器

Sr 原子光钟需要 813 nm 作为魔幻波长, 实现光晶格装载. 为了实现有效的原子装载, 满足钟跃迁谱的探测信噪比要求, 进入真空系统的 813 nm 激光功率需要达到 800 mW 以上, 考虑光路中的损耗和光纤耦合效率, 激光器出光功率应该在 2 W 以上. 采用种子激光结合半导体 TA 放大, 勉强可以满足使用要求. 图 7(a) 是 TA 放大激光器爆炸图, TA 芯片固定在紫铜热沉上, 两边分别用相同的非球面镜进行准直, 为了提升芯片的使用寿命, 采用密封设计, 避免灰尘和水汽进入腔体内. 图 7(b) 和图 7(c) 则是装配完成的结构图, 整个 TA 放大器结构非常紧凑, 并且包含了接口电路和连接器, 满足抗振和长寿命使用要求.

3.4 实物图和测试结果

所有激光器集成到 3 块光路面板中, 如图 8 所示. 左边的光路面板包含了 813 nm 种子、813 nm TA 放大器、689 nm 种子、679 nm 和 707 nm 激光器, 右边的两块光路面板分别包含了 2 台 689 nm

注入激光器和 3 台 461 nm 注入激光器. 特殊的铝合金基板材料和结构保证轻量化的同时有一定刚度, 加强筋和镂空处都经过精心的设计、仿真; 所有光学元件和镜架采用专门设计的小型化元件, 以满足空间站严格的体积和质量要求. 单块光学面板尺寸为 548 mm×380 mm×85 mm.

光钟激光系统所有种子激光器都是采用相同的结构, 性能相近. 针对其中的 689 nm 激光器自由运行时和拍频锁定后的频谱特性进行了测试, 如图 9 所示. 左图是激光器自由运行状态下的情况, 扫描带宽为 100 MHz, 激光线宽小于 1 MHz, 连续调谐范围根据波长不同有一定差别, 在无前馈的条件下通常为 3—5 GHz, 加入前馈后可达 20 GHz. 右图是通过拍频锁定, 将 689 nm 激光器锁定到一台商用超稳激光器后拍频得到的结果, 偏置频率选取 50 MHz, 扫描带宽 10 MHz, 锁定后拍频线宽小于 1 Hz. 经过实验验证, 所有激光器性能均满足空间 Sr 原子光钟的正常运行要求, 光钟在轨开机功耗测试正常.

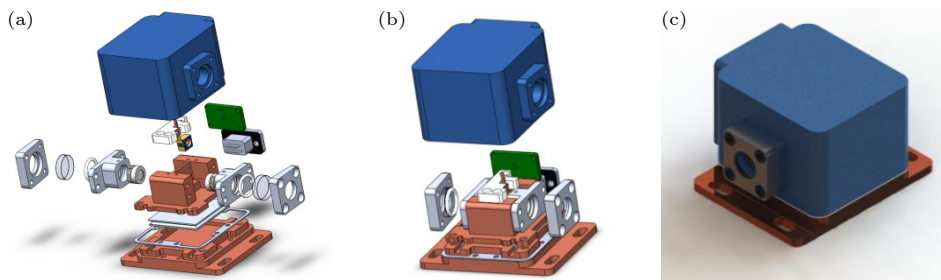


图 7 TA 放大器结构装配图
Fig. 7. Assembly view of tapered amplifier.

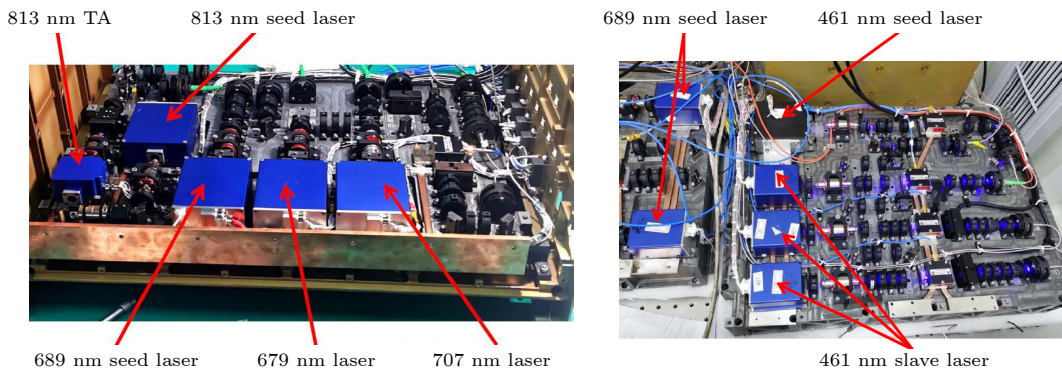


图 8 激光系统实物图
Fig. 8. Pictures of laser system.

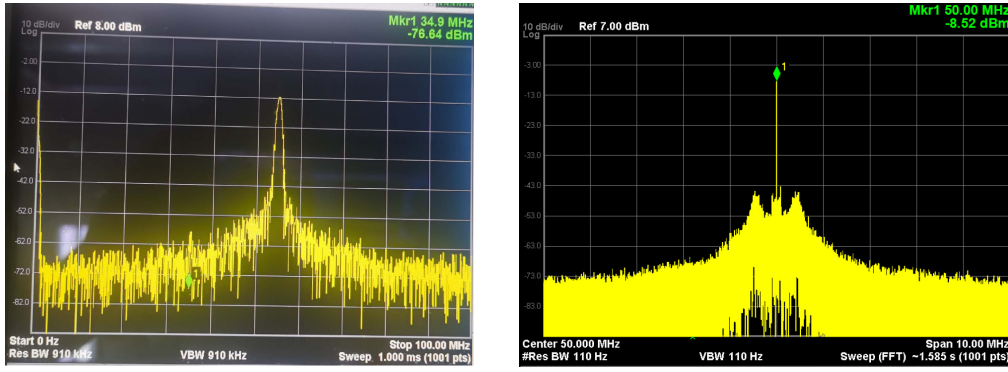


图 9 689 nm 激光器拍频锁定前后频谱图

Fig. 9. Beating signals of 689 nm lasers before (left) and after (right) frequency offset locking.

4 光钟激光控制系统

光钟激光控制系统与其他驱动和控制模块协调工作, 共同构成独立的光钟电控单元. Sr 原子光钟需要 6 个波长的激光器, 如何有效地驱动它们, 并让它们协调工作是一件复杂的事情. 其中 461 nm 激光用于原子的一级激光冷却, 679 nm 和 707 nm 用于匀化和回泵, 提升一级冷却效率. 689 nm 激光用于原子的二级激光冷却, 将原子温度降低到 30 μ K 以下, 然后用大功率 813 nm 激光进行光晶格装载, 最后用 698 nm 激光进行钟谱探测. 整套光钟的运行必须严格按照时序进行, 具体时序可参考文献 [23]. 光钟激光控制系统集成在光钟电控单元中, 是其重

要的组成部分. 光钟电控单元是整套的光钟的核心控制系统, 它由 4 个基于 FPGA 的控制板和一系列的驱动电路协调完成, 其结构如图 10 所示.

其中光钟主控是整个光钟电控单元的核心, 其主要功能包括: 1) 时序控制磁场线圈驱动、AOM 驱动的微波开关、液晶波片和机械光开关; 2) 采集各路电源电压、温度和 3 路磁场信号; 3) 与数据采集和声光控制系统进行串口通信, 发送运行状态获得谱数据; 4) 与两套激光器控制系统进行通信, 将激光器设置参数发送给激光控制器, 同时将激光器监视数据反馈给地面; 5) 与波长计和 CCD 相机进行通信, 获取二者的测量数据, 一方面反馈控制激光器参数, 另一方面将数据发送到地面; 6) 与空间光梳和窄线宽激光器进行通信, 获取它们的状态信息, 并协调工作, 完成测频、锁频和闭环等功能;

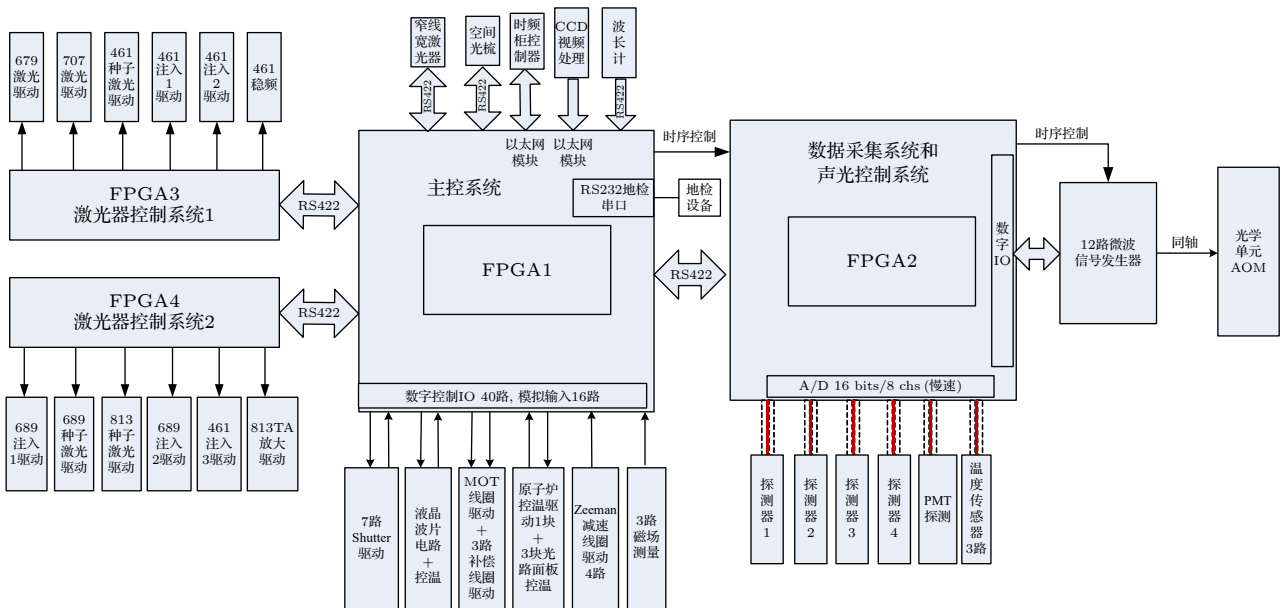


图 10 空间光钟电控系统方框图

Fig. 10. Schematic of electronic control unit of space optical clock.

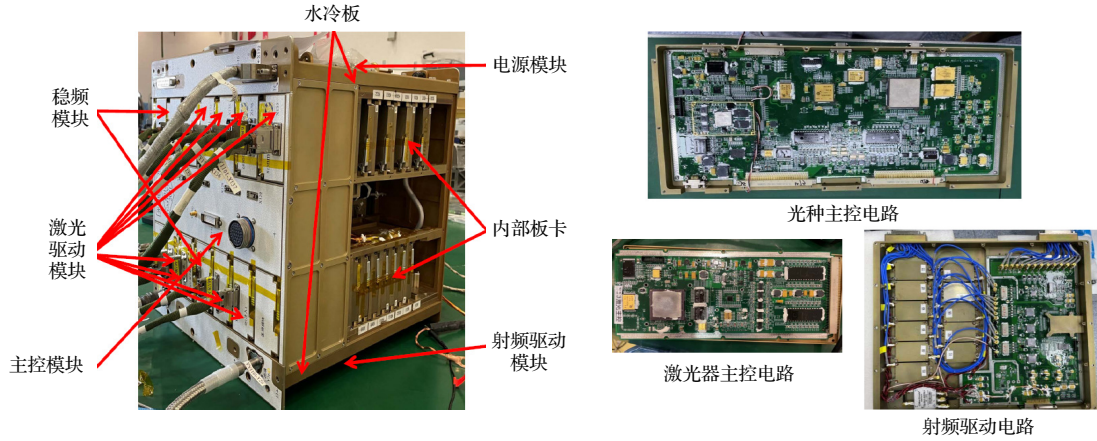


图 11 光钟电控单元(左)和主要控制电路(右)实物图

Fig. 11. Pictures of electronic control unit (left) and main control modules (right).

7) 与时频柜控制器通信, 获取地面指令, 同时将各个应用数据和工参数据进行下传; 8) 与地检设备或上位机按约定通信协议进行通信, 用于调试设备. FPGA1 控制整个光钟的工作模式和与时频柜的通信, 同时负责时序信号产生, 并通过硬件电路同步给其他 FPGA.

基于 FPGA2 的数据采集和声光控制系统, 主要完成对 12 路数字信号合成器 (DDS) 进行参数配置, 产生所需要的射频驱动信号. 产生的射频信号经过滤波和功率放大后, 由微波开关控制, 并通过同轴线缆输送到光学单元上的 AOM, 对激光信号进行移频、扫频和时序控制. 该系统还备有高速数据采集, 用于对扫谱产生的 PMT 数据进行采集和分析, 同时对真空系统的温度进行采集监视.

基于 FPGA3 和 FPGA4 的两套激光控制系统, 主要用于对 Sr 原子光钟所需要的 679, 707, 461, 689, 813 nm 五个波长的激光器进行参数设置和数据采集, 同时与光钟主控进行数据交互. 其中 461 nm 激光器包含种子激光和 3 台注入激光器, 用于增加功率, 满足 Sr 原子一级冷却需要. 689 nm 激光器包含种子激光和 2 台注入激光器, 用于增加功率满足 Sr 原子二级冷却需要. 813 nm 激光器由种子激光器和 TA 放大器两部分构成. 同时, 两套激光控制系统还需要控制 461 nm 稳频模块和 689 nm 拍频锁定模块, 实现两台激光器的波长锁定. 所有激光器调优都是基于软件自动完成, 相关算法在光钟主控中进行, 然后通过串口通信将所有激光器的参数值发送给激光主控, 并对激光驱动模块参数进行设置. 698 nm 钟激光器是一套独立的单机, 不受这里的控制系统控制.

空间光钟电控单元和主要控制电路实物如图 11 所示. 电控单元采用水冷进行散热, 两块水冷板分别放置在电控箱的顶端和底端, 所有单元模块通过结构与水冷板相连. 电控箱前面板包含了 11 台套激光器的驱动模块和稳频模块, 光钟主控单元放置在电控箱中部, 并通过前面板连接器引出信号. 发热量较大的电源模块和射频驱动模块分别与水冷板直接相连, 保持良好的散热特性. 其他内部板卡则放置在电控箱的两侧, 通过顶部和底部进行散热. 整个电控单元尺寸 465 mm×420 mm×410 mm, 总功耗小于 600 W, 且在不同工作模式下, 光钟软件会自动关闭不需要的能量供给. 图 11 右图是 3 块带 FPGA 配置项的控制电路实物图, 包含光钟主控、激光器主控和射频驱动模块. 其中, 两块激光器主控电路功能一致, 所以只放了 1 张图, 射频驱动电路实际上还包含了 DDS 信号产生电路和数据采集电路.

5 总结和展望

本文详细介绍了光钟里每种激光器的实现方案和结构设计, 结合电控系统共同构成了当前空间光钟的激光器系统; 所有模块均采用轨道可更换单元设计, 当某个模块出现故障时, 可由宇航员进行更换. 为了满足空间站时频柜的约束条件, 整套光钟按 5 个独立单元进行设计和装配. 这是目前首台进入太空的光钟, 成功实现了光钟的高度集成, 国产化率达到 80% 以上. 光钟系统里最敏感的就是激光器, 也是影响光钟可靠性最主要的因素. Sr 原子光钟所需要的激光波长主要集中在可见光波段,

受限于这个波段的半导体材料还不成熟, 激光二极管的寿命和功率都偏低, 只能采用注入放大的方式来满足使用需求, 这给系统带来了很大的不确定性, 而且严重限制了光钟的连续运行时间. 光钟要真正走向实际应用, 必须解决光源的问题, 针对光钟激光系统的发展方向, 作如下展望: 1) 从半导体材料和工艺入手, 解决激光二极管的功率和寿命问题; 2) 寻求有效的注入激光反馈控制机制, 确保其不失锁; 3) 采用光纤激光器结合频率变换技术代替半导体激光器方案, 但需要提升转换效率, 降低功耗, 满足更多场景的应用; 4) 发展微纳光学技术, 重点解决声光移频问题, 实现光学系统的高度集成. 中国空间站冷原子光钟是世界首台上天的光钟, 标志着中国在光钟工程化方面已经迈出了第一步, 相信不久的将来, 可以率先实现光钟的实际工程应用, 有效提升我国时频体系的精度, 服务于社会.

参考文献

- [1] Mallette L A, White J, Rochat P 2010 *IEEE/ION Position, Location and Navigation Symposium* Indian Wells, CA, USA, May 4–6, 2010 p11414524
- [2] Batori E, Almat N, Affolderbach C, Mileti G 2021 *Adv. Space Res.* **68** 4723
- [3] Thornton C L, Border J S 2003 *Radiometric Tracking Techniques for Deep-Space Navigation* (New York: Wiley-Interscience) pp28–31
- [4] Wolf P, Blanchet L 2016 *Classical Quantum Gravity* **33** 035012
- [5] Liu, L, Lyu D S, Chen W B, Li T, Qu Q Z, W B, Li L, Ren W Dong Z R, Zhao J B, Xia W B, Zhao X, Ji J W, Ye M F, Sun Y G, Yao Y Y, Song D, Liang Z G, Hu S J, Yu D H, Hou X, Shi W, Zang H G, Xiang J F, Peng X K, Wang Y Z 2018 *Nat. Commun.* **9** 2760
- [6] Burt E A, Prestage J D, Tjoelker R L, Enzer D G, Kuang D, Murphy D W, Robison D E, Seubert J M, Wang R T, Ely T A 2021 *Nature* **595** 43
- [7] Schiller S, Gorlitz A, Nevsky A, Alighanbari S, Vasilyev S, Abou-Jaoudeh C, Mura G, Franzen T, Sterr U, Falke S, Lisdat C, Rasel E, Kulosa A, Bize S, Lodewyck, Tino G M, Poli N, Schioppo M, Bongs K, Singh Y, Gill P, Barwood G, Ovchinnikov Y, Stuhler J, Kaenders W, Braxmaier C, Holzwarth R, Donati A, Lecomte S, Calonico D, Levi F 2012 *European Frequency and Time Forum, Gothenburg, Sweden, April 23–27, 2012*, p412
- [8] Bongs K, Singh, Smith L, He W, Kock O, Swierad D, Hughes J, Schiller S, Alighanbari S, Origlia S, Vogt S, Sterr O, Lisdat C, Le Targat R, Lodewyck J, Holleville D, Venon B, Bize S, Barwood G P, Gill P, Hill I R, Ovchinnikov Y B, Poli N, Tino G M, Stuhler J, Kaenders W 2015 *C. R. Phys.* **16** 553
- [9] Khabarova K, Kryuchkov D, Borisenko A, Zalivako I, Semerikov I, Aksenov M, Sherstov I, Abbasov T, Tausenev A, Kolachevsky N 2022 *Symmetry* **14** 2213
- [10] Ohmae N, Takamoto M, Takahashi Y, Kokubun M, Araki K, Hinton A, Ushijima I, Muramatsu T, Furumiya T, Sakai Y, Moriya N, Kamiya N, Fujii K, Muramatsu R, Shiimado T, Katori H 2021 *Adv. Quantum Technol.* **4** 2100015
- [11] Zhao F J, Gao F, Han J X, Zhou C H, Meng J W, Wang Y B, Guo Y, Zhang S G, Chang H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 050601 (in Chinese) [赵芳婧, 高峰, 韩建新, 周驰华, 孟俊伟, 王叶兵, 郭阳, 张首刚, 常宏 2018 *物理学报* **67** 050601]
- [12] Krebs D J, Novo-Gradac A M, Li S X, Lindauer S J, Afzal R S, Yu A W 2005 *Appl. Opt.* **44** 1715
- [13] Yu A W, Krainak M A, Stephen M A, Chen J R, Coyle B, Numata K, Camp J B, Abshire J B, Allan G R, Li S X, Riris H 2012 *Fiber Lasers IX: Technology, Systems, and Applications*, San Francisco, California, United States, February 15, 2012 p823713
- [14] Lévêque T, Faure B, Esnault F, Delaroche C, Massonnet D, Grosjean O, Buffe F, Torresi P, Bomer T, Pichon A, Béraud P, Lelay J, Thomin S, Laurent P 2015 *Rev. Sci. Instrum.* **86** 033104
- [15] Lezius M, Wilken T, Deutsch C, Giunta M, Mandel O, Thaller A, Schkolnik V, Schiemangk M, Dinkelaker A, Kohfeldt A, Wicht A, Krutzik M, Peters A, Hellmig O, Duncker H, Sengstock K, Windpassinger P, Lampmann K, Hülsing T, Hänsch T, Holzwarth R 2016 *Optica* **3** 1381
- [16] Dinkelaker A N, Schiemangk M, Schkolnik V, Kenyon A, Lampmann K, Wenzlawski A, Windpassinger P, Hellmig O, Wendrich T, Rasel E M, Giunta M, Deutsch C, Kürbis C, Smol R, Wicht A, Krutzik M, Peters A 2017 *Appl. Opt.* **56** 1388
- [17] Schwarz R, Dorscher S, Al-Masoudi A, Vogt S, Li Y, Lisdat C 2019 *Rev. Sci. Instrum.* **90** 023109
- [18] Sottile A, Damiano E, Di Lieto A, Tonelli M 2019 *Opt. Lett.* **44** 594
- [19] Meng L Q, Zhao P Y, Meng F C, Long Chen, Xie Y, Wang Y K, Bian W, Jia J J, Liu T, Zhang S G, Wang J Y 2022 *Chin. Opt. Lett.* **20** 021407
- [20] Zou H X, Wang W H, Zhan Z H 2021 CN Patent ZL 202110005798.9 [2021-01-05] (in Chinese) [邹宏新, 王文海, 詹子豪 2021 国专利 ZL 202110005798.9 [2021-01-05]]
- [21] Zou H X, Zhan Z H, Wang W H 2021 CN Patent ZL 202110005871.9 [2021-01-05] (in Chinese) [邹宏新, 詹子豪, 王文海 2021 中国专利 ZL 202110005871.2 [2021-01-05]]
- [22] Shaffer M K, Ranjit G, Sukenik C I 2008 *Rev. Sci. Instrum.* **79** 046102
- [23] Guo F, Tan W, Zhou C H, Xia J, Chen Y X, Liang T, Liu Q, Liu Y, He D J, Zhou Y Z, Wang W H, Shen Y, Zou H X, Chang H 2021 *AIP Adv.* **11** 125116

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Laser system of cold atom optical clock in China Space Station*

Liu Yun¹⁾²⁾ Wang Wen-Hai¹⁾²⁾ He De-Jing¹⁾²⁾ Zhou Yong-Zhuang¹⁾²⁾
Shen Yong¹⁾²⁾ Zou Hong-Xin^{1)2)†}

1) (*Institute for Quantum Science and Technology, College of Science, National University of
Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Hunan Key Laboratory of Mechanism and Technology of Quantum Information, Changsha 410073, China*)

(Received 18 March 2023; revised manuscript received 26 April 2023)

Abstract

The world's first space optical clock (SOC) developed in China, which is composed of five subsystems, i.e. an optical unit, a physics unit, an electronic control unit, a space optical frequency comb, and an ultrastable laser, was successfully launched with the Mengtian space laboratory on October 31, 2022, and entered into the China Space Station (CSS). Compact and stable laser is a key element for the operation of the SOC. The optical unit consists of 5 lasers with wavelengths of 461, 679, 689, 707 and 813 nm, respectively. With a synchronous-tuning-like scheme, high-quality external cavity diode lasers (ECDLs) are developed as the seeds. The linewidths of the lasers are all reduced to approximately 100 kHz, and their tuning ranges, free from mode hopping, are capable of reaching 20 GHz, satisfying the requirements for the SOC. With careful mechanical and thermal design, the stability of the laser against vibration and temperature fluctuation is sufficiently promoted to confront the challenge of rocket launching. While the power from the ECDL is sufficient for 679-nm repump laser and 707-nm repump laser, additional injection lock is utilized for the 461-nm laser and 689-nm laser to amplify the power of the seeds to more than 600 mW, so that effective first and second stage Doppler cooling can be achieved. To generate an optical lattice with deep enough potential well, over 800-mW 813-nm lasers are required. Therefore, a semiconductor tapered amplifier is adopted to amplify the seed to more than 2 W, so as to cope with various losses of the coupling optics. The wavelengths and output power values of the 5 lasers are monitored and feedback is controlled by the electronic control unit. All the modules are designed and prepared as orbital replaceable units, which can be easily replaced by astronauts in case failure occurs. Now the lasers are all turned on and operate normally in CSS. More data of the SOC will be obtained in the near future. At present stage, according to our evaluation, the continuous operation time of the SOC is limited by the injection locked lasers, which are relatively vulnerable to mode hopping. Hopefully, this problem can be solved by improving the laser diode preparing technology, or developing fiber lasers with compact frequency conversion modules.

Keywords: cold atom optical clock, China Space Station, laser system, control system

PACS: 42.55.Px, 07.60.-j

DOI: [10.7498/aps.72.20230412](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230412)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62105368, 62275268).

† Corresponding author. E-mail: hxzou@nudt.edu.cn



中国空间站冷原子光钟激光系统

刘云 王文海 贺德晶 周勇壮 沈咏 邹宏新

Laser system of cold atom optical clock in China Space Station

Liu Yun Wang Wen-Hai He De-Jing Zhou Yong-Zhuang Shen Yong Zou Hong-Xin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 184202 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230412

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230412>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

超高精度空间站共视时间比对新方法

Super-high accurate new method of common-view time comparison based on space station

物理学报. 2018, 67(19): 190601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180842>

小型化铯光钟物理系统的研制

Miniaturization of physics system in Sr optical clock

物理学报. 2018, 67(5): 050601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172584>

锶原子光晶格钟

Strontium optical lattice clock

物理学报. 2018, 67(16): 160604 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181097>

绝热跃迁方法测量铯喷泉钟冷原子碰撞频移

Investigation of cold atom collision frequency shift measured by rapid adiabatic passage in cesium fountain clock

物理学报. 2020, 69(14): 140601 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191800>

光梳主动滤波放大实现锶原子光钟二级冷却光源

Optical frequency comb active filtering and amplification for second cooling laser of strontium optical clock

物理学报. 2018, 67(8): 080601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172733>

锶原子光晶格钟自旋极化谱线的探测

Interrogation of spin polarized clock transition in strontium optical lattice clock

物理学报. 2018, 67(7): 070601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172759>

国防科技大学建校 70 周年专题

片上光互连器件的智能化设计研究进展*

杜特¹⁾ 马汉斯¹⁾²⁾ 姜鑫鹏¹⁾ 赵芬¹⁾³⁾ 张兆健¹⁾ 王志成¹⁾⁴⁾
彭政¹⁾⁴⁾ 张伊祎¹⁾⁵⁾ 张煜青¹⁾⁴⁾ 罗鸣宇¹⁾⁵⁾ 邹宏新¹⁾ 吴加贵⁴⁾
闫培光⁶⁾ 朱刚毅⁷⁾ 于洋¹⁾ 何新¹⁾ 陈欢¹⁾ 张振福¹⁾ 杨俊波^{1)†}

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学计算机学院, 长沙 410073)

3) (重庆理工大学两江人工智能学院, 重庆 400054)

4) (西南大学人工智能学院, 重庆 400715)

5) (广西大学计算机与电子信息学院, 南宁 530004)

6) (深圳大学物理与光电工程学院, 深圳 518060)

7) (南京邮电大学通信与信息工程学院, 南京 210023)

(2023 年 4 月 30 日收到; 2023 年 8 月 1 日收到修改稿)

光互连技术相比于电互连等传统通信技术具有带宽大、能耗低、抗干扰等系列优势,正在逐渐成为短距离、甚短距离数据终端间通信的重要手段和发展趋势. 基于绝缘体上硅的片上光互连技术作为光互连在芯片尺度上的实现,在一系列复用技术的支持下得到了非常广泛的应用. 智能设计方法具有原理直观、设计自由度高、材料兼容性好等优点. 随着智能设计方法在片上光互连器件设计活动中的广泛应用,目前片上光互连器件逐渐呈现出超紧凑化、可调控化、系统集成化等重要发展趋势. 本文首先归纳了几种目前最常用的片上光互连器件的智能设计方法,然后详细分析了智能化设计的片上光互连器件的几个重大研究进展与趋势,最后对未来智能化设计的片上光互连器件的发展进行了展望.

关键词: 片上光互连器件, 智能设计方法, 相变材料, 光子集成回路**PACS:** 42.82.Ds, 42.79.Ta, 42.30.-d, 42.82.Bq**DOI:** 10.7498/aps.72.20230705

1 引言

随着移动互联网产业和大数据产业的蓬勃发展,各种规模的数据终端之间的通信速率和通信容量面临着更高的要求 and 更大的挑战. 光通信和光互连技术被认为是解决这一问题的根本途径^[1]. 相比于以铜线为传输媒介的电互连,光互连

凭借其带宽大、速率高、成本低、能耗低、抗电磁干扰等优势,成为了短距离数据中心之间、甚短距离计算机之间甚至集成电路之间数据通信的最佳解决方案^[1-3]. 特别是近些年来,基于绝缘体上硅 (silicon on insulator, SOI) 的片上光互连技术在波分复用 (wavelength division multiplexing, WDM) 技术、偏振复用 (polarization division multiplexing, PDM) 技术、光时分复用 (optical time division

* 国家自然科学基金 (批准号: 60907003, 61805278, 12272407, 62275269, 62275271)、国家重点研发计划 (批准号: 2022YFF0706005)、中国博士后科学基金 (批准号: 2018M633704)、国防科技大学科研计划 (批准号: JC13-02-13, ZK17-03-01)、湖南省自然科学基金 (批准号: 13JJ3001) 和新世纪高校优秀人才计划 (批准号: NCET-12-0142) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yangjunbo@nudt.edu.cn

multiplexing, OTDM) 技术和空分复用 (space division multiplexing, SDM) 技术等多种复用技术的支持下得到了非常广泛的应用^[4-15]. 这些技术使得片上光互连技术能够进一步提升传输容量、加快处理速度、降低成本以及削减能耗^[1,16-19].

一段时间以来, 有大量的基于耦合模 (coupled-mode) 理论、多模干涉 (multi-mode interference) 理论、传输线 (transmission line) 理论等传统设计方法的片上光互连器件问世^[20-26]. 这些器件为短距离至甚短距离数据终端之间信息的传输提供了重要的硬件基础, 也极大地拓展了光互连的应用场景. 但与此同时, 这些传统设计方法在设计器件时往往会面临设计思路不直接、人力成本高的问题, 设计出的器件很多也会面临紧凑度和集成度不足、功能单一等限制^[27-31].

近年来, 智能化设计在整个光子器件设计领域呈现出蓬勃的发展趋势^[32-36]. 利用智能设计方法, 人们设计出了大量的外形、结构和功能都很新颖的光子器件^[37-43]. 智能设计方法一般是指利用各种人工智能技术来解决复杂设计问题的方法, 它们通过模仿一些自然规律或者基于一些数学原理来寻找或接近目标, 可主动寻找规律, 自动学习和优化^[44]. 在许多情况下, 智能设计方法都是解决各种具有挑战性的工程问题的实用技术^[44]. 相比于传统的光子器件设计方法, 智能设计方法的原理简单、操作方便, 且优化过程不需要大量复杂的理论推导以及对物理过程细节的探究, 因此能够让研究者更加专注于器件的设计活动本身. 另外, 与传统设计方法相比, 智能设计方法的设计自由度更高, 更有利于设计多功能器件, 也更容易在较小的区域内得到符合设计要求的器件结构^[45-49]. 与传统设计结果相比, 智能化设计的光子器件在紧凑度和功能丰富度方面有了大幅的提升^[50-52]. 与此同时, 智能设计方法往往能够兼容各种光学材料, 从而设计出基于各种材料的器件结构. 这一特点使得智能设计方法的应用范围得到了极大的拓宽, 也使得研究者在设计基于各种材料的器件时无需单独探究每种材料的特性, 从而能够更加专注于器件功能、尺寸等方面的优化^[53-56]. 基于以上优势, 智能化设计大幅解决了传统方法在设计器件时所面临的多个问题和挑战, 使得包含片上光互连器件在内的大量光子器件得到了进一步的优化.

随着智能设计方法在片上光互连器件设计活

动中的广泛应用, 目前片上光互连器件已经取得了超紧凑化、可调控化、系统集成化等可喜的进展, 也在这些方面呈现出了更进一步发展的趋势. 本文对目前常用的片上光互连器件的智能设计方法进行介绍, 并详细分析智能化设计的片上光互连器件的这几个重要研究进展与趋势.

本文共包含 6 节. 第 1 节是文章的引言, 整体介绍了片上光互连技术的优势和发展现状、智能设计方法的优点和解决力以及本文的整体思路. 第 2 节介绍、归纳、分析了常用的光子器件的智能设计方法, 主要包括几种基于经典智能算法的智能设计方法和基于神经网络的智能设计方法. 第 3 节从不同的角度介绍了智能设计方法在设计片上光互连器件时的显著优势, 即大幅提升所设计器件的紧凑度, 为包含片上光互连系统在内的片上光子回路的大规模集成提供了重要的基础条件. 第 4 节介绍了“相变材料”这一新兴材料的独特优势, 以及基于智能设计方法对材料的广泛适应性而设计的片上可调控光互连器件. 第 5 节介绍了几种基于智能设计方法的推动片上光互连器件系统集成化的方式. 第 6 节对目前智能化设计的片上光互连器件的研究进展进行了总结, 并对相关领域未来发展的趋势做出了展望.

2 光子器件的智能设计方法

随着光子学研究的发展与光子器件的大规模应用, 光互连、光计算、光子神经网络、超透镜、超表面等新兴应用所展示出的独特优势让人们对各种结构、功能的光子器件产生了前所未有的兴趣^[57-68]. 近年来, 智能设计方法在光子器件设计领域呈现出了蓬勃的发展趋势. 利用智能设计方法, 设计出了大量具有新颖的外形、结构和功能的光子器件.

本节介绍、归纳、分析了几种应用广泛的光子器件的智能设计方法, 并从几个角度分析了它们在光子器件设计领域的优势. 本节所归纳的智能设计方法主要可以分为基于经典智能算法的智能设计方法和基于神经网络的智能设计方法两大类, 它们是目前光子器件智能化设计领域最活跃的方向, 也代表了光子器件智能化设计的发展趋势. 这些方法的提出与应用, 给包含片上光互连器件在内的大量光子器件提供了丰富的设计工具, 也创造出了一大批功能新颖、性能优良的新型光子器件.

2.1 现有的代表性光子器件智能设计方法

随着计算机性能的不断提高,充分利用计算机强大的计算能力帮助人类解决各种科学技术问题一直是人们追求的目标.基于这个目标,各种各样的智能设计方法如雨后春笋般在光子器件设计领域不断涌现.本节选取了几种最为常用的智能设计方法,包括几种基于经典智能算法的智能设计方法和基于神经网络的智能设计方法.在它们的辅助下,人们设计出了大量种类繁多、功能齐全的光子器件.可以预见的是,这些智能设计方法将继续为包含片上光互连器件在内的光子器件的设计提供充足的动力.为了更加充分地展示智能设计方法的优势,如卓越的设计能力和广泛的适用性,本小节中列举的一些智能化设计成果不局限于片上光互连器件.

2.1.1 基于经典智能算法的智能设计方法

下面介绍基于遗传算法、粒子群优化算法、直接二进制搜索算法、伴随法等经典智能算法的智能设计方法及它们在光子器件设计领域的广泛应用.这些智能设计方法的主体部分为算法优化,研究者通过选择合适的优化内容与优化目标,以及设置与调整算法的初始参量等操作,使得算法能够找到满

足优化目标的结果(一般为器件结构).

1975年,美国的J. Holland教授提出了遗传算法(genetic algorithm, GA)的概念^[69].该算法借鉴了进化学说中优胜劣汰的思想,通过个体基因的不断迭代获得最优解.算法的一个典型的流程图如图1(a)所示.作为一种启发式算法,GA拥有很好的全局搜索能力,不易陷入局部最优,因此在片上光互连器件的设计中备受关注^[70–72].例如,2009年,Sanchis等^[70]设计了模式可扩展的交叉波导,在传统交叉结构的基础上对交叉区域的波导进行分段,通过GA优化每段波导的宽度,以得到最大的传输效率,减小因波导交叉造成的损耗.该模式可扩展交叉波导的结构如图1(b)所示^[70].又如,2017年,Yu等^[71]提出的基于多模干涉耦合器(multi-mode interference, MMI)结构的超紧凑偏振旋转器,先将设计区域划分为多个同等大小的像素点,再利用GA对结构所要刻蚀的像素点位置数量进行优化,实现了1440–1580 nm波长范围内 TE_{00} 到 TM_{00} 的偏振旋转,如图1(c)所示.2019年,Liu等^[72]也利用GA设计了一种波长路由器,尺寸仅有 $1.4\ \mu\text{m}\times 1.8\ \mu\text{m}$.与上文提到的偏振旋转器不同,器件在初始化时没有采用划分均匀像素点的方式,而是在设计区域使用多种不同规则排列

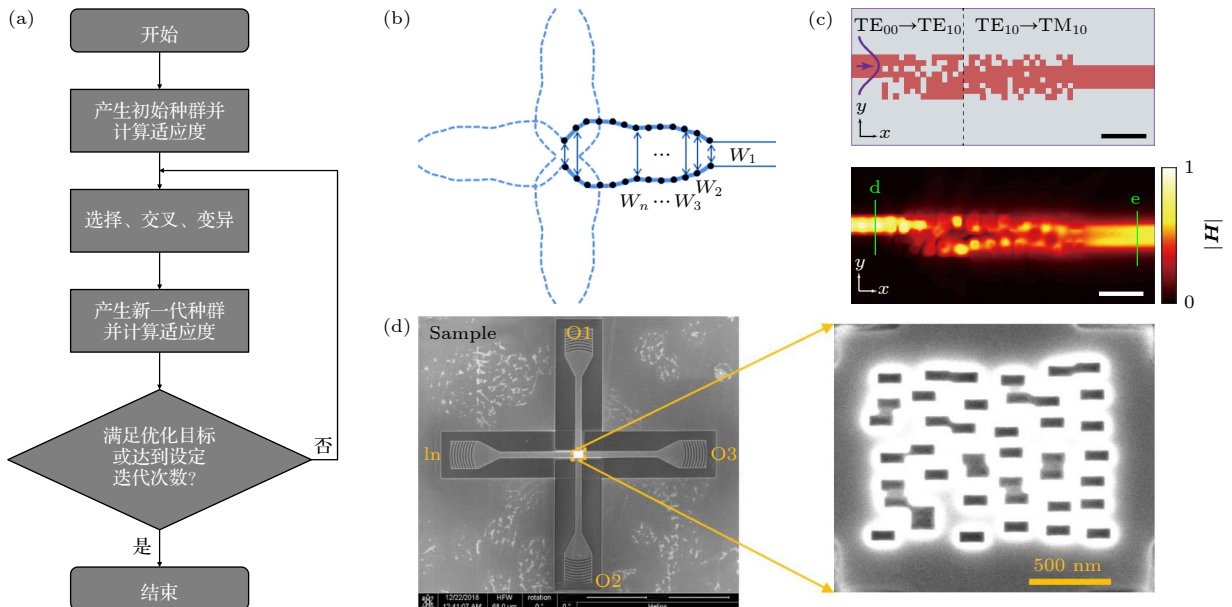


图1 典型的GA流程图及GA在片上光子器件设计领域的应用 (a) 一个典型的GA流程图; (b) 利用GA设计的模式可扩展的交叉波导^[70]; (c) 利用GA设计的超紧凑偏振旋转器^[71]; (d) 利用GA设计的波长路由器^[72]

Fig. 1. Typical flowchart of GA and its application in on-chip photonic devices design: (a) A typical GA flowchart; (b) mode-extensible crossing waveguide designed by GA^[70]; (c) ultra-compact polarization rotator designed by GA^[71]; (d) wavelength router designed by GA^[72].

的单元模型, 通过 GA 优化模型位置调节光的传输. 图 1(d) 给出了该波长路由器的扫描电子显微镜 (scanning electron microscopy, SEM) 成像图 [72].

粒子群优化 (particle swarm optimization, PSO) 算法是一种基于群体智能的优化算法, 其基本思想是模拟鸟群、鱼群等群体动物的生存行为, 通过不断调整粒子的速度和位置, 优化目标函数, 找到最优解. PSO 算法由 Kennedy 和 Eberhart [73] 于 1995 年提出, 其基本优化原理如图 2(a) 所示. PSO 算法原理简单易懂, 容易实现, 因此在光子器件的设计过程中得到了广泛的应用 [74–76]. 例如, 2020 年, Chen 等 [74] 利用 PSO 算法优化了反锥形耦合器结构, 设计出一种片上偏振分束器, 其结构如图 2(b) 所示. 该片上偏振分束器能够在 5 μm 的长度内实现 TE_0 模式和 TM_0 模式的分束. 2021 年, Qin 等 [75] 利用 PSO 算法优化设计了一种单层超临界透镜, 可以在原子厚度的尺度上实现光波相位的调控, 它的 SEM 成像图如图 2(c) 所示. 2022 年,

Chen 等 [76] 又利用 PSO 算法通过优化锥形耦合器结构设计了一种多模式功率分束器. 该多模式功率分束器能够实现对 TE_0 — TE_4 共 5 种模式的 3 dB 功率分束, 其结构如图 2(d) 所示.

直接二进制搜索 (direct binary search, DBS) 算法是一种通过将状态空间转换为二进制编码空间从而进行求解的优化算法. 1987 年, Seldowitz 等 [77] 首次提出了 DBS 算法并将其应用于全息光学设计. 自此, DBS 算法进入了光子学领域研究者的视野. DBS 算法的优化流程如图 3(a) 所示. DBS 算法适合于求解简单的优化问题, 是目前逆向设计算法中最常用的算法之一. 该算法因其操作十分简单, 收敛速度快, 不需要复杂的理论推导和计算, 吸引了光子器件设计研究者的兴趣 [78–81]. 2014 年, DBS 算法首次被 Shen 等 [78] 应用于光子器件设计领域. 自此以后, DBS 算法被广泛应用于各种光子器件设计中 [79–81]. 2015 年, Shen 等 [79] 利用 DBS 算法设计了尺寸仅为 2.4 $\mu\text{m} \times 2.4 \mu\text{m}$ 的超紧凑偏振分束器, 如图 3(b) 所示. 实验结果表明, 在 32 nm

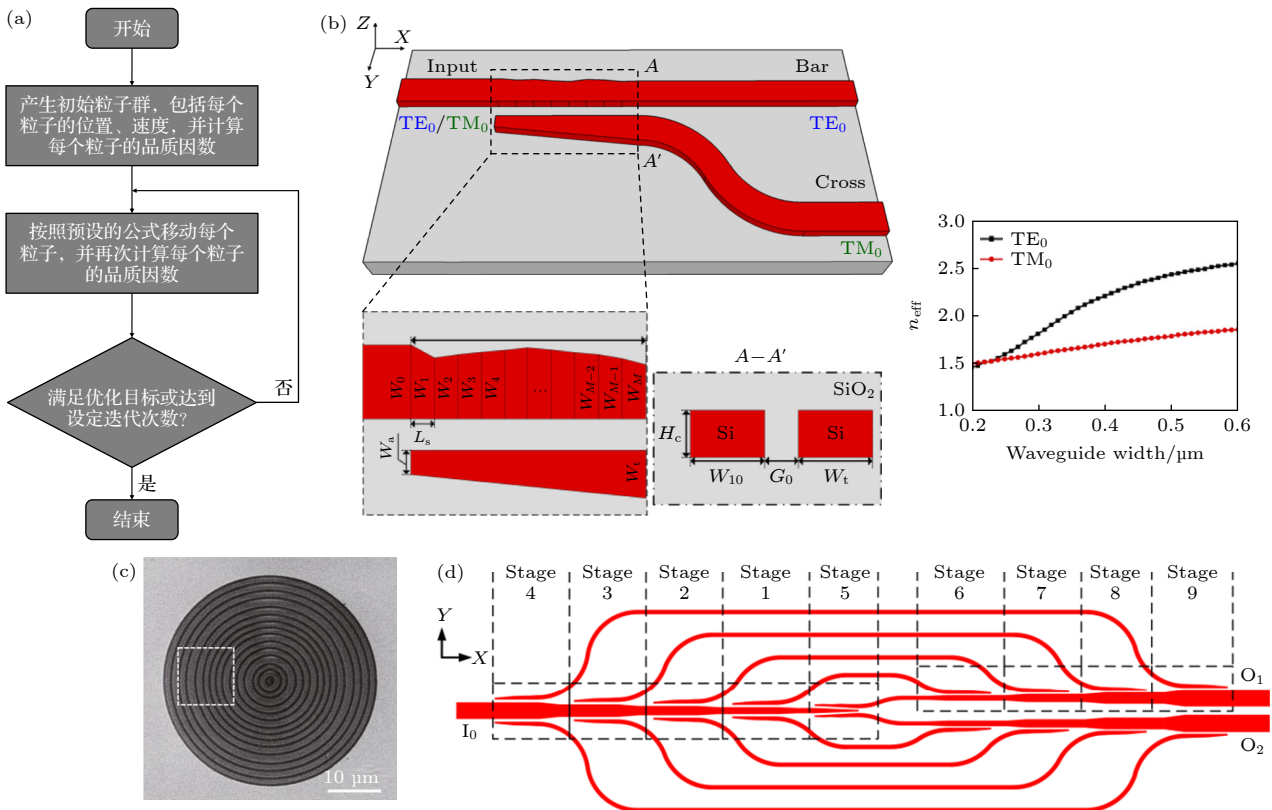


图 2 PSO 算法的流程及 PSO 算法在光子器件设计领域的应用 (a) PSO 算法的流程; (b) 利用 PSO 算法设计的片上偏振分束器 [74]; (c) 利用 PSO 算法优化设计的单层超临界透镜的 SEM 图 [75]; (d) 利用 PSO 算法设计的片上多模式功率分束器 [76]

Fig. 2. Flowchart of PSO algorithm and its application in photonic devices design: (a) Flowchart of PSO algorithm; (b) on-chip polarization beam splitter designed by PSO algorithm [74]; (c) SEM image of single-layer supercritical lens optimized by PSO algorithm [75]; (d) on-chip multi-mode power beam splitter designed by PSO algorithm [76].

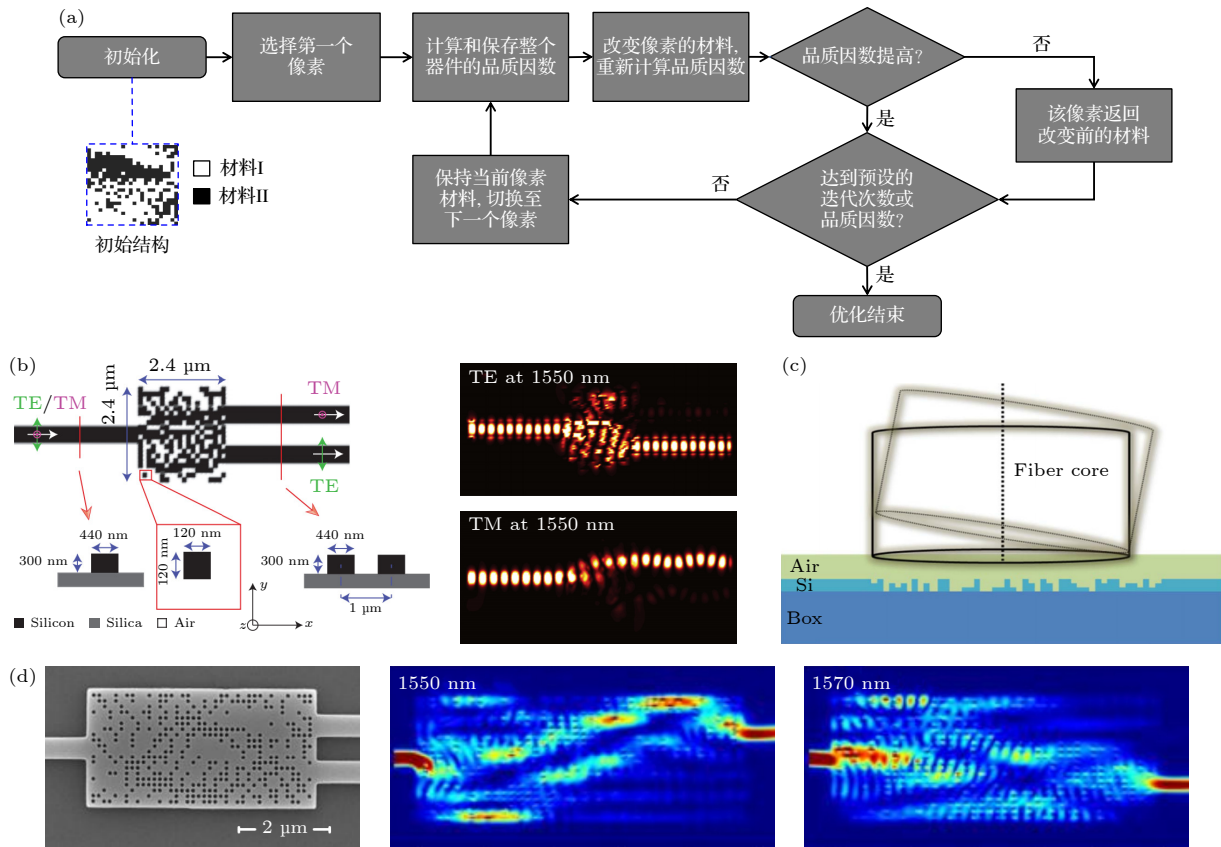


图 3 DBS 算法的流程图及 DBS 算法在光子器件设计领域的应用 (a) DBS 算法具体优化流程图; (b) 基于 DBS 算法设计的偏振分束器的结构图, 以及波长为 1550 nm 的 TE 和 TM 通过该器件时的光场图^[79]; (c) 利用改良的 DBS 算法设计的离散化纳米结构的侧视图^[80]; (d) 利用 DBS 算法设计的双通道波长解复用器及不同波长的光通过该器件时的光场图^[81]

Fig. 3. Flowchart of DBS algorithm and its application in photonic device design: (a) Flowchart of DBS algorithm; (b) structure diagram of the polarization beam splitter designed by DBS algorithm, and the light field diagram of TE and TM with a wavelength of 1550 nm passing through the device^[79]; (c) side view of the discretized nanostructures designed by the improved DBS algorithm^[80]; (d) dual-channel wavelength demultiplexer designed by DBS algorithm, and the optical field diagram when light of different wavelengths passing through the device^[81].

的带宽范围内, TE 和 TM 模式的传输效率都在 70% 以上, 相应的消光比大于 10 dB. 该器件的成功设计, 证明了 DBS 算法应用在片上光互连器件设计领域的可行性. 2016 年, Wen 等^[80] 提出了一种改良的 DBS 算法, 设计了一种类似条形码的一维纳米结构, 用于芯片与光纤的耦合, 解决了耦合角和偏振问题, 如图 3(c) 所示. 2017 年, Zhou 等^[81] 利用 DBS 算法设计了一个双通道的波长解复用器, 如图 3(d) 所示. 该器件具有 $2.6 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ 的超紧凑占地面积, 在实验中显示出了 -2.3 dB 的插入损耗、 -16.4 dB 的串扰. 这些优点使其成为下一代芯片级光通信的有前途的组件.

伴随法 (adjoint method, AM) 是为了解决物理问题而提出的^[82]. 自提出以来, 它已被广泛应用于工业模型的优化设计^[83-85]. 近十年来, AM 也被广泛应用于光子器件的拓扑优化设计过程中^[86-88].

AM 是基于梯度信息进行优化的, 其核心思想是使用两次仿真的所得到的信息求出“全局梯度”, 再使用处理梯度信息的方法等进行优化^[89]. 得益于对梯度信息的利用, AM 的优化收敛速度很快, 且优化得到的光子器件性能较好, 在设计复杂功能光子器件时有一定优势. 时至今日, 已有大量的利用 AM 设计的片上光子器件问世. 例如, 2013 年, Lalau-Keraly 等^[86] 对 AM 在光子器件设计中的原理进行介绍, 并使用 AM 对一个功率分束器进行形状优化, 在 $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ 的区域内优化得到的分束器插入损耗低至 0.07 dB , 如图 4(a) 所示. 2018 年, Hughes 等^[87] 将 AM 应用到非线性光子器件的设计中, 进行了完整的推导并开发了一个完整的优化方法, 而后使用频域有限差分法进行数值仿真. 他们设计了两种光子器件, 当光功率较低时和较高时, 光子器件所实现的功能不一样, 如图 4(b) 和

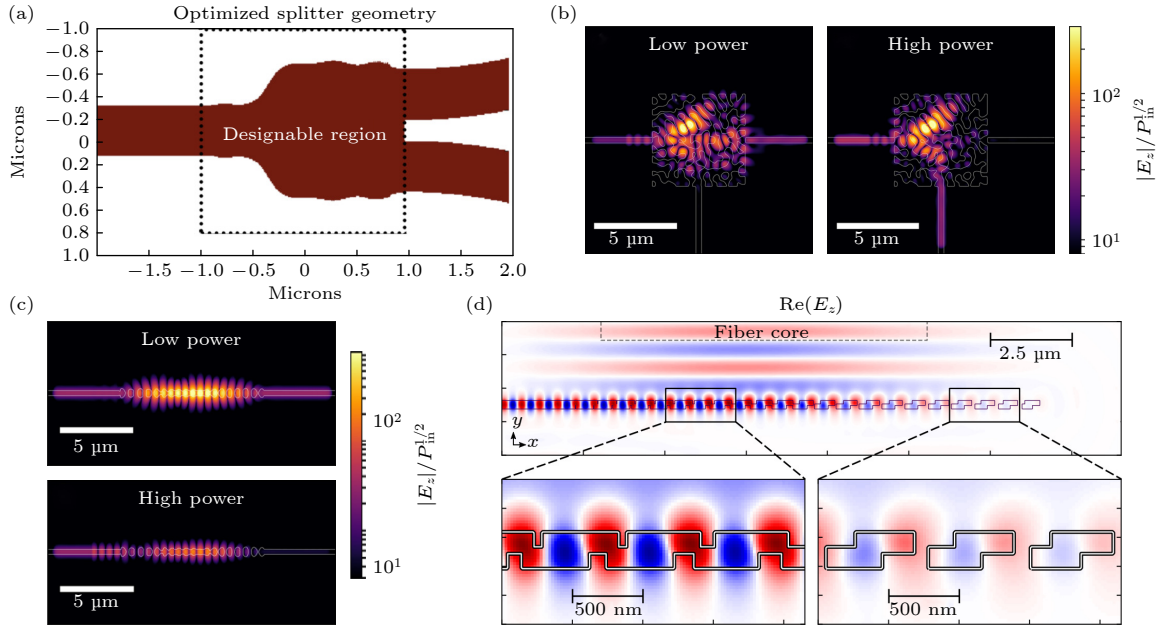


图 4 AM 在光子器件设计领域的应用 (a) 利用 AM 设计的功率分束器^[86]; (b), (c) 基于 AM 提出的两种非线性光子器件^[87]; (d) 使用 AM 优化的垂直光栅耦合器^[88]
 Fig. 4. Application of AM in photonic device design: (a) Power splitter designed by AM^[86]; (b), (c) two nonlinear photonic devices designed by AM^[87]; (d) vertical grating couplers optimized by AM^[88].

图 4(c) 所示. 2018 年, Michaels 和 Yablonovitch^[88] 使用 AM 对垂直光栅耦合器进行优化设计, 首先得到的光栅耦合器在 1550 nm 处得到耦合效率为 99.2% (−0.035 dB) 的器件, 如图 4(d) 所示. 后续对该器件进行了约束优化, 以实现耦合效率超过 96% 和背反射小于 −40 dB 的垂直耦合器, 并可以使用 65 nm 分辨率的光刻机进行制作.

2.1.2 基于神经网络的智能设计方法

神经网络 (neural network) 是一种模仿大脑神经系统工作的强有力的计算模型, 可以利用数据学习和解决问题. 它无需事先确定输入输出之间的映射关系, 可以通过对自身的训练, 得到所需要的映射关系和规则, 从而在给定输入值时得到最接近期望输出值的结果. 神经网络起源于 20 世纪 50 年代, 到 20 世纪 90 年代, 误差反向传播 (error back propagation) 算法的提出使神经网络能够处理更加复杂的问题^[90]. 时至今日, 神经网络已全方位地走进人类生产生活的各个方面, 在目标识别^[91–100]、自然语言处理^[101–110]、智能交互^[111–113] 等很多领域都发挥了重要的作用. 随着计算机性能的不断提高, 神经网络的应用领域也变得愈加广泛.

自神经网络兴起以来, 各种结构的网络模型层出不穷, 数不胜数. 近些年来, 已有多种基于神经

网络的智能设计方法出现在了包含光互连器件在内的光子器件的设计过程中.

2019 年, Hammond 等^[114] 开发了一种实用的人工神经网络 (artificial neural network, ANN) 架构, 包括用作“正向”设计和“逆向”设计的网络结构. 作为示例, 他们利用这个神经网络设计并制造了几个集成布拉格光栅, 如图 5(a) 所示. 经过训练, 他们提出的 ANN 的预测结果与实验测量结果吻合得很好, 证明了 ANN 在片上光子器件设计领域的成功. 类似地, 2021 年, Tu 等^[115] 利用深度神经网络 (deep neural network, DNN) 设计了一种光栅耦合器, 如图 5(b) 所示. 他们也建立了一种由光栅结构到光学响应的“正向”深度神经网络和一种更复杂的、由光学响应到光栅结构的“逆向”深度神经网络, 最终得到了较高的预测精度和较好的器件性能. 这两种网络架构也是基于神经网络的智能设计方法最常用的.

除了片上光子器件设计领域, 基于神经网络的智能化设计方法还在超表面等空间光调制器件设计领域发挥了重要的作用. 例如, 2022 年, An 等^[116] 关注于近场耦合效应对超表面设计的影响, 提出了一种基于深度学习的方法来预测大面阵中每一个超原子的精确电磁场响应. 首先, 他们通过仿真软件 CST 建立目标超原子的仿真数据集, 并基于卷

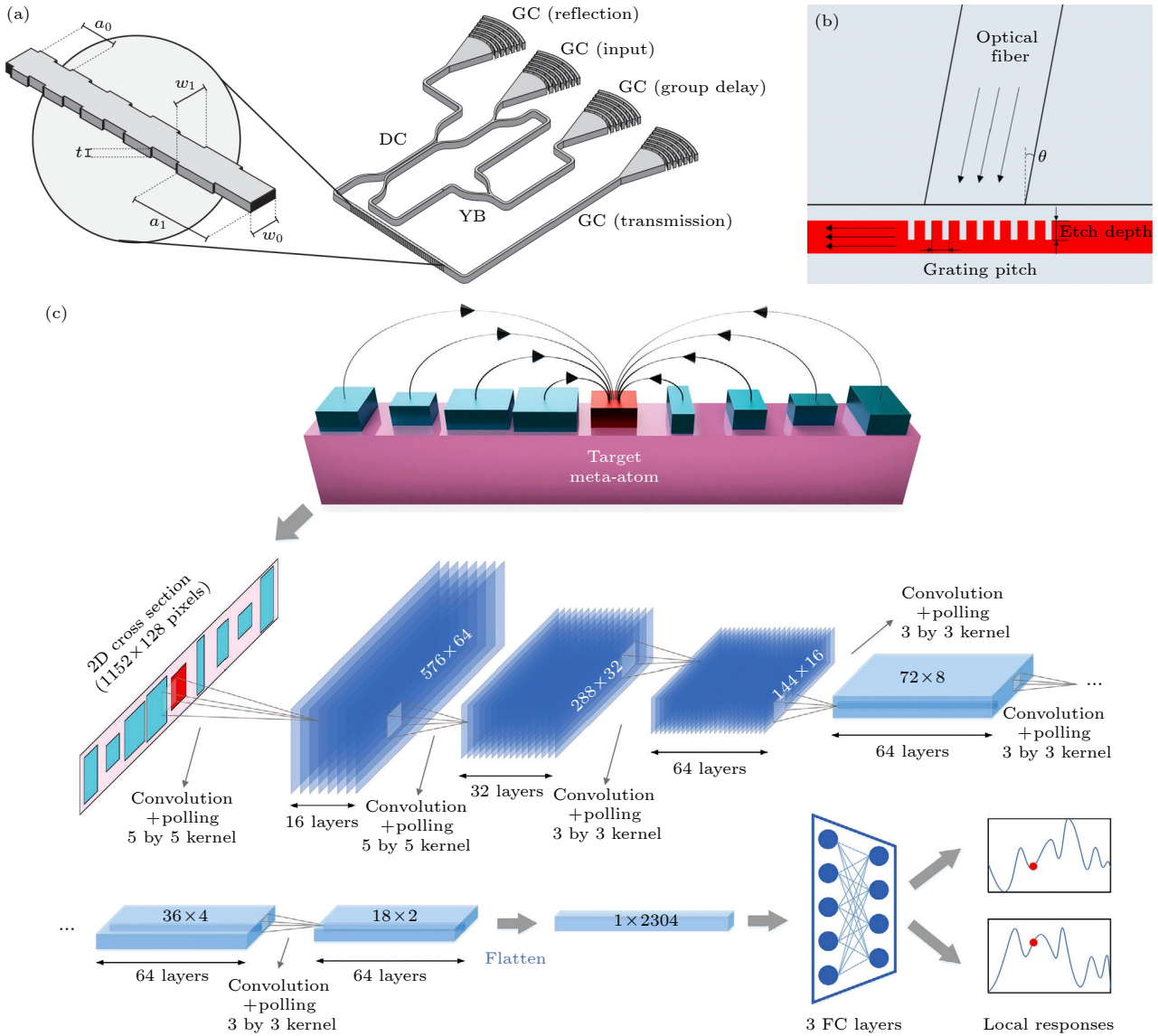


图 5 神经网络在光子器件设计领域的应用 (a) 基于神经网络架构设计的布拉格光栅^[114]; (b) 利用深度神经网络设计的光栅耦合器^[115]; (c) 用来预测超表面中的超原子光响应的 PNN 架构^[116]

Fig. 5. Application of neural network in photonic device design: (a) Bragg grating based on ANN architecture^[114]; (b) grating couplers designed using DNN^[115]; (c) PNN architecture for predicting meta-atom light responses in metasurfaces^[116].

积神经网络 (convolutional neural network, CNN) 建立预测网络模型 PNN (predicting neural network), 将目标超原子与邻近超原子的几何参数作为输入, 就可快速得到目标超原子的局部电磁场响应. 该预测网络模型的架构示意图如图 5(c) 所示. 该方法可用于提升超表面的效率, 如有效提升光束偏转器和超透镜的效率. 由于结构间的相互耦合作用被简化为一维模型, 后续还需要考虑复杂耦合模型的预测问题, 并用于提升多功能超表面的光响应. 与传统方法相比, 利用他们的神经网络设计出的光束偏转器和聚焦镜头在性能上有明显的提高.

在上述较为通用的网络架构的基础上, 人们又

聚焦于解决一些具体技术问题, 在光子器件的智能化设计过程中引入了很多新的神经网络架构, 从而使神经网络在光子器件设计领域逐渐成为了一种解决力强、适应性好的强大设计工具.

在前文所引述的工作中, “逆向”神经网络无疑具有非常强大的吸引力. 它在一定程度上能够根据输入的目标光响应迅速地反推出所需要的器件结构. 但是“逆向”神经网络也有一定的缺陷. 从原理上讲, 每一个器件结构都会单独对应一种光响应, 但是每一种光响应却未必会只对应一种器件结构. 这种“一多对应”的关系就会在“逆向”设计过程中造成“隐式冲突 (implicit conflicting)”^[117].

2018年, Liu等^[117]提出了一种“正、逆向串联神经网络 (tandem network)”的网络架构来解决“隐式冲突”. 他们构建了如图6(a)左图所示的串联神经网络, 即在“逆向”设计网络之后再串联一个预先训练好的“正向”预测网络. 在训练整个串联网络时只调整“逆向”设计网络中的权重分布. 他们将这个神经网络引入二氧化硅 (SiO_2) 和氮化硅 (Si_3N_4) 交错的多层膜系结构设计中, 来确定能够实现目标透射光谱的各层膜的厚度, 如图6(a)右图所示. 经过检验, 串联神经网络确实能够很好地克服隐式冲突, 从而顺利完成多层膜系结构的设计.

基础神经网络的另一个缺点是需要大量的数据作为训练集. 为了解决这一问题, 2021年, Ren等^[118]将DNN和GA结合, 提出了一种显著减小设计成本的设计方法——基于GA的深度神经网络 (genetic-algorithm-based deep neural network), 如图6(b)所示. 他们先利用GA的初代样本训练“正向”深度神经网络, 再将该神经网络反置作为“逆向”网络, 利用选择后的数据生成若干新的器件结构作为子代. 最后将这些后代添加到初始种群中, 并更新深度神经网络模型中的权重, 以开始下一次迭代. 该网络可以显著缩小设计类似器件所需要的计算量, 利用该网络, 他们设计了一系列的片上光互连器件. 同样为了解决所需数据量大的问题, 2022年, Zhao等^[119]提出了一种少样本数据增强迭代 (data enhanced iterative few-sample) 算法, 用来设计二维可编程手性超材料. 超材料示意图如图6(c)所示. 少样本数据增强迭代算法可分为“数据增强”和“迭代”两个主要阶段. 数据增强阶段是利用“正向”预测网络生成的“伪数据”来获得数据增强后的数据集. 迭代阶段是利用光谱以及附加的小误差参数来预测相应超材料的几何参数. 在迭代阶段, 他们同样用到了前文所述的串联神经网络. 最后, 通过将输出谱与输入谱进行比较来验证算法的结果是否令人满意. 该设计方法在灵活性、可扩展性和时间消耗方面明显优于传统逆设计方法和许多机器学习方法.

除了前文所述的工作之外, 2021年, Yeung等^[120]还开发了一种基于全局深度学习的逆设计框架来弥补训练完成的神经网络适用范围较为狭窄的短板. 他们首先将折射率、等离子体频率、结构参数等数据编码在彩色图像上, 之后利用这些图像训练条件深度卷积生成对抗网络 (conditional deep

convolutional generative adversarial network). 训练得到的网络可以用来设计跨越了多种材料、结构、目标的超表面, 一定程度上实现了神经网络的通用性. 该网络的训练和设计过程如图6(d)所示.

2.2 智能设计方法的优势

经过近几十年的发展, 智能设计方法已凭借其特有的优势在光子器件设计领域稳定立足. 相比于一些传统的光子器件设计方法, 智能设计方法具有设计思路直接、器件紧凑度高、人力成本低等几个显著的优势.

首先, 在方法的设计思路方面. 大多数智能设计方法在设计器件时都是利用器件结构与光响应之间的直接联系, 因此无需对器件中复杂的物理过程进行解析. 例如, 基于GA和PSO算法的智能设计方法往往将器件的几何参数或几何参数组合 (例如, 长度、角度、间隔) 作为待优化对象 (染色体或粒子), 每个几何参数或几何参数组合对应的光响应作为评价指标. 当它们进行优化时, 只需要将这些参量当作数字, 再按照预定方式进行搜索, 无需考虑几何参数或几何参数组合具体是如何对光响应产生影响的, 从而使研究者的设计更加方便和专注. 类似地, 基于DBS算法的智能设计方法在优化时也只利用每个正在搜索的像素的状态与整个器件的光响应之间的直接联系, 无需考虑器件中复杂的电磁场分布. 而基于神经网络的智能设计方法更是聚焦于建立器件结构与器件光响应之间的直接联系 (隐式函数), 从而“绕开”大量的仿真或实验工作来获取所需的数据. 之后再根据所获得的数据找到最优的器件结构. 与此同时, 智能设计方法对不同材料具有广泛兼容性, 这使得研究者无需在设计前专门对每种材料进行深入的理论研究. 在设计光子器件时, 每种材料的光学特性例如折射率和消光系数都是不相同的. 每种材料独有的光学特性会导致光响应的特异性. 传统的设计方法不可避免地要考虑每种材料的光学特性, 并针对该种材料进行单独设计. 相反, 智能设计方法避免了过多关注材料的光学特性这一弊端. 它们只需要收集该种材料的结构与光响应之间的对应数据并进行寻优, 无需专门为某种材料制订单独的优化方法.

其次, 在器件的紧凑度方面. 相比于绝大多数的传统设计方法, 大多数智能设计方法的搜索自由度更大. 从很多经典智能算法的寻优原理中可以

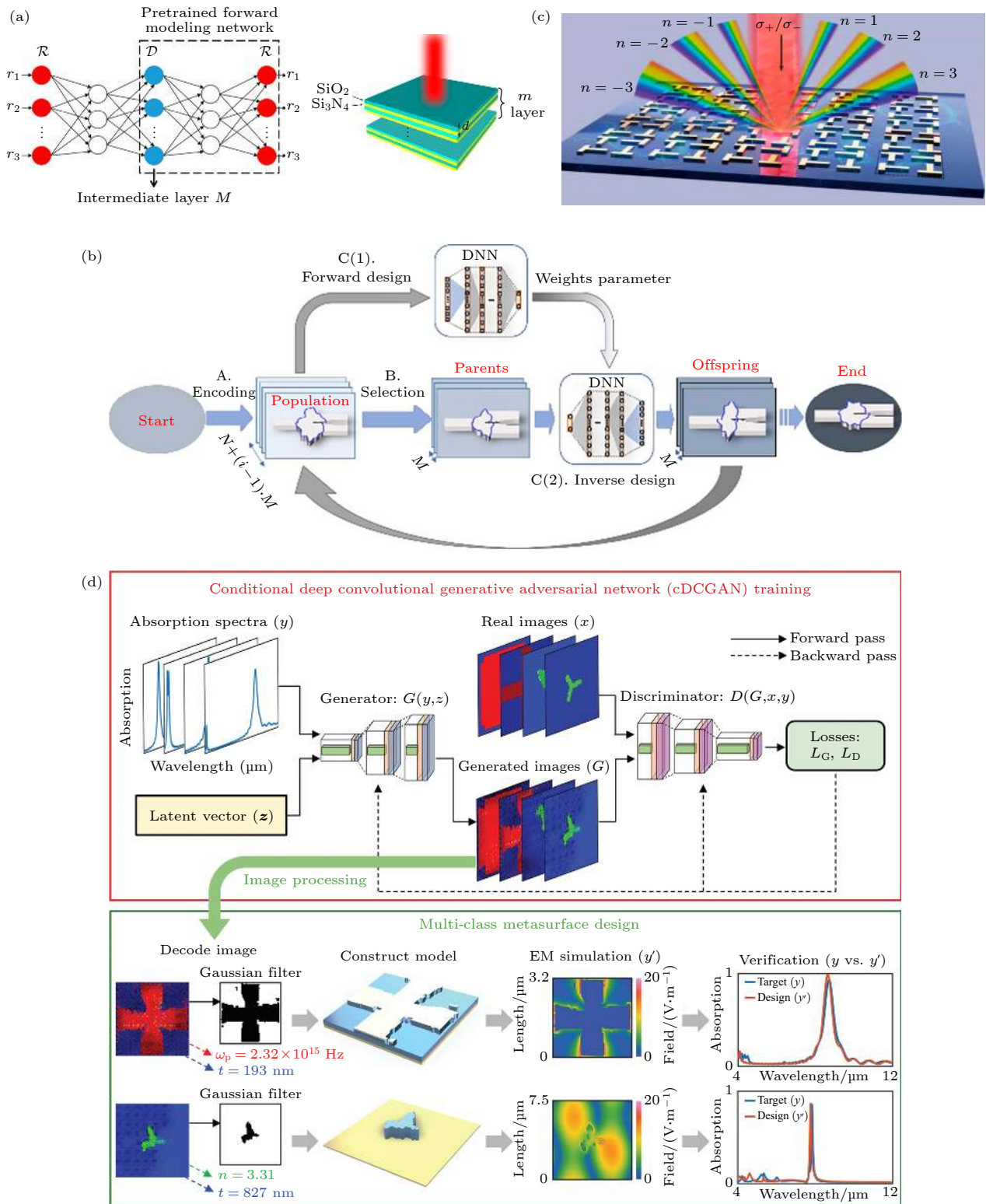


图 6 用来解决一些具体技术问题的神经网络架构 (a) “正、逆向串联”神经网络示意图以及利用该网络设计的多层膜系结构^[117]; (b) 基于GA的深度神经网络^[118]; (c) 利用少样本数据增强迭代算法优化得到的二维可编程手性超材料^[119]; (d) 一种基于全局深度学习的逆设计框架的训练和设计过程^[120]

Fig. 6. Neural network architectures used to solve some specific technical problems: (a) Schematic of the “forward and backward series” neural network and the multilayer structure designed by this network^[117]; (b) GA-based DNN^[118]; (c) two-dimensional programmable chiral metamaterial optimized by data enhanced iterative few-sample algorithm^[119]; (d) training and design process of an inverse design framework based on global deep learning^[120].

看出,它们往往能够在相当紧凑的范围内进行充分的搜索.这就使得利用智能设计方法在很小的空间范围内获得满足设计目标的器件结构的可能性更大,从而使得智能设计方法在所设计器件的紧凑度方面具有独特的优势.

最后,在优化的人力成本方面.很多智能设计方法都是由计算机代替人类进行试错并收集信息,再利用已完成的优化所产生的信息指导后续的优化.通过将繁重的信息收集与规律学习过程交给计算机完成,研究者得到了很大程度的解放,能够更加专注于器件功能、适应性、应用场景等方向上的创新.

另外,大多数经典智能算法往往能够同时对多个几何参数进行搜索,而这是手动调参或参数扫描难以实现.这就使得很多智能设计方法相比于传统设计方法在优化速度方面具备了优势.

2.3 智能设计方法的有待提升之处

虽然与传统设计方法相比,智能设计方法在人力成本和器件尺寸方面都大幅减小,但是智能设计方法也存在一些有待提升之处.

首先是智能化设计的器件,在加工时往往会遇到一些挑战.智能化设计的器件往往非常紧凑,这就对器件的加工精度提出了很高的要求.例如,DBS算法设计的片上光互连器件往往需要在SOI的顶硅平面上刻蚀若干极微小的区域.刻蚀中心的偏移、刻蚀尺寸的变化以及两刻蚀区域之间硅材料的完整性都会对最终的器件光响应产生一定的影响.而且,由于反应离子刻蚀(reactive ion etching)滞后效应等效应的影响,现有的制造水平很难将设计出的器件结构的细节完全加工,而是会存在一定的误差.器件的尺寸越小,这些误差的影响就越大.因此,智能化设计的器件走向更高水平的应用还需要芯片加工工艺的进一步提升.

其次是智能化设计的器件,其中的物理过程相对难以定量描述.由于智能化设计的器件在一个非常紧凑的空间尺度内完成对电磁场的操控,因此其中的电磁场变化过程以及相互作用情况非常复杂.这个复杂的物理过程有时难以用数学方法进行定量描述,需要通过仿真来展示.

传统设计方法是智能化设计的基础,研究者只有在充分理解传统设计方法的思想、原理、过程的基础上,才能为智能化设计提供合适的初始参数

等条件,才能大幅避免智能化设计过程中的冗余成本.

3 智能化设计的超紧凑片上光互连器件

本节介绍智能化设计的光互连器件相对于传统设计结果的一个重要、显著的优势——器件尺寸大幅度减小,器件紧凑度大幅度提升.时至今日,不论是电子芯片领域的发展经验还是层出不穷的大规模集成光电子芯片,都显示出了单器件尺寸减小所带来的巨大效益^[121–123].片上光互连器件所占区域的减小可以使宝贵的芯片面积得到更加充分的利用.

传统方法设计片上光互连器件时,由于一些物理过程需要较大的作用尺度以及传统设计的参数空间较小等原因,有时设计出的器件不得不占用较大的面积.而以上问题和弊端都可以利用智能设计方法加以克服.智能设计方法可以利用其广阔的参数空间和充足的搜索自由度在一个很小的区域内搜索出能够实现目标光响应的器件结构.更进一步地,从优化目标的角度来说,智能设计方法往往无需深究在超紧凑的区域内发生的复杂物理过程,也无需过多关注所设计器件的具体形状,只需要关注目标光响应是否得到优化.

本节从两个方面介绍了智能化设计的超紧凑片上光互连器件的优势和成果.第1个方面是研究者无需指定特定的初始结构,可以利用智能设计方法直接设计出超紧凑的片上光互连器件;第2个方面是研究者可以基于传统的设计理论,先给定一个传统方法设计的器件基础,再利用智能设计方法在超紧凑空间内优化得到满足光响应要求的片上光互连器件.

3.1 通过智能设计方法直接设计超紧凑片上光互连器件

本节通过介绍3种在光互连领域有重要应用的器件——(多模)功率分束器、模式(分解)复用器和(多模)弯曲波导的智能化设计过程,来说明利用智能设计方法直接设计超紧凑光互连器件的优势:无需给定初始结构或仅给定简单形状作为初始结构,利用智能化设计强大的搜索能力直接搜寻满足光响应要求的器件结构.在这些器件的设计过

程中, 研究者的双手得到了很大程度的解放. 这些智能化设计的器件, 与传统方法设计的相同(似)功能的器件相比, 尺寸上往往会有数量级程度的缩小. 它们之间的对比清晰地显示了智能设计方法在提升器件紧凑度方面的巨大作用.

功率分束器是一种重要的光子器件, 可用于包含光互连在内的诸多应用场景. 特别是多模功率分束器, 常常用于多模光互连系统, 如模分复用 (mode-division multiplexing, MDM) 系统. 它能够对一束光束进行分裂, 让产生的新光束向不同方向传播, 从而实现信息的一对多传递. 2013 年, Zhang 等^[124]

利用 PSO 算法设计了一种波长不敏感的单模功率分束器, 该器件的结构如图 7(a) 所示. 该器件的外轮廓由 13 条线段的长度决定, PSO 算法用来寻找这 13 条线段长度的最优组合. 该器件的尺寸小于 $1.2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$, 相比于 2022 年 Kumari 和 Prince^[125] 利用光束传播法 (beam propagation method) 设计的基于 S 形曲线脊波导的波长不敏感单模功率分束器, 其尺寸有了数量级程度的减小. 利用光束传播法设计的功率分束器的结构如图 7(b) 所示, 它最小的分束区域 (区域 3) 中 S 形曲线脊波导的曲率半径为 $325 \mu\text{m}$, 器件的实际长度大于 $25 \mu\text{m}$.

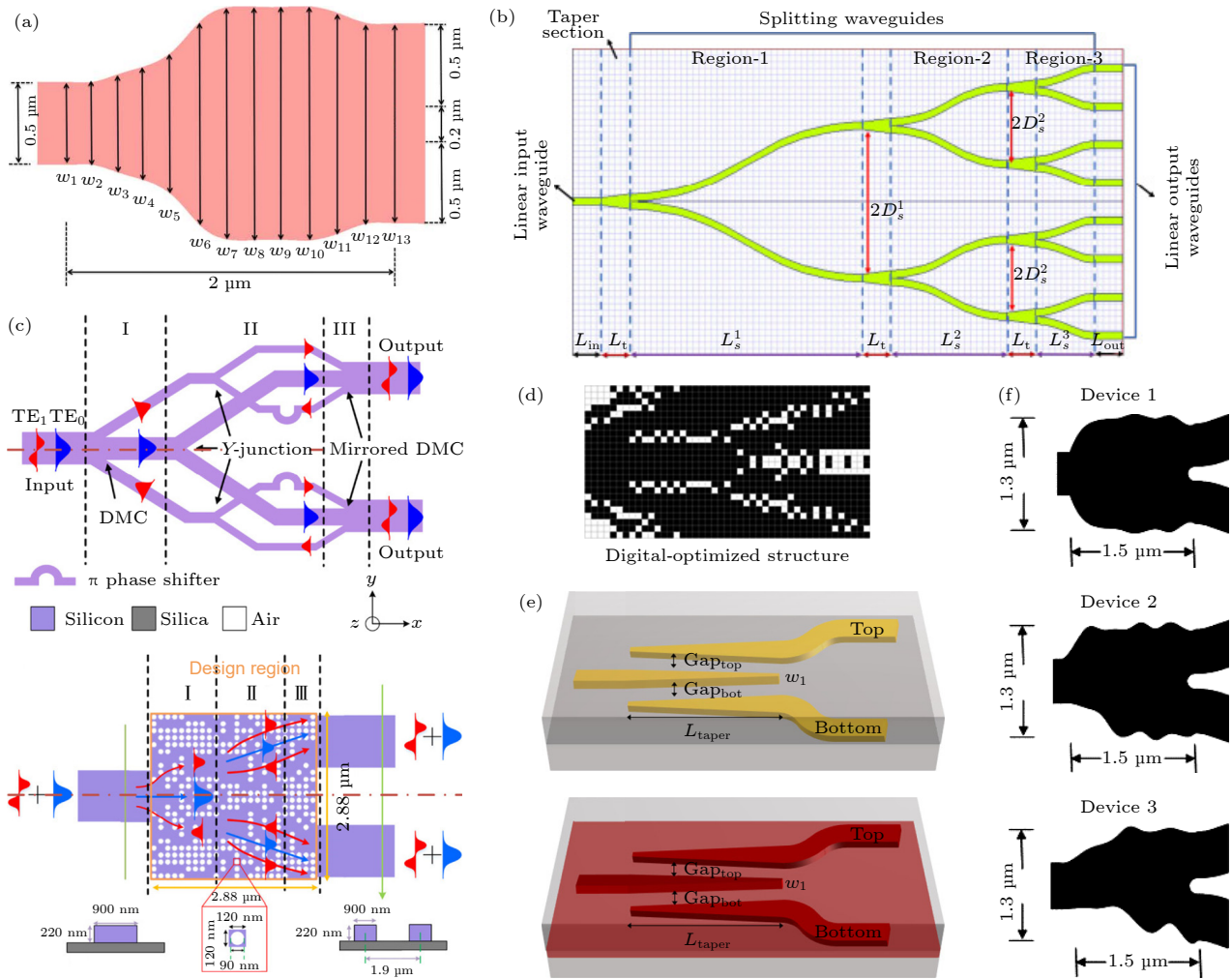


图 7 几种由不同方法设计的功率分束器及对比 (a) 利用 PSO 算法设计的波长不敏感的单模功率分束器^[124]; (b) 利用传统方法设计的基于 S 形曲线脊波导的波长不敏感单模功率分束器^[125]; (c) 传统方法设计双模功率分束器的原理示意图 (左) 和基于对称优化的 DBS 算法设计的双模功率分束器 (右)^[126]; (d) 利用多种算法分阶段优化设计的超宽波段适用的双模功率分束器^[127]; (e) 基于传统方法设计的任意分束比的功率分束器架构示意图^[128]; (f) 基于 QPSO 算法设计的几种不同分束比的功率分束器^[129]

Fig. 7. Several power splitters designed by different methods and their comparison: (a) Wavelength insensitive single-mode power splitter designed by PSO algorithm^[124]; (b) wavelength insensitive single-mode power splitter based on S-shaped curved ridge waveguide designed by conventional methods^[125]; (c) schematic of dual-mode power splitter designed by conventional method (left) and dual-mode power splitter designed by symmetric-optimize-DBS algorithm (right)^[126]; (d) dual-mode power splitter suitable for ultra-wide band optimized by multiple algorithms^[127]; (e) schematic of the power splitter with arbitrary split ratio designed by conventional methods^[128]; (f) power splitters with different split ratios designed by QPSO algorithm^[129].

随着人们对通信带宽的要求越来越高,光的模式作为一个单独的维度受到越来越多的重视. 利用光的不同模式之间互不干扰的特性,人们可以在一条通路里实现多种模式同时传播,从而成倍地增大通信带宽. 因此,适用于如MDM系统的多模光互连系统中的多模功率分束器应运而生. 2018年,Chang等^[126]分析了传统方法设计双模功率分束器时在紧凑度方面所受到的限制,并提出了一种基于对称优化的DBS算法设计的双模功率分束器,如图7(c)所示. 他们提出,如果按照耦合的方法设计双模功率分束器,则该分束器的重要组件——双模转换器(dual-mode convertor)需要100 μm 以上的耦合长度,整个器件的总长度可能大于200 μm ^[126]. 而他们提出的相同功能的双模功率分束器的尺寸仅为2.88 μm ×2.88 μm ,器件紧凑度得到了大幅度的提升. 除了他们的工作之外,2022年,Xu等^[127]也通过利用多种算法分阶段优化的方式得到了相同功能的、超宽波段适用的双模功率分束器. 该双模功率分束器的结构如图7(d)所示. 他们提出了一种模拟数字拓扑优化(analog and digital topology optimization)的方法,首先设计出模拟的拓扑结构,然后再利用DBS算法对模拟的拓扑结构进行二次优化,设计出适合加工的数字优化的结构. 他们优化得到的器件的尺寸为5.4 μm ×2.88 μm ,也能达到超紧凑的程度.

在光互连的实际应用场景中,光束并不总是要求平均分束,人们需要一套能够根据不同的需求场景灵活设计功率分束比的设计框架. 2021年,Zhu等^[128]提出了利用传统方法设计锥形波导从而构建基于不同材料的任意分束比的功率分束器,该分束器可用于波分复用(wavelength division multiplexing, WDM)光子回路. 他们通过70 nm浅刻蚀的方式构建了基于硅材料的脊波导和基于氮化硅材料的锥形脊波导,再通过调整锥形脊波导之间的间隙宽度来实现不同分束比的光功率输出. 该设计架构如图7(e)所示,设计出的几种分束比的功率分束器所需的作用距离在45—80 μm 之间. 而在2019年,Sheng等^[129]基于改进的PSO算法——量子PSO(quantum particle swarm algorithm, QPSO)算法提出了一种可以设计任意功率分束比的功率分束器的智能化设计框架. 在QPSO算法中,粒子被认为具有量子行为,粒子的状态由波函数决定. 与传统的PSO算法相比,QPSO算法中粒子的多样

性将大大提高,因此该算法可以更好地处理设计目标复杂的问题^[129]. 他们利用QPSO算法优化18个顶点所处的坐标,设计了一系列的不同分束比的功率分束器. 这些器件的尺寸仅为1.5 μm ×1.3 μm ,接近亚微米的尺度. 比起前文所述的基于锥形波导的功率分束器,紧凑度提升了至少一个量级. 其中几个器件的示意图如图7(f)所示.

以上介绍的几种由不同方法设计的功率分束器,相同功能的智能化设计和传统设计结果在尺寸方面的对比如表1所列.

表1 相同功能的智能化设计和传统方法设计的功率分束器的尺寸对比

Table 1. Size comparison of power beam splitters designed by intelligent and conventional design methods with the same function.

功率分束器类型	智能化设计结果 最大长度/ μm	传统设计结果 最大长度/ μm
波长不敏感单模	2	>25
双模	2.88/5.4	>200
任意分束比	1.5	>45

模式(分解)复用器是片上模分复用光互连系统的关键组件. 通过模式复用器的调控,各个输入光路中的光会分别以不同的模式在总线中并行传输而互不干扰,之后再通过模式分解复用器进入对应的输出光路,从而成倍地提升光互连系统的通信带宽. 在极紧凑的尺寸内高效地实现模式(分解)复用一直是研究者们追求的目标,过去一段时间,基于定向耦合等传统设计方法,人们设计出了一些多通道的模式(分解)复用器. 然而,这些器件的尺寸往往较大,难以达到极紧凑的目标. 近些年,在智能设计方法的帮助下,越来越多的超紧凑模式(分解)复用器问世,为片上光子器件大规模集成带来了重大利好.

2018年,Chang等^[130]提出了一种基于DBS算法设计的二阶模式复用器. 该器件可以将片上光互连系统的通信带宽增大一倍,它的结构示意图如图8(a)所示. 该器件的尺寸为2.4 μm ×3 μm ,与2013年Ding等^[131]设计的基于锥形定向耦合器的二阶模式复用器相比(如图8(b)所示),长度从几十微米到了几微米,尺寸有了大幅度的减小. 2020年和2022年,Xie等^[132]和Zhou等^[133]分别提出了两种结构的四阶模式(分解)复用器. 这两种器件均是由DBS算法设计的,它们的结构示意图如

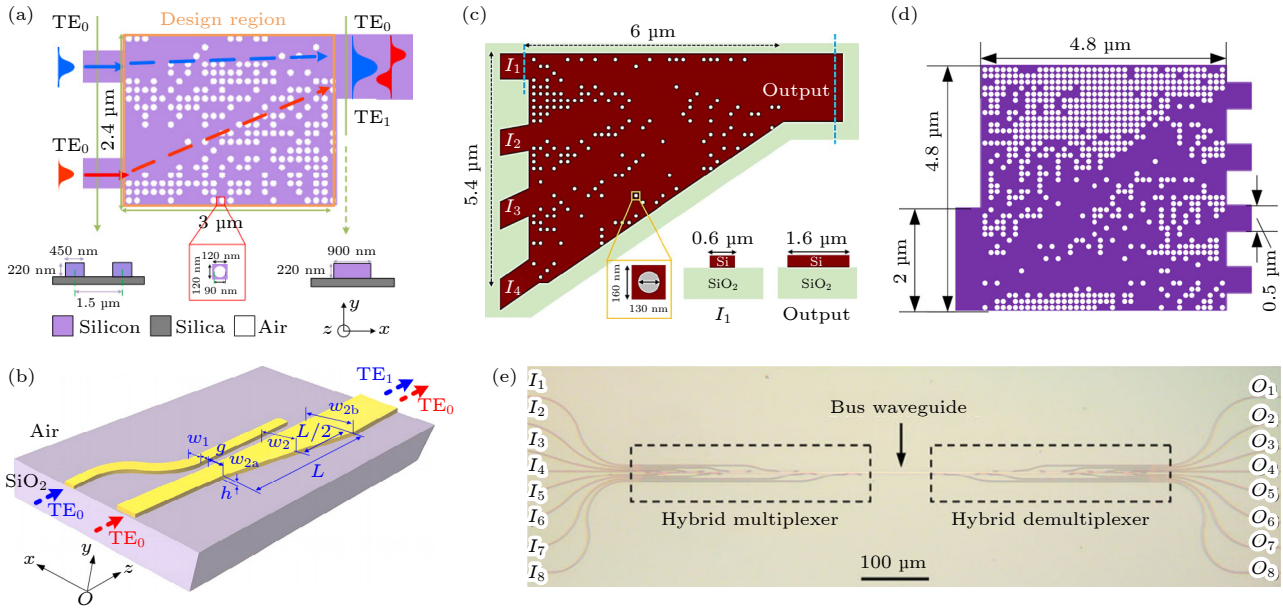


图 8 几种由不同方法设计的模式(分解)复用器及对比 (a) 基于 DBS 算法设计的二阶模式复用器^[130]; (b) 基于锥形定向耦合器的二阶模式复用器^[131]; (c), (d) 两种由 DBS 算法设计的四阶模式(分解)复用器^[132,133]; (e) 八阶模式/偏振(分解)复用器的光学显微镜成像图^[134]

Fig. 8. Several mode (de)multiplexers designed by different methods and their comparison: (a) Two-mode multiplexer based on the DBS algorithm^[130]; (b) two-mode multiplexer based on conical directional coupler^[131]; (c), (d) two kinds of four-mode (de)multiplexers designed by the DBS algorithm^[132,133]; (e) optical microscope image of the eight-mode/polarization (de)multiplexers^[134].

图 8(c) 和图 8(d) 所示. 这两种四阶模式(分解)复用器的尺寸相仿, 分别是 $5.4\ \mu\text{m} \times 6\ \mu\text{m}$ 和 $4.8\ \mu\text{m} \times 4.8\ \mu\text{m}$. 相比于 2014 年 Wang 等^[134] 提出的传统方法设计的八阶模式/偏振(分解)复用器(两种偏振状态, 每种偏振状态四阶模式), 尺寸缩减了两个量级左右. Wang 等^[134] 提出的八阶模式/偏振(分解)复用器的光学显微镜成像图如图 8(e) 所示, 其长度达到了百微米的量级.

以上介绍的几种由不同方法设计的模式(分解)复用器, 相同或相似功能的智能化设计和传统设计结果在尺寸方面的对比如表 2 所列.

表 2 相同(似)功能的智能化设计和传统方法设计的模式(分解)复用器的尺寸对比
Table 2. Size comparison of mode (de)multiplexers designed by intelligent and traditional design methods with the same (like) function.

模式(分解)复用器类型	智能化设计结果 最大长度/ μm	传统设计结果 最大长度
二阶	3	十微米量级
四阶/八阶(含偏振态)	6/4.8	百微米量级

除了一些用于片上光互连系统的功能器件外, 器件之间的连接波导的紧凑度也是一个不可忽视的问题. 以弯曲波导为代表的器件间连接波导也可

应用智能设计方法来大幅缩减其占地面积. 弯曲波导是几乎所有的大规模光子器件集成系统中不可或缺的连接组件, 用来引导光束改变传播方向, 从而帮助光子器件集成系统合理布局. 如果不对弯曲波导做专门设计, 则实现光路 90° 转弯的弯曲波导需要很大的转弯半径才能保证不出现大的损耗. 这对于片上光互连系统等光子器件集成系统的集成化来说非常不利. 除此之外, 随着光的模式逐渐被应用到光互连系统中来拓展带宽, 支持多模式低损耗的多模弯曲波导也成为了光互连系统的必须组件^[135].

2022 年, Zhou 等^[133] 在提出超紧凑四阶模式(分解)复用器的同时也提出了一种单模式的 90° 弯曲波导, 其结构示意图如图 9(a) 所示. 该 90° 弯曲波导同样也是基于 DBS 算法设计, 非对称结构, 尺寸为 $2.4\ \mu\text{m} \times 2.4\ \mu\text{m}$, 将原本需要很大转弯半径和很大占地面积的普通弯曲波导进行了充分的压缩.

至于能够支持多模式低损耗的多模弯曲波导, 也已有许多基于传统方法和智能设计方法的成果出现. 2013 年, Jiang 等^[136] 提出了一种基于修正欧拉曲线的多模 90° 弯曲波导, 其设计示意图如图 9(b) 所示. 该弯曲波导由两个 45° 弯曲波导组成, 波导核心宽度为 $2.36\ \mu\text{m}$, 能够支持 4 种横磁(transverse magnetic, TM) 模式. 其有效半径可以

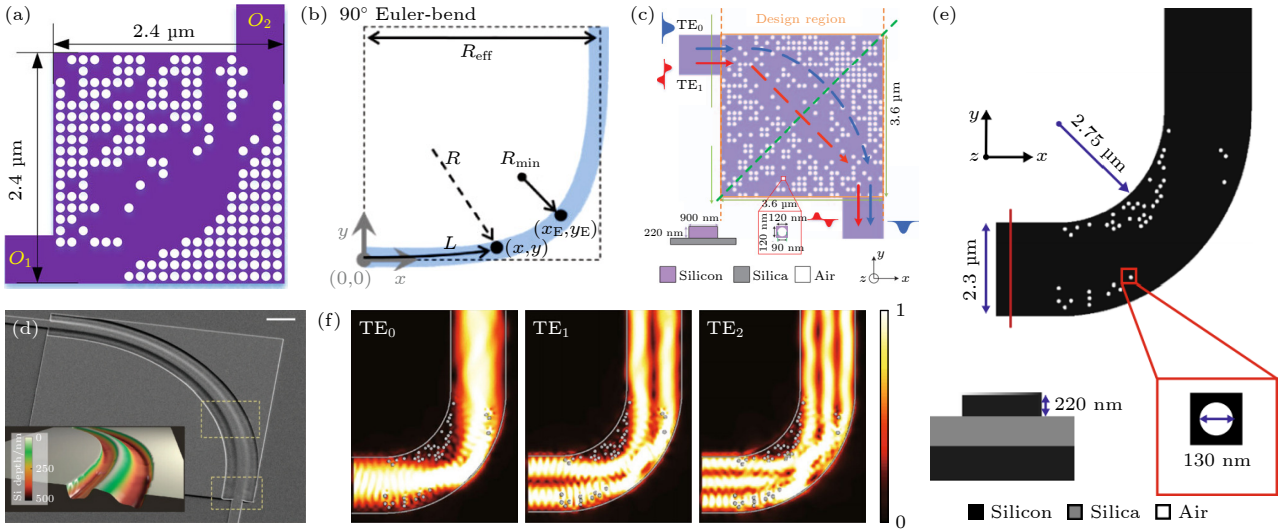


图 9 几种由不同方法设计的单、多模弯曲波导及对比 (a) 基于 DBS 算法设计的单模式 90° 弯曲波导 [133]; (b) 传统方法设计的基于修正欧拉曲线的多模 90° 弯曲波导 [136]; (c) 利用 DBS 算法设计的双模 90° 弯曲波导 [137]; (d) 基于 TO 的使用了灰度刻蚀技术的三模 90° 弯曲波导 [138]; (e) 利用 DBS 算法设计的三模 90° 弯曲波导 [139]; (f) 利用 DBS 算法设计的三模 90° 弯曲波导的模拟光场分布示意图

Fig. 9. Comparison of several single- and multi-mode bending waveguides designed by different methods: (a) Single-mode 90° bending waveguide designed by DBS algorithm [133]; (b) four-mode 90° bending waveguide based on modified Euler curve designed by conventional methods [136]; (c) two-mode 90° bending waveguide designed by DBS algorithm [137]; (d) three-mode 90° bending waveguide based on TO using grayscale etching technology [138]; (e) three-mode 90° bending waveguide designed by the DBS algorithm [139]; (f) schematic of simulated light field distribution of the three-mode 90° bending waveguide in (e).

小至 45 μm , 约为常规 90° 弯曲波导有效半径 (大约 175 μm) 的 1/4. 这是用传统方法设计的较为紧凑的多模弯曲波导的一个代表. 2018 年, Chang 等 [137] 基于一对非对称“Y”形结, 利用 DBS 算法设计了一种能够支持两种模式的双模 90° 弯曲波导, 其结构示意图如图 9(c) 所示. 该器件能够在 3.6 $\mu\text{m} \times 3.6 \mu\text{m}$ 尺寸范围内实现双模 90° 转弯, 并保持了很低的模间串扰. 为了实现 3 种横电 (transverse electric, TE) 模式的 90° 转弯, 2012 年, Gabrielli 等 [138] 提出了一种基于变换光学 (transformation optics, TO) 的三模 90° 弯曲波导. 该波导需要使用灰度刻蚀技术, 其结构在图 9(d) 中详细展示. 基于这种复杂的结构, 它们在 78.8 μm 的转弯半径下, 采用 4 μm 宽的波导实现了 3 种 TE 模式的 90° 转弯. 在该工作基础上, 2019 年, Liu 等 [139] 设计了同样功能的三模 90° 弯曲波导, 如图 9(e) 所示. 他们利用 DBS 算法在一段圆弧形波导基底上设计了这种三模 90° 弯曲波导, 该圆弧的转弯半径仅为 2.75 μm , 波导宽度为 2.3 μm , 与 Gabrielli 等 [138] 的工作相比, 器件尺寸同样有了量级程度的减小. 这又一次证明了智能设计方法在提升器件紧凑度方面的巨大作用. TE₀—TE₂ 三个模式在该三模 90° 弯曲波导中的模拟光场分布示意图如所图 9(f) 示.

以上介绍的几种由不同方法设计的弯曲波导, 相同或相似功能的智能化设计和传统设计结果在尺寸方面的对比如表 3 所列.

表 3 相同 (似) 功能的智能化设计和传统方法设计的 90° 弯曲波导的尺寸对比

Table 3. Size comparison of bendings designed by intelligent and traditional design methods with the same (like) function.

弯曲波导类型	智能化设计结果 转弯半径/ μm	传统设计结果 转弯半径/ μm
三模	2.75	78.8
其他多模	<3.6(双模)	45(4种TM模式)

3.2 利用智能设计方法优化传统设计结果得到的片上光互连器件

除了利用智能设计方法直接设计超紧凑片上光互连器件之外, 很多研究者还将目光放在了利用智能设计方法对传统设计的片上光互连器件的优化上. 他们将正向设计初步确定的器件结构作为初始结构, 利用智能设计方法的优化能力在超紧凑的尺度内对已有结构的光响应进行优化提升或者大幅减小原器件的占地面积.

如前文所述, 2020 年 Chen 等 [74] 利用 PSO 算

法优化反锥形耦合器结构设计出的片上偏振分束器就是一个典型的代表. 该器件的结构如图 10(a) 所示, 其设计过程如下: 首先, 按照传统方法的耦合模理论设计出大致的倒锥形波导耦合区域; 之后, 利用 PSO 算法优化耦合区域中波导的形状, 使得输入端口的 TM_0 模式能够在很短的距离内耦合至“交叉”出口. 相比于完全基于传统耦合模理论设计的同功能偏振分束器, 例如 2017 年 Wu 等 [140] 设计的如图 10(b) 所示的结果, 其能够将达到预期目标所需的耦合长度大幅度减小. Chen 等 [74] 设计的片上偏振分束器的耦合长度为 $5\ \mu\text{m}$, 而 Wu 等 [140] 设计片上偏振分束器需要在大于 $20\ \mu\text{m}$ 的长度内实现 TE_0 模式和 TM_0 模式的分束.

类似地, 2018 年, Huang 等 [141] 提出的偏振分

束器也是基于“智能设计方法优化传统光互连器件”这一原理. 按照他们所解释的原理, 传统的并列靠近的直波导若要发生耦合需要一段较长的耦合距离, 为了减小这段耦合距离, 他们选择在一段很短的耦合区域内加入硅材料进行辅助, 利用 AM 设计硅材料的特定位置分布, 从而使目标光束在这段很短的区域内就达到目标耦合效率. 他们设计了几种应用于不同波长条件下的偏振分束器, 这些器件的结构如图 10(c) 所示. 在这些器件中横向和纵向的模拟电磁场密度分布也如图 10(c) 所示.

除了偏振分束器之外, 2017 年, Piggott 等 [142] 利用带有制造约束的水平集方法设计的“50-50 定向耦合器”也是一个“智能优化传统光互连器件”的实例. 他们同样也是在一段耦合区域中改变耦合波

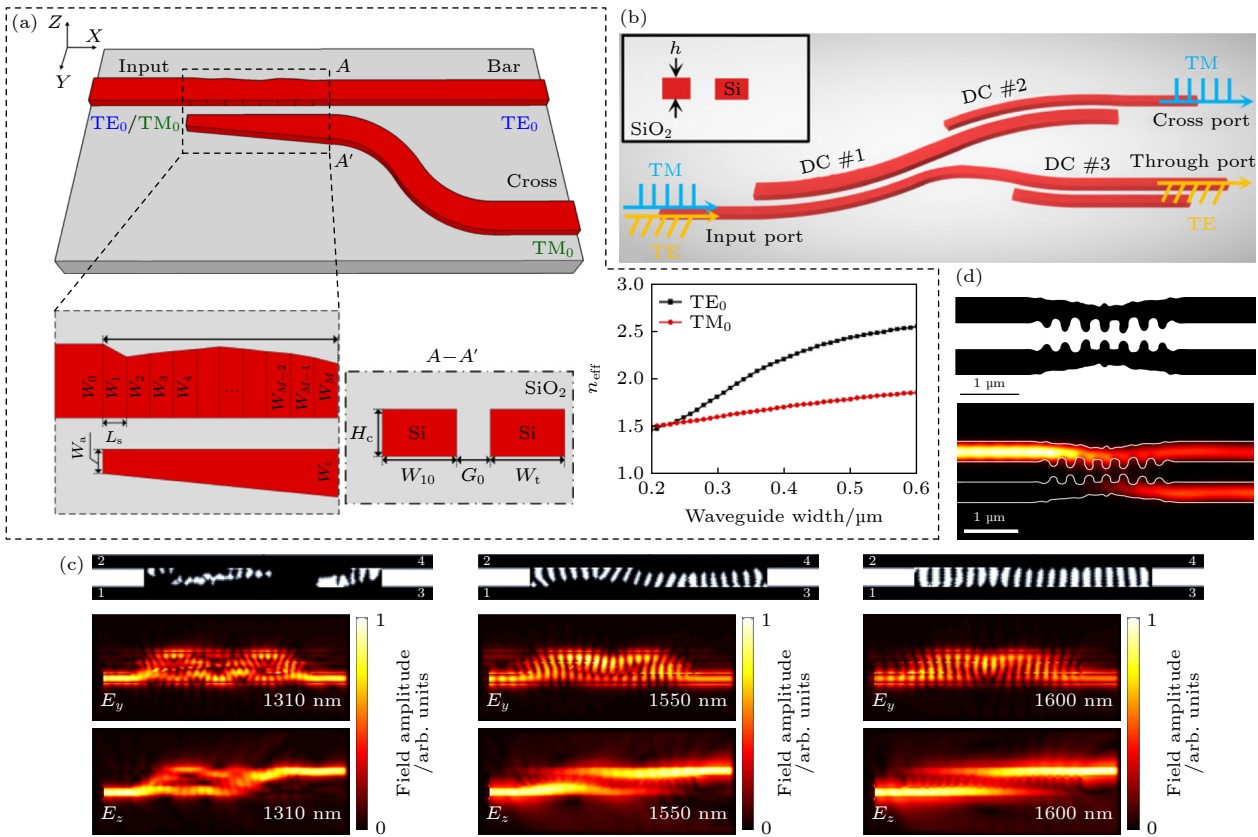


图 10 几种利用智能设计方法优化传统光互连器件得到的结果及其对比器件 (a) 利用 PSO 算法优化反锥形耦合器结构设计出的片上偏振分束器 [74]; (b) 完全基于传统耦合模理论设计的偏振分束器 [140]; (c) 利用 AM 优化耦合区域间隙设计的几种用于不同波长条件下的偏振分束器, 以及其中的横向和纵向的模拟电磁场密度分布 [141]; (d) 利用带有制造约束的水平集方法设计的功率分束器, 以及其中的模拟电磁场密度分布 [142]

Fig. 10. Several results obtained by using intelligent design methods to optimize conventional optical interconnect devices, and their comparison devices: (a) On-chip polarization beam splitter designed by using the PSO algorithm to optimize the anti-conical coupler [74]; (b) polarization beam splitters designed by conventional methods [140]; (c) several polarization beam splitters designed for different wavelength conditions using the AM to optimize the coupling region gap, and their simulated electromagnetic field density distributions [141]; (d) power splitter designed using a level set method with manufacturing constraints, and the simulated electromagnetic field density distribution in it [142].

导的形状来辅助提升耦合效率,从而大幅减小了光束耦合至目标比例所需要的长度.该器件的结构示意图以及其中的模拟电磁场密度分布如图 10(d)所示.

4 智能化设计的可调控片上光互连器件

片上光互连器件的超紧凑化对光互连的发展起到了极为重要的推动作用.与此同时,光互连的进一步发展还体现在对功能选项的需求的增加上.例如,如果能够实现互连光路的自主开关、不同情境下对复用因素的选择性提取、实时控制光路中的光场强度等,那么光互连的应用范围与应用场景都会得到极大地拓展.

过去一段时间,人们尝试了利用硅波导的电光、热光效应实现对光子器件的调控^[143,144].基于电光、热光效应设计的可调控器件拥有成熟的技术,但有以下不足:硅材料折射率的改变范围小,导致器件尺寸大,与片上光互连器件紧凑化、集成化的趋势相违背;需要持续的外界能量输入来维持调控,能耗较大.因此,将可以在极紧凑空间内大幅度改变折射率的相变材料集成到光互连器件上就成为了可调控片上光互连器件的一大重要发展趋势^[145].

另一方面,利用传统的设计方法设计可调控片上光互连器件时难以避免大量的理论计算或者参数扫描,这使得研究者在设计过程中要付出大量的人力成本.由于智能设计方法对不同材料具有广泛的兼容性,因此智能设计方法正在成为一种方便快捷的设计可调控片上光互连器件的手段.

4.1 用于可调控光子器件设计的相变材料

具有非易失性、可调控功能的光互连器件是下一代光子集成回路 (photonics integrated circuit, PIC) 的重要组成部分.目前,可调控光子器件已有多种实现方法.例如,利用内嵌的加热器改变硅波导的温度从而微调器件的折射率^[143];利用基于谐振器的开关帮助提高调制强度^[146];利用等离子体实现器件可调控^[147]等.但是,这些方法都存在一些较难克服的弊端.例如,内嵌加热器的尺寸一般比较大并且功耗较高;基于谐振器的开关对温度的

波动比较敏感;等离子体虽然具有超快和高能效的特点,但是其可拓展性受到高插入损耗和传播损耗的限制.

相变材料 (phase change materials) 的出现和兴起为下一代片上光互连器件提供了新的解决方案.相变材料是一种具有多种稳定结构和电子态的材料^[148,149].这些稳定结构和电子态 (例如多种相变材料的“晶态”和“非晶态”) 之间可以互相转化,称为相变.一个典型的相变过程的示意图如图 11(a)所示.相变可以通过外部加热^[150]、调节作用在相变材料上的光脉冲^[151]或电流强度^[152]的方式来实现.很多种相变材料的晶态 (crystalline) 和非晶态 (amorphous) 之间存在明显的折射率差 (Δn), 通过将这些相变材料集成到光子器件中可以对光进行大范围的相位和振幅调制^[153].

除了能够提供明显的折射率变化之外,很多相变材料还具有可多次重构、相变速度快、相态非易失的特性.一些相变材料能够进行 10^{12} 次的反复相变,有些相变材料的相变切换速度可达到纳秒量级,很多相变材料的晶态或者非晶态在不消耗额外能量的情况下可以稳定存在多年^[154–156].这些特性使得近几十年来很多相变材料在可调控光器件领域得到了非常广泛的应用.下面选取几种片上光互连之外的相变材料的应用场景加以展示,如图 11(b)–(d)所示.

锗锑碲 ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, GST) 是目前应用最广泛的相变材料之一,其晶态和非晶态之间有着巨大的折射率差.当入射波长为 1550 nm 时,两种状态的折射率差值为 3.56,并且两种状态在较低的温度下都可以稳定存在.GST 在光开关、光子神经网络以及光学存储等领域展现出了巨大的应用潜力^[157–162].但是由于 GST 的复折射率的虚部值较大,导致了较大的吸收损耗,在应用时需要考虑这一问题.锗锑硒碲 ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Se}_4\text{Te}$, GSST) 被认为是 GST 的低损耗替代品^[163].密度泛函理论模型表明,通过适当的替换,可以设计出具有特定带隙和折射率的材料^[163].在 GSST 中,部分碲元素被硒元素所取代,导致带隙增加,从而减少近红外波段的光的损耗.在降低损耗方面,锑基硫族化合物硫化锑 (Sb_2S_3) 和硒化锑 (Sb_2Se_3) 也是一类非常有前景的材料^[164,165].这两种材料在 C 波段范围内的本征吸收损耗几乎为 0 (复折射率的虚部实数值 $k < 10^{-5}$)^[165].此外,它们的非晶态的折射率实部比 GST 更接近硅的折射率

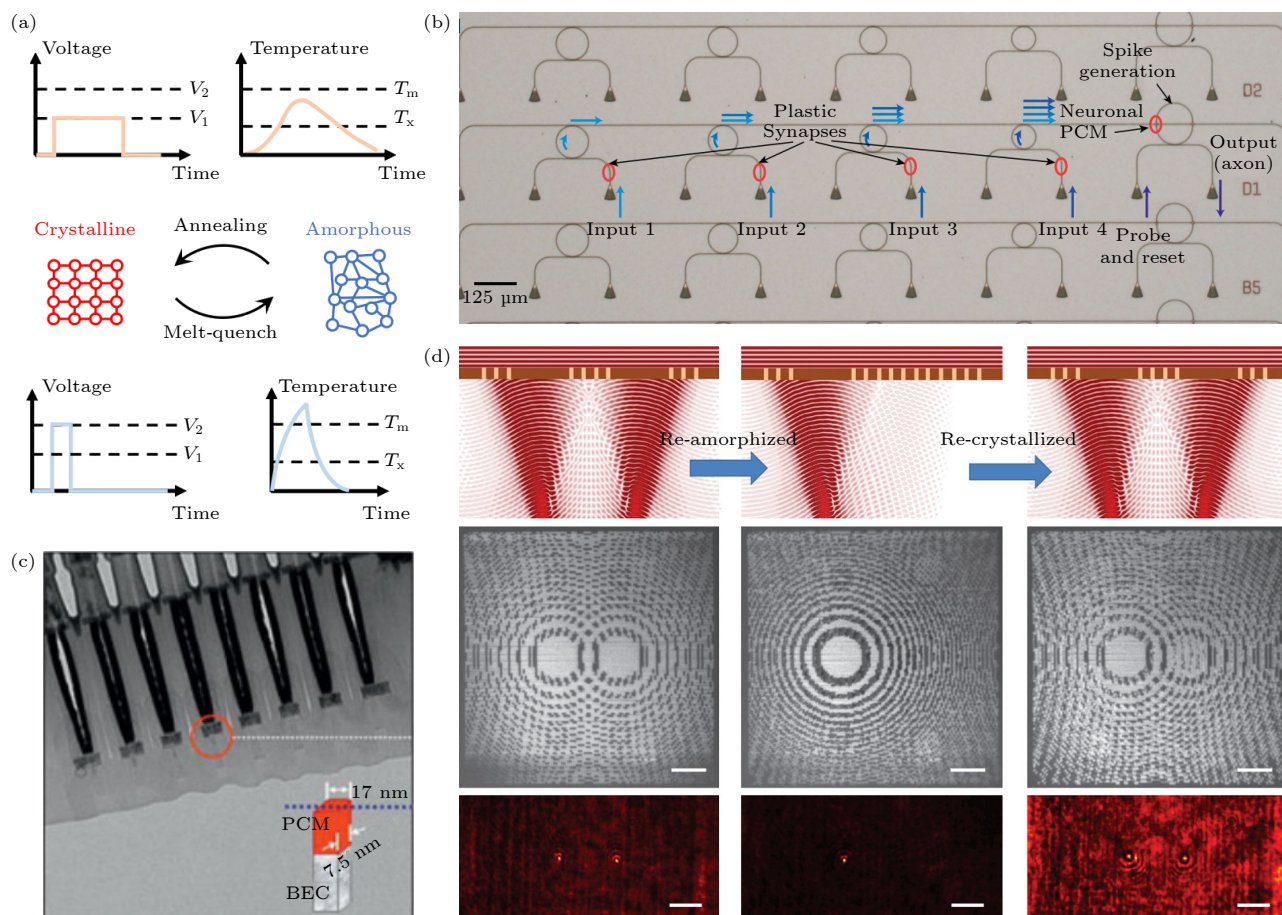


图 11 相变材料的典型相变过程和相变材料在可调控光器件领域的应用 (a) 一个典型的相变过程的示意图; (b) 基于相变材料设计的全光神经突触网络; (c) 基于相变材料设计的相变存储器单元; (d) 基于相变材料设计的可调控超表面

Fig. 11. Typical phase change process of phase change materials and their application in the field of controllable optical devices: (a) Diagram of a typical phase change process; (b) all-optical synaptic networks based on phase change materials; (c) phase-change memory cell based on phase change material; (d) controllable metasurface based on phase change material.

实部, 与硅波导具有良好的模式匹配^[165]. 与 GST 相比, 硫化锑和硒化锑的低损耗优势在大规模光子集成电路和可编程门阵列等领域中有着巨大的应用前景. 除了上述几种硫系相变材料之外, 二氧化钒 (VO_2) 因为其较低的转变温度和极快的电开关速度在敏感器件以及光信息存储等领域也备受关注^[166]. 此外, 硒化铟 (In_2Se_3) 两个转换态中间附近的折射率与硅的折射率相近, 根据此特性设计出的超透镜可以实现聚焦长度在正负值之间进行切换^[167].

4.2 智能化设计的可调控片上光互连器件

随着片上光互连器件及其所在系统结构复杂度和功能复杂度的增加, 人们对设计功能可调控的片上光互连器件的需求日渐强烈. 一方面, 可调控片上光互连器件能够在单个器件区域内实现多种功能, 从而减小了潜在的器件需求数量; 另一方面,

可调控片上光互连器件可以大大增加片上集成系统的功能选项.

近些年来, 已经出现了很多利用传统方法设计的可调控片上光互连器件. 它们的功能涵盖光开关、交叉波导等诸多光互连应用领域, 大大增加了所在系统的功能自由度, 为所在系统的应用前景提供了丰富的想象空间. 例如, 2019 年, Xu 等^[150]提出了几种低损耗、宽带宽的可调控方向性耦合开关, 并对它们进行了加工和测试. 它们的光学显微镜图和细节部分的 SEM 图如图 12(a) 所示. 他们利用非对称定向耦合器的基本设计, 在器件基本结构上引入 GST 材料, 实现了“ 1×2 ”和“ 2×2 ”的两种可调控光开关. 操作者可以通过改变 GST 材料的相态来选择从入射端口入射的光从哪个端口出射. 器件的耦合区域长度约为 $30 \mu\text{m}$, 属于紧凑的程度. 器件的插入损耗为 1 dB 左右, 并且能够在

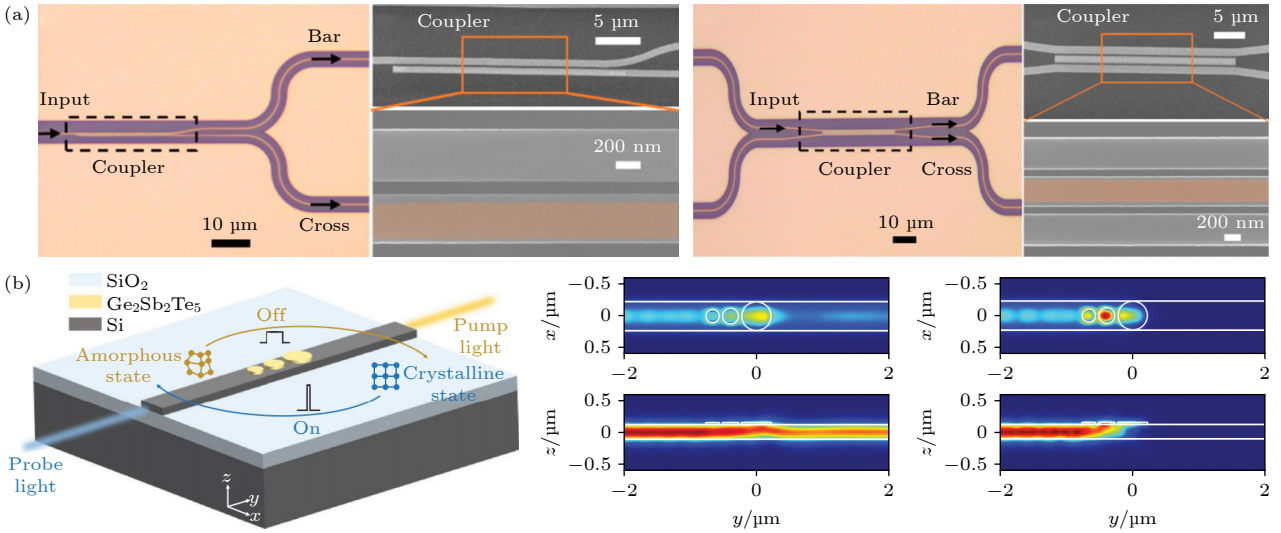


图 12 基于传统方法设计的可控切片上光互连器件 (a) 几种可控方向性耦合开关的光学显微镜图和细节部分的 SEM 图^[150]; (b) 一种高消光比的可控光开关的结构示意图和调控效果光场图^[157]

Fig. 12. Controllable on-chip optical interconnection devices designed by traditional methods: (a) Optical microscope images of several controllable directional coupling switches and the SEM images of their details^[150]; (b) structural and performance of the optical switch with a high ER^[157].

30 nm 宽的波段内保持 10 dB 的串扰. 这些可控光开关除了可用于光互连之外, 还可用于神经形态计算、量子计算和微波光子学等方面. 又如, 2022 年, Li 等^[157] 利用小的 GST 纳米盘的局部共振构建了一个芯片上的可控光开关. 他们通过在硅波导上设置多个级联的 GST 纳米盘来有效地散射和吸收入射光, 从而获得了高的消光比 (extinction ratio, ER), 如图 12(b) 所示. 3 个 GST 纳米片的总体积仅为 $0.229 \mu\text{m}^2 \times 35 \text{ nm}$, 所占空间极小. 该开关在实验验证中可以实现高达 27 dB 的高消光比, 具有对比度高、占地面积小、能耗低、结构稳定性好等优点.

虽然上述基于传统方法设计的可控切片上光互连器件能够实现非常丰富的功能, 且能够达到很高的性能, 但是它们依然避免不了高的人力成本. 近些年来, 由于智能设计方法对不同材料具有广泛的兼容性, 可以像设计硅器件一样设计基于相变材料的器件, 因此, 利用智能设计方法直接设计相变材料正在成为一种方便、快捷、应用广泛的可控切片上光互连器件的设计手段. 利用智能设计方法设计的可控切片上光互连器件的功能, 除了能够涵盖前文所述的可控光开关、交叉波导等方面外, 还包含了可控模式转换器、可控功率分束器等新鲜的概念. 而在具体设计方法的选择方面, 基于 DBS 算法的智能设计方法凭借其独特的优势受到

了广大研究者的欢迎.

2020 年, Chen 等^[168] 利用 DBS 算法优化调整 GSST 在硅波导中的分布, 从而设计了一种宽带的可控模式转换器, 其结构图以及工作原理如图 13(a) 所示. 当 TE_0 模式进入这个模式转换器时, 通过调整 GSST 的相态, 该模式转换器可以选择性地输出 TE_0 模式或 TE_1 模式. 器件的尺寸为 $22 \mu\text{m} \times 3.5 \mu\text{m}$, 属于紧凑的程度. 2021 年, 国防科技大学杨俊波课题组^[169] 基于 DBS 算法设计了一系列的单模和多模纳米光子波导开关. 其中, 三模可控光开关的结构示意图如图 13(b) 所示. 他们通过在硅波导上“打孔刻蚀”并填充相变材料 GST, 来改变所设计区域的有效折射率. DBS 算法可以帮助确定 GST 在硅波导中的分布. 当目标模式的光进入所设计的器件后, 操作者可以通过改变 GST 的相态来实现该光波的通过或阻断. 同样是在 2021 年, Delaney 等^[170] 提出了一种基于像素化相变材料的功率分束比可调的功率分束器. 其结构示意图如图 13(c) 所示. 他们通过在 MMI 的上表面之上覆盖薄层 (23 nm) 硒化锑材料并选择性改变部分材料的相态从而实现 MMI 两输出端口输出功率之比可控的功能. 硒化锑材料的相态分布由 DBS 算法确定. 该器件的尺寸为 $22 \mu\text{m} \times 3.5 \mu\text{m}$, 相比于最先进的干涉仪有了量级程度的减小. 面向相似的功能目标, 2022 年, 国防科技大学杨俊波

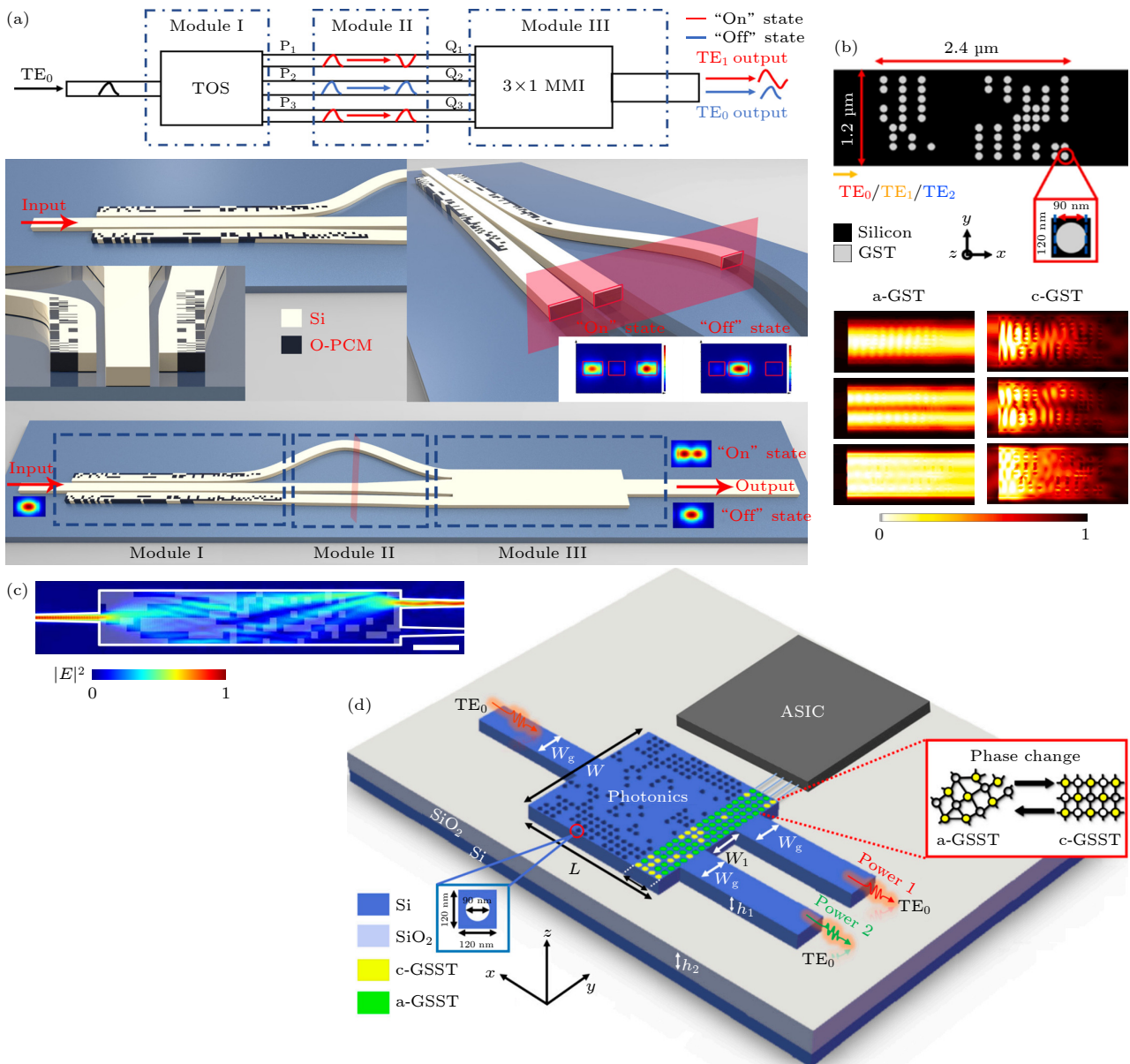


图 13 利用智能设计方法设计的可控片上光互连器件 (a) 基于 DBS 算法设计的一种可控模式转换器^[168]; (b) 基于 DBS 算法设计的可控三模式纳米光子波导开关^[169]; (c) 基于像素化相变材料设计的功率分束比可调的功率分束器^[170]; (d) 基于 DBS 算法设计的任意功率分束比的功率分束器^[171]

Fig. 13. Controllable on-chip optical interconnection devices designed by intelligent methods: (a) Controllable mode converter based on the DBS algorithm^[168]; (b) controllable three-mode nanophotonic waveguide switch based on the DBS algorithm^[169]; (c) power splitter with arbitrary split ratio based on pixelated phase change material^[170]; (d) power splitter with arbitrary split ratio based on the DBS algorithm^[171].

课题组^[171]同样利用 DBS 算法设计了一种任意功率分束比的功率分束器. 该器件的主体由两部分组成, 第 1 部分为仅刻蚀的方形硅区域, 刻蚀圆孔的分布由 DBS 算法确定. 第 2 部分为全部填充了 GSST 的四列刻蚀圆孔, 如图 13(d) 所示. 通过单独改变第二部分每个圆孔中 GSST 的相态, 可以对两个输出通道的透过率之比进行任意地配置. 相比于前一年 Delaney 等^[170]的工作, 该文章中提出的器

件尺寸更小、调控精度更高. 这个分束器拥有的极小尺寸和数字可编程性的优点, 不仅能够应用在光互连系统中, 还可以有助于光电混合芯片的实现.

5 智能化设计的系统集成化片上光互连器件

第 3 节介绍了智能设计方法带来的片上光互

连器件紧凑度的提升. 智能化设计的片上光互连器件, 相比于传统设计结果, 尺寸往往会有数量级程度的减小, 这对片上大规模 PIC 的发展具有非常重要的意义. 但是, 要想实现片上大规模 PIC 的集成, 还需要考虑器件间、模块间、芯片间的连接和布局. 因此, 这就要求片上大规模 PIC 的重要组成部分——片上光互连系统要尽可能地将器件间的连接部分的尺寸压缩, 并适应片上大规模 PIC 的布局方式.

目前, 为了进一步提升片上光互连系统的集成度和适应度, 聚焦于设计集成化的片上光互连器件, 人们努力推进如下几个方面的进展. 第一是设计多用途集成光互连器件. 由于智能设计方法不受传统设计逻辑的局限, 因此它可以尝试将多种功能集成在一个更小的空间内. 通过设计具有多种用途的片上光互连器件, 将原本的一片功能区域压缩为一个器件, 取消器件间的连接部分, 从而大幅度提升整个光互连系统的集成度. 第二是将多个功能器件紧密排列, 设计例如“全数字化集成模块”的整体光互连区域. 考虑到将某些功能集成到一个器件上可能存在较大的难度, 可以将已设计完成的几个尺寸相近的器件紧密排列并再次进行整体优化, 设计

模块化集成的光互连器件. 第三是设计集成化层间光互连器件. 随着单层芯片上 PIC 的集成度提升越来越困难, 光子芯片开始向多层结构的方向发展. 因此芯片的层间光互连成为了片上大规模 PIC 的迫切需要, 集成化层间光互连器件也成为了提升光互连系统集成度的关键器件. 经过一系列的努力, 人们在以上三方面取得了大量的成果.

5.1 智能化设计的多用途集成光互连器件

多用途集成光互连器件是指一个集成了多种光互连功能的、可应用于不同光互连场景、服务于不同光互连需求的固定器件. 在不同的应用场景中, 该器件可以发挥不同的光互连的作用. 多用途集成光互连器件的作用如同将一片功能区域中的若干个器件压缩为一个器件, 能够在保证系统功能完整的前提下再次大幅缩减系统的占地面积, 可以说是一种片上光互连器件高度集成化的理想情况.

虽然将若干功能器件的功能集成到一个单独的固定器件上的实现难度很大, 但是它所能带来的效益依然吸引着研究者们. 例如, 2014 年, Piggott 等^[172]提出了一种波长分解复用光栅耦合器, 其扫描电子显微镜成像图如图 14(a) 所示. 该器件作为

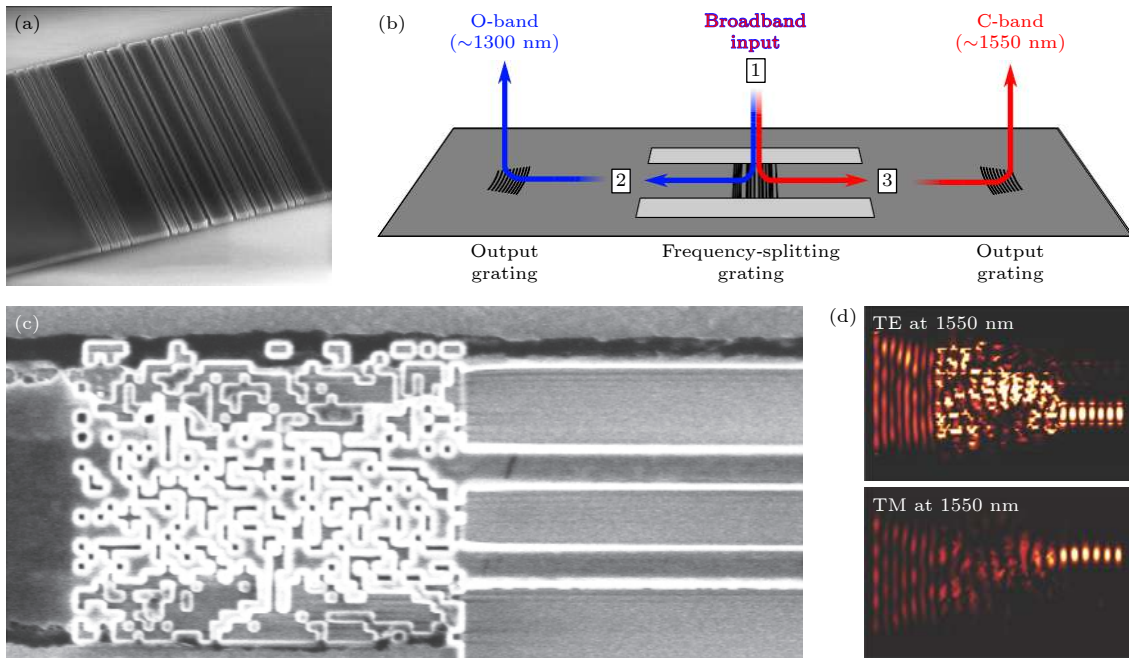


图 14 智能化设计的多用途集成光互连器件 (a) 波长分解复用光栅耦合器的 SEM 成像图^[172]; (b) 波长分解复用光栅耦合器的工作原理; (c) 模式转换偏振分束器的 SEM 成像图^[79]; (d) 不同偏振态的光输入模式转换偏振分束器后该器件横截面中的模拟电磁场密度分布^[79]

Fig. 14. Multi-purpose integrated optical interconnection devices designed by intelligent methods: (a) SEM image of the wavelength demultiplexing grating coupler^[172]; (b) working principle of the wavelength demultiplexing grating coupler; (c) SEM image of the mode-switching polarization beam splitter^[79]; (d) the density distribution of the simulated electromagnetic field in the device^[79].

一种光栅耦合器,基本作用是将空间中的光束耦合至片上.但它与普通的光栅耦合器不同的是,它能够将在O波段(波长大约为1300 nm)和C波段(波长大约为1550 nm)的光耦合至两个不同的波导中并向两个不同的方向输出,其工作原理示意图如图14(b)所示.作为一个固定器件,它既可以用于O波段工作环境中,又可以在C波段工作环境中使用,实现光互连系统的光源输入或实现空间-片上光互连.又如,Shen等^[79]在2015年采用智能设计方法设计的模式转换偏振分束器也是一种多用途集成光互连器件,如图14(c)所示.当它被用于多偏振态系统中时,它可以当作普通的偏振分束器使用,而当它被用于多模式系统中时,它又可以当作模式转换器来使用.不同偏振态的光输入该器件之后该器件横截面中的模拟光场分布如图14(d)所示.

5.2 智能化设计的模块化集成光互连器件

在很多片上光互连系统中,单独的片上光互连器件之间通常采用大量直波导和弯曲波导连接.长距离的波导具有较大的尺寸和较高的损耗,特别是一些传统方法设计的弯曲波导,其曲率半径要达到数十微米才能使损耗降到最低.大量的直波导和弯曲波导不可避免地导致片上光互连系统的尺寸和损耗的增加.这是一个可能严重制约片上光互连系统发展的问题.为了解决这个问题,国防科技大学

杨俊波课题组^[69]提出了一种设计模块化集成光互连器件的方法.首先,利用DBS算法等智能化设计算法设计“数字化”光互连器件.然后,将这些器件紧密排列并再次对整体进行优化,从而得到满足需求的模块化集成光互连器件.如图15(a)所示的可调谐的模式产生器就是一个基于此方法设计的模块化集成光互连器件^[173].它由一个可调谐的非对称定向耦合波导和一个模分复用器直接连接组成,避免了器件之间通过波导相连,从而大幅度减小了整个模块的尺寸.基于同样的设计方法,该课题组还设计了一个图15(b)所示的偏振模式转换器,其长度仅为10 μm.仿真结果显示其插入损耗小于1.1 dB,消光比大于20.5 dB^[174].相比利用模式杂化理论设计的偏振转换器,基于此方法设计的模块化集成光互连器件的尺寸减小了约60 μm^[175].

模块化集成的概念还可进一步拓展至非“数字化”结构、无需整体优化的器件.例如,Huang等^[176]在2020年设计的聚焦波长分解复用器,如图15(c)所示,可以看作是光栅耦合器和波长分解复用器直接连接集成的模块化集成光互连器件.此器件的功能是将空间入射的宽带光分解为两种不同波长的光并从片上的两路分别输出.此器件虽然在两个部分连接后未再进行整体优化,但是由于其两个部分的性能均未受到连接的影响,因此可以直接作为一个模块化集成光互连器件使用.又如,2022年,Ruan等^[177]提出了一种基于双层形状伴随法

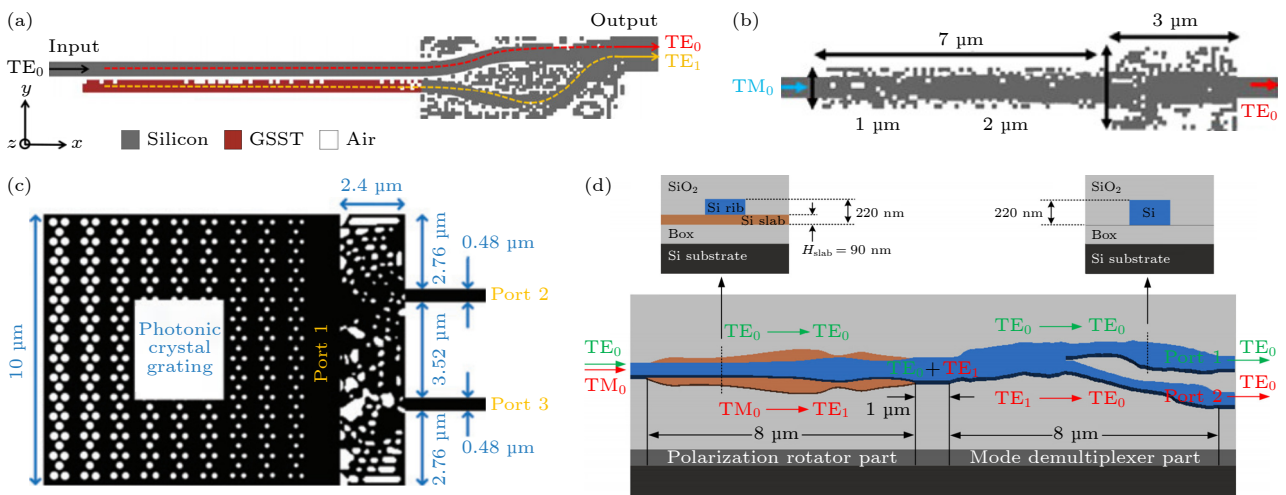


图 15 智能化设计的模块化集成光互连器件 (a) 模块化集成的可调谐模式产生器^[173]; (b) 模块化集成的偏振转换器^[174]; (c) 由光子晶体光栅和聚焦波长解复用器直接相连得到的模块化集成光互连器件^[176]; (d) 模块化集成的偏振分束转换器,由双层结构的偏振转换器和模式分解复用器直接相连而成^[177]

Fig. 15. Modular integrated optical interconnect devices designed by intelligent methods: (a) Modular integrated tunable mode generator^[173]; (b) modular integrated polarization converters^[174]; (c) modular integrated focusing wavelength demultiplexer^[176]; (d) modular integrated polarization beam-splitting converter^[177].

(bi-level shape adjoint method) 和拓扑伴随法 (topology adjoint method) 设计的偏振分束转换器 (polarization splitter-rotator), 其结构示意图如图 15(d)所示. 该器件由双层结构的偏振转换器和模式分解复用器直接相连而成, 通过选择性偏振转换和模式分解复用将 TM_0 和 TE_0 两种偏振态的混合光波分为两路 TE_0 输出.

模块化集成器件可以避免将多个功能集成到一个器件上时所面临的设计方面的困难, 是一种简单、有效地提升片上光互连系统集成度的思路.

5.3 智能化设计的集成化层间光互连器件

目前, 大多数片上光互连系统都设计在单层平台上, 成二维排布的方式. 随着对系统集成度要求的提高, 整个系统在光路布局等方面将面临越来越大的困难. 很多时候为了解决光路布局问题, 光互连系统不得不使用大量的交叉波导、弯曲波导等器件, 这不仅对系统集成度的提升造成很大的影响, 还在光互连系统中引入了较高的插入损耗和串扰 [133]. 另一个方面, 随着人类对光子芯片功能需求的逐渐

增多, 在二维空间内单个器件的设计也会越来越复杂. 过度复杂的器件在设计时往往面临一些困难, 最终结果也很难满足全部的需求. 例如, 多通道的模式和偏振复用是增加光互连带宽的有效手段, 近些年来, 对多通道的模式和偏振复用器的需求十分强烈 [178]. 过去, 基于传统设计方法, Wang 等 [134] 利用不同模式的非对称定向耦合器级联组成了 8 通道的模式和偏振复用器; 同样基于非对称定向耦合原理, 该团队 [179] 还设计了 10 通道的双偏振模式复用器. 然而这些基于耦合原理的器件占地面积较大, 不符合大规模集成的要求. 虽然 Xie 等 [132] 采用 DBS 算法设计了超紧凑的 4 模式模分复用器, 但是如果在智能设计方法中大量增加设计目标, 比如直接优化 8 通道或者 10 通道的模分和偏振复用器, 不仅会导致优化时间成本剧增, 并且多目标优化可能会导致器件最终的性能不够理想.

三维电子集成电路给大规模 PIC 的设计带来了很好的启发 [180]. 人们试图通过设计多层 PIC 来解决上述两个问题. 多层设计的大规模 PIC 需要大量层间光互连系统提供通信. 实现层间光互连的

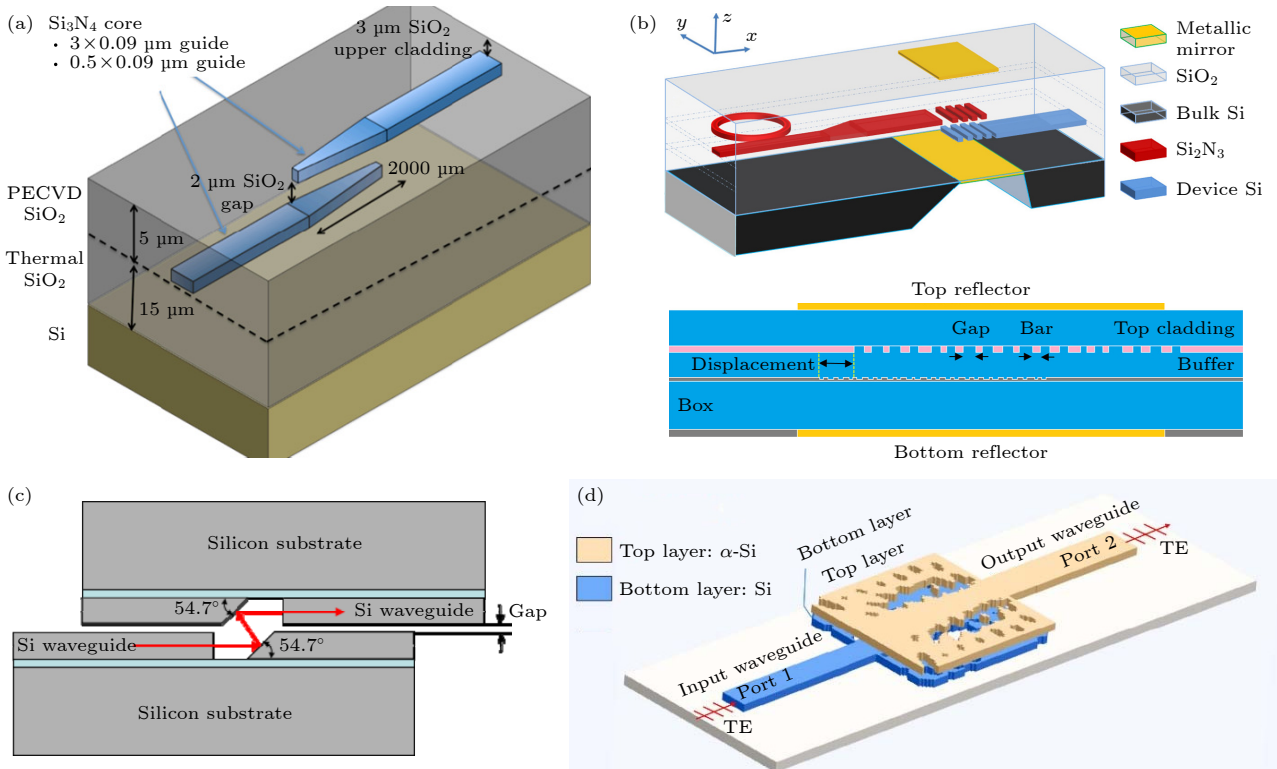


图 16 智能化设计的多层光互连系统 (a) 基于氮化硅波导的层间垂直耦合器 [181]; (b) 利用 GA 设计的层间光栅耦合器 [182]; (c) 基于硅波导的层间反射镜 [183]; (d) 采用智能设计方法设计的硅层间光学通道 [184]

Fig. 16. Multi-layer optical interconnection systems designed by intelligent methods: (a) Interlayer vertical coupler based on silicon nitride waveguide [181]; (b) interlayer grating coupler designed by the GA [182]; (c) interlayer reflectors based on silicon waveguides [183]; (d) silicon interlayer optical channel designed by intelligent method [184].

关键技术是设计层间光互连器件, 包括定向耦合器、光栅耦合器、反射镜等. 近些年来, 人们基于传统设计方法和智能设计方法, 设计了很多的层间耦合器件. 例如, 基于氮化硅波导, Moreira 等^[181]设计和加工了一个层间垂直耦合器, 其耦合区域长度为 2000 μm , 实现了在 1550 nm 波长的 0.2 dB 的耦合损耗, 如图 16(a) 所示. Sodagar 等^[182]利用 GA 为 Si/SiO₂/SiN 多层材料平台设计了具有单/双金属反射器的层间光栅耦合器, 如图 16(b) 所示. Zheng 等^[183]通过反射镜实现了 2.5 dB 耦合损耗的光接近通信 (optical proximity communication), 通过一对平行的反射镜, 可将一个硅平面上的信号光束大带宽地传输到另一个硅平行平面上, 如图 16(c) 所示. 这些传统方法设计的层间耦合器件, 虽然能够实现层间光互连, 但依然难以避免紧凑度不足、难以适应高度集成的弊端. 为了解决这一问题, Yu 等^[184]采用智能设计方法设计了集成的层间光互连器件组 (硅层间光学通道), 其尺寸仅为 2.8 μm × 2.8 μm , 在 1550 nm 波长的插入损耗为 0.55 dB, 在 1451—1712 nm 的带宽范围的插入损耗小于 1 dB, 如图 16(d) 所示.

目前, 随着多层微纳加工技术的日渐成熟, 层间光互连系统作为一个能够快速提升系统整体集成度的新技术, 已经凭借其设计简单、低损耗、低串扰的独特优势逐渐在大规模多层 PIC 中发挥重要作用.

6 总结和展望

6.1 本文总结

片上光互连凭借着其带宽大、速率高、成本低、能耗低、抗电磁干扰等优势, 逐渐成为了解决芯片间通信速率和通信容量壁垒的重要手段. 近些年来, 在多种智能设计方法的辅助下, 目前片上光互连器件已经取得了超紧凑化、可调控化、系统集成化等可喜的进展, 也在这些方面呈现出了更进一步发展的趋势. 本文综述了目前最为常用的几种片上光互连器件的智能设计方法, 并详细分析了片上光互连器件的几个重要的发展趋势.

本文归纳总结了几种有代表性的片上光互连器件的智能设计方法, 包括几种基于经典智能算法的智能设计方法和基于神经网络的智能设计方法.

这些片上光互连器件的智能设计方法都具有非常广泛的应用范围和非常大的影响力. 它们不仅能应用于片上器件, 还能应用于空间光调制器件, 同时不仅能应用于光互连, 还能应用于光计算、光子神经网络、超透镜、超表面等新兴应用领域. 在这些智能设计方法的帮助下, 信息光学、微纳光电子学等学科的各个分支领域都开启了迅猛的发展.

本文从不同的方面介绍了智能化设计的片上光互连器件一个重要而显著的优势: 器件超紧凑化. 一方面, 研究者可以利用智能设计方法直接设计出满足预设目标的光互连器件, 无需为其提供专门的初始结构; 另一方面, 研究者也可以选择应用智能设计方法对传统设计的光互连器件进行优化, 从而大大减小其占地面积, 提升紧凑度. 本文通过若干组功能相同 (近) 的智能化设计器件与传统设计器件的对比, 显示了智能化设计对片上光互连器件紧凑度提升的明显作用.

本文介绍了基于相变材料的智能化设计的可调控的片上光互连器件. 实现光子器件的可调控意义非凡, 不仅能使器件或系统的功能更加灵活, 还能通过多种功能的集成来大幅减小器件或系统的占地面积. 传统的实现光子器件可调控的方法存在诸多弊端, 比如硅材料折射率的改变范围小、需要持续供能等. 相变材料凭借其折射率变化范围大、状态非易失的优良特性正在成为可调控光子器件的重要材料选择. 智能化设计的可调控片上光互连器件的功能丰富多样, 涵盖了可调控光开关、交叉波导、模式转换器、功率分束器等诸多方面, 显示出了智能设计方法和相变材料广泛的适应性和实用性.

本文从三方面介绍了人们通过设计集成化片上光互连器件来提升片上光互连系统的集成度和对 PIC 布局适应度的努力. 一是设计多用途集成光互连器件. 通过将多种功能器件的功能集成在一个固定的多种用途集成光互连器件上, 来大幅度提升整个器件系统的集成度. 二是将多个功能器件紧密排列, 设计多功能的模块化集成器件. 这样可以避免将某些功能集成到一个器件上时存在的设计难度. 三是设计集成化层间光互连器件. 为了解决在单层芯片上实现大规模 PIC 时遇到的器件复杂度、光路布局等瓶颈, 人们开始发展多层大规模 PIC. 因此, 需要大量的层间光互连系统作为连接.

集成化层间光互连器件作为一种实现层间光互连的重要方式为 PIC 集成度的提升做出了很大贡献。

智能化设计为片上光互连器件的发展提供了崭新的思路和充足的动力,在相变材料等新兴材料、多层设计等新兴设计思路的辅助下,智能化设计的片上光互连器件的发展更加具有广阔的想法空间。

6.2 智能化设计片上光互连器件的未来发展趋势展望

智能化设计的片上光互连器件作为一个新兴的领域,其未来的发展方向、发展思路自由且丰富。本节根据前文所做的总结梳理,提出以下几个方面的展望。

首先在设计方法方面。第一,几十年来,经典的智能算法已经在各个学科领域得到了广泛的应用,但是考虑到一些算法的优化思路与片上光子器件的设计需求匹配度不高,还有一些算法存在收敛速度慢、自由度较低、鲁棒性较差的弊端,因此期望未来出现更多在片上光子器件设计领域适应性强的、性能优良的算法。第二,神经网络作为一种强大的计算机工具已经在人们生产生活等各个方面一再地证明了其适应性和能力。未来随着计算机技术的进一步发展,更加先进的网络架构也会随之出现。与此同时,经典智能算法与神经网络的结合也会不断给本领域带来崭新的成果。第三,每一种算法都是为了解决一类问题而发明和使用的,随着片上光子器件的设计逐渐复杂化,单一的算法解决全部设计问题的难度也会随之增大。因此,未来将几种算法的优势结合起来,利用几种算法联合优化某一功能器件的情况将会越来越多地出现在人们眼前。

其次在器件功能方面。第一,相变材料的卓越性能已经深深地吸引了广大研究者的注意。未来可以预见的是,基于相变材料的可调控光子器件将会层出不穷。同时,基于智能设计方法对不同材料的广泛适应性,智能设计的超紧凑可调控片上光互连器件将会为片上光互连系统的发展和应用做出重大贡献。第二,虽然多用途集成光互连器件的实现难度很大,但是它所能带来的效益依然吸引着广大研究者。可以期望的是,未来随着智能设计方法的不断进步,多功能、多用途的片上光互连器件将会越来越常见。

最后在系统性能方面。第一,正如目前在电子芯片领域可以看到的那样,人们对单独器件的紧凑度、系统整体的集成度的追求是没有止境的。有强大的需求动力作为牵引,再加上使用材料、设计方法方面的不断创新,片上光互连器件的紧凑度一定会得到进一步提高。第二,片上光互连系统作为芯片间数据传输的桥梁,其通信带宽、通信速率等技术指标无疑是研究者们最关心的。伴随着波分复用技术、偏振复用技术、光时分复用技术和空分复用技术等先进技术的不断发展和应用,可以期望的是,未来片上光互连系统的通信带宽将得到进一步增大,通信速率将得到进一步提高。

参考文献

- [1] Zhou Z P 2021 *Silicon-based Optoelectronics* (Beijing: Science Press) p361 (in Chinese) [周治平 2021 硅基光电子学 (北京: 科学出版社) 第 361 页]
- [2] Zhou P J, Li Z Y, Yu Y D, Yu J Z 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 104211 (in Chinese) [周培基, 李智勇, 俞育德, 余金中 2014 物理学报 **63** 104211]
- [3] Arumugam M 2001 *Pramana J. Phys.* **57** 849
- [4] Han L S, Kuo B P P, Alic N, Radic S 2018 *Opt. Express* **26** 14800
- [5] Wang Y, Gao S T, Wang K, Skafidas E 2016 *Opt. Lett.* **41** 2053
- [6] Sia J X B, Wang W J, Guo X, Zhou J, Zhang Z C, Rouified M S, Li X, Qiao Z L, Liu C Y, Littlejohns C, Reed G T, Wang H 2019 *IEEE Photonics J.* **11** 1
- [7] Nguyen V H, Kim I K, Seok T J 2020 *Appl. Sci.* **10** 4507
- [8] Xu H N, Shi Y C 2016 *Opt. Lett.* **41** 5047
- [9] Chung K K, Chan H P, Chu P L 2006 *Opt. Commun.* **267** 367
- [10] Tao S H, Fang Q, Song J F, Yu M B, Lo G Q, Kwong D L 2008 *Opt. Express* **16** 21456
- [11] Zhang Y, Qin X J, Wang J D, Yu Y F, Wei Z J, Zhang Z M 2022 *Chin. Opt. Lett.* **20** 122701
- [12] Wu Q, Zhu Y X, Zhuge Q B, Hu W S 2022 *J. Lightwave Technol.* **40** 7297
- [13] Wang X W, Chen Z W, Yin M Z, Wang W, Li Z B, Ni W H, Li F 2022 *J. Lightwave Technol.* **41** 2323
- [14] Zhai W L, Wen A J, Gao Y S, Shan D J, Fan Y Y 2022 *IEEE T. Microw. Theory* **70** 1821
- [15] Zhu S Y, Liu B, Ren J X, Wu X Y, Mao Y Y, Bai Y, Zhang H J, Yuan L Z, Zhang M T, Zhu X 2022 *J. Lightwave Technol.* **40** 4599
- [16] Liu Y, Ding R, Li Q, Xuan Z, Li Y C, Yang Y S, Lim A E J, Lo P G Q, Bergman K, Baehr-Jones T, Hochberg M 2014 *Optical Fiber Communications Conference and Exhibition San Francisco, USA, March 09–13, 2014* pTh4G.6
- [17] Yu Y, Chen G Y, Sima C T, Zhang X L 2017 *Opt. Express* **25** 28330
- [18] Sun C L, Wu W H, Yu Y, Chen G Y, Zhang X L, Chen X, Thomson D J, Reed G T 2018 *Nanophotonics* **7** 1571
- [19] Zhou D, Sun C L, Lai Y X, Yu Y, Zhang X L 2019 *Opt. Express* **27** 10798

- [20] Xu L, Leijtens X J M, Docter B, de Vries T, Smalbrugge E, Karouta F, Smit M K 2009 *35th European Conference on Optical Communication* Vienna, Austria, September 20–24, 2009 p24
- [21] Ou K, Yu F L, Li G H, Wang W J, Miroshnichenko A E, Huang L J, Wang P, Li T X, Li Z F, Chen X S, Lu W 2020 *Sci. Adv.* **6** eabc0711
- [22] Tian Sh N, Guo H M, Hu J B, Zhuang S L 2019 *Opt. Express* **27** 680
- [23] Sakamoto J, Goh T, Katayose S, Kasahara R, Hashimoto T 2019 *Opt. Commun.* **433** 221
- [24] Dong F X, Liu A J, Ma P J, Zheng W H 2018 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51** 495101
- [25] Michinel H, Costa M F, Frazao O, Pant B, Zhang W W, Tran D, Banakar M, Du H, Yan X Z, Littlejohns C G, Reed G T, Thomson D J 2020 *EPJ Web of Conferences* **238** 1007
- [26] Chen H B, He Z J, Wang W 2018 *Prog. Electromagn. Res. Lett.* **75** 47
- [27] Dai D X, Wang J 2014 *IEEE Photonics Soc. Newslett.* **28** 8
- [28] Dai D X, Bowers J E 2011 *Opt. Express* **19** 10940
- [29] Dai D X, Wang J, Shi Y C 2013 *Opt. Lett.* **38** 1422
- [30] Chesca B, John D, Cantor R 2021 *Appl. Phys. Lett.* **118** 42601
- [31] Nath J P, Dhingra N, Saxena G J, Sharma E K 2020 *IEEE Photonics Technol. Lett.* **32** 595
- [32] Jiang X P, Yuan H, He X, Du T, Ma H S, Li X, Luo M Y, Zhang Z J, Huan C, Yu Y, Zhu G Y, Yan P G, Wu J G, Zhang Z F, Yang J B 2023 *Nanophotonics* **12** 1891
- [33] Maidment P, Sorel M 2022 *Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO)* San Jose, USA, May 15–20, 2022 p1
- [34] Jiang X P, Yuan H, Chen D B, Zhang Z J, Du T, Ma H S, Yang J B 2021 *Adv. Opt. Mater.* **9** 2100575
- [35] Jiang X P, Zhang Z J, Ma H S, Du T, Luo M Y, Liu D Q, Yang J B 2022 *Opt. Express* **30** 18250
- [36] Chang W J, Xu S Y, Cheng M F, Liu D M, Zhang M M 2020 *Opt. Express* **28** 28343
- [37] Shastri B J, Tait A N, Ferreira D L T, Pernice W H P, Bhaskaran H, Wright C D, Prucnal P R 2021 *Nat. Photonics* **15** 102
- [38] Li G H Y, Sekine R, Nehra R, Gray R M, Ledezma L, Guo Q S, Marandi A 2023 *Nanophotonics* **12** 847
- [39] Yeung C, Pham B, Tsai R, Fountaine K T, Raman A P 2022 *ACS Photonics* **10** 884
- [40] Jiang L, Li X Z, Wu Q X, Wang L H, Gao L 2021 *Opt. Express* **29** 2521
- [41] Meng C, Qiu J F, Tian Y, Ye Z, Wu J 2016 *15th International Conference on Optical Communications and Networks (ICOON)* Hangzhou, China, September 24–27, 2016 p1
- [42] An S S, Fowler C, Zheng B W, Shalaginov M Y, Tang H, Li H, Zhou L, Ding J, Agarwal A M, Rivero-Baleine C, Richardson K A, Gu T, Hu J J, Zhang H L 2019 *ACS Photonics* **6** 3196
- [43] Aoad A, Simsek M, Aydin Z 2017 *Int. J. Numer. Model.* **30** 2129
- [44] Ma L F, Li J, Liu Z H, Zhang Y X, Zhang N E, Zheng S Q, Lu C C 2021 *Chin. Opt. Lett.* **19** 11301
- [45] Liu Y J, Sun W Z, Xie H C, Zhang N, Xu K, Yao Y, Xiao S M, Song Q H 2018 *Opt. Lett.* **43** 2482
- [46] An X P, Cao Y, Wei Y X, Zhou Z H, Hu T, Feng X, He G Q, Zhao M, Yang Z Y 2021 *Opt. Lett.* **46** 3881
- [47] Wiecha P R, Arbouet A, Girard C, Muskens O L 2021 *Photonics Res.* **9** 182
- [48] Zeng Z S, Lu L H, He P X, Liu D M, Zhang M M 2021 *IEEE Photonics Technol. Lett.* **33** 1289
- [49] Yeung C, Ho D, Zhang Z, Raman A P, Pham B, Fountaine K T, Levy K 2022 *ACS Photonics* **9** 1577
- [50] Yu Z J, Cui H R, Sun X K 2017 *Photonics Res.* **5** 15
- [51] Ma T G, Tobah M, Wang H Z, Guo L J 2022 *Opto-Electronic Science* **1** 210011
- [52] Schubert M F, Cheung A, Williamson I, Spyra A, Alexander D H 2022 *ACS Photonics* **9** 2327
- [53] Hodge J A, Mishra K V, Zaghoul A I 2021 arXiv: 2101.09131 [physics. app-ph]
- [54] Campbell S D, Werner D H, Werner P L 2021 *Proc. SPIE* **11769** 117690N
- [55] Deotare P B 2012 *Ph. D. Dissertation* (Boston: Harvard University)
- [56] Urban P J, Pluk E G C, KleIn E J, Koonen A M J, Khoe G D, de Waardt H 2006 *2nd Institution of Engineering and Technology International Conference* Osaka, Japan, June 21–22, 2006 p93
- [57] Shen Y C, Harris N C, Skirlo S, Prabhu M, Baehr-Jones T, Hochberg M, Sun X, Zhao S, Larochelle H, Englund D, Soljačić M 2017 *Nat. Photonics* **11** 441
- [58] Yu T, Ma X, Pastor E, George J K, Wall S, Miscuglio M, Simpson R E, Sorger V J 2021 arXiv: 2102.10398 [physics. optics]
- [59] Wu C M, Yu H S, Lee S, Peng R M, Takeuchi I, Li M 2021 *Nat. Commun.* **12** 96
- [60] Chen H, Li J T, Shang Z Y, Wang G Q, Zhang Z M, Zhao Z X, Zhang M Y, Yin J D, Wang J Z, Guo K, Yang J B, Yan P G 2022 *Laser Photonics Rev.* **16** 2200254
- [61] Yang K Y, Skarda J, Cotrufo M, Dutt A, Ahn G H, Sawaby M, Vercurysse D, Arbabian A, Fan S H, Alù A, Vučković J 2020 *Nat. Photonics* **14** 369
- [62] Wu Y T, Shi Y C, Zhao Y, Li L Y, Wu P H, Dai P, Fang T, Chen X F 2019 *Opt. Express* **27** 38541
- [63] Huang L C, Whitehead J, Colburn S, Majumdar A 2020 *Photonics Res.* **8** 1613
- [64] Guo L H, Hu Z L, Wan R Q, Long L Y, Li T, Yan J C, Lin Y, Zhang L, Zhu W H, Wang L C 2018 *Nanophotonics* **8** 171
- [65] Ossianer M, Meretska M L, Hampel H K, Lim S W D, K N, Jauk T, Capasso F, Schultze M 2023 *Science* **380** 59
- [66] Li T Y, Xu X H, Fu B Y, Wang S M, Li B J, Wang Z L, Zhu S N 2021 *Photonics Res.* **9** 1062
- [67] Guo W P, Liang W Y, Cheng C W, Wu W L, Wang Y T, Sun Q, Zu S, Misawa H, Cheng P J, Chang S W, Ahn H, Lin M, Gwo S 2020 *Nano Lett.* **20** 2857
- [68] Ollanik A J, Smith J A, Belue M J, Escarra M D 2018 *ACS Photonics* **5** 1351
- [69] Huang J, Ma H S, Chen D B, Yuan H, Zhang J P, Li Z K, Han J M, Wu J G, Yang J B 2021 *Nanophotonics* **10** 1011
- [70] Sanchis P, Villalba P, Cuesta F, Hakansson A, Griol A, Galan J V, Brimont A, Marti J 2009 *Opt. Lett.* **34** 2760
- [71] Yu Z J, Cui H R, Sun X K 2017 *Opt. Lett.* **42** 3093
- [72] Liu Z H, Liu X H, Xiao Z Y, Lu C C, Wang H Q, Wu Y, Hu X Y, Liu Y C, Zhang H Y, Zhang X D 2019 *Optica* **6** 1367
- [73] Kennedy J, Eberhart R 1995 *ICNN95-International Conference on Neural Networks* Perth, WA, Australia, November 27–December 1, 1995 p1942
- [74] Chen W W, Zhang B H, Wang P J, Dai S X, Liang W, Li H X, Fu Q, Li J, Li Y, Dai T G, Yu H, Yang J Y 2020 *Opt. Express* **28** 30701
- [75] Qin F, Liu B Q, Zhu L W, Lei J, Fang W, Hu D J, Zhu Y, Ma W D, Wang B W, Shi T, Cao Y Y, Guan B O, Qiu C

- W, Lu Y R, Li X P 2021 *Nat. Commun.* **12** 32
- [76] Chen W W, Lin J, Li H X, Wang P J, Dai S X, Liu Y X, Yao R K, Li J, Fu Q, Dai T G, Yang J Y 2022 *Opt. Express* **30** 46236
- [77] Seldowitz M A, Allebach J P, Sweeney D W 1987 *Appl. Optics* **26** 2788
- [78] Shen B, Wang P, Polson R, Menon R 2014 *Opt. Express* **22** 27175
- [79] Shen B, Wang P, Polson R, Menon R 2015 *Nat. Photonics* **9** 378
- [80] Wen X, Xu K, Song Q H 2016 *Photonics Res.* **4** 209
- [81] Zhou F Y, Lu L L Z, Zhang M M, Chang W J, Li D Y, Deng L, Liu D M 2017 *Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO) San Jose, USA, May 14–19, 2017* p1
- [82] Cao Y, Li S T, Petzold L, Serban R 2003 *SIAM J. Sci. Comput.* **24** 1076
- [83] Jameson A 2003 *Aerodynamic Shape Optimization Using the Adjoint Method* (Brussels: Von Karman Institute)
- [84] McNamara A, Treuille A, Popović Z 2004 *ACM Transactions On Graphics (TOG)* **3** 449
- [85] Pedersen C B W, Allinger P 2006 *IUTAM Symposium on Topological Design Optimization of Structures, Machines and Materials*, Copenhagen, Denmark, 2006 p229
- [86] Lalau-Keraly C M, Bhargava S, Miller O D, Yablonovitch E 2013 *Opt. Express* **21** 21693
- [87] Hughes T W, Minkov M, Williamson I A D, Fan S H 2018 *ACS Photonics* **5** 4781
- [88] Michaels A, Yablonovitch E 2018 *Opt. Express* **26** 4766
- [89] Dai Y H 2002 *SIAM J. Optimiz.* **13** 693
- [90] Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J 1986 *Nature* **323** 533
- [91] Sermanet P, Eigen D, Zhang X, Mathieu M, Fergus R, LeCun Y 2013 arXiv: 1312.6229 [cs.CV]
- [92] Girshick R, Donahue J, Darrell T, Malik J 2016 *IEEE T. Pattern Anal.* **38** 142
- [93] Ren S Q, He K M, Girshick R, Sun J 2017 *IEEE T. Pattern Anal.* **39** 1137
- [94] Redmon J, Divvala S, Girshick R, Farhadi A 2016 *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)* Las Vegas, USA, June 27–30, 2016 p779
- [95] Wang S, Fei S 2019 *Industrial Control Computer* **32** 103 (in Chinese) [汪宋, 费树岷 2019 *工业控制计算机* **32** 103]
- [96] Lin T Y, Dollar P, Girshick R, He K, Hariharan B, Belongie S 2016 arXiv: 1612.03144 [cs.CV]
- [97] Joseph R A F 2017 *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)* Honolulu, USA, July 21–26, 2017 p6517
- [98] Lin T Y, Goyal P, Girshick R, He K M, Dollar P 2020 *IEEE Trans. Pattern Anal.* **42** 318
- [99] Redmon J, Farhadi A 2018 arXiv: 1804.02767v1 [cs.CV]
- [100] Tan M X, Pang R M, Le Q V 2020 *IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)* Seattle, USA, June 13–19, 2020 p10778
- [101] Bahdanau D, Cho K, Bengio Y 2014 *Statistics* **3** 1467
- [102] Nguyen H Q, Nguyen T M, Vu H H, Nguyen V V, Nguyen P T, Dao T N M, Tran K H, Dinh K Q 2019 *6th NAFOSTED Conference on Information and Computer Science (NICS)* Hanoi, Vietnam, December 12–13, 2019 p240
- [103] Wu Y H, Schuster M, Chen Z F, Le Q V, Norouzi M 2016 arXiv: 1609.08144 [cs.CL]
- [104] Cho K, van Merriënboer B, Bahdanau D, Bengio Y 2014 *Statistics* **2** 1467
- [105] Sennrich R, Haddow B, Birch A 2015 arXiv: 1511.06709 [cs.CL]
- [106] Johnson M, Schuster M, Le Q V, Krikun M, Wu Y H, Chen Z F, Thorat N, Viégas F, Wattenberg M, Corrado G, Dean M H 2017 *T. Assoc. Comput. Ling.* **5** 339
- [107] Jean S, Cho K, Memisevic R, Bengio Y 2014 arXiv: 1412.2007 [cs.CL]
- [108] Tu Z P, Lu Z D, Liu Y, Liu X H, Li H 2016 arXiv: 1601.04811 [cs.CL]
- [109] Gao L, Mi H B, Zhu B Q, Feng D W, Li Y C, Peng Y X 2019 *IEEE Access* **7** 105319
- [110] Li Y C, Feng D W, Lu M L, Li D S 2019 *In Knowledge Science, Engineering and Management: 12th International Conference, KSEM Athens, Greece, August 28–30, 2019* p37
- [111] Li Y C, Chen H X, Sun X G, Sun Z C, Li L, Cui L Z, Yu P S, Xu G D 2021 *CIKM '21: Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management* Queensland Australia, November 1–5, 2021 p988
- [112] Li Y C, Chen H X, Li Y L, Li L, Yu P S, Xu G D 2023 *IEEE T. Knowl. Data En.* (early access) DOI: 10.1109/TKDE.2023.3237741
- [113] Chen H X, Li Y C, Sun X G, Xu G D, Yin H Z 2021 *WSDM '21: Proceedings of the 14th ACM International Conference on Web Search and Data Mining* Virtual Event Israel, March 8–12, 2021 p1056
- [114] Hammond A M, Camacho R M 2019 *Opt. Express* **27** 29620
- [115] Tu X, Xie W S, Chen Z M, Ge M F, Huang T Y, Song C L, Fu H Y 2021 *J. Lightwave Technol.* **39** 2790
- [116] An S S, Zheng B W, Shalaginov M Y, Tang H, Li H, Zhou L, Dong Y X, Haerinia M, Agarwal A M, Rivero B C, Kang M, Richardson K A, Gu T, Hu J J, Fowler C, Zhang H L 2022 *Adv. Opt. Mater.* **10** 2102113
- [117] Liu D J, Tan Y X, Khoram E F, Yu Z F 2018 *ACS Photonics* **5** 1365
- [118] Ren Y M, Zhang L X, Wang W Q, Wang X Y, Lei Y F, Xue Y L, Sun X C, Zhang W F 2021 *Photonics Res.* **9** B247
- [119] Zhao Z Y, You J, Zhang J, Du S Y, Tao Z L, Tang Y H, Jiang T 2022 *Nanophotonics* **11** 4465
- [120] Yeung C, Tsai R, Pham B, King B, Kawagoe Y, Ho D, Liang J, Knight M W, Raman A P 2021 *Adv. Opt. Mater* **9** 2100548
- [121] Meindl J D 2003 *Comput. Sci. Eng.* **5** 20
- [122] Mack C A. 2011 *IEEE T. Semiconduct. M.* **24** 202
- [123] Schaller R R 1997 *IEEE Spectrum* **34** 52
- [124] Zhang Y, Yang S Y, Lim A E J, Lo G Q, Galland C, Baehr-Jones T, Hochberg M 2013 *Opt. Express* **21** 1310
- [125] Kumari S, Prince S 2022 *International Conference on Wireless Communications Signal Processing and Networking (WiSPNET)* Chennai, India, March 24–26, 2022 p231
- [126] Chang W J, Ren X S, Ao Y Q, Lu L H, Cheng M F, Deng L, Liu D M, Zhang M M 2018 *Opt. Express* **26** 24135
- [127] Xu J F, Liu Y J, Guo X Y, Song Q H, Xu K 2022 *Opt. Express* **30** 26266
- [128] Zhu J B, Chao Q, Huang H Y, Zhao Y X, Li Y, Tao L, She X J, Liao H, Huang R, Zhu Z J, Liu X, Sheng Z, Gan F W 2021 *Appl. Opt.* **60** 413
- [129] Sheng J C, Liu Y J, Xu K 2019 *The International Photonics and Optoelectronics Meeting Wuhan China, November 11–14, 2019* paper OW3D.6
- [130] Chang W J, Lu L L Z, Ren X S, Li D Y, Pan Z P, Cheng M F, Liu D M, Zhang M M 2018 *Opt. Express* **26** 8162

- [131] Ding Y H, Xu J, Da R F, Huang B, Ou H Y, Peucheret C 2013 *Opt. Express* **21** 10376
- [132] Xie H C, Liu Y J, Wang S, Wang Y J, Yao Y, Song Q H, Du J B, He Z Y, Xu K 2020 *IEEE Photonics Technol. Lett.* **32** 166
- [133] Zhou H L, Wang Y L, Gao X Y, Gao D S, Dong J J, Huang D M, Li F, Alexander W P K, Zhang X L 2022 *Laser Photonics Rev.* **16** 2100521
- [134] Wang J, He S L, Dai D X 2014 *Laser Photonics Rev.* **8** L18
- [135] Li C L, Liu D J, Dai D X 2019 *Nanophotonics* **8** 227
- [136] Jiang X H, Wu H, Dai D X 2018 *Opt. Express* **26** 17680
- [137] Chang W J, Lu L L Z, Liu D M, Zhang M M 2018 *Optical Fiber Communication (OFC) Conference* San Diego, USA, March 11–15, 2018 p1
- [138] Gabrielli L H, Liu D, Johnson S G, Lipson M 2012 *Nat. Commun.* **3** 1217
- [139] Liu Y J, Xu K, Wang S, Shen W H, Xie H C, Wang Y J, Xiao S M, Yao Y, Du J B, He Z Y, Song Q H 2019 *Nat. Commun.* **10** 3263
- [140] Wu H, Tan Y, Dai D X 2017 *Opt. Express* **25** 6069
- [141] Huang J, Yang J B, Chen D B, He X, Han Y X, Zhang J J, Zhang Z J 2018 *Photonics Res.* **6** 574
- [142] Piggott A Y, Petykiewicz J, Su L, Vučković J 2017 *Sci. Rep.* **7** 1786
- [143] Yu L H, Yin Y L, Shi Y C, Dai D X, He S L 2016 *J. Operat. Theo.* **3** 159
- [144] Gentry C M, Zeng X, Popović M A 2014 *Opt. Lett.* **39** 5689
- [145] Wuttig M, Bhaskaran H, Taubner T 2017 *Nat. Photonics* **11** 465
- [146] Sherwood-Droz N, Wang H, Chen L, Lee B G, Lipson M 2008 *Opt. Express* **16** 15915
- [147] Ono M, Hata M, Tsunekawa M, Nozaki K, Sumikura H, Chiba H, Notomi M 2020 *Nat. Photonics* **14** 37
- [148] Gong Z L, Yang F Y, Wang L T, Chen R, Wu J Q, Grigoropoulos C P, Yao J 2021 *J. Appl. Phys.* **129** 30902
- [149] Fang Z R, Chen R, Tara V, Majumdar A 2023 *Sci. Bull.* **68** 783
- [150] Xu P P, Zheng J J, Doyle J K., Majumdar A 2019 *ACS Photonics* **6** 553
- [151] Wang Q, Rogers E T F, Gholipour B, Wang C M, Yuan G H, Teng J H, Zheludev N I 2016 *Nat. Photonics* **10** 60
- [152] Zhang Y F, Fowler C, Liang J H, Azhar B, Shalaginov M Y, Deckoff-Jones S, An S S, Chou J B, Roberts C M, Liberman V, Kang M, Ríos C, Richardson K A, Rivero-Baleine C, Gu T, Zhang H L, Hu J J 2021 *Nat. Nanotechnol.* **16** 661
- [153] Shportko K, Kremers S, Woda M, Lencer D, Robertson J, Wuttig M 2008 *Nat. Mater.* **7** 653
- [154] Kim S, Burr G W, Nam W K Sung W 2019 *MRS Bull.* **44** 710
- [155] Loke D, Lee T H, Wang W J, Zhao R, Shi L P, Yeo Y C, Chong T C, Elliott S R 2012 *Science* **336** 1566
- [156] Orava J, Greer A L, Gholipour B, Hewak D W, Smith C E 2012 *Nat. Mater.* **11** 279
- [157] Li W F, Cao X Y, Song S N, Wu L S, Wang R B, Jin Y, Song Z T, Wu A M 2022 *Laser Photonics Rev.* **16** 2100717
- [158] Stegmaier M, Iacute C R, Bhaskaran H, Wright C D, Pernice W H P 2016 *Adv. Opt. Mater.* **5** 1600346
- [159] Feldmann J, Youngblood N, Wright C D, Bhaskaran H, Pernice W H P 2019 *Nature* **569** 208
- [160] Feldmann J, Youngblood N, Karpov M, Gehring H, Li X, Stappers M, Le Gallo M, Fu X, Lukashchuk A, Raja A. S, Liu J, Wright C D, Sebastian A, Kippenberg T J, Pernice W H P, Bhaskaran H 2021 *Nature* **589** 52
- [161] Pernice W H P, Bhaskaran H 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 171101
- [162] Raoux S, Xiong F, Wuttig M, Pop E 2014 *MRS Bull.* **39** 703
- [163] Zhang Y F, Chou J B, Li J Y, Li H S, Du Q Y, Yadav A, Zhou Si, Shalaginov M Y, Fang Z R, Zhong H K, Roberts C, Robinson P, Bohlin B, Ríos C, Lin H T, Kang M, Gu T, Warner J, Liberman V, Richardson K, Hu J J 2019 *Nat. Commun.* **10** 4279
- [164] Fang Z R, Zheng J J, Saxena A, Whitehead J, Chen Y Y, Majumdar A 2021 *Adv. Opt. Mater.* **9** 2002049
- [165] Delaney M, Zeimpekis I, Lawson D, Hewak D W, Muskens O L 2020 *Adv. Funct. Mater.* **30** 2002447
- [166] Yang S, Shamim A, Vaseem M 2019 *Adv. Mater. Technol.* **4** 11
- [167] Wang N N, Li T T, Sun B S, Wang Z, Zhou L J, Gu T Y 2021 *Opt. Lett.* **46** 4088
- [168] Chen H X, Jia H, Wang T, Tian Y H, Yang J H 2020 *J. Lightwave Technol.* **38** 1874
- [169] Ma H S, Yang J B, Huang J, Zhang Z J, Zhang K W 2021 *Results Phys.* **26** 104384
- [170] Delaney M, Zeimpekis I, Du H, Yan X Z, Banakar M, Thomson D J, Hewak D W, Muskens O L 2021 *Sci. Adv.* **7**
- [171] Yuan H, Wu J G, Zhang J P, Pu X, Zhang Z F, Yu Y, Yang J B 2022 *Nanomaterials* **12** 669
- [172] Piggott A Y, Lu J, Babinec T M, Lagoudakis K G, Petykiewicz J, Vučković J 2014 *Sci. Rep.* **4** 7210
- [173] Ma H S, Luo M Y, He J, Du T, Zhang Z J, Jiang X P, He X, Fang L, Yang J B 2022 *J. Lightwave Technol.* **40** 7869
- [174] Ma H S, Du T, Zhang Z J, Jiang X P, Fang L, Yang J B 2023 *Opt. Commun.* **526** 128912
- [175] Dai D X, Wu H 2016 *Opt. Lett.* **41** 2346
- [176] Huang J, Yang J B, Chen D B, Bai W, Han J M, Zhang Z J, Zhang J J, He X, Han Y X, Liang L M 2020 *Nanophotonics* **9** 159
- [177] Ruan X K, Li H, Chu T 2022 *J. Lightwave Technol.* **40** 7142
- [178] Li C L, Zhang M, Xu H N, Tan Y, Shi Y C, Dai D X 2021 *Photonix* **2** 1991
- [179] Dai D X, Li C L, Wang S P, Wu H, Shi Y C, Wu Z H, Gao S M, Dai T G, Yu H, Tsang H K 2018 *Laser Photonics Rev.* **12** 1700109
- [180] Shen W W, Chen K N 2017 *Nanoscale Res. Lett.* **12** 56
- [181] Moreira R, Barton J, Belt M, Huffman T, Blumenthal D 2013 *Advanced Photonics Congress Integrated Photonics Research, Silicon and Nanophotonics* Rio Grande, USA, July 14–17, 2013 paper IT2A.4
- [182] Sodagar M, Pourabolghasem R, Eftekhari A A, Adibi A 2014 *Opt. Express* **22** 16767
- [183] Zheng X, Cunningham J E, Shubin I, Simons J, Asghari M, Feng D, Lei H, Zheng D, Liang H, Kung C C, Luff J, Sze T, Cohen D, Krishnamoorthy A V 2008 *Opt. Express* **16** 15052
- [184] Yu Z X, Qiu J F, Dong Z L, Zheng L, Guo H X, Wu J 2018 *Asia Communications and Photonics Conference (ACP)* Hangzhou, China, October 26–29, 2018 p1

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Research progress of intelligent design of on-chip optical interconnection devices*Du Te¹⁾ Ma Han-Si¹⁾²⁾ Jiang Xin-Peng¹⁾ Zhao Fen¹⁾³⁾ Zhang Zhao-Jian¹⁾Wang Zhi-Cheng¹⁾⁴⁾ Peng Zheng¹⁾⁴⁾ Zhang Yi-Yi¹⁾⁵⁾ Zhang Yu-Qing¹⁾⁴⁾Luo Ming-Yu¹⁾⁵⁾ Zou Hong-Xin¹⁾ Wu Jia-Gui⁴⁾ Yan Pei-Guang⁶⁾Zhu Gang-Yi⁷⁾ Yu Yang¹⁾ He Xin¹⁾ Chen Huan¹⁾Zhang Zhen-Fu¹⁾ Yang Jun-Bo^{1)†}1) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)2) (*College of Computer, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)3) (*School of Artificial Intelligence, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, China*)4) (*College of Artificial Intelligence, Southwest University, Chongqing 400715, China*)5) (*School of Computer, Electronic and Information, Guangxi University, Nanning 530004, China*)6) (*College of Physics and Optoelectronic Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China*)7) (*School of Communication and Information Engineering, Nanjing University of Posts and**Telecommunications, Nanjing 210023, China*)

(Received 30 April 2023; revised manuscript received 1 August 2023)

Abstract

Compared with traditional communication technologies such as electrical interconnection, optical interconnection technology has the advantages of large bandwidth, low energy consumption, anti-interference, etc. Therefore, optical interconnection is becoming an important approach and development trend of short distance and very short distance data terminal communication. As the chip level optical interconnection is implemented, silicon on insulator (SOI) based on-chip optical interconnection has been widely utilized with the support of a series of multiplexing technologies. In recent decades, many on-chip optical interconnection devices have been developed by using conventional design methods such as coupled-mode, multimode interference, and transmission line theories. However, when used in device design, these conventional methods often face the problems such as complex theoretical calculations and high labor costs. Many of the designed devices also encounter the problems of insufficient compactness and integration, and single function.

Intelligent design method has the advantages such as pellucid principle, high freedom of optimization, and good material compatibility, which can solve the problems of conventional design methods to a large extent. With the widespread use of intelligent design methods in the design of on-chip optical interconnection devices, three main trends have emerged. Firstly, the size of on-chip optical interconnect device is gradually developing

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60907003, 61805278, 12272407, 62275269, 62275271), the National Key R&D Program of China (Grant No. 2022YFF0706005), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2018M633704), the Scientific Research Program of National University of Defense Technology, China (Grant Nos. JC13-02-13, ZK17-03-01), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 13JJ3001), and the Program for New Century Excellent Talents in University of Ministry of Education of China (Grant No. NCET-12-0142).

† Corresponding author. E-mail: yangjunbo@nudt.edu.cn

towards ultra compact size. Secondly, the number of intelligently designed controllable on-chip optical interconnect devices is increasing. Thirdly, on-chip optical interconnect devices are gradually developing towards integration and systematization. This paper summarizes the most commonly used intelligent design methods of photonic devices, including intelligent algorithms based intelligent design methods and neural networks based intelligent design methods. Then, the above three important research advances and trends of intelligently designed on-chip optical interconnection devices are analyzed in detail. At the same time, the applications of phase change materials in the design of controllable photonic devices are also reviewed. Finally, the future development of intelligently designed on-chip optical interconnection devices is discussed.

Keywords: on-chip optical interconnection device, intelligent design method, phase change material, integrated photonic circuit

PACS: 42.82.Ds, 42.79.Ta, 42.30.-d, 42.82.Bq

DOI: [10.7498/aps.72.20230705](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230705)

片上光互连器件的智能化设计研究进展

杜特 马汉斯 姜鑫鹏 赵芬 张兆健 王志成 彭政 张伊祎 张煜青 罗鸣宇 邹宏新 吴加贵 闫培光 朱刚毅
于洋 何新 陈欢 张振福 杨俊波

Research progress of intelligent design of on-chip optical interconnection devices

Du Te Ma Han-Si Jiang Xin-Peng Zhao Fen Zhang Zhao-Jian Wang Zhi-Cheng Peng Zheng
Zhang Yi-Yi Zhang Yu-Qing Luo Ming-Yu Zou Hong-Xin Wu Jia-Gui Yan Pei-Guang Zhu Gang-Yi
Yu Yang He Xin Chen Huan Zhang Zhen-Fu Yang Jun-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 184204 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230705

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230705>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

绝缘体上铌酸锂薄膜片上光子学器件的研究进展

Research progress of photonics devices on lithium-niobate-on-insulator thin films

物理学报. 2020, 69(15): 157801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200302>

宽带高效聚焦的片上集成纳米透镜

Broadband efficient focusing on-chip integrated nano-lens

物理学报. 2020, 69(24): 244201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200948>

基于移动渐近线算法的大角度偏转分束器的智能设计

Intelligent design of large angle deflection beam splitter based on method of moving asymptotes

物理学报. 2021, 70(23): 234102 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210117>

相变材料与超表面复合结构太赫兹移相器

Terahertz phase shifter based on phase change material-metasurface composite structure

物理学报. 2021, 70(7): 074201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201495>

基于相变材料超表面的光学调控

Tunable metasurfaces based on phase-change materials

物理学报. 2020, 69(15): 154202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200453>

基于阵列波导光栅的光纤布拉格光栅解调技术综述

Review of fiber Bragg grating interrogation techniques based on array waveguide gratings

物理学报. 2022, 71(9): 094207 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212063>

国防科技大学建校 70 周年专题

本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 研究进展*谢向男^{1) #} 李成^{1) #} 曾俊炜²⁾ 周珅¹⁾ 江天^{1) †}

1) (国防科技大学理学院, 量子信息研究所, 长沙 410073)

2) (国防科技大学计算机学院, 量子信息研究所兼高性能计算国家重点实验室, 长沙 410073)

(2023 年 4 月 30 日收到; 2023 年 6 月 1 日收到修改稿)

本征磁性拓扑绝缘体非平庸拓扑态和磁有序的相互作用使其具备量子反常霍尔效应和轴子绝缘体等奇异物理性质, 在低功耗拓扑自旋电子器件及拓扑量子计算等方面展现广泛应用前景. 自 2019 年第一种本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 在实验上被发现以来, 该材料体系领域迅速吸引了大量研究者的目光, 引发了研究热潮. 本文将从 MnBi_2Te_4 基本性质出发, 介绍近期本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 的一些重要研究成果, 着重阐述 MnBi_2Te_4 系列的量子反常霍尔效应、轴子绝缘体态和马约拉纳零能模等拓扑量子态, 并列该材料体系其他研究方向及目前存在的问题. 最后, 总结并展望 MnBi_2Te_4 的下一步研究, 期望为相关领域人员的研究提供一定参考价值.

关键词: 本征磁性拓扑绝缘体, MnBi_2Te_4 , 拓扑量子态**PACS:** 71.20.-b, 73.20.At, 73.43.Nq, 75.45.+j**DOI:** 10.7498/aps.72.20230704

1 引言

回顾拓扑绝缘体 (TI) 的研究历史, 第一代和第二代拓扑绝缘体 (TIs) 分别是 HgTe/CdTe 量子阱^[1,2] 和 Bi-Sb 合金^[3,4], 但它们的能带结构复杂, 因此理论和实验研究较困难. 2009 年, 以 Bi_2Se_3 为代表的第三代拓扑绝缘体^[5] 问世, 由于其在相干自旋传输^[6]、高性能催化^[7] 和量子信息调控^[8] 等领域展现的巨大潜力, 引发了人们研究的广泛兴趣. 此类 Z_2 拓扑绝缘体的拓扑性质受时间反演对称性保护. 当其时间反演对称性被长程磁有序破坏时, 会形成新的拓扑态 (磁性拓扑绝缘体). 虽然学术界已经预测、验证很多非磁绝缘体的拓扑相, 但磁性材料的拓扑相很少被研究分析. 这是因为磁性材料复杂的相互作用使其理论预测更加困难; 并且实际磁

性材料经常出现各种磁畴和缺陷, 纯净磁性材料的制备面临巨大挑战. 然而, 磁性自由度与空间群结合形成巨大的磁空间群. 这极大丰富了磁性拓物质态, 进而为调控拓扑态提供更多的机遇、为探索各种奇异量子现象提供有效途径. 所以磁性拓扑绝缘体在实验上更具吸引力. 目前该领域尚处于初步探索阶段. 前几年, 大量的实验研究多集中在磁性掺杂的 TIs^[9,10] 和磁拓扑异质结^[11–14]. 然而, 在磁掺杂 TI 薄膜中, 磁性杂质的随机分布使得人们只能在超低温下观测到奇异量子现象. 在磁拓扑异质结中, 磁性和拓扑性之间的耦合通常较弱, 且敏感地依赖于界面性质. 这使得磁性导致的拓量子态的实验实现较困难. 对它们的研究相当有挑战性并且进展缓慢. 因此, 发现简单、易于控制的本征磁性拓扑绝缘体将对该领域的研究具有重要推动意义.

* 高性能计算国家重点实验室自主开放课题 (批准号: 202201-04) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: tjiang@nudt.edu.cn

近年来, 第一次被发现的本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 (MBT) 引起了人们的广泛关注. 它可以在不同的空间尺寸和磁场调控下表现极其丰富的拓量子态, 包含奇数层 MBT 薄膜的高温量子反常霍尔效应^[15-17]; 偶数层 MBT 薄膜的轴子绝缘体态拓扑磁电效应^[15,18]; 在费米能级附近包含一对 Weyl 点的理想的 Weyl 半金属^[15,16]; 通过与 s 波超导体^[19] 相互作用可能存在的马约拉. 这种同时具备拓扑性和磁性的本征磁性拓扑绝缘体, 不仅为研究拓扑磁有序结构和新颖的拓扑相变提供了理想的平台, 而且对低功耗甚至无功耗的拓扑自旋

电子器件^[20]、太赫兹辐射器件^[21] 及拓扑量子计算^[22] 等领域的发展起到积极推动作用, 如图 1 所示.

2010 年, Mong 等^[27] 曾理论预言存在一种本征的反铁磁拓扑绝缘体, 即使不满足时间反演对称性, 但当其满足时间反演 Θ 和空间平移对 $\tau_{1/2}$ 的联合对称性 $S(S = \Theta\tau_{1/2})$ 时, 可以同时保留磁性和拓扑性. 2013 年, 韩国科学家^[28] 最早合成 MBT 多晶, 但并没有涉及拓扑性和磁性的研究. 因此, 未引起凝聚态相关领域研究者的关注. 直到 2018 年, 该领域的研究者才开始关注这一点. 由此拉开了 MBT 体系中本征磁性拓扑性的研究序幕^[15,29,30].

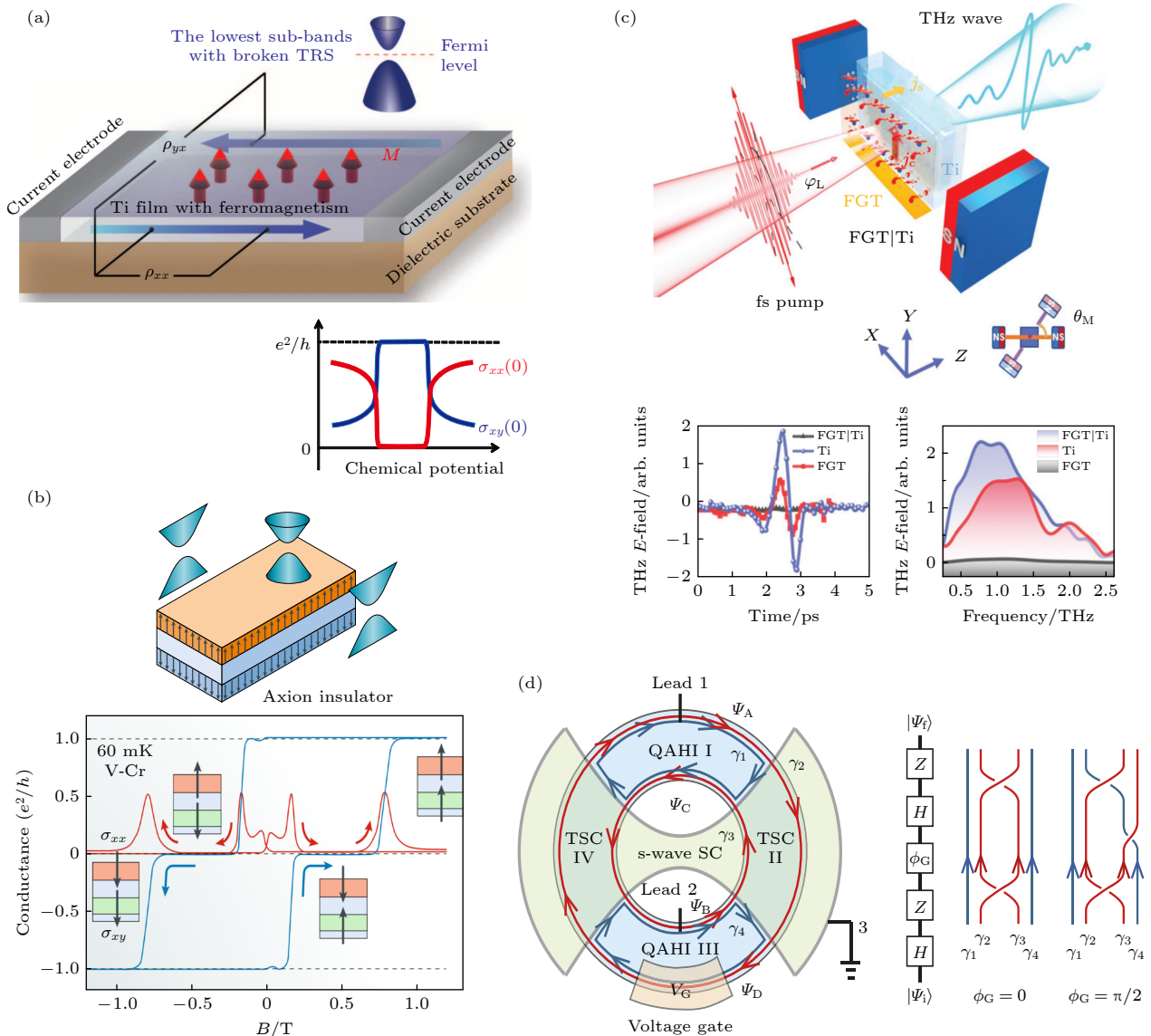


图 1 磁性拓扑绝缘体奇异拓扑性质及应用前景^[23] (a) 量子反常霍尔效应^[9]; (b) 轴子绝缘体态^[24,25]; (c) 太赫兹辐射^[21]; (d) 手性马约拉纳费米子及拓扑量子计算^[26]

Fig. 1. Singular topological properties and application prospects of magnetic topological insulators^[23]: (a) Quantum anomalous Hall effect^[9]; (b) axion insulator state with antiparallel magnetization^[24,25]; (c) terahertz radiation^[21]; (d) chiral Majorana fermions and topological quantum computation^[26].

清华大学何珂研究组^[29]使用分子束外延方法成功合成 MBT 薄膜, 观测到典型的 Dirac 表面态, 并指出该体系具有 A 型反铁磁结构. 这表明该体系是一类新的磁性拓扑绝缘体. 南京大学张海军和复旦大学王靖研究组^[15]理论上最早指出 MBT 体系是受 S 对称性保护的三维反铁磁轴子绝缘体, 其轴子场 $\theta = \pi$; 并且验证了其 A 型反铁磁结构. 清华大学徐勇与合作者^[16]通过第一性原理计算独立发现 MBT 体系的磁性和拓扑性, 特别是预言了奇数层和偶数层 MBT 分别对应着量子反常霍尔态和轴子绝缘体态. 国际上, 西班牙 Chulkov 团队^[30]与国内研究者几乎同时发现了 MBT 的磁性和拓扑性. 很快地, 国内外越来越多的研究组对 MBT 体系展开了深入系统的研究.

目前, MBT 拓扑量子物态的实验研究已取得突破性进展^[31–33]. 中国研究人员在该材料体系的研究处于世界领先地位. 复旦大学张远波和中国科学技术大学陈仙辉研究组^[31]实验上证实了 MBT 具有 A 型反铁磁结构且其奈尔温度为 25 K, 率先在 1.4 K 观测到奇数层 MBT 手撕薄膜的高温量子反常霍尔效应. 清华大学王亚愚和徐勇等^[32]发现 MBT 薄膜 (6 SL) 在磁场下可实现量子反常霍尔态与轴子绝缘态之间的量子转变. 北京大学王健课题组^[33]实现了 MBT 器件高陈数的量子反常霍尔态. 清华大学王亚愚团队和张金松团队合作^[34]测量出只存在于偶数层轴子绝缘态 MBT 的非定域电阻. 并与华中科技大学脉冲强磁场中心合作, 发现陈绝缘体态 (或者说量子反常霍尔态). MBT 在高达 61 T 的超强磁场下存在一个以零级霍尔平台和螺旋式边缘态输运为典型特征的新拓扑物态^[35]. 中国科学院田明亮课题组^[36]证实了在大于 10 T 磁场下 MBT 由于轨道磁矩存在平面霍尔效应等. 此外, 国际上, 哈佛大学的 Xu Su-Yang 与加州大学洛杉矶分校倪霓^[37]合作发现偶数层 MBT 在电场作用下产生层霍尔效应, 有助于表征其轴子绝缘态. 加州大学洛杉矶分校 Wang 研究组^[38]发现了磁性拓扑绝缘体 MBT 极性可调的反常霍尔效应. 新加坡南洋理工大学的王骁及其合作者研究组^[39]和 Zhang 等^[40]分别在 MBT/Pt 和 MBT 样品中观测到非互易效应. 清华大学杨鲁懿研究组^[41]揭示了原子薄层 MBT 的层间范德瓦耳斯耦合强度及其超快光学性质. 这些突破性结果为低功耗的新型纳米拓扑自旋电子器件的开发应用提供了全新思路.

本文将总结归纳 MBT 的基本性质、奇异的拓扑量子态、该材料体系其他的研究方向及存在的问题, 并对其下一步的研究做出展望.

2 MBT 基本性质

2.1 晶体结构

MBT 是一种 A-B-C 型密堆型范德瓦耳斯层状结构材料. Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te 七原子层 (septuple layer, SL) 是其基本单元; Mn 原子层位于每个 SL 单元的中心. MBT 的每个 SL 层可以看作一个五原子层 Bi_2Te_3 中间插入一个额外的 Mn-Te 双分子层. SL 单元内部, 近邻原子之间形成强共价键, 而 SL 单元之间是弱的范德瓦耳斯相互作用. 该体系空间对称性与 Bi_2Te_3 的一致, 属于空间群 $R\bar{3}m$ (No.166), 晶格常数 $a = b = 4.36 \text{ \AA}$ 和 $c = 40.6 \text{ \AA}$ ^[42–44], 如图 2(a) 所示. 清华大学何珂柯研究组^[29]使用高分辨扫描透射电子显微镜 (STEM) 对 MBT 薄膜 (5 SLs) 实空间的晶体结构进行了表征. 高角度环形暗场 (HAADF) 图像清楚地显示其特征 SL 结构, 如图 2(b) 所示. 图 2(c) 显示沿两个 SLs 的原子剖面强度分布图 (cut 1). 在 SL 中不同位置的原子对比度变化很大. HAADF-STEM 图像中原子的对比度与其原子序数直接相关. 因此, 沿 SL 的强度分布与 Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te 原子排列相一致. X 射线衍射 (XRD) 表征 MBT 薄膜的面外晶体结构并证实其高质量晶体结构. 在 Si(111) 衬底上生长的 MBT 薄膜沿着 (00 l) 晶面, 如图 2(d) 所示.

2.2 磁性

MBT 的磁性主要由 Mn 的 3d 态提供. 理论计算表明, MBT 是一种具有范德瓦耳斯层状结构的本征反铁磁拓扑绝缘体 AFM TI, 在 SLs 内保持铁磁 (FM) 有序, 在相邻 SLs 之间保持反铁磁 (AFM) 有序^[15,17,30]. 每层 SL 中的单个 Mn^{2+} 离子预计贡献 $5 \mu_B$ 磁矩. 在磁基态下, Mn 原子的磁矩沿着面外易轴 z 方向, 相邻 SL 层之间的磁矩相反, 因此具有 A 型 AFM- z 磁基态, 如图 2(a) 所示. 在 MBT 中, Mn 原子位于由相邻 Te 原子形成的轻微畸变八面体的中心, Mn-Te-Mn 超交换作用引起的层内 FM 耦合同样明显强于 Mn-Te...Te-Mn 超交换作用导致的层间 AFM 耦合^[29]. 利用非弹性中子散射证

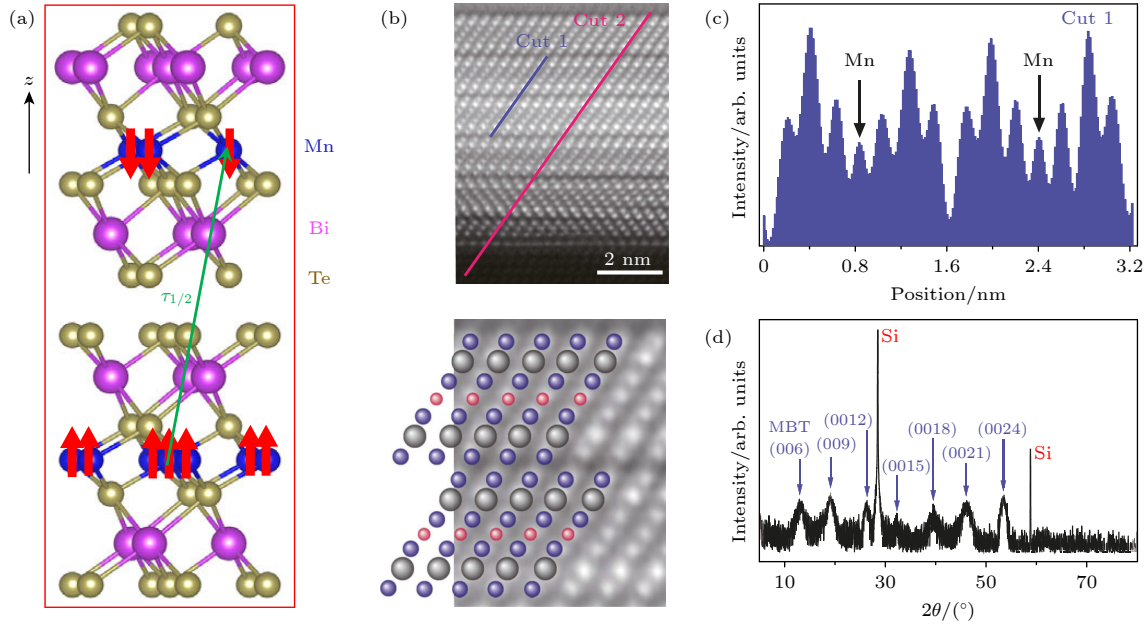


图 2 MBT 的晶体结构图^[15,29] (a) 由两个 SLs 组成反铁磁 MBT 的原子结构图^[15]. 每个 SL 内为铁磁性, 相邻 SL 之间为反铁磁性. 红色箭头表示 Mn 原子磁矩; 绿色箭头表示空间平移算符 $\tau_{1/2}$; (b) 在 Si(111) 衬底上生长的 5 SLs MBT 薄膜的横截面 HAADF-STEM 图像^[29]; (c) HAADF-STEM 沿 (b) 中 Cut 1 的强度分布图^[29]; (d) 在 Si(111) 上生长的 MBT 薄膜的 XRD 图^[29]

Fig. 2. Crystal structure in MBT^[15,29]: (a) Atomic structure of MBT consists of two SLs, whose magnetic states are ferromagnetic within each SL and antiferromagnetic between adjacent SLs^[15]. The red arrows represent the spin moment of Mn atom. The green arrow denotes for the half translation operator $\tau_{1/2}$; (b) cross-sectional HAADF-STEM image of a 5 SLs MBT films grown on a Si(111) substrate^[29]; (c) intensity distribution of HAADF-STEM along Cut 1 in panel (b)^[29]; (d) XRD pattern of MBT films grown on Si(111)^[29].

实了长程 FM 层内耦合、AFM 层间耦合和面外易轴 z 的磁各向异性^[45,46]. 北京大学叶培及其合作者^[47] 使用反射式磁圆二向色谱 (RMCD) 首次研究了从单层到少层的 MBT 在层数、温度和外磁场等参数变化下的磁行为. 通过对 RMCD 信号的温度拟合, 得到层数-温度磁相图, 如图 3(a) 所示. 随着温度升高, MBT 经历反铁磁到顺磁的磁相变; 并且随着层数的增加, 奈尔温度 T_N 逐渐升高直至达到体态的 24.5 K. 他们认为随着样品趋近二维 (2D) 极限, 热扰动增加, 进而抑制 T_N . 在 T_N 以下, 利用平均场近似模拟得到各个不同层厚样品随温度、外磁场下的磁相变演化, 从而获得在各个层厚下样品的磁场-温度磁相图, 如图 3(c) 和图 3(d) 所示. 图中展示了 2 SLs 和 3 SLs MBT 的磁场-温度磁相图. 理论计算的 A-AFM 与 CAFM 相转变的临界 spin-flop 场 $\mu_0 H_1$ 值和 CAFM 与 FM 相转变的临界 spin-flip 场 $\mu_0 H_2$ 值与实验测得的结果一致. 这种一致性有望进一步揭示 MBT 体系中磁性和拓扑性的相互关系, 并且利用层数、外场等调控磁性从而调控拓扑性成为可能. 随后, 新加坡南洋理工的王骁与其合作者^[30] 实验上在 12 SLs

层 MBT 中也得到了类似的磁场-温度磁相图, 如图 3(b) 所示.

2.3 拓扑性

磁性体系不具有时间反演对称性 Θ , 而拓扑绝缘体的拓扑性是受时间反演对称性保护的. 在磁性拓扑绝缘体中, 当 Θ 被有磁序打破时, 它与某些磁晶格对称性 (如旋转对称性 C_n 和平移对称性 $\tau_{1/2}$ 等) 结合组成的联合对称性等效于 Θ , 使得系统仍然保持拓扑性^[15,23]. 2010 年, Mong 等^[27] 理论预言存在一种三维本征的反铁磁拓扑绝缘体 3D AFM TI, 即使不满足时间反演对称性, 但当其满足时间反演对称操作 Θ 和空间平移操作 $\tau_{1/2}$ 的联合对称性 S 时, 可以同时保留磁性和拓扑性. 与 3D TI 不同的是, 3D AFM TI 只在某些 S 对称性破缺的表面上具有无带隙的拓扑表面态; 而 3D TI 所有表面都具有 Θ 保护的无带隙的拓扑表面态. 直到 2018 年, 实验上第一个被发现的本征反铁磁拓扑绝缘体 MBT 单晶的成功合成^[29] 验证了上述的理论预测, 并引发了人们对本征磁性拓扑绝缘体的研究热潮. MBT 具有弱拓扑性, 拓扑非平庸性主要

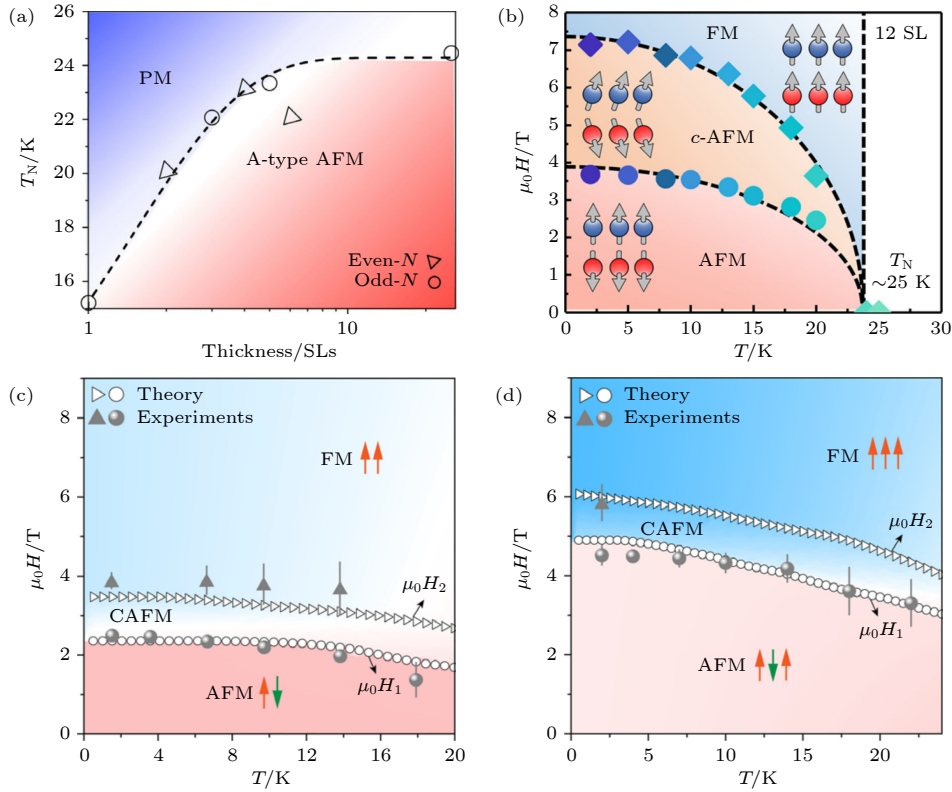


图3 MBT磁相图 (a) MBT薄膜的层数-温度相图^[47]; PM代表顺磁区域; A-type AFM代表A型反铁磁区域; (b) 12 SLs MBT/Pt异质结自旋排列随温度和外加磁场的变化^[39]; (c) 2 SLs MBT的温度-磁场相图^[47]; (d) 3 SLs MBT的温度-磁场相图^[47]; 白色圆圈和三角形分别表示在不同温度下计算得到的 spin-flop 场 $\mu_0 H_1$ 和 spin-flip 场 $\mu_0 H_2$, 即 A-AFM/CAFm 相和 CAFm/FM 相的临界转变点; 实验数据点用灰色的球和三角形表示

Fig. 3. Magnetic phase diagram of MBT: (a) Layer number-temperature phase diagram of the MBT flake^[47]; PM denotes the region where the flake is paramagnetic; A-type AFM denotes the region where adjacent ferromagnetic SLs couple antiferromagnetically with each other; (b) spin configuration of 12 SLs MBT/Pt bilayer as functions of temperature and external magnetic field^[39]; (c) temperature-field phase diagram of 2 SLs MBT^[47]; (d) temperature-field phase diagram of 3 SLs MBT^[47]; the white circles and triangles represent the calculated spin-flop field $\mu_0 H_1$ and spin-flip field $\mu_0 H_2$, respectively, at various temperatures, showing the boundaries of the A-type AFM/CAFm phase and CAFm/FM phase; the experimental data points are represented using grey spheres and triangles with corresponding error bars.

由 Bi 元素和 Te 的 p 态提供. 其表面态不再像 3D TI 那样全部表面保持无带隙, 而是在满足 S 对称性的表面上才保持无带隙^[42]. 例如, 在保持 S 对称性的 (011) 面, MBT 存在无带隙的拓扑表面态; 而在 S 对称性破缺的 (001) 和 (111) 晶面, MBT 拓扑表面态打开带隙, 如图 4 所示.

该材料体系具有丰富的拓扑量子态^[16,48]. 能带结构计算表明^[16], MBT 可能出现各种奇异的拓扑相, 包括量子反常霍尔绝缘态 QAHE、轴子绝缘态 AI、量子自旋霍尔绝缘态 QSHE、Weyl 半金属 WSM、Dirac 半金属 DSM 和反铁磁拓扑绝缘态 AFM TI, 如图 5(a) 所示. 通过空间维度和磁排列调控可改变这些 2D 或 3D 拓扑量子态. MBT 具有层间反铁磁 AFM; 根据层数的奇偶性, 少层 MBT 的上下表面具有相同或相反的磁矩, 从而决定了其拓扑

性. 因此少层 MBT 的磁性和相应的拓扑性会随着层数的变化而变化. 理论计算^[17]表明单层的 MBT 是拓扑平庸的; 偶数层的 MBT 是完全反铁磁的, 净磁矩为零; 三层及三层以上奇数层是非补偿反铁磁的, 净磁矩为非零. 奇数层的 MBT 为 $C = 1$ 的陈绝缘体态; 偶数层的 MBT 的 $C = 0$, 但拓扑上是非平庸的, 即为轴子绝缘体态. 由于 MBT 的层间 AFM 相互作用较弱, 通过施加适度的面外磁场, MBT 的层间反铁磁序可以调制为面外 FM- z , 拓扑性质也随之发生变化, 成为只有一对 Weyl 点的最简单的 II 型磁性 WSM. 当外部磁场旋转时, 系统从 FM- z 相连续变化到 FM- x 相; 同时, 系统由 II 型磁性 WSM 相变为 I 型磁性 WSM 直至普通 FM 绝缘体^[49]. 在无磁场情况下, 体态 MBT 是一

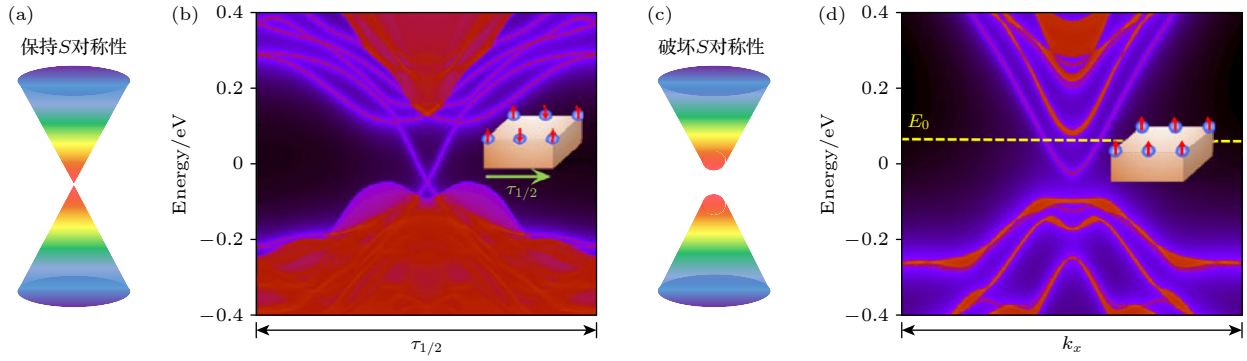


图 4 MBT 表面态能带结构图 (a) 保留 S 对称性的表面具有无能隙的 Dirac 锥表面态示意图^[42]; (b) MBT(011) 方向表面 (保持 S 对称性) 的表面态^[15,42]; (c) 破坏 S 对称性的表面具有有能隙的 Dirac 锥表面态^[42]; (d) MBT (111) 方向表面 (破坏 S 对称性) 的表面态^[15,42]

Fig. 4. Energy band structure of MBT with surface state: (a) The Dirac surface state is gapless due to the S symmetry^[42]; (b) the surface state on MBT(011) with S symmetry^[15,42]; (c) the Dirac surface state is fully gapped due to the S symmetry broken^[42]; (d) the surface state on MBT(111) without S symmetry^[15,42].

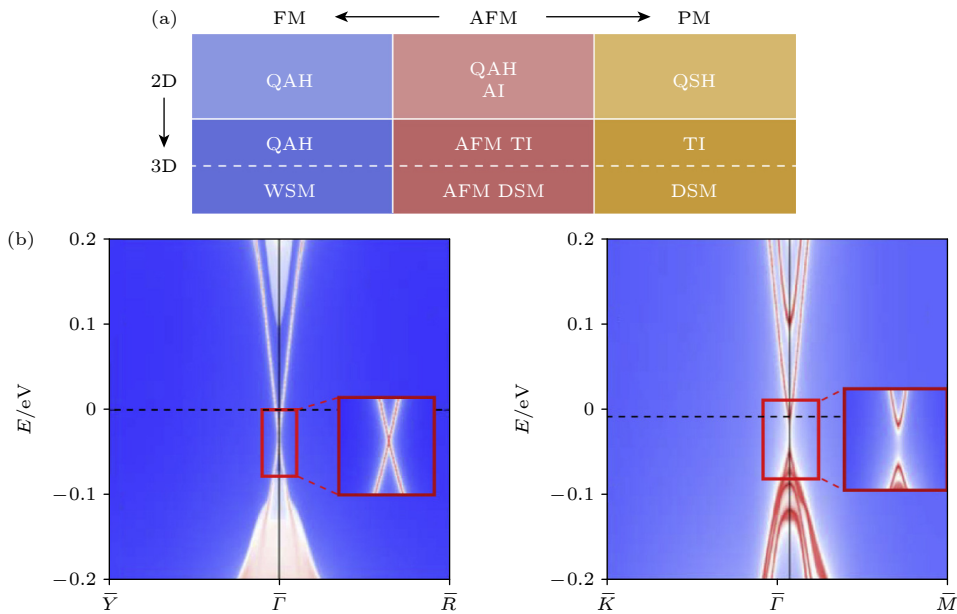


图 5 MBT 丰富的拓扑量子态 (a) MBT 薄膜 (2D) 和块体 (3D) 在不同磁化状态下丰富的拓扑量子态. QAH, 量子反常霍尔态; AI, 轴子绝缘体; QSH, 量子自旋霍尔态; TI, 拓扑绝缘体; WSM, Weyl 半金属; DSM, Dirac 半金属^[16,48]. (b) MBT (110) 面和 (111) 面的无能隙和有带隙表面态能带结构^[16,48]

Fig. 5. Rich MBT topological quantum states. (a) MBT thin films (2D) and bulk (3D) have rich topological quantum states in different magnetic states. QAH, quantum anomalous Hall state; AI, axion insulator; QSH, quantum spin Hall state; TI, topological insulator; WSM, Weyl semimetal; DSM, Dirac semimetal^[16,48]. (b) Surface states of the MBT (110) and (111) surfaces, which are gapless and gapped, respectively^[16,48].

种 AFM TI, 侧表面态无带隙, 而顶部和底部表面态存在磁带隙. 对于 MBT 薄膜, 有带隙的顶部和底部表面态具有相反或相同符号的半整数量子霍尔电导, 导致 $C = 0$ 或 1 . $C > 1$ 的陈绝缘体态在此薄膜上是不可能存在的. 然而, 在适度磁场下, 块状 MBT 变为铁磁 Weyl 半金属. 当薄膜厚度处于量子限域区时, 铁磁 MBT 表现出陈绝缘态; 随

着薄膜厚度增加, 带隙减小, 陈数 C 增大. 这种不寻常的特性归因于量子限域效应与 MBT 铁磁相的 Weyl 半金属特性的结合, 为实现高陈数陈绝缘态铺平了道路, 如图 5(b) 所示.

接下来, 我们将重点介绍 MBT 几种代表性拓扑量子态, 包括量子反常霍尔态、轴子绝缘体态和马约拉纳准粒子态.

3 MBT 拓扑量子态

3.1 量子反常霍尔态和量子霍尔态

量子反常霍尔效应是一种无需外加磁场而由自发磁化强度引起的量子霍尔效应. 拓扑绝缘体的拓扑性受时间反演对称性保护, 即存在无带隙的 Dirac 锥表面态. 当引入磁性后, 长程磁有序打破时间反演对称性, 并在无带隙的 Dirac 锥表面态中引入磁带隙. 具有磁带隙表面态的有效哈密顿量表示为: $H(k) = (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + m_z \sigma_z$, 其中 σ 为泡利矩阵, $\sigma_z = \pm 1$ 分别代表自旋向上和自旋向下, m_z 为表面交换场. 磁带隙的打开伴随着手性边缘态的出现. 当费米能级处于磁带隙中时, 量子反常霍尔效应出现, 如图 6(a) 所示. 相较于磁性掺杂的拓扑绝缘体和铁磁/拓扑绝缘体异质结而言, 在本征磁性拓扑绝缘体中观测 QAHE 更具优势, 例如其磁性离子的均匀分布、磁性和拓扑性的强耦合有望在更高温度下观察到 QAHE 等. 在本征磁性拓扑绝缘体 MBT 中, 厚度大于 1 SL 的样品顶部和底部表面态间的杂化可以忽略不计. 因此, 其拓扑电子性质由上下两个孤立的表面决定. 奇数层 (偶

数层) SLs 的 MBT 上下表面具有相同 (相反) 的 m_z , 既具有相同 (相反) 的半整数量子化霍尔电导 $e^2/(2h)$, 如图 6(b) (图 8(a)) 所示. 所以, 奇数 SL 层 MBT 薄膜是陈数 $C = 1$ 的本征量子反常霍尔绝缘体; 偶数 SL 层薄膜是本征轴子绝缘体 ($C = 0$), 在直流测量中表现为普通绝缘体, 但在交流测量中表现出拓扑磁电效应 [18]. 复旦大学张远波及其合作者 [31] 在 1.4 K 的 5 SLs MBT 样品中观察到零场量子反常霍尔效应, 即在零磁场下, 几乎量子化的霍尔电阻 $R_{yx} = 0.97(h/e^2)$ 和纵向电阻 $R_{xx} = 0.061(h/e^2)$ (如图 6(c)). 外加的 7.6 T 磁场促使所有 SL 层铁磁排列, 进而将量子化温度提高到 6.5 K. 此外, 在 5 SLs 的薄片研究中研究门电压调控 QAHE 时, 外加 10 T 以上的面外磁场、门电压 V_g 在 -20 — -60 V 的情况下, R_{yx} 趋近 $-h/(2e^2)$ 平台, 即填充因子 $\nu = -2$; 同时 R_{xx} 趋于 0, 如图 7(a) 所示. 这意味着除了 QAH 态之外出现了一个额外的量子霍尔态. 他们进一步证实这个额外的量子霍尔态起源于朗道能级. 朗道能级与 QAH 态共存促使 $R_{yx} = -h/(2e^2)$. 朗道能级量子化只负责两个边缘通道中的一个, QAH 效应贡献另一个边缘通道, 如图 7(b) 所示. 北京大学王健及其合作者 [33] 在

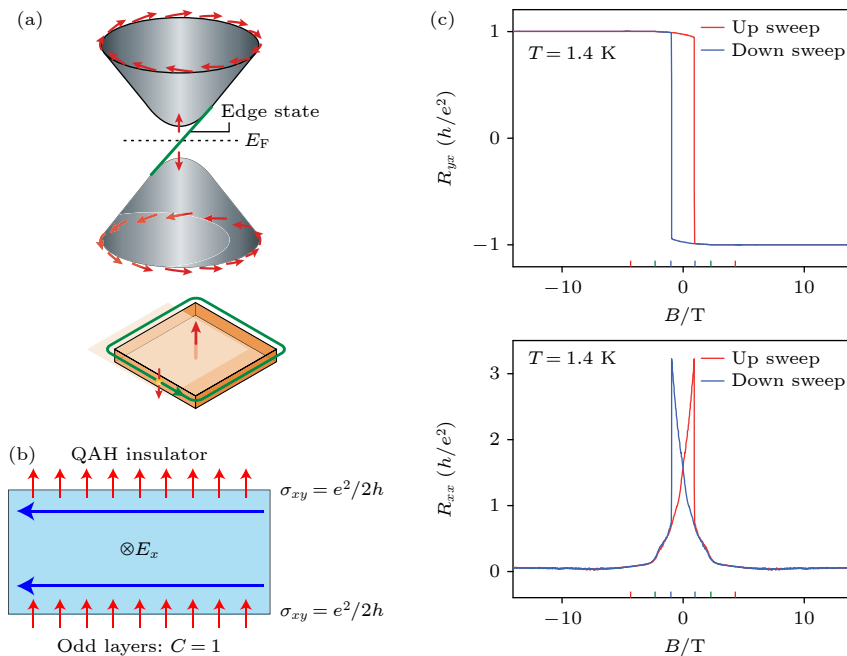


图 6 MBT 量子反常霍尔效应 (a) 磁性拓扑绝缘体中表面态有带隙的能带结构示意图 [24]; (b) 奇数层 MBT 本征量子反常霍尔绝缘体的示意图 [16]; (c) 5 SLs 的 MBT 样品零磁场下的量子反常霍尔效应 [31]

Fig. 6. Quantum anomalous Hall effect of MBT: (a) Schematic diagram of the energy band structure with a band gap in the surface state in a magnetic topological insulator [24]; (b) illustration of intrinsic QAH insulators in odd layers [16]; (c) quantum anomalous Hall effect under zero magnetic field in 5 SLs MBT [31].

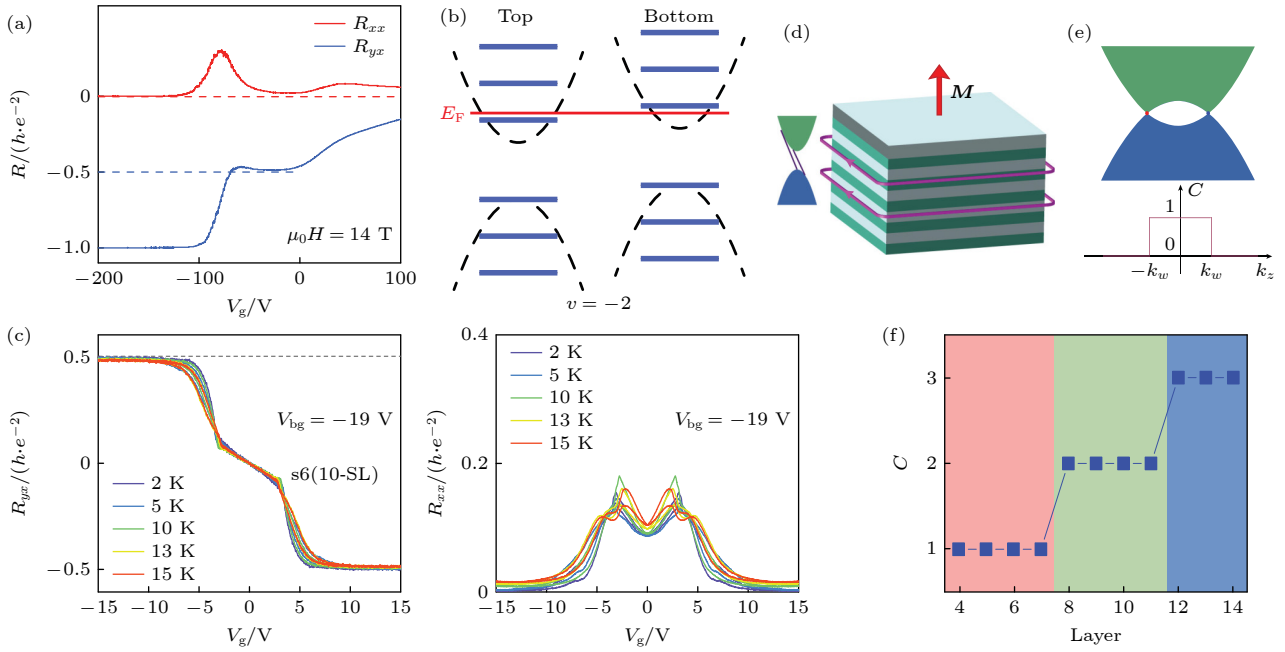


图 7 MBT 高陈数陈绝缘态 (a) 5 SLs MBT 门电压调控的反常霍尔效应^[31]; (b) 5 SLs MBT 的顶部和底部表面态的示意图^[31]; (c) 10 SLs MBT 中 $C = 2$ 的高陈数陈绝缘态的 R_{yx} 和 R_{xx} 与磁场和温度间的关系^[33]; (d) 具有两个手性边缘态的高陈数陈绝缘态示意图; 灰色和绿色表示相邻 SLs 的 MBT^[33]; (e) 铁磁 MBT 能带结构示意图, 其为磁性 Weyl 半金属^[33]; (f) 计算得到的 MBT 陈数随膜厚的变化函数^[33]

Fig. 7. High Chern number of Chern insulator MBT. (a) Anomalous Hall effect of 5 SLs MBT by gate voltage^[31]. (b) Schematic band diagrams for the top and bottom surface states of this five-layer sample^[31]. (c) Temperature and magnetic field dependence of R_{yx} and R_{xx} in high-Chern-number Chern insulator states with $C = 2$ in 10 SLs MBT device^[33]. (d) Schematic of high-Chern-number Chern insulator states with two chiral edge states across the band gap; gray and green indicate adjacent MBT SLs^[33]. (e) Schematic diagram of band structure of the ferromagnetic MBT, which is a magnetic Weyl semimetal^[33]. (f) Chern number as a function of film thickness in MBT^[33].

9 SLs 和 10 SLs 的 MBT 中, 外加 6—10 T 的面外磁场时, 同样观察到 $R_{yx} = h/(2e^2)$ 及纵向电阻 R_{xx} 的消失, 如图 7(c) 所示. 然而研究表明此时 $\nu = 2$ 只起源于高陈数 $C = 2$, 而与朗道能级无关. 在 6—10 T 的面外磁场范围内, 本征 AFM TI 的 MBT 转变为铁磁 Weyl 半金属. 理论计算表明, 由于量子限域效应, 铁磁 Weyl 半金属 MBT 可以实现高陈数绝缘态, 如图 7(d)、图 7(e) 和图 7(f) 所示. 因此, 上述观察到的实验现象和理论计算结果相一致. 此外, 研究者在 MBT 异质结中也发现了 QAHE^[50–52]. 最近, Ying 等^[53] 在 5 SLs 器件中再现了陈绝缘态, 并通过非局域输运测量证实了边缘态的手性.

3.2 轴子绝缘体态

轴子绝缘体态^[48] 是一种独特的拓扑相, 其陈数 $C = 0$, 但 Chern-Simon 项有限^[18]. 如上所述, 偶数 SL 层 MBT 薄膜是本征轴子绝缘体, 在直流测量中表现为普通绝缘体, 但在交流测量中表现出

拓扑磁电效应^[18]; 与普通绝缘体相比, 轴子绝缘体态对有质量的 Dirac 表面态具有独特的电磁响应, 从而产生半整数量子化表面霍尔电导、量子化拓扑磁电效应和拓扑磁光效应等^[54–57]. 在实验上, 轴子绝缘体表现出巨大的纵向电阻和零霍尔电导 (或零霍尔电阻), 这是由于上下表面霍尔电导相互抵消, 如图 8(a) 所示. 然而, 普通绝缘体也会表现出这种性质. 因此, 依据零霍尔电导间接判断轴子绝缘体态的存在显得不充分. 所以探索直接判定轴子绝缘体态存在的实验判据尤为重要. 接下来, 简单介绍几种直接判断轴子绝缘体态存在的证据.

在量子色动力学下, 轴子场在麦克斯韦方程中引入了耦合电场和磁场的附加项. 根据有效拓扑场论, 三维 TI 的电磁响应包含附加项^[18,58] $S = \frac{\theta}{2\pi} \frac{e^2}{h} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$. 这类似于拥有附加轴子项的麦克斯韦方程. 这里, \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 分别是电场和磁场, h 为普朗克常数, θ 为轴子角. 附加的轴子项耦合磁场和电场, 并导致拓扑磁电效应 (TME)^[15], 即电场可以诱导磁极化, 而磁场可以诱导电极

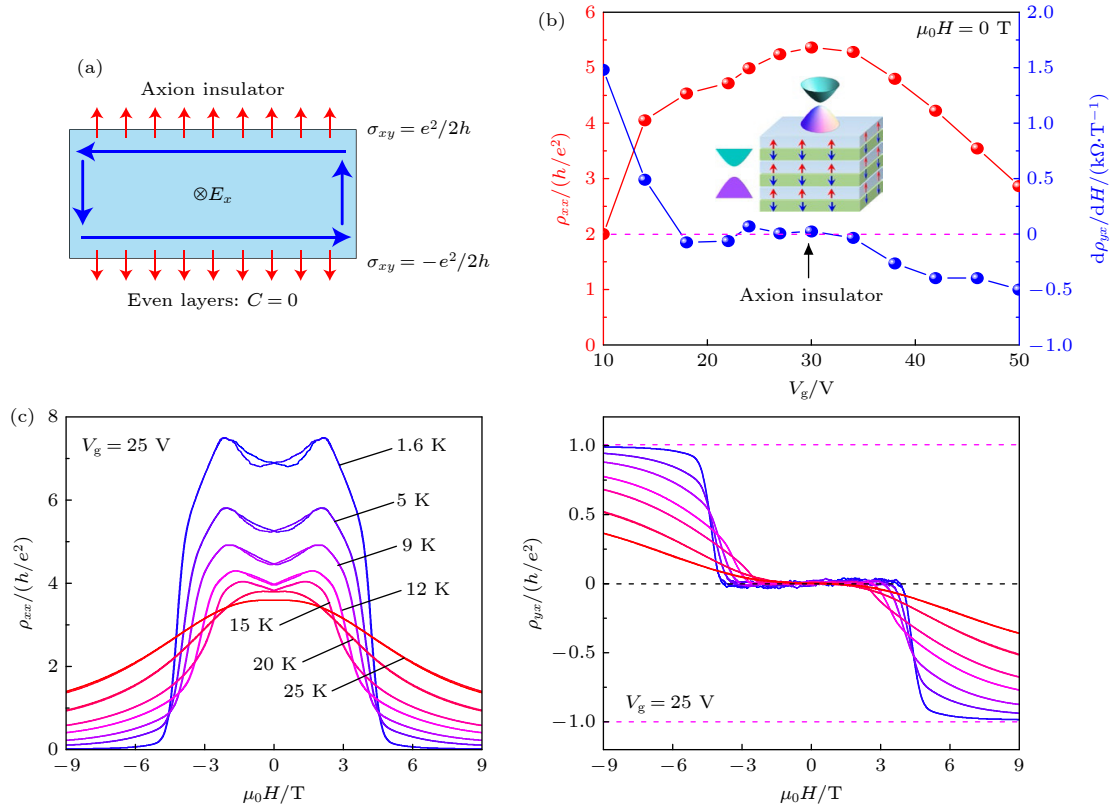


图 8 MBT 轴子绝缘态^[16,32] (a) 偶数层 MBT 本征轴子绝缘体的示意图^[16]. 顶部和底部有带隙的表面具有半整数量子化的霍尔电导, 其符号在偶数层中相反, 导致 $C = 0$; (b) 轴子绝缘态的 ρ_{xx} 和 $\frac{d\rho_{xx}}{dH}$ 与栅极电压的依赖关系^[32]; (c) 栅极电压 $V_g = 25$ V 时, 不同温度下纵向电阻率和霍尔电阻率随磁场强度的变化关系^[32]

Fig. 8. Axion insulator state in MBT^[16,32]: (a) Illustration of intrinsic axion insulators in even layers^[16]. The intrinsically gapped surfaces on the top and bottom sides have half-quantized Hall conductances, whose signs are opposite in even layers, leading to $C = 0$; (b) gate dependence of ρ_{xx} and $\frac{d\rho_{xx}}{dH}$ in axion insulator state^[32]; (c) longitudinal and Hall resistivities versus magnetic field strength at various temperatures with gate voltage $V_g = 25$ V^[32].

化. 从三维 TI 的有效作用量来看, 电流项为 $j = j_{\text{free}} + \frac{\alpha}{4\pi^2} \nabla \theta \times \mathbf{E} - \frac{\alpha \theta}{4\pi^2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$, 其中第 1 项 j_{free} 为自由电荷电流密度; 第 2 项是霍尔电流 (垂直于电场), 完全是由轴子项引起的. 这是系统的非平庸拓扑性的结果. 如果表面的能隙完全打开, 并且体态轴子角完全量化为 π , 那么轴子项将是稳定系统的唯一电流贡献项. 沿着表面法线方向积分, 可以得到由每个表面贡献的半整数量子霍尔电导 $\sigma_{xy} = e^2/(2h)$, 其中符号由表面磁矩的方向决定. 当磁矩的方向在上下表面相反时, 轴子项引起的电流方向相反. 因此, 虽然某一表面具有半整数霍尔电导, 但由于上下表面相互抵消, 系统的净霍尔电流变为零, 所以可以观察到零平台量子反常霍尔效应 ZPQAH. 此外, 当施加电场时, 环形霍尔电流形成. 这样的环形霍尔电流相当于表面量子化磁化强度 $\mathbf{M} = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{hc} \mathbf{E}$ 导致的表面磁电流, 其中

n 为整数, c 为光速. 同样地, 施加磁场也能导致电极化. 当磁场缓慢增加时, 感应电场产生平行于磁场的霍尔电流, 电荷在上下表面聚集, 相当于量子化极化 $\mathbf{P} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{hc} \mathbf{B}$. 这种电场和磁场之间的感应被称为 TME, 是轴子绝缘态的直接证据. 然而, 由于仪器精度和样品质量的严格要求, TME 的观测具有很大的挑战性. 因此, 迄今为止的研究工作一直以探测零霍尔平台作为轴子绝缘体相的证据^[12,32]. 此外, 最近提出的二维无序导致的金属-绝缘体转变^[55] 和层霍尔效应^[37] 也是判定轴子绝缘体态的间接证据.

实现轴子绝缘态需满足 3 个条件^[15,18]: 1) 系统的所有拓扑表面态需完全打开带隙; 2) 轴子角 θ 必须有一定的对称性才能量子化; 3) 费米面需落入体态和所有表面态的带隙. MBT 作为一种本征磁性拓扑绝缘体, 有望克服这些困难. MBT 的磁

有序结构使其更有利于避免带隙波动和超顺磁性^[15]等无序效应. 大带隙有利于在高温下观测轴子绝缘态. 偶数层 MBT 薄膜的 AFM- z 相是本征轴子绝缘体, 因为其上、下表面态被相反方向的磁矩自然地打开了带隙. 清华大学王亚愚与其合作者等^[32]报道了 6 SLs 的 MBT 在 $22\text{V} \leq V_g \leq 30\text{V}$ 栅压范围内, 弱磁场下的纵向电阻率较大: $\rho_{xx} > 4.5h/e^2$; 同时在 $-3.5\text{T} < \mu_0 H < 3.5\text{T}$ 磁场范围内霍尔效应保持为零, 形成一个较宽的 $\rho_{yx} = 0$ 平台. 这是轴子绝缘体的标志特征, 它被预测为具有偶数 SLs 的 MBT 在 AFM 态的本征基态^[15-17]. 他们进一步在 1.6 K 温度下总结零磁场下 ρ_{xx}, ρ_{yx} 与栅压 V_g 的关系. 图 8(b) 显示零磁场下, 当 E_F 被调节到表面态带隙中时 ($22\text{V} \leq V_g \leq 34\text{V}$), 纵向电阻率 ρ_{xx} 表现出很强的绝缘性; 同时霍尔效应形成 $\rho_{yx} = 0$ 的平台, 因此霍尔电阻率的斜率 $\frac{d\rho_{yx}}{dH}$ 表现出零平台. 这与传统绝缘体不同. 他们还研究了栅压 V_g 为 25 V 时, ρ_{xx}, ρ_{yx} 随温度的演化现象, 如图 8(c) 所示. 在 $T = 1.6\text{K}$ 时, 弱磁场下 MBT 较大的纵向

电阻率和较宽的零霍尔平台验证了轴子绝缘态的出现. 零磁场中稳固的轴子绝缘态显著提高了发现量子化拓扑磁电和磁光效应以及探索凝聚态系统中的轴子电动力学的可能性^[58-61].

3.3 MBT 超导异质结产生马约拉纳准粒子

二十多年来, 凝聚态体系中马约拉纳准粒子的实现, 包括马约拉纳零能模 (MZM) 和马约拉纳手性边缘态, 一直备受关注^[26,62-67]. 马约拉纳准粒子的主要特征是其反粒子等于它自身, 即 $\gamma = \gamma^\dagger$. 理论发现, 无自旋一维 p 波拓扑超导体^[68,69]的边界处和无自旋二维 p + ip 拓扑超导体^[70-75]的涡旋中心存在零能的 MZM, 如图 9(a)、图 9(b) 和图 9(c) 所示. 相应地, 实验上有望在一维 SOC 纳米线^[76]、二维异质结^[66,77]以及本征材料^[78-81]中获得 MZM. 验证 MZM 存在的间接证据有零偏压电导峰^[82-85]和整数化分布的能级^[79]等. MZM 可以用来构造非局域拓扑量子比特, 有望解决量子态易受环境影响产生的退相干问题, 并且会带来基态简并度和非局域性^[86], 因此在拓扑量子计算中有重要的应用^[65,86].

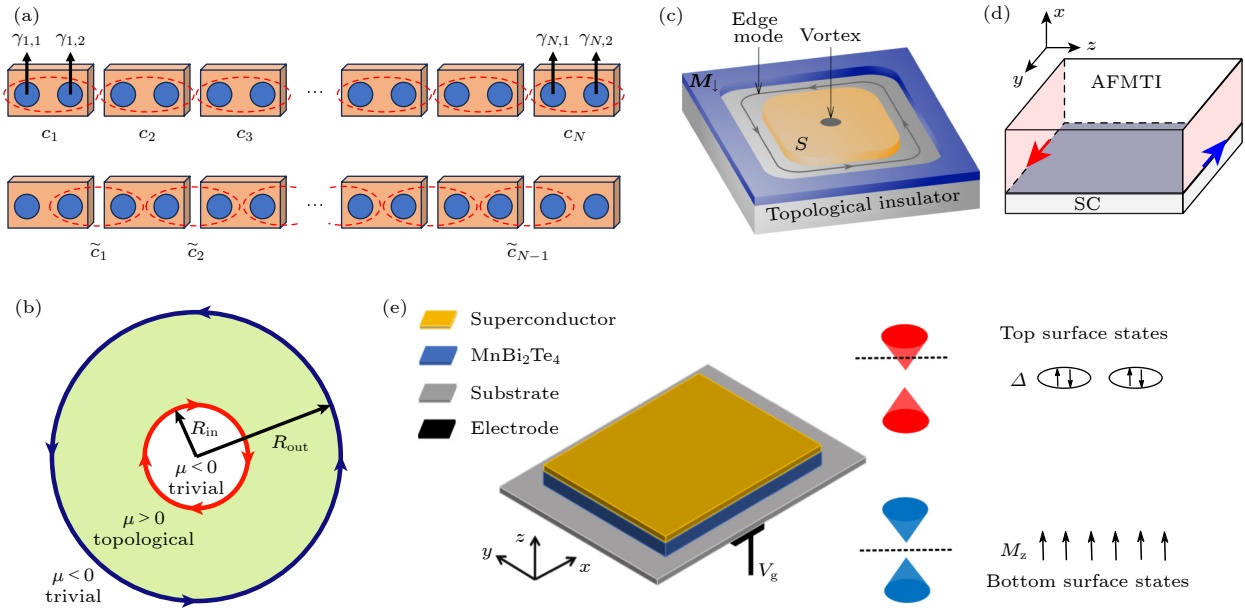


图 9 MBT 马约拉纳特性 (a) 无自旋 Kitaev 一维 p 波超导紧束缚链^[69]; (b) 环上的拓扑 p + ip 超导体在其内外边界支持手性马约拉纳边缘模式^[74]; (c) 无自旋二维 p+ip 超导体^[75]. 当三维拓扑绝缘体靠近铁磁体 ($M \downarrow$) 和超导体 (S) 时, 沿超导体和铁磁体边缘出现手性马约拉纳模式; (d) 在 AFM TI 和 s 波超导 SC 之间的界面边缘 (灰色) 的马约拉纳铰链模式 (蓝色和红色箭头)^[19]; (e) MBT 薄膜与顶部表面的 s 波超导 SC 耦合^[94]

Fig. 9. Majorana characteristics in MBT. (a) Sketch of Kitaev one-dimensional p-wave superconducting tight binding chain without spin^[69]. (b) The topological p + ip superconductor on an annulus supports chiral Majorana edge modes at its inner and outer boundaries^[74]. (c) Spin free two-dimensional p + ip superconductors^[75]. When the three-dimensional topological insulator is close to the ferromagnet ($M \downarrow$) and superconductor (S), the chiral Majorana mode appears along the edge mode superconductor and ferromagnet. (d) Majorana hinge modes (blue and red arrows) at the interface edge (gray) between an AFM TI and an s-wave superconducting SC^[19]. (e) The MBT thin film is coupled to s-wave superconducting SC on the top surface^[94].

除了 MZM, 一维马约拉纳手性边缘态是二维 $p + ip$ 手性超导体的拓扑边缘态. Fu 和 Kane^[66] 提出了由铁磁体、TIs 和 s 波超导体组成的异质结构, 以形成等效的 $p + ip$ 超导体, 进而获得可能的 1D 马约拉纳手性边缘态. 此外, 很多研究组提出, 临近 s 波超导体的 QAHI^[64,87–89]、半平台表面 QAHI (HPSQAHI)^[90] 和零平台 QAHI(ZPQAHI)^[17,91], 可实现马约拉纳手性边缘态. 不仅如此, 近期研究^[92,93] 发现, 临近超导体的 AI 同样可以实现马约拉纳边缘态. Yan 等^[92] 证明了 $C = 1/2$ 轴子态对应于马约拉纳基中 Chern 数为 $N = 1$ 的拓扑态. 在临近 s 波超导体, 临界超导配对尺度下发生从 $N = 1$ 向 $N = 0$ 相的拓扑相变. 他们理论分析表明, 在 AI 表面 $N = 1$ 和 $N = 0$ 区域的边界处出现了手性马约拉纳铰链模. Zhang 和 Liu^[93] 基于紧束缚模型分析也发现临近超导体的 AI 可实现马约拉纳边缘态. 与磁掺杂拓扑绝缘体/ s 波超导体异质结相比, 最近发现的本征磁拓扑 MBT 材料家族具有更大的磁交换带隙和更少的无序, 并且奇数层为 QAHI、偶数层为 AI, 被认为与 s 波超导体组成的异质结是实现手性马约拉纳模的潜在平台. Peng 和 Xu^[19] 提出了利用 MBT 和 s 波超导体组成的异质结构实现手性马约拉纳态. 在这种异质结构中, 超导邻近效应可以在 MBT 侧表面打开超导间隙. 该超导能隙与上下表面的磁交换能隙在拓扑上是截然不同的. 在具有这两种能隙表面的共用边, 即异质结

的铰链, 会呈现一维马约拉纳手性边缘态, 如图 9(d) 所示. 最近, Chen 等^[94] 提出, 当 MBT 薄膜与其上表面的 s 波超导体耦合时, 无论门电压如何调控, MBT 上表面态的磁能隙始终处于费米能级以下. 若调控下表面费米能级到磁带隙中, 则会出现手性马约拉纳模, 如图 9(e) 所示. Zhang 和 Liu^[93] 使用第一性原理方法预测在超导衬底上生长的 MBT/ Bi_2Te_3 薄膜是在较宽能量范围 (约 80 meV) 内实现马约拉纳手性边缘态的理想实验平台.

4 该体系其他研究方向

4.1 MnBi_2Te_4 异质结及超晶格 $[\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ 和 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{MnTe})_m]$

除 MnBi_2Te_4 之外, $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) 范德瓦耳斯家族材料也具有本征磁性拓扑性^[95,97–107]. $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ 族的非平庸拓扑结构与该系列中相应的磁性能紧密相连, 从而可通过调节层间 AFM 耦合强度来调控拓扑态. 这一特性有助于在 MnBi_2Te_4 家族/拓扑超导体异质结实现马约拉纳准粒子^[19]. MnBi_2Te_4 家族为探索新的量子拓扑相^[31–33], 低功耗电子学、自旋电子学^[62,108] 和拓扑量子计算^[65] 等领域的应用提供一个可行且高度可调的二维平台. 在该体系材料中, MBT 层由 n 层 Bi_2Te_3 隔开, 如图 10(a) 所示. 层间 AFM 相互作用随着 MnBi_2Te_4 层间距离的增加而迅速减弱, 因此其磁性和拓扑性可以由 Bi_2Te_3 层数 n

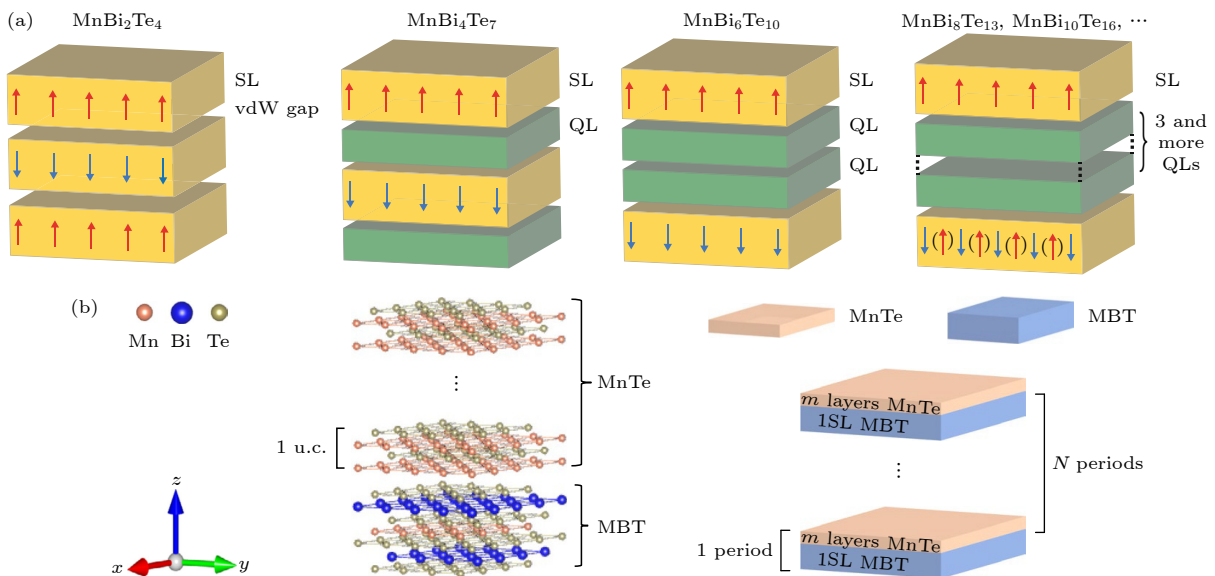


图 10 (a) $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ ^[95] 和 (b) $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{MnTe})_m$ ^[96] 的原子结构排列图
Fig. 10. Atomic structure of (a) $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ ^[95] and (b) $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{MnTe})_m$ ^[96].

大幅度调控. n 越大, AFM 耦合越弱, 奈尔温度越低, 越易形成铁磁基态^[109]. 当 $n = 1$ 或 2 时, MnBi_4Te_7 和 $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ 分别在奈尔温度为 13 K 和 11 K 时保持层间 AFM 耦合^[105,106]; 并且天然超晶格 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ ($n = 1$ 和 2)^[110] 存在铁磁及反铁磁相共存和交换偏置效应. 理论计算表明, 通过材料设计, 改变 MnBi_2Te_4 和 Bi_2Te_3 层的比例及堆叠情况, 可以实现多种二维拓扑相, 包括时间反演对称的量子自旋霍尔效应、时间反演破缺的量子自旋霍尔效应以及量子反常霍尔效应, 如图 11(a) 所示; 并且 Mn-Bi-Te 体系随层间电子耦合及交换相互作用的不同展现出丰富的三维拓扑物相, 如图 11(b) 所示. 扫描隧道显微镜 STM 和角分辨光电子能谱 ARPES 实验^[111] 表明, MnBi_4Te_7 顶部和底部表面态与 MnBi_2Te_4 或 Bi_2Te_3 截止面相关, 存在两种拓扑表面态. 这两种表面态强烈依赖表面 MnBi_2Te_4 层和 Bi_2Te_3 层之间的相互作用. 拥有 MnBi_2Te_4 截止面的比拥有 Bi_2Te_3 截止面的 MnBi_4Te_7 顶表面态的能隙小得多^[106]. $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ 的侧表面无带隙, 顶和底表面态有带隙^[97] 等. 此外, $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 异质结^[112] 的拓扑表面态存在明显磁带隙; $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 超晶格^[50] 拥有高温量子反常霍尔态. 当 $n = 3$ 时, 输运结果表明, $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ 在 10.5 K 以下进入铁磁相, 第一性原理计算和 ARPES 测量进一步证明, $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ 是 $Z_4 = 2$ 的本征铁磁轴子绝缘体^[98]. 研究表明^[113] 拥有 MnBi_2Te_4 截止面的 $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ 具有磁性起源的表面态带隙; 此带隙随温度的升高而减小, 并在顺磁相时完全关闭. 另一方面, 具有 Bi_2Te_3 截止面

的 $\text{MnBi}_8\text{Te}_{13}$ 表面由于铁磁性的缺失, 具有无带隙的 Dirac 锥表面态. 当 Bi_2Te_3 层数 n 进一步增加时, 相邻 MnBi_2Te_4 SLs 之间的层间交换相互作用变得过于微弱. 在临界温度以下, MnBi_2Te_4 SLs 被认为是相互磁独立的, 并且 SLs 的磁化在 z 轴上变得无序. 最近, 上海科技大学的寇煦丰和杨雨梦合作^[96] 报道了具有可调谐磁交换相互作用的铁磁体插层 MnBi_2Te_4 超晶格, 将铁磁 MnTe 层插入 MnBi_2Te_4 中, 形成 $[(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)(\text{MnTe})_m]_N$ 超晶格, 如图 10(b) 所示, 并利用偏振中子反射仪和磁电阻测量研究它们的磁相互作用. 铁磁体 MnTe 的加入通过 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{MnTe}$ 异质界面的交换弹簧效应调节了 MnBi_2Te_4 层的磁层间耦合.

4.2 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$

根据 ARPES 的测量结果, MBT 样品总是表现出重 n 型掺杂, 即费米能级位于样品体态的导带中. 这限制了其丰富拓扑物相的出现. 从材料的角度出发, 利用 Sb 元素替代 Bi 形成 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 可有效将其费米能级从导带调控到价带, 即载流子的类型从 n 型转变为 p 型, 进而可以观测到其拓扑物性. 不仅如此, $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 还具有其他丰富物理现象^[116], 包括拓扑相变、金属绝缘转变、不同的磁性和反常朗道量子化^[117] 等, 如图 12(a) 所示. 因此, $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 值得进一步研究, 并可能在未来提供广泛的潜在应用.

沈大伟及其合作者^[116] 发现在 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 中, 当掺杂量 $x = 0.3$ 时, 材料拥有相对较低的载流子浓度 ($3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). 这表明费米能级处在

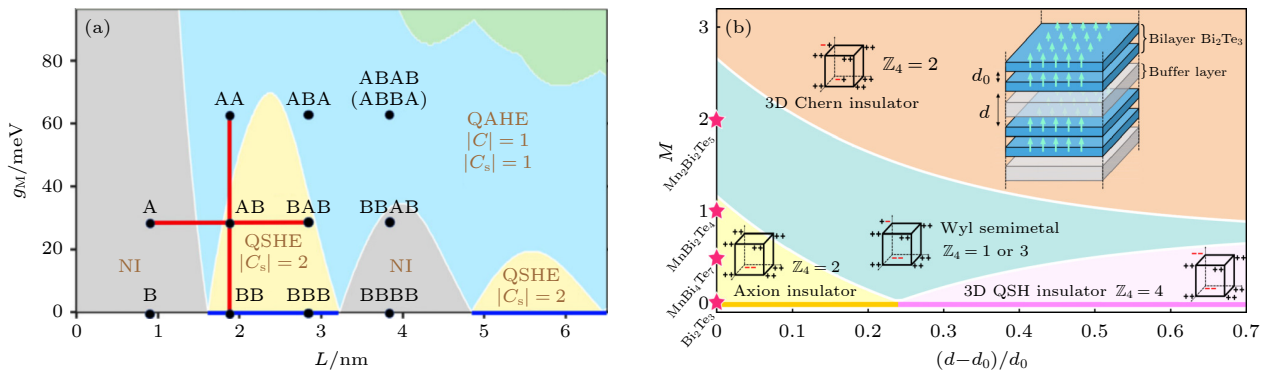


图 11 $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)_m(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ 体系丰富的拓扑物相 (a) $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)_m(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ 体系拓扑相图^[114]. 灰色、黄色和蓝色分别代表平庸的绝缘体、量子自旋霍尔态和量子反常霍尔态; (b) Mn-Bi-Te 体系随层间电子耦合和交换作用的不同展现丰富的拓扑物相^[115]
Fig. 11. Rich topological phase in $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)_m(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ system: (a) Topological phase diagram in $(\text{MnBi}_2\text{Te}_4)_m(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ system^[114]. Gray, yellow, and blue represent normal insulators, quantum spin Hall states, and quantum anomalous Hall states, respectively; (b) phase diagram of the multilayer topological heterostructure Mn-Bi-Te systems in terms of relative spacing and magnetization^[115].

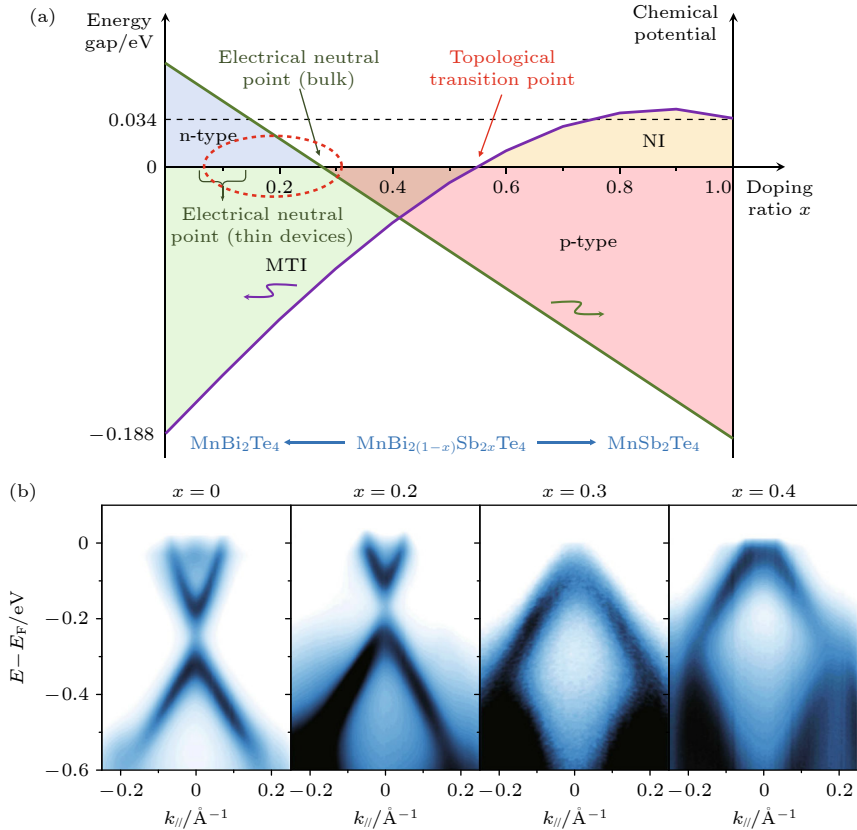


图 12 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 的丰富物理现象及能带结构 (a) $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 的 n-p 载流子转变和拓扑相变图^[116]; (b) 不同 Sb 掺杂浓度的 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 样品的 ARPES 测量的能带结构图^[116,129]

Fig. 12. Rich physical phenomena and band structure of $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$: (a) n-p carrier transition and topological phase transition diagram of $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ ^[116]; (b) band structure diagram of ARPES measurement of $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ samples with different Sb doping concentrations^[116,129].

带隙中. 当 Sb 完全取代 Bi 时, MnSb_2Te_4 (MST) 的载流子为 p 型 ($4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$). 因此, 从体态电子结构的角度来看, $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 系列样品可以调控费米能级、带隙, 甚至能带反转^[118], 如图 12(b) 所示. 由于组分和生长条件不同, MST 可以表现出反铁磁性 (奈尔温度 $T_N = 20 \text{ K}$)^[119]、铁磁性^[120]、亚铁磁性^[119,121] ($T_C = 25\text{—}34 \text{ K}$) 甚至是混合磁有序^[122]. 通过研究分析, 推测这与每层内 Mn 位和 Sb 位间交换作用有关^[119,123]. Yan 等^[124] 报道, 随着 $\text{Mn}(\text{Sb}_x\text{Bi}_{1-x})_2\text{Te}_4$ 中 Sb 含量的增加, 奈尔温度从 MBT 的 24 K 略微下降到 MST 的 19 K, 而自旋翻转和磁矩饱和所需的临界磁场强度明显下降. Lei 等^[125] 建立了一种简单的模型解释膜厚、磁排列及堆叠序列对 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 的磁性和拓扑性的影响; 并通过密度泛函理论 DFT 计算发现, 完全有序的 MST 是反铁磁性的, 但拓扑上是平庸的. 而另一项研究^[126] 表明在微过量 Mn 掺杂 MnSb_2Te_4 (M-MST) 中, Mn 部分取代 Sb 使其兼具铁

磁性和拓扑绝缘性, 并且 T_C 提高到了 45—50 K. 该样品具有垂直磁各向异性的铁磁性、2D Dirac 锥, 并且随着 Mn 的微量掺杂量增加, 其费米能级又从价带逐渐靠近 Dirac 点. 在 T_C 以下, 具有磁性导致的拓扑表面态带隙. Lee 等^[127] 在本征反铁磁拓扑绝缘体 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 中观察到磁场导致的 Type-II Weyl 态. 此外, Wang 等^[128] 系统地测量了 $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ 的电阻率、塞贝克系数和导热系数等, 验证了当费米能级位于体隙内电荷中性点附近时, 双极效应可能在其输运性质中起重要作用.

5 存在的问题

近几年, MBT 的电子结构还存在一些分歧, 即 MBT 的自然解理 (001) 晶面的拓扑表面态是否存在带隙^[30,95]. 理论研究表明, 由于该晶面的 S 对称性破缺, 在 T_N 以下, 其拓扑表面态会出现带

隙^[15,31,112,130–132]. 早期的 ARPES 测量结果^[30,130,132] 表明其拓扑表面态存在 70—200 meV 的带隙. 但有些研究组发现, 在 T_N 以下和以上, 其拓扑表面态都无带隙^[30,107,132–137]. 另有结果表明, 拓扑表面态的带隙还会随空间位置的变化而变化^[9,116,130]. 南方科技大学陈朝宇等^[23] 最近发表的一篇文章指出 MBT 的拓扑表面态无磁隙的原因主要归类为两种: 磁重构和拓扑表面态重分布. 1) 磁重构: 理论计算表明, 在 MBT 中, 偏离 A 型 AFM- z 的表层磁结构^[49,104,134,138], 例如无序磁结构、G-AFM 以及 A 型 AFM- x , 都会导致无带隙的拓扑表面态. 另一种类型的磁重构为磁畴和磁畴壁的形成^[139]. 基于紧束缚模型的第一性原理^[140] 和实验^[24] 均证实了无带隙手性边缘态在相反磁畴存在时受到拓扑保护, 因此这种边缘态是严格无带隙的. 实验观察到 MBT 表面存在磁畴壁^[141,142], 并且其拓扑表面态带隙大小与样品质量和空间位置相关^[131,143]. 所以 MBT 表面磁畴壁也可能导致无带隙的拓扑表面态. 一种更复杂的亚铁磁结构已被实验观察到^[119,144], 并被用来解释 MBT 中大大减小的拓扑表面态带隙^[145]. Mn-Bi 的互掺杂可以引入从表面数第二和第六原子层中 Mn_{Bi} 的缺陷, 其磁矩与中心 Mn 层的磁矩反平行. 由于拓扑表面态密度主要局域于 Te-Bi-Te 层, Mn_{Bi} 的缺陷磁矩抵消了部分中心 Mn 层的磁矩, 这导致拓扑表面态带隙减小. Mn_{Bi} 缺陷的不均匀性可以解释拓扑表面态带隙大小与样品质量和空间位置的依赖性, 这表明改善样品晶体质量进而抑制 Mn-Bi 的互掺杂是近期研究的关键问题^[145]. 此外, 贡献磁性的 Mn d 轨道和贡献拓扑表面态的 Bi/Te p 轨道间的弱耦合^[135] 也可能导致 MBT 无带隙的拓扑表面态. 2) 拓扑表面态重分布: 无带隙的拓扑表面态也可归因于拓扑表面态从最顶层 SL 到下一层的扩展分布使得拓扑表面态感受到的有效磁矩减小. 导致拓扑表面态重分布的内因有能带杂化^[146], vdW 间距膨胀^[147,131] 和电荷^[143]/缺陷^[148] 效应等. 拓扑表面态与 Rashba 劈裂能带杂化会引起拓扑表面态的重分布^[146], 进而产生无带隙的表面态. 在理想情况下, 拓扑表面态主要位于最顶端的 SL. 在 A-AFM 结构中, 拓扑表面态的有效磁矩约等于最顶层 SL 的净铁磁矩, 这足以像预期的那样打开一个相当大的拓扑表面态 Dirac 带隙. 然而在实际情况下, 拓扑表面态的分布扩展到第二个 SL 层. 层间反铁磁排列导致前

两个 SLs 的净磁化为零, 从而抵消了拓扑表面态感受到的有效磁矩. 在极端情况下, 不论表面 A-AFM 磁结构多么稳固、磁有序与能带耦合多么强, 若拓扑表面态平均分布在前两个 SLs, 则无带隙拓扑表面态出现^[23].

该领域面临的另一个问题是大面积 MBT 薄膜样品的质量不高, 进而影响其拓扑量子态的观测. 到目前为止, 验证 MBT 的量子反常霍尔效应、轴子绝缘体态等拓扑量子态的样品几乎都是块体 MBT 单晶手撕的薄片. 但手撕薄片的形状不规则、尺寸较小、性能调控不良并且产率低, 这使得 MBT 材料体系性能的系统研究及优化非常困难, 导致不同的样品测量数据不一致, 不利于促进其实际的拓扑应用. 为了开发其拓扑应用, 需要以可重复、可控和可扩展的方式制备 MBT 样品, 使其能够构建复杂的、大面积的异质结构和阵列等, 进而实现不同用途. 而薄片状样品很难满足要求. 分子束外延是目前最精密的制备高质量薄膜的方法之一, 可提供大面积、规则并且易于调控的样品, 满足重复性、可调性和可扩展性的制备需求^[149]. 自 2018 年何珂研究组^[29] 首次使用分子束外延制备成功 MBT 薄膜以来, 一直未在使用分子束外延制备的 MBT 样品中^[150,151] 观测到这些奇异的拓扑量子态. 直到近期, 清华大学的冯硝研究组^[149] 使用分子束外延制备了 MBT 薄膜, 并在高磁场下的铁磁 MBT 薄膜中测试到量子化的霍尔电阻率. 因此, 继续探索 MBT 制备高质量大面积致密的 MBT 薄膜尤为重要.

6 总结与展望

本文简要回顾了本征磁性拓扑绝缘体 MBT 的基本性质, 重点介绍了其奇异的拓扑量子态: 量子反常霍尔效应、轴子绝缘体、手性马约拉纳模等. 对本征磁拓扑绝缘体 MBT 的研究具有重要的科学价值和应用前景, 因其在无耗散自旋电子学、信息存储和量子计算方面的巨大潜力. 当前 MBT 体系的研究正在如火如荼地开展, 并不断涌现一些重要的成果. MBT 系列的发现只是磁性拓扑物理研究的开端, 预期更多新的磁性拓扑物理效应和理想磁性拓扑体系会被发现. 通过掺杂、应变、缺陷工程、加压、异质结和超晶格构建等手段, MBT 及其相关体系的磁性、电学等性质有望进一步改善, 这

也为更多新奇拓扑量子物态的研究提供了绝佳平台。其次, 由于 MBT 还存在磁转变温度低、重 n 型掺杂等问题, 寻找具有更高磁转变温度、更优的本征磁性拓扑性质的新材料体系有望在更高温度下实现拓扑量子态, 进而更接近实际应用。不局限于在拓扑材料中引入磁性, 反过来在磁性材料中寻找拓扑性将有可能更有效地发现本征磁性拓扑材料^[44]。高通量计算和磁空间群分析预测大量新的磁性拓扑材料^[152–156], 为相关实验提供指导。研究不同的磁性(铁磁、反铁磁、亚铁磁和新的磁化状态等)与拓扑性相互作用可能产生更多奇异拓扑量子态等。本征磁性拓扑绝缘体不仅为研究拓扑磁有序结构和新颖的拓扑相变提供理想平台, 而且对物理学、材料和信息技术领域的发展具有重要的推动作用。

感谢南方科技大学量子研究院陈朝宇研究员和王渊博士的讨论。

参考文献

- Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766
- Fu L, Kane C L 2007 *Phys. Rev. B* **76** 045302
- Hsieh D, Qian D, Wray L, Xia Y, Hor Y S, Cava R J, Hasan M Z 2008 *Nature* **452** 970
- Zhang H, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nat. Phys.* **5** 438
- Pesin D, MacDonald A H 2012 *Nat. Mater.* **11** 409
- Rajamathi C R, Gupta U, Kumar N, Yang H, Sun Y, Suss V, Shekhar C, Schmidt M, Blumtritt H, Werner P, Yan B H, Parkin S, Felser C, Rao C N R 2017 *Adv. Mater.* **29** 1606202
- Kitaev A Y 2003 *Ann. Phys.* **303** 2
- Chang C Z, Zhang J, Feng X, Shen J, Zhang Z, Guo M, Li K, Ou Y, Wei P, Wang L L, Ji Z Q, Feng Y, Ji S, Chen X, Jia J, Dai X, Fang Z, Zhang S C, He K, Wang Y, Lu L, Ma X C, Xue Q K 2013 *Science* **340** 167
- Chang C Z, Zhao W, Kim D Y, Zhang H, Assaf B A, Heiman D, Zhang S C, Liu C, Chan M H W, Moodera J S 2015 *Nat. Mater.* **14** 473
- Mogi M, Kawamura M, Yoshimi R, Tsukazaki A, Kozuka Y, Shirakawa N, Takahashi K S, Kawasaki M, Tokura Y 2017 *Nat. Mater.* **16** 516
- Xiao D, Jiang J, Shin J H, Wang W, Wang F, Zhao Y F, Liu C, Wu W, Chan M H W, Samarth N, Chang C Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 056801
- Lachman E O, Young A F, Richardella A, Cuppens J, Naren H R, Anahory Y, Meltzer A Y, Kandala A, Kempinger S, Myasoedov Y, Huber M E, Samarth N, Zeldov E 2015 *Sci. Adv.* **1** e1500740
- Otrokov M M, Menshchikova T V, Vergniory M G, Rusinov I P, Yu Vyazovskaya A, Koroteev Y M, Bihlmayer G, Ernst A, Echenique P M, Arnau A, Chulkov E V 2017 *2D Mater.* **4** 025082
- Zhang D, Shi M, Zhu T, Xing D, Zhang H, Wang J 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 206401
- Li J, Li Y, Du S, Wang Z, Gu B L, Zhang S C, He K, Duan W, Xu Y 2019 *Sci. Adv.* **5** eaaw5685
- Otrokov M M, Rusinov I P, Blanco-Rey M, Hoffmann M, Vyazovskaya A Y, Ereemeev S V, Ernst A, Echenique P M, Arnau A, Chulkov E V 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 107202
- Qi X L, Hughes T L, Zhang S C 2008 *Phys. Rev. B* **78** 195424
- Peng Y, Xu Y 2019 *Phys. Rev. B* **99** 195431
- He Q L, Hughes T L, Armitage N P, Tokura Y, Wang K L 2022 *Nat. Mater.* **21** 15
- Chen X, Wang H, Liu H, Wang C, Wei G, Fang C, Wang H, Geng C, Liu S, Li P, Yu H, Zhao W, Miao J, Li Y, Wang L, Nie T, Zhao J, Wu X 2022 *Adv. Mater.* **34** 2106172
- Flensberg K, von Oppen F, Stern A 2021 *Nat. Rev. Mater.* **6** 944
- Wang Y, Ma X M, Hao Z, Cai Y, Rong H, Zhang F, Chen W, Zhang C, Lin J, Zhao Y, Liu C, Liu Q, Chen C 2023 *Natl. Sci. Rev.* DOI: 10.1093/nsr/nwad066
- Tokura Y, Yasuda K, Tsukazaki A 2019 *Nat. Rev. Phys.* **1** 126
- Mogi M, Kawamura M, Tsukazaki A, Yoshimi R, Takahashi K S, Kawasaki M, Tokura Y 2017 *Sci. Adv.* **3** eaao1669
- Lian B, Sun X Q, Vaezi A, Qi X L, Zhang S C 2018 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **115** 10938
- Mong R S K, Essin A M, Moore J E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 245209
- Lee D S, Kim T H, Park C H, Chung C Y, Lim Y S, Seo W S, Park H H 2013 *CrystEngComm* **15** 5532
- Gong Y, Guo J, Li J, Zhu K, Liao M, Liu X, Zhang Q, Gu L, Tang L, Feng X, Zhang D, Li W, Song C, Wang L, Yu P, Chen X, Wang Y, Yao H, Duan W, Xu Y, Zhang S C, Ma X, Xue Q K, He K 2019 *Chin. Phys. Lett.* **36** 076801
- Otrokov M M, Klimovskikh I I, Bentmann H, Estyunin D, Zeugner A, Aliev Z S, Gass S, Wolter A U B, Koroleva A V, Shikin A M, Blanco-Rey M, Hoffmann M, Rusinov I P, Vyazovskaya A Y, Ereemeev S V, Koroteev Y M, Kuznetsov V M, Freyse F, Sánchez-Barriga J, Amiraslanov I R, Babanly M B, Mamedov N T, Abdullayev N A, Zverev V N, Alfonsov A, Kataev V, Buchner B, Schwiery E F, Kumar S, Kimura A, Petaccia L, Di Santo G, Vidal R C, Schatz S, Kissner K, Unzelmann M, Min C H, Moser S, Peixoto T R F, Reinert F, Ernst A, Echenique P M, Isaeva A, Chulkov E V 2019 *Nature* **576** 416
- Deng Y, Yu Y, Shi M Z, Guo Z, Xu Z, Wang J, Chen X H, Zhang Y 2020 *Science* **367** 895
- Liu C, Wang Y, Li H, Wu Y, Li Y, Li J, He K, Xu Y, Zhang J, Wang Y 2020 *Nat. Mater.* **19** 522
- Ge J, Liu Y, Li J, Li H, Luo T, Wu Y, Xu Y, Wang J 2020 *Natl. Sci. Rev.* **7** 1280
- Li Y, Liu C, Wang Y, Lian Z, Li H, Chun O, Zhang J, Wang Y 2021 arXiv: 2105.10390v1 [cond-mat. mtrl-sci]
- Liu C, Wang Y, Yang M, Mao J, Li H, Li Y, Li J, Zhu H, Wang J, Li L, Wu Y, Xu Y, Zhang J, Wang Y 2021 *Nat. Commun.* **12** 4647
- Wu M, Tu D, Nie Y, Miao S, Gao W, Han Y, Zhu X, Zhou J, Ning W, Tian M 2022 *Nano Lett.* **22** 73
- Gao A, Liu Y F, Hu C, Qiu J X, Tzschaschel C, Ghosh B, Ho S C, Bérubé D, Chen R, Sun H, Zhang Z, Zhang X Y,

- Wang Y X, Wang N, Huang Z, Felser C, Agarwal A, Ding T, Tien H J, Akey A, Gardener J, Singh B, Watanabe K, Taniguchi T, Burch K S, Bell D C, Zhou B B, Gao W, Lu H Z, Bansil A, Lin H, Chang T R, Fu L, Ma Q, Ni N, Xu S Y 2021 *Nature* **595** 521
- [38] Tai L, Chong S K, Zhang H, Zhang P, Deng P, Eckberg C, Qiu G, Dai B, He H, Wu D, Xu S, Davydov A, Wang K 2021 *arXiv: 2103.09878v1 [cond-mat. mtrl-sci]*
- [39] Ye C, Xie X, Lü W, Huang K, Yang A J, Jiang S, Liu X, Zhu D, Qiu X, Tong M, Zhou T, Hsu C H, Chang G, Lin H, Li P, Yang K, Wang Z, Jiang T, Renshaw Wang X 2022 *Nano Lett.* **22** 1366
- [40] Zhang Z, Wang N, Cao N, Wang A, Zhou X, Watanabe K, Taniguchi T, Yan B, Gao W B 2022 *Nat. Commun.* **13** 6191
- [41] Bartram F M, Leng Y C, Wang Y, Liu L, Chen X, Peng H, Li H, Yu P, Wu Y, Lin M L, Zhang J, Tan P H, Yang L 2022 *npj Quantum Mater.* **7** 84
- [42] Zhan G H, Wang H Q, Zhang H J 2020 *Physics* **49** 817 (in Chinese) [占国慧, 王怀强, 张海军 2020 *物理* **49** 817]
- [43] Guo W T, Huang L, Xu G G, Zhong K H, Zhang J M, Huang Z G 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 047101 (in Chinese) [郭文铤, 黄璐, 许桂贵, 钟克华, 张健敏, 黄志高 2021 *物理学报* **70** 047101]
- [44] Wang Y, Zhang F, Zeng M, Sun H, Hao Z, Cai Y, Rong H, Zhang C, Liu C, Ma X, Wang L, Guo S, Lin J, Liu Q, Liu C, Chen C 2023 *Front. Phys.* **18** 21304
- [45] Li B, Yan J Q, Pajeroski D M, Gordon E, Nedić A M, Sizyuk Y, Ke L, Orth P P, Vaknin D, McQueeney R J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 167204
- [46] Yan J Q, Zhang Q, Heitmann T, Huang Z, Chen K Y, Cheng J G, Wu W, Vaknin D, Sales B C, McQueeney R J 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 064202
- [47] Yang S, Xu X, Zhu Y, Niu R, Xu C, Peng Y, Cheng X, Jia X, Huang Y, Xu X, Lu J, Ye Y 2021 *Phys. Rev. X* **11** 011003
- [48] Wang P, Ge J, Li J, Liu Y, Xu Y, Wang J 2021 *The Innovation* **2** 100098
- [49] Li J, Wang C, Zhang Z, Gu B-L, Duan W, Xu Y 2019 *Phys. Rev. B* **100** 121103
- [50] Deng H, Chen Z, Wołoś A, Konczykowski M, Sobczak K, Sitnicka J, Fedorchenko I V, Borysiuk J, Heider T, Pluciński Ł, Park K, Georgescu A B, Cano J, Krusin-Elbaum L 2021 *Nat. Phys.* **17** 36
- [51] Fu H, Liu C X, Yan B 2020 *Sci. Adv.* **6** eaaz0948
- [52] Gao R, Qin G, Qi S, Qiao Z, Ren W 2021 *Phys. Rev. Mater.* **5** 114201
- [53] Ying Z, Zhang S, Chen B, Jia B, Fei F, Zhang M, Zhang H, Wang X, Song F 2022 *Phys. Rev. B* **105** 085412
- [54] Nomura K, Nagaosa N 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 166802
- [55] Li H, Jiang H, Chen C Z, Xie X C 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 156601
- [56] Tse W K, MacDonald A H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 057401
- [57] Wu L, Salehi M, Koirala N, Moon J, Oh S, Armitage N P 2016 *Science* **354** 1124
- [58] Wang J, Lian B, Qi X L, Zhang S C 2015 *Phys. Rev. B* **92** 081107
- [59] Morimoto T, Furusaki A, Nagaosa N 2015 *Phys. Rev. B* **92** 085113
- [60] Wilczek F 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1799
- [61] Essin A M, Moore J E, Vanderbilt D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 146805
- [62] Wang J 2020 *Sci. Chin. -Phys., Mech. Astron.* **63** 127031
- [63] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [64] Qi X L, Hughes T L, Zhang S C 2010 *Phys. Rev. B* **82** 184516
- [65] 't Hooft G 1976 *Phys. Rev. D* **14** 3421
- [66] Fu L, Kane C L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 096407
- [67] Chen C, Jiang K, Zhang Y, Liu C, Liu Y, Wang Z, Wang J 2020 *Nat. Phys.* **16** 536
- [68] Lutchyn R M, Sau J D, Das Sarma S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 077001
- [69] Leijnse M, Flensberg K 2012 *Semicond. Sci. Technol.* **27** 124003
- [70] Stone M, Roy R 2004 *Phys. Rev. B* **69** 184511
- [71] Wang M X, Liu C, Xu J P, Yang F, Miao L, Yao M Y, Gao C L, Shen C, Ma X, Chen X, Xu Z A, Liu Y, Zhang S C, Qian D, Jia J F, Xue Q K 2012 *Science* **336** 52
- [72] Fu L, Kane C L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 216403
- [73] Sau J D, Lutchyn R M, Tewari S, Das Sarma S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 040502
- [74] Alicea J 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 076501
- [75] Akhmerov A R, Nilsson J, Beenakker C W J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 216404
- [76] Oreg Y, Refael G, von Oppen F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 177002
- [77] Fu L, Kane C L 2009 *Phys. Rev. B* **79** 161408
- [78] Zhang P, Yaji K, Hashimoto T, Ota Y, Kondo T, Okazaki K, Wang Z, Wen J, Gu G D, Ding H, Shin S 2018 *Science* **360** 182
- [79] Kong L, Zhu S, Papaj M, Chen H, Cao L, Isobe H, Xing Y, Liu W, Wang D, Fan P, Sun Y, Du S, Schneeloch J, Zhong R, Gu G, Fu L, Gao H J, Ding H 2019 *Nat. Phys.* **15** 1181
- [80] König E J, Coleman P 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 207001
- [81] Machida T, Sun Y, Pyon S, Takeda S, Kohsaka Y, Hanaguri T, Sasagawa T, Tamegai T 2019 *Nat. Mater.* **18** 811
- [82] Mourik V, Zuo K, Frolov S M, Plissard S R, Bakkers E P A M, Kouwenhoven L P 2012 *Science* **336** 1003
- [83] Deng M T, Yu C L, Huang G Y, Larsson M, Caroff P, Xu H Q 2012 *Nano Lett.* **12** 6414
- [84] Xu J P, Wang M X, Liu Z L, Ge J F, Yang X, Liu C, Xu Z A, Guan D, Gao C L, Qian D, Liu Y, Wang Q H, Zhang F C, Xue Q K, Jia J F 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 017001
- [85] Sun H H, Zhang K W, Hu L H, Li C, Wang G Y, Ma H Y, Xu Z A, Gao C L, Guan D D, Li Y Y, Liu C, Qian D, Zhou Y, Fu L, Li S C, Zhang F C, Jia J F 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 257003
- [86] He Y P, Hong J S, Liu X J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 110302 (in Chinese) [何映萍, 洪健松, 刘雄军 2020 *物理学报* **69** 110302]
- [87] Strübi G, Belzig W, Choi M S, Bruder C 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 136403
- [88] Chung S B, Qi X L, Maciejko J, Zhang S C 2011 *Phys. Rev. B* **83** 100512
- [89] Wang J, Zhou Q, Lian B, Zhang S-C 2015 *Phys. Rev. B* **92** 064520
- [90] Maciejko J, Qi X L, Drew H D, Zhang S C 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 166803
- [91] Wang J, Lian B, Zhang S C 2014 *Phys. Rev. B* **89** 085106
- [92] Yan Q, Li H, Zeng J, Sun Q F, Xie X C 2021 *Commun. Phys.* **4** 239
- [93] Zhang X, Liu F 2021 *Phys. Rev. B* **103** 024405
- [94] Chen L, Cao Z, He K, Liu X, Liu D E 2023 *Phys. Rev. B* **107** 165405
- [95] Klimovskikh I I, Otrokov M M, Estyunin D, Ereemeev S V, Filnov S O, Koroleva A, Shevchenko E, Voroshnin V, Rybkin A G, Rusinov I P, Blanco-Rey M, Hoffmann M,

- Aliev Z S, Babanly M B, Amiraslavov I R, Abdullayev N A, Zverev V N, Kimura A, Tereshchenko O E, Kokh K A, Petaccia L, Di Santo G, Ernst A, Echenique P M, Mamedov N T, Shikin A M, Chulkov E V 2020 *npj Quantum Mater.* **5** 54
- [96] Chen P, Yao Q, Xu J, Sun Q, Grutter A J, Quarterman P, Balakrishnan P P, Kinane C J, Caruana A J, Langridge S, Li A, Achinuq B, Heppell E, Ji Y, Liu S, Cui B, Liu J, Huang P, Liu Z, Yu G, Xiu F, Hesjedal T, Zou J, Han X, Zhang H, Yang Y, Kou X 2023 *Nat. Electron.* **6** 18
- [97] Tian S, Gao S, Nie S, Qian Y, Gong C, Fu Y, Li H, Fan W, Zhang P, Kondo T, Shin S, Adell J, Fedderwitz H, Ding H, Wang Z, Qian T, Lei H 2020 *Phys. Rev. B* **102** 035144
- [98] Hu C, Ding L, Gordon K N, Ghosh B, Tien H-J, Li H, Linn A G, Lien S W, Huang C Y, Mackey S, Liu J, Reddy P V S, Singh B, Agarwal A, Bansil A, Song M, Li D, Xu S Y, Lin H, Cao H, Chang T R, Dessau D, Ni N 2020 *Science advances* **6** eaba4275
- [99] Wu J, Liu F, Liu C, Wang Y, Li C, Lu Y, Matsuishi S, Hosono H 2020 *Adv. Mater.* **32** 2001815
- [100] Shi M Z, Lei B, Zhu C S, Ma D H, Cui J H, Sun Z L, Ying J J, Chen X H 2019 *Phys. Rev. B* **100** 155144
- [101] Ding L, Hu C, Ye F, Feng E, Ni N, Cao H 2020 *Phys. Rev. B* **101** 020412
- [102] Hu Y, Xu L, Shi M, Luo A, Peng S, Wang Z Y, Ying J J, Wu T, Liu Z K, Zhang C F, Chen Y L, Xu G, Chen X H, He J F 2020 *Phys. Rev. B* **101** 161113
- [103] Jo N H, Wang L L, Slager R J, Yan J, Wu Y, Lee K, Schruck B, Vishwanath A, Kaminski A 2020 *Phys. Rev. B* **102** 045130
- [104] Zhang R X, Wu F, Das Sarma S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 136407
- [105] Yan J Q, Liu Y H, Parker D S, Wu Y, Aczel A A, Matsuda M, McGuire M A, Sales B C 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 054202
- [106] Hu C, Gordon K N, Liu P, Liu J, Zhou X, Hao P, Narayan D, Emmanouilidou E, Sun H, Liu Y, Brawer H, Ramirez A P, Ding L, Cao H, Liu Q, Dessau D, Ni N 2020 *Nat. Commun.* **11** 97
- [107] Vidal R C, Zeugner A, Facio J I, Ray R, Haghghi M H, Wolter A U B, Corredor Bohorquez L T, Cagliaris F, Moser S, Figgemeier T, Peixoto T R F, Vasili H B, Valvidares M, Jung S, Cacho C, Alfonsov A, Mehlawat K, Kataev V, Hess C, Richter M, Büchner B, van den Brink J, Ruck M, Reinert F, Bentmann H, Isaeva A 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041065
- [108] He K 2020 *npj Quantum Mater.* **5** 90
- [109] Xie H K, Wang D H, Cai Z X, Chen B, Guo J W, Naveed M, Zhang S, Zhang M H, Wang X F, Fei F C, Zhang H J, Song F Q 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 221902
- [110] Xu X, Yang S, Wang H, Guzman R, Gao Y, Zhu Y, Peng Y, Zang Z, Xi M, Tian S, Li Y, Lei H, Luo Z, Yang J, Wang Y, Xia T, Zhou W, Huang Y, Ye Y 2022 *Nat. Commun.* **13** 7646
- [111] Wu X, Li J, Ma X M, Zhang Y, Liu Y, Zhou C-S, Shao J, Wang Q, Hao Y J, Feng Y, Schwier E F, Kumar S, Sun H, Liu P, Shimada K, Miyamoto K, Okuda T, Wang K, Xie M, Chen C, Liu Q, Liu C, Zhao Y 2020 *Phys. Rev. X* **10** 031013
- [112] Rienks E D L, Wimmer S, Sánchez-Barriga J, Caha O, Mandal P S, Růžička J, Ney A, Steiner H, Volobuev V V, Groiss H, Albu M, Kothleitner G, Michalička J, Khan S A, Minár J, Ebert H, Bauer G, Freyse F, Varykhalov A, Rader O, Springholz G 2019 *Nature* **576** 423
- [113] Lu R, Sun H, Kumar S, Wang Y, Gu M, Zeng M, Hao Y J, Li J, Shao J, Ma X M, Hao Z, Zhang K, Mansuer W, Mei J, Zhao Y, Liu C, Deng K, Huang W, Shen B, Shimada K, Schwier E F, Liu C, Liu Q, Chen C 2021 *Phys. Rev. X* **11** 011039
- [114] Sun H, Xia B, Chen Z, Zhang Y, Liu P, Yao Q, Tang H, Zhao Y, Xu H, Liu Q 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 096401
- [115] Gu M, Li J, Sun H, Zhao Y, Liu C, Liu J, Lu H, Liu Q 2021 *Nat. Commun.* **12** 3524
- [116] Chen B, Fei F, Zhang D, Zhang B, Liu W, Zhang S, Wang P, Wei B, Zhang Y, Zuo Z, Guo J, Liu Q, Wang Z, Wu X, Zong J, Xie X, Chen W, Sun Z, Wang S, Zhang Y, Zhang M, Wang X, Song F, Zhang H, Shen D, Wang B 2019 *Nat. Commun.* **10** 4469
- [117] Chong S K, Lei C, Lee S H, Jaroszynski J, Mao Z, Macdonald A H, Wang K 2022 arXiv: 2208.13332v1 [cond-mat. mes-hall]
- [118] Glazkova D A, Estyunin D A, Klimovskikh I I, Makarova T P, Tereshchenko O E, Kokh K A, Golyashov V A, Koroleva A V, Shikin A M 2022 *JETP Lett.* **115** 286
- [119] Liu Y, Wang L L, Zheng Q, Huang Z, Wang X, Chi M, Wu Y, Chakoumakos B C, McGuire M A, Sales B C, Wu W, Yan J 2021 *Phys. Rev. X* **11** 021033
- [120] Ge W, Sass P M, Yan J, Lee S H, Mao Z, Wu W 2021 *Phys. Rev. B* **103** 134403
- [121] Murakami T, Nambu Y, Koretsune T, Xiangyu G, Yamamoto T, Brown C M, Kageyama H 2019 *Phys. Rev. B* **100** 195103
- [122] Glazkova D A, Estyunin D A, Klimovskikh I I, Rybkina A A, Golovchanskiy I A, Tereshchenko O E, Kokh K A, Shchetinin I V, Golyashov V A, Shikin A M 2022 *JETP Lett.* **116** 817
- [123] Riberolles S X M, Zhang Q, Gordon E, Butch N P, Ke L, Yan J Q, McQueeney R J 2021 *Phys. Rev. B* **104** 064401
- [124] Yan J Q, Okamoto S, McGuire M A, May A F, McQueeney R J, Sales B C 2019 *Phys. Rev. B* **100** 104409
- [125] Lei C, Chen S, MacDonald A H 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **117** 27224
- [126] Wimmer S, Sánchez-Barriga J, Küppers P, Ney A, Schierle E, Freyse F, Caha O, Michalička J, Liebmann M, Primetzhofer D, Hoffman M, Ernst A, Otrokov M M, Bihlmayer G, Weschke E, Lake B, Chulkov E V, Morgenstern M, Bauer G, Springholz G, Rader O 2021 *Adv. Mater.* **33** 2102935
- [127] Lee S H, Graf D, Min L, Zhu Y, Yi H, Ciocys S, Wang Y, Choi E S, Basnet R, Fereidouni A, Wegner A, Zhao Y F, Verlinde K, He J, Redwing R, Gopalan V, Churchill H O H, Lanzara A, Samarth N, Chang C Z, Hu J, Mao Z Q 2021 *Phys. Rev. X* **11** 031032
- [128] Wang H H, Luo X G, Shi M Z, Peng K L, Lei B, Cui J H, Ma D H, Zhuo W Z, Ying J J, Wang Z Y, Chen X H 2021 *Phys. Rev. B* **103** 085126
- [129] Ma X M, Zhao Y, Zhang K, Kumar S, Lu R, Li J, Yao Q, Shao J, Hou F, Wu X, Zeng M, Hao Y J, Hao Z, Wang Y, Liu X R, Shen H, Sun H, Mei J, Miyamoto K, Okuda T, Arita M, Schwier E F, Shimada K, Deng K, Liu C, Lin J, Zhao Y, Chen C, Liu Q, Liu C 2021 *Phys. Rev. B* **103** L121112
- [130] Lee S H, Zhu Y, Wang Y, Miao L, Pillsbury T, Yi H, Kempinger S, Hu J, Heikes C A, Quarterman P, Ratcliff W, Borchers J A, Zhang H, Ke X, Graf D, Alem N, Chang C Z, Samarth N, Mao Z 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 012011
- [131] Shikin A M, Estyunin D A, Klimovskikh I I, Filnov S O, Schwier E F, Kumar S, Miyamoto K, Okuda T, Kimura A,

- Kuroda K, Yaji K, Shin S, Takeda Y, Saitoh Y, Aliev Z S, Mamedov N T, Amiraslanov I R, Babanly M B, Otrokov M M, Ereemeev S V, Chulkov E V 2020 *Sci. Rep.* **10** 13226
- [132] Vidal R C, Bentmann H, Peixoto T R F, Zeugner A, Moser S, Min C H, Schatz S, Kißner K, Ünzelmann M, Fornari C I, Vasili H B, Valvidares M, Sakamoto K, Mondal D, Fujii J, Vobornik I, Jung S, Cacho C, Kim T K, Koch R J, Jozwiak C, Bostwick A, Denlinger J D, Rotenberg E, Buck J, Hoesch M, Diekmann F, Rohlf S, Kalläne M, Rossnagel K, Otrokov M M, Chulkov E V, Ruck M, Isaeva A, Reinert F 2019 *Phys. Rev. B* **100** 121104
- [133] Chen Y J, Xu L X, Li J H, Li Y W, Wang H Y, Zhang C F, Li H, Wu Y, Liang A J, Chen C, Jung S W, Cacho C, Mao Y H, Liu S, Wang M X, Guo Y F, Xu Y, Liu Z K, Yang L X, Chen Y L 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041040
- [134] Hao Y J, Liu P, Feng Y, Ma X M, Schwier E F, Arita M, Kumar S, Hu C, Lu R e, Zeng M, Wang Y, Hao Z, Sun H Y, Zhang K, Mei J, Ni N, Wu L, Shimada K, Chen C, Liu Q, Liu C 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041038
- [135] Li H, Gao S Y, Duan S F, Xu Y F, Zhu K J, Tian S J, Gao J C, Fan W H, Rao Z C, Huang J R, Li J J, Yan D Y, Liu Z T, Liu W L, Huang Y B, Li Y L, Liu Y, Zhang G B, Zhang P, Kondo T, Shin S, Lei H C, Shi Y G, Zhang W T, Weng H M, Qian T, Ding H 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041039
- [136] Swatek P, Wu Y, Wang L L, Lee K, Schrunck B, Yan J, Kaminski A 2020 *Phys. Rev. B* **101** 161109
- [137] Nevola D, Li H X, Yan J Q, Moore R G, Lee H N, Miao H, Johnson P D 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 117205
- [138] Yang Z, Zhang H 2022 *New J. Phys.* **24** 073034
- [139] Yasuda K, Mogi M, Yoshimi R, Tsukazaki A, Takahashi K S, Kawasaki M, Kagawa F, Tokura Y 2017 *Science* **358** 1311
- [140] Garrity K F, Chowdhury S, Tavazza F M 2021 *Phys. Rev. Mater.* **5** 024207
- [141] Sass P M, Kim J, Vanderbilt D, Yan J, Wu W 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 037201
- [142] Sass P M, Ge W, Yan J, Obeysekera D, Yang J J, Wu W 2020 *Nano Lett.* **20** 2609
- [143] Shikin A M, Estyunin D A, Zaitsev N L, Glazkova D, Klimovskikh I I, Filnov S O, Rybkin A G, Schwier E F, Kumar S, Kimura A, Mamedov N, Aliev Z, Babanly M B, Kokh K, Tereshchenko O E, Otrokov M M, Chulkov E V, Zvezdin K A, Zvezdin A K 2021 *Phys. Rev. B* **104** 115168
- [144] Lai Y, Ke L, Yan J, McDonald R D, McQueeney R J 2021 *Phys. Rev. B* **103** 184429
- [145] Garnica M, Otrokov M M, Aguilar P C, Klimovskikh I I, Estyunin D, Aliev Z S, Amiraslanov I R, Abdullayev N A, Zverev V N, Babanly M B, Mamedov N T, Shikin A M, Arnau A, de Parga A L V, Chulkov E V, Miranda R 2022 *npj Quantum Mater.* **7** 7
- [146] Ma X M, Chen Z, Schwier E F, Zhang Y, Hao Y J, Kumar S, Lu R, Shao J, Jin Y, Zeng M, Liu X R, Hao Z, Zhang K, Mansuer W, Song C, Wang Y, Zhao B, Liu C, Deng K, Mei J, Shimada K, Zhao Y, Zhou X, Shen B, Huang W, Liu C, Xu H, Chen C 2020 *Phys. Rev. B* **102** 245136
- [147] Wang D H, Wang H Q, Xing D Y, Zhang H J 2022 *arXiv: 2205.08204v1 [cond-mat. mes-hall]*
- [148] Tan H, Yan B 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 126702
- [149] Bai Y, Li Y, Luan J, Liu R, Song W, Chen Y, Ji P F, Zhang Q, Meng F, Tong B, Li L, Jiang Y, Gao Z, Gu L, Zhang J, Wang Y, Xue Q K, He K, Feng Y, Feng X 2022 *arXiv: 2206.03773v2 [cond-mat. mes-hall]*
- [150] Liu S, Yu J, Zhang E, Li Z, Sun Q, Zhang Y, Li L, Zhao M, Leng P, Cao X, Zou J, Kou X, Zang J, Xiu F 2021 *arXiv: 2110.00540v1 [cond-mat. mtrl-sci]*
- [151] Zhao Y F, Zhou L J, Wang F, Wang G, Song T, Ovchinnikov D, Yi H, Mei R, Wang K, Chan M H W, Liu C X, Xu X, Chang C Z 2021 *Nano Lett.* **21** 7691
- [152] Xu Y, Elcoro L, Song Z D, Wieder B J, Vergniory M G, Regnault N, Chen Y, Felser C, Bernevig B A 2020 *Nature* **586** 702
- [153] Su Y, Hu J, Cai X, Shi W, Xia Y, Xu Y, Xu X, Chen Y, Li G 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 261
- [154] Choudhary K, Garrity K F, Ghimire N J, Anand N, Tavazza F 2021 *Phys. Rev. B* **103** 155131
- [155] Watanabe H, Po H C, Vishwanath A 2018 *Sci. Adv.* **4** eaat8685
- [156] Elcoro L, Wieder B J, Song Z, Xu Y, Bradlyn B, Bernevig B A 2021 *Nat. Commun.* **12** 5965

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Research progress of intrinsic magnetic topological insulator MnBi_2Te_4 *

Xie Xiang-Nan^{1) #} Li Cheng^{1) #} Zeng Jun-Wei²⁾ Zhou Shen¹⁾ Jiang Tian^{1) †}

1) (*Institute for Quantum Information, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*State Key Laboratory of High Performance Computing, Institute for Quantum Information, College of Computer, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 30 April 2023; revised manuscript received 1 June 2023)

Abstract

The interaction between non-trivial topological states and the magnetic order of intrinsic magnetic topological insulators gives rise to various exotic physical properties, including the quantum anomalous Hall effect and axion insulator. These materials possess great potential applications in low-power topological spintronic devices and topological quantum computation. Since the first intrinsic magnetic topological insulator, MnBi_2Te_4 , was discovered in 2019, this material system has received significant attention from researchers and sparked a research boom. This paper begins with discussing the fundamental properties of MnBi_2Te_4 and then turns to important research findings related to this intrinsic magnetic topological insulator. Specifically, it focuses on the quantum anomalous Hall effect, axion insulating state, and Majorana zero energy mode exhibited by the MnBi_2Te_4 series. Furthermore, this paper highlights other research directions and current challenges associated with this material system. Finally, this paper provides a summary and outlook for future research on MnBi_2Te_4 , aiming to offer valuable references for researchers in related fields.

Keywords: intrinsic magnetic topological insulators, MnBi_2Te_4 , topological quantum states

PACS: 71.20.-b, 73.20.At, 73.43.Nq, 75.45.+j

DOI: [10.7498/aps.72.20230704](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230704)

* Project supported by the Independent and Open Subject Fund from State Key Laboratory of High Performance Computing, China (Grant No. 202201-04).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: tjiang@nudt.edu.cn



本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 研究进展

谢向男 李成 曾俊伟 周坤 江天

Research progress of intrinsic magnetic topological insulator MnBi_2Te_4

Xie Xiang-Nan Li Cheng Zeng Jun-Wei Zhou Shen Jiang Tian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 187101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230704

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230704>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

本征磁性拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 电子结构的压力应变调控

Pressure strain control of electronic structure of intrinsic magnetic topological insulator MnBi_2Te_4

物理学报. 2021, 70(4): 047101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201237>

强三维拓扑绝缘体与磁性拓扑绝缘体的角分辨光电子能谱学研究进展

Angle resolved photoemission spectroscopy studies on three dimensional strong topological insulators and magnetic topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191450>

铁基超导中拓扑量子态研究进展

Research progress of topological quantum states in iron-based superconductor

物理学报. 2018, 67(20): 207101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181455>

二维有机拓扑绝缘体的研究进展

Research progress of two-dimensional organic topological insulators

物理学报. 2018, 67(23): 238101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181711>

高阶拓扑绝缘体和高阶拓扑超导体简介

Higher-order topological insulators and superconductors

物理学报. 2019, 68(22): 226101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191101>

二维拓扑绝缘体的扫描隧道显微镜研究

Scanning tunneling microscopy study on two-dimensional topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 226801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191631>

国防科技大学建校 70 周年专题

局域热平衡 Sn 等离子体极紫外辐射 不透明度和发射谱的理论研究*

高城^{1)†} 刘彦鹏²⁾ 严冠鹏¹⁾ 闫杰¹⁾ 陈小棋¹⁾ 侯永¹⁾
靳奉涛¹⁾ 吴建华^{1)‡} 曾交龙¹⁾³⁾ 袁建民¹⁾⁴⁾

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (西北核技术研究所, 激光与物质相互作用国家重点实验室, 西安 710000)

3) (浙江工业大学理学院, 杭州 310023)

4) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193)

(2023 年 3 月 26 日收到; 2023 年 5 月 4 日收到修改稿)

锡 (Sn) 是 13.5 nm 光刻光源的材料, Sn 等离子体辐射性质对光源设计意义重大. 基于细致能级模型, 在局域热平衡假设条件下计算得到了 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱. 使用多组态 Dirac-Fock 方法获得了 Sn^{6+} - Sn^{14+} 离子的能级和辐射跃迁振子强度等基本原子参数. 针对波长在 13.5 nm 附近的 4d-4f 和 4p-4d 跃迁系, 重点考虑了 $4d^m-4f^m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) 和 $4p^n-4d^n$ ($n = 1, 2, 3$) 的电子关联效应. 在大规模组态相互作用计算中, 每种电荷态离子的精细能级数目约为 20 万. 对较强的吸收谱线 (振子强度大于 0.01), 其长度和速度表示的相对差异为 20%—30%. 基于精密原子参数, 计算了 Sn 等离子体在 30 eV, 0.01 g/cm³ 条件下的透射谱, 与实验结果基本符合. 系统计算了温度 16—30 eV, 密度 0.0001—0.1 g/cm³ 条件下的 Sn 等离子体辐射不透明度和发射光谱, 分析了极紫外 (extreme ultraviolet, EUV) 光谱随温度和密度的变化规律. 研究表明温度一定时, 密度增大会使得 13.5 nm 附近的辐射不透明度和发射谱包络增宽. 而密度一定时, 随着温度的增加, 辐射不透明度和发射谱在 13.5 nm 附近存在明显的窄化效应. 本文工作有助于 EUV 光刻光源的设计和研究.

关键词: 极紫外光源, 细致能级模型, 组态相互作用

PACS: 31.15.am, 32.30.-r, 31.15.A-

DOI: 10.7498/aps.72.20230455

1 引言

摩尔定律要求集成电路上的晶体管数目越来越多, 尺寸越来越小^[1,2]. 光刻技术是半导体行业的核心技术之一, 其刻蚀集成电路节点的最小尺寸可以由瑞利公式确定^[3]: $R = k\lambda/NA$, 其中 k 表示工艺因子常数, NA 表示光学孔径, λ 为曝光光源波

长. 为了提高分辨率, 减小工艺因子常数和增大光学孔径数值已经几乎被研究者们做到了极限, 目前聚焦的方向是减小光源波长^[4]. 光刻光源波长从光学波段, 进入深紫外波段, 现在商用光刻光源的最短波长为 13.5 nm, 位于极紫外 (extreme ultraviolet, EUV) 波段^[5].

目前商用的 EUV 光刻光源采用高功率 CO₂ 激光作用在锡 (Sn) 的液滴靶上, 使之处于温度 20—

* 国家自然科学基金 (批准号: 12074430, 11974423) 和激光与物质相互作用国家重点实验室开放基础研究 (批准号: SKLIM2008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gaocheng@nudt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wujh@nudt.edu.cn

40 eV, 电子密度 10^{18} – 10^{19} cm^{-3} 的等离子体状态^[5]. 在此温度和密度条件下, Sn 等离子体中的主要离子类型是高离化态的 Sn^{8+} - Sn^{14+} 离子, 这些离子的 4d-4f 和 4p-4d 等跃迁线集中在 13.5 nm 附近^[6,7]. 工艺上要求光源中心波长 13.5 nm, 带宽 2%^[4]. 因此, 研究在此波长范围内的 Sn 等离子体辐射性质对 EUV 光源的数值模拟和工业设计非常重要. 实验上, 基于激光等离子体相互作用和电子束离子阱等平台, 人们获得了不同电荷态 Sn 离子的谱线, 并证认了部分谱线, 但是与实用需求还有很大距离^[8–15]. 同时, 基于不同的理论方法, 人们计算获得了 EUV 到可见光波段的不同电荷态 Sn 离子的辐射原子参数^[13–18]. 如基于 FSCC (Fock space coupled culster) 方法^[19], Windberger 等^[13] 计算了 Sn^{11+} - Sn^{14+} 的价电子跃迁谱线, 波长范围覆盖 260–780 nm. 基于 CI+MBPT (configuration interaction many body perturbation theory) 方法^[20]; Torretti 等^[14] 计算了 Sn^{7+} - Sn^{10+} 在光学和 EUV 波段的谱线.

除了对 Sn 高电荷态离子能级和辐射跃迁参数的测量, 人们也开展了 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱的实验研究^[21–26]. 例如, Fujioka 等^[22] 测量了温度约为 30 eV, 密度约为 0.01 g/cm^3 的 Sn 等离子体透射谱. 陈鸿等^[24] 使用激光辐照 Sn 的液滴靶, 对产生的极紫外辐射的谱线结构和时空分布特性进行了研究. Su 等^[25] 测量了激光产生的 Sn 等离子体的 EUV 辐射特性的演化, 并研究了自吸收的规律. 理论方面, 为了获得 Sn 等离子体准确的 EUV 辐射性质, 基于细致原子模型的计算是必要的. 但是对于 Sn 这种含有多个电子的复杂原子体系, 其辐射不透明度的精密计算是困难的. 因为 Sn^{10+} 及其邻近电荷态离子具有未填满的 4d 轨道, 轨道塌缩效应主要导致两个方面的计算挑战: 一是组态相互作用很强, 计算中需要考虑复杂的电子关联效应, 以获得精确的原子参数; 二是能级简并效应显著, 多电子激发组态仍然是束缚态, 对辐射不透明度的贡献不可忽略, 因此增加了辐射不透明度精细计算的困难. 近年来, 基于细致物理模型对 Sn 等离子体辐射不透明度的理论研究不多^[27–30]. 且这些研究在计算原子参数时, 最多考虑到双电子激发组态, 一般至多考虑了 4d²-4f² 和 4p²-4d² 的电子关联效应. 最近, 基于 COWAN 程序^[31], Torretti 等^[29] 和 Sheil 等^[30] 开展了大规模组态相互作用计

算, 将组态规模扩展到三电子激发态, 电子关联效应至多考虑到 4d³-4f³ 和 4p³-d³, 发现多电子激发组态对辐射不透明度的贡献不可忽略.

上述的实验和理论工作加深了人们对 Sn 等离子体 EUV 辐射性质的理解, 展示了包含电子关联效应的大规模组态相互作用计算对获得精密原子参数和等离子体辐射性质的重要性. 但是电子关联效应究竟是怎样影响原子参数的, 还需要更多精密计算的验证. 同时, 对 Sn 等离子体宏观辐射性质, 基于细致物理模型的理论研究还很少, 更缺乏对 EUV 辐射性质的系统性研究, 对获得满足工艺要求的 EUV 光源的最优等离子体条件也缺乏研究. 因此, 采取细致物理模型, 系统研究 Sn 等离子体在宽广温度和密度条件下的辐射特性, 为 EUV 光源设计提供理论支持是重要的.

本文基于细致能级模型 (detailed-level-accounting, DLA)^[27,28], 在局域热平衡近似下, 研究 Sn 等离子体在温度 16–30 eV, 密度 0.0001–0.1 g/cm^3 条件下的辐射不透明度和发射性质. 首先基于原子结构计算程序 GRASP2K^[32], 针对典型的高电荷态 Sn 离子 (Sn^{6+} - Sn^{14+}), 开展大规模的组态相互作用计算. 对跃迁波长在 13.5 nm 附近的 4d-4f 和 4p-4d 跃迁系, 电子关联效应包括了 4d^{*m*}-4f^{*m*} (*m* = 1, 2, 3, 4) 和 4p^{*n*}-4d^{*n*} (*n* = 1, 2, 3), 以获得精确的原子参数. 然后分析了单、双和三电子等激发组态对辐射不透明度的贡献, 展示了多电子激发组态对总辐射不透明度的重要性. 最后讨论了在宽广的温度和密度条件下, Sn 等离子体 EUV 辐射的光谱特点和变化规律.

2 DLA 模型

使用 DLA 模型计算辐射不透明度的方法可参见文献^[33–35]. 对温度为 *T*, 密度为 ρ 的等离子体, 在光子能量 $h\nu$ 处, 其辐射不透明度 κ' 为

$$\rho\kappa'(h\nu) = (\mu_{\text{bb}}(h\nu) + \mu_{\text{bf}}(h\nu) + \mu_{\text{ff}}(h\nu)) \times (1 - e^{-h\nu/k_{\text{B}}T}) + \mu_{\text{scatt}}(h\nu), \quad (1)$$

其中 μ_{bb} , μ_{bf} 和 μ_{ff} 分别是束缚-束缚、束缚-自由和自由-自由吸收系数, μ_{scatt} 为散射系数, h 为 Planck 常数, ν 为光子频率, k_{B} 为 Boltzmann 常数. 束缚-束缚吸收系数可以写为

$$\mu_{\text{bb}}(h\nu) = \sum_i \left(\sum_{l'} N_{il} \sigma'_{ill}(h\nu) \right), \quad (2)$$

其中, N_{il} 是电离度为 i 的离子的第 l 个能级上的粒子占据数. σ'_{ill} 是 i 离子的束缚-束缚跃迁 $l-l'$ 的吸收截面, 它与吸收振子强度 f'_{ill} 的关系是

$$\sigma'_{ill}(h\nu) = \frac{\pi h e^2}{m_e c} f'_{ill} S(h\nu), \quad (3)$$

其中 m_e 为电子质量, e 为电子电荷, c 为光速, $S(h\nu)$ 是谱线的线型函数. 本文采用 Voigt 线型函数^[33],

$$S(h\nu) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \Gamma_d} \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2}}{a^2 + (y-x)^2} dx, \quad (4)$$

其中, $a = \sqrt{\ln 2} \Gamma_l / \Gamma_d$, $y = \sqrt{\ln 2} (h\nu - h\nu_0) / \Gamma_d$, ν_0 表示跃迁谱线的中心频率. $\Gamma_d = \sqrt{\frac{2k_B T \ln 2}{M c^2}}$ 表示 Gauss 线型函数的半宽度, 来自离子热运动的 Doppler 效应 (M 表示原子质量). Γ_l 表示 Lorentz 线型函数的半宽度, 主要由电子碰撞展宽和自然线宽贡献, 其中电子碰撞展宽由经验公式得到

$$\Gamma_e = N_e \frac{4\pi^2 \hbar^3}{3\sqrt{3} m_e^2} \sqrt{\frac{2m_e}{\pi k_B T}} (0.9 - 1.1/z) \times \sum_{j=i,f} \left(\frac{3n_j}{2z} \right)^2 (n_j^2 - l_j^2 - l_j - 1), \quad (5)$$

其中 N_e 和 T 分别为等离子体中的自由电子密度和温度; z 表示离子电荷数; i, f 分别表示跃迁的初态和末态; n 和 l 表示对应的主量子数和轨道量子数.

透射率与辐射不透明度的关系是

$$F(h\nu) = e^{-\kappa'(h\nu)\rho L}, \quad (6)$$

其中 L 为等离子体长度. 将此透射率与高斯型函数做卷积, 宽度对应光谱仪器的分辨本领, 就可以获得与实验直接对比的透射率.

对局域热动平衡的稀薄等离子体, 粒子占据数可由 Saha-Boltzmann 方程得到

$$\frac{N_{i+1} N_e}{N_i} = 2 \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{Z_{i+1}}{Z_i} e^{-\frac{\phi_i - \Delta\phi_i}{k_B T}}, \quad (7)$$

其中, N_i 表示电离度为 i 的离子的丰度, N_e 为自由电子密度, Z_i 是 i 离子的配分函数, ϕ_i 是 i 离子的电离能, $\Delta\phi_i$ 是 i 离子的电离能下降值, 本文采用 SP 模型得到^[36].

热平衡条件下, 发射系数 $j(\nu)$ 与吸收系数 $\mu(\nu)$ 满足 Kirchhoff 定律^[37]:

$$\frac{j(\nu)}{\mu(\nu)} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (8)$$

在得到总的吸收系数后, 发射系数就容易得到了.

3 原子模型

本文主要研究 Sn 等离子体 EUV 辐射特性, 此波段的辐射不透明度和发射谱主要由束缚-束缚跃迁贡献. 计算用到的主要原子参数有能级和辐射跃迁振子强度, 采用原子结构计算程序 GRASP2K 得到^[32]. GRASP2K 基于多组态 Dirac-Fock (multi-configuration Dirac-Fock, MCDF) 方法, 原子态波函数被展开为具有相同宇称和角动量的组态波函数的线性组合:

$$|\Phi_\alpha(J\pi)\rangle = \sum_i a_i(\alpha) |\phi(\gamma_i J\pi)\rangle, \quad (9)$$

其中, $|\Phi_\alpha(J\pi)\rangle$ 表示总角动量为 J 、宇称为 π 的原子态 α 的波函数, $|\phi(\gamma_i J\pi)\rangle$ 表示具有相同总角动量和宇称的组态波函数, γ_i 代表轨道占据数等表明该组态的信息, $a_i(\alpha)$ 表示在这组组态波函数为基下的展开系数. 组态波函数 $|\phi(\gamma_i J\pi)\rangle$ 表达为单电子轨道波函数的 Slater 行列式, 而单电子轨道波函数由求解 Dirac-Fock 方程得到^[32].

在获得原子波函数后, 对电偶极跃迁 $\Phi_\alpha \rightarrow \Phi_{\alpha'}$, 振子强度的长度表示 f_l 和速度表示 f_v 可以分别写为

$$f_l = \frac{\Delta E}{g_\alpha} |\langle \Phi_{\alpha'} | \sum_i r_i | \Phi_\alpha \rangle|^2 \quad (10)$$

和

$$f_v = \frac{4}{\Delta E g_\alpha} |\langle \Phi_{\alpha'} | \sum_i \nabla_i | \Phi_\alpha \rangle|^2, \quad (11)$$

其中, g_α 为简并度, ΔE 为跃迁能量, r_i 为 i 电子的电偶极矩算符.

图 1 给出了不同电荷态 Sn 离子的 4s, 4p, 4d 和 4f 轨道波函数. 从图 1 可见 4d 轨道的塌缩性质, 且随着电荷态的增加, 原子核对 4f 轨道的吸引越来越强. 13.5 nm 附近辐射的主要贡献是 Sn^{10+} 及其近邻离子, 这些高电荷态离子的 4f 轨道塌缩效应非常明显. 4d 和 4f 的塌缩效应使得轨道能量简并, 组态相互作用强, 能级结构复杂. 作为示例, Sn^{10+} 离子能级结构示意图见图 2. 可以看出, 从基组态 $[\text{Ni}]4s^2 4p^6 4d^4$ (为描述简便, 此处 $[\text{Ni}]$ 表示类 Ni 的电子结构), 激发一个电子形成的 $4s^2 4p^6 4d^3 4f$, $4s^2 4p^6 4d^3 5s$, $4s^2 4p^5 4d^5$ 和 $4s 4p^6 4d^5$ 的组态能

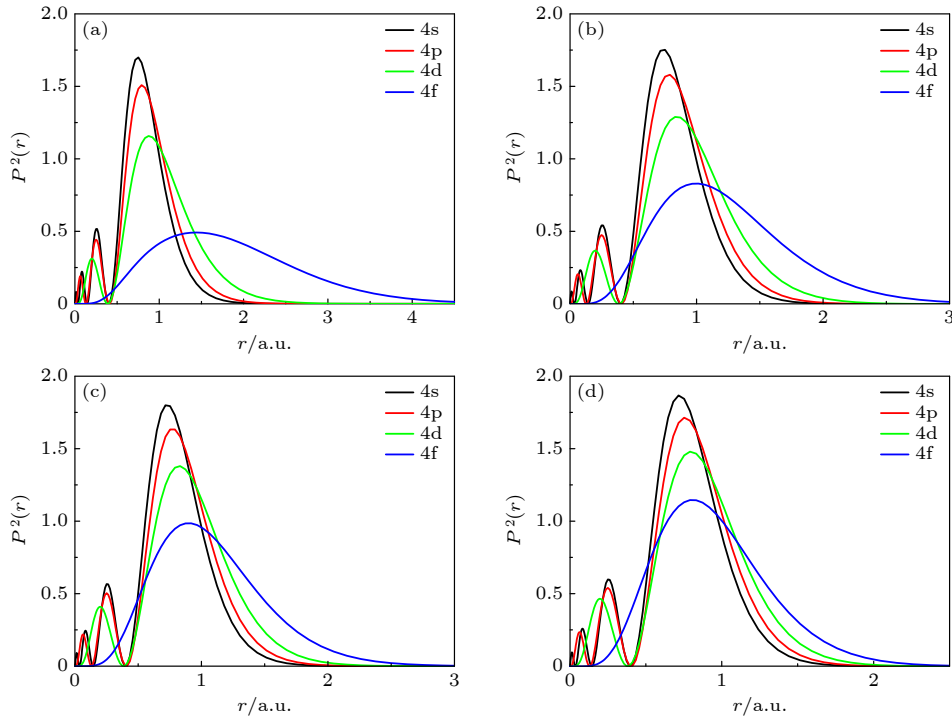


图 1 (a) Sn^{5+} , (b) Sn^{8+} , (c) Sn^{10+} 和 (d) Sn^{13+} 离子的 4s, 4p, 4d 和 4f 轨道波函数

Fig. 1. Radial wavefunctions of 4s, 4p, 4d and 4f belonging to (a) Sn^{5+} , (b) Sn^{8+} , (c) Sn^{10+} and (d) Sn^{13+} .

量较低. 激发两个电子形成的 $4s^2 4p^6 4d^2 4f^2$ 能量范围扩展很宽, 部分精细能级的能量处于连续态之上, 而 $4s^2 4p^4 4d^6$ 的精细能级完全处于电离阈之下, 这些低能束缚态对辐射特性的贡献很大, 原子参数的精度直接影响辐射不透明度和发射谱的精度. 此外, 由这些能量较低的组态激发形成的里德伯态如 $4s^2 4p^6 4d^3 n l$ ($n > 6$) 简并度大, 能级数目很多, 给精确原子参数计算带来挑战.

13.5 nm 附近的强辐射谱线主要来自 4d-4f 和 4p-4d 跃迁系, 电子关联效应对原子参数精度影响很大 [38–40]. 在本文的大规模 CI 计算中, 包括了 $4d^m 4f^m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) 和 $4p^n 4d^n$ ($n = 1, 2, 3$) 的电子关联效应, 这是目前为止考虑电子关联效应最为完整的计算. 组态选取原则是: 从 4s, 4p 和 4d 轨道激发一个、两个和三个电子形成的组态, 以及从 4d 轨道激发四个电子的组态. 以 Sn^{10+} 为例, CI 计算包含的组态如下:

基态和单激发态: $4s^2 4p^6 4d^4$, $4s^2 4p^6 4d^3 4f$, $4s^2 4p^6 4d^3 5l$, $4s^2 4p^5 4d^5$, $4s^2 4p^5 4d^4 4f$, $4s^2 4p^5 4d^4 5l$, $4s 4p^6 4d^5$, $4s 4p^6 4d^4 4f$, $4s 4p^6 4d^4 5l$, 其中 $l = s, p, d, f, g$;

双激发态: $4s^2 4p^6 4d^2 4f^2$, $4s^2 4p^6 4d^2 4f 5l$, $4s^2 4p^6 4d^2 5s 5l$, $4s^2 4p^6 4d^2 5p 5l$, $4s^2 4p^4 4d^6$, $4s^2 4p^4 4d^5 4f$, $4s^2 4p^4 4d^5 5l$, $4s^2 4p^5 4d^3 4f^2$, $4s^2 4p^5 4d^3 4f 5l$, $4s 4p^5 4d^6$, $4s 4p^5 4d^5 4f$, $4s 4p^5 4d^5 5l$, 其中 $l = s, p, d, f, g$;

三激发态: $4s^2 4p^6 4d 4f^3$, $4s^2 4p^6 4d 4f^2 5l$, $4s^2 4p^3 4d^6 4f$, $4s^2 4p^3 4d^6 5l$, $4s^2 4p^5 4d^2 4f^3$, $4s^2 4p^5 4d^2 4f^2 5l$, 其中 $l = s, p, d, f$;

四激发态: $4s^2 4p^6 4f^4$.

由这些组态分裂而成的精细结构能级数目约为 20 万, 其中奇宇称和偶宇称原子态的数目大致

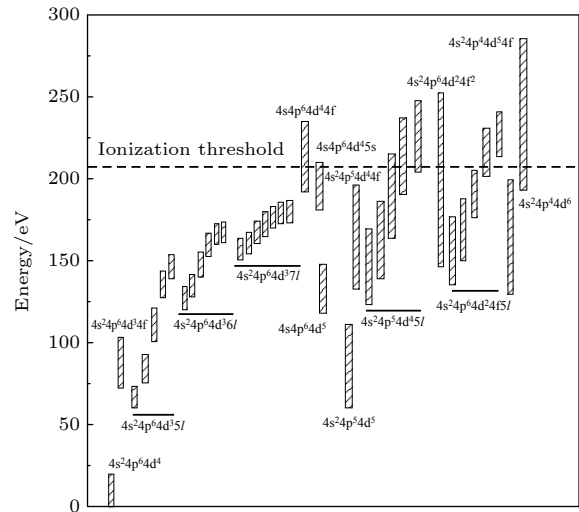


图 2 Sn^{10+} 束缚组态, 其中长条表示相应组态分裂而成的精细能级的能量范围, 虚线表示电离阈值

Fig. 2. Bound configurations of Sn^{10+} . Each bar represents the energy range of fine-structure levels belonging to the corresponding configuration. The dashed line represents ionization threshold.

相当. 与本文相比, Torretti 等^[29] 的 CI 计算包括了单、双和三电子激发组态, 虽然精细能级数目达到了 30 万, 但是在计算中引入了标度参数, 使用半经验方法调整了径向积分的数值. 除了在上述 CI 计算中包含的组态外, 一些能量较高的里德伯态, 如 $4s^24p^64d^3nl$ ($n > 5$) 和 $4s^24p^54d^4nl$ ($n > 5$) 对辐射不透明度亦有贡献. 在典型的实验条件下 (30 eV, 0.01 g/cm³), 相比于基态和低激发态, 这

些里德伯态对辐射不透明度的贡献相对较小. 因此, 这些里德伯态没有包含在大规模组态相互作用的计算中, 相关的辐射跃迁参数采用单组态的方法获得, 即在计算中只包括偶极允许跃迁的初组态和末组态, 单个组态分裂形成的精细能级之间的组态相互作用考虑在内.

作为示例, 表 1 列出了属于 Sn¹⁰⁺ 基组态 $4s^24p^64d^4$ 的 34 个精细能级, 能级符号取为 (9) 式中展开

表 1 Sn¹⁰⁺ 基组态 $4s^24p^64d^4$ 的精细能级 (单位: eV), 能级符号中省略了满壳层的 4s 和 4p 轨道.

Table 1. Fine-structure levels belonging to the ground configuration $4s^24p^64d^4$ of Sn¹⁰⁺ (Unit: eV), where the fully occupied 4s and 4p orbitals are omitted.

	能级	J	本文(MCDF)	实验 ^[4]	CI+MBPT ^[14]
1	$4d_{3/2}^4$	0	0.00	0.00	0.00
2	$(4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}$	1	0.36	0.38	0.39
3	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	2	0.79	0.82	0.83
4	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	3	1.22	1.25	1.27
5	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	4	1.64	1.65	1.68
6	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	0	3.48	3.32	3.28
7	$(4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}$	4	3.98	3.67	3.60
8	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	3	4.58	4.33	4.29
9	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	5	4.61	4.36	4.30
10	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	1	4.68	4.39	4.39
11	$(4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}$	2	4.80	4.55	4.54
12	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	6	5.09	4.74	4.67
13	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	4	5.29	5.02	4.99
14	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	2	5.61	5.38	5.40
15	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	4	5.72	5.43	5.40
16	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	3	5.87	5.60	5.60
17	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_2$	3	6.27	5.99	5.99
18	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_4$	5	6.36	6.06	6.03
19	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	2	6.69	6.42	6.43
20	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	1	6.81	6.55	6.56
21	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{9/2}$	6	7.15	6.68	6.60
22	$4d_{5/2}^4$	4	7.72	7.40	7.38
23	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	0	7.77	7.55	7.57
24	$4d_{5/2}^4$	2	8.41	8.01	8.00
25	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}$	3	8.89	8.43	8.42
26	$(4d_{3/2}^2)_0(4d_{5/2}^2)_2$	2	9.86	—	9.40
27	$(4d_{3/2}^2)_0(4d_{5/2}^2)_4$	4	10.27	9.77	9.78
28	$(4d_{3/2}^2)_2(4d_{5/2}^2)_0$	2	10.48	9.97	9.98
29	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	3	10.66	10.15	10.16
30	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	1	10.77	—	10.30
31	$4d_{5/2}^4$	0	11.23	—	10.77
32	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	4	11.79	—	11.11
33	$4d_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{5/2}$	2	14.70	—	13.95
34	$(4d_{3/2}^2)_0(4d_{5/2}^2)_0$	0	18.87	—	17.98

系数最大的电子组态. 作为比较, 基于 EBIT 实验数据和其他理论结果一并列出^[14]. 可以看出, 本文计算结果与实验符合较好. 除了第 7 条能级本文结果比实验值大了约 8.5% 外, 其余能级相对实验结果的误差均不超过 8%. 在复杂元素辐射不透明度的计算中, 上述能级的误差对粒子数分布和辐射跃迁能量的影响是很小的. 注意到 CI+MBPT 方法与实验值更为接近^[14], 这主要是因为该计算是仅针对基组态 $4s^2 4p^6 4d^4$ 而进行的优化计算.

辐射跃迁振子强度是计算辐射不透明度和发射谱的基本参数, 文献中可用于比较的数据很少. 理论上, 用长度和速度两种规范得到的振子强度是相等的, 而实际计算中组态展开只能取有限项, 因此两者是有差异的, 通常用长度和速度表示的差异来检验计算精度. 图 3 以 Sn^{10+} 为例, 分析辐射跃迁振子强度的计算结果. 图 3(a) 给出了振子强度大于 0.01 的长度和速度表示的比较. 对小于 0.1 的振子强度, 两种表示虽然有部分振子强度差异较大, 但是整体上比较接近. 对大于 0.1 的振子强度, 两种表示符合很好. 整体上, 两种表示符合得较好, 表明了本文大规模组态相互作用计算的可信度. 图 3(b) 给出了振子强度大于 0.01, 且跃迁波长在 11—20 nm 范围内的振子强度两种表示方法的比

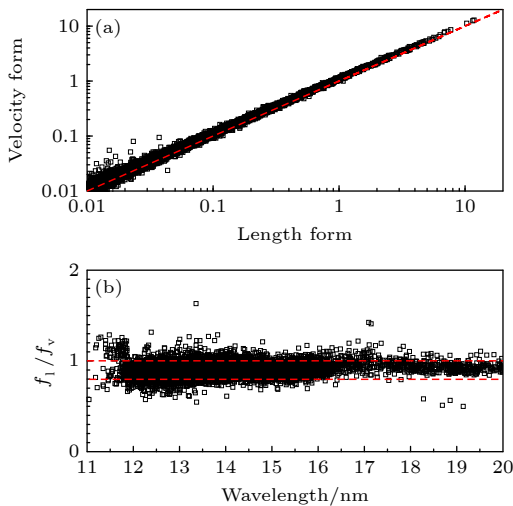


图 3 Sn^{10+} 振子强度 (a) 振子强度的长度和速度表示, 红色虚线斜率为 1; (b) 波长 11—20 nm 的振子强度长度和速度表示的比值, 上下两条红色虚线分别表示比值为 1 和 0.8

Fig. 3. Oscillator strengths of Sn^{10+} : (a) Length and velocity forms of oscillator strengths; the slope of the red dashed line is 1; (b) ratio of length form to velocity form. The upper and lower red dashed lines represent 1 and 0.8, respectively.

值, 这些跃迁线是 13.5 nm 附近辐射不透明度和发射谱的主要贡献. 上下两条红虚线分别表示比值为 1 和 0.8. 可以看出, 两种表示的相对误差基本在 20%—30% 以内, 这表明了本文计算的基本原子参数是基本可靠的.

4 结果和讨论

获得能级和振子强度等原子参数后, 使用 DLA 模型计算可得到典型条件下 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度, 如图 4 所示. 等离子体温度为 30 eV, 密度为 0.01 g/cm^3 , 相应的电子密度约 $5.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 主要的离子类型是 Sn^{9+} , Sn^{10+} , Sn^{11+} 和 Sn^{12+} , 丰度分别为 5.4%, 26.0%, 41.6% 和 22.4%. 在图示的波长范围内 (11.5—15 nm), 束缚-束缚跃迁是辐射不透明度的主要贡献, 束缚-自由和自由-自由跃迁的贡献可以忽略不计, 这些强吸收线主要来自 4d-4f 和 4p-4d 跃迁. Sn^{9+} - Sn^{12+} 都显示了非常复杂的谱线结构. Sn^{9+} 的波长范围最宽 (12—14 nm), 谱线结构非常丰富, 形成了准连续的吸收包络. 在吸收包络上叠加了复杂的线谱, 位于约 13.8 nm 附近的最强吸收峰主要来自 4d-4f 的跃迁. 随着电荷态的增大, 谱线覆盖的波长范围越来越窄. 对于 Sn^{12+} 离子, 谱线集中在 12.6—13.4 nm. 相比于 Sn^{9+} , 高电荷态离子的吸收包络更窄, 而线谱特点更为明显. 图 4(e) 给出了总的辐射不透明度 (黑线), 可见吸收结构集中在 13 nm 附近, 形成了一个大的吸收包络, 而包络上叠加了丰富的线状谱.

高电荷态 Sn 离子的轨道塌缩效应使得多电子激发组态依然是束缚态 (如图 2 所示), 它们对总辐射不透明度的贡献是值得研究的, 这对理解吸收结构的特征是有意义的. 注意到在本文的大规模组态相互作用计算中, 能级混合非常严重, 很难分辨某一精细能级是来自哪个组态. 为此, 我们另外设置了两组不同组态规模的计算: 一是每种电荷态离子只包含基组态和单电子激发组态 (记为 A); 二是在 A 的基础上加上双电子激发组态 (记为 B). 分别基于 A 和 B 两种组态规模产生的辐射跃迁参数, 计算得到了辐射不透明度, 分别如图 4(e) 的红线和绿线所示. 因为计算规模不同, 所以振子强度大小和分布亦有不同. 为了便于和最大计算规模的结果 (黑线) 相比, A 和 B 的计算结果向长波范围移动了 0.1 nm. 容易看出, 当只包括基组态和单电子

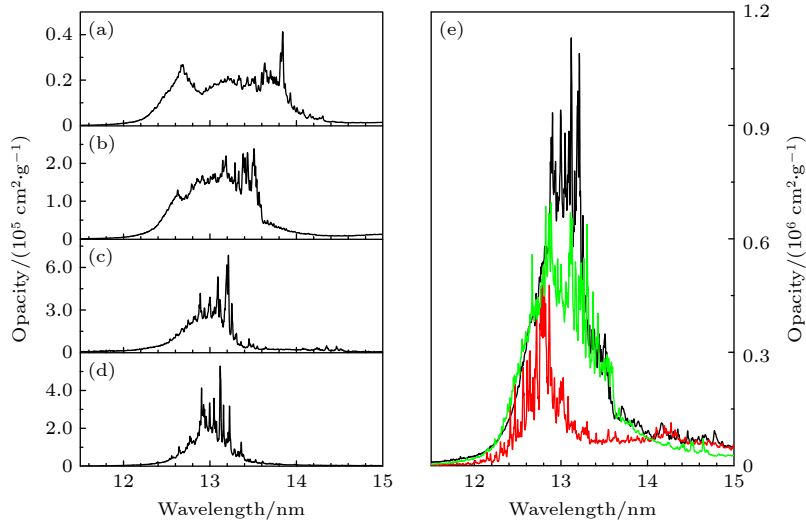


图 4 温度 30 eV, 密度 0.01 g/cm³ 条件下 Sn 等离子体中不同电荷态对辐射不透明度的贡献 (a) Sn⁹⁺; (b) Sn¹⁰⁺; (c) Sn¹¹⁺; (d) Sn¹²⁺; (e) 总不透明度, 红线为只包含基组态和单电子激发组态的结果, 绿线为包括了基组态、单电子和双电子激发组态的结果
Fig. 4. Radiative opacity of Sn at a temperature of 30 eV and a density of 0.01 g/cm³ contributed by different ionization stages: (a) Sn⁹⁺; (b) Sn¹⁰⁺; (c) Sn¹¹⁺; (d) Sn¹²⁺; (e) total opacity. The red line represents the result including only ground and singly excited configurations. The green line represents the result including ground, singly and doubly excited configurations.

激发组态时 (红线), 最强的吸收位于约 12.8 nm 处, 主要来自各电荷态离子基组态 4d-4f 和 4p-4d 的吸收. 在增加了双电子激发组态后 (绿线), 12.8 nm 处的强吸收峰增加了约 50%. 同时, 13—13.5 nm 范围的吸收明显增强, 这些吸收线来自单电子激发组态的 4d-4f 和 4p-4d 的跃迁. 在热平衡条件下, 单电子激发态能量比基组态高, 因此其占据数比基态小. 但是它们的电子结构复杂, 电子耦合出的精细能级数目多, 因此所占据的配分函数比例大, 从而对辐射不透明度的贡献也很大. 以 Sn¹⁰⁺ 为例, 基组态贡献的配分函数约占总配分函数的 17.4%, 单电子激发组态占 73.1%, 双电子激发组态占 9.5%, 可见单电子激发组态对总吸收的重要贡献. 进一步包含三电子及更高激发组态后 (黑线), 谱线峰值强度增大, 线谱分布更加集中, 表明双电子激发组态对辐射不透明度亦有较大贡献.

Fujioka 等 [22] 通过激光产生的 X 射线加热 Sn 靶, 测量了 Sn 等离子体辐射不透明度. 辐射流体模拟预测了在 X 射线峰值过后的 1 ns, Sn 等离子体的平均温度 30 eV, 平均密度 0.01 g/cm³, 面密度 2.04×10^{-5} g/cm². 理论和实验的透射谱比较如图 5 所示, 其中 ATOMIC 程序采用混合模型计算辐射不透明度, 即对重要的跃迁线采取细致能级的描述, 对次要的跃迁采取统计方法 [28,41]. 从图 5(a) 可见, 理论与实验结果虽然整体上基本符合, 但也存在明显差异. 在 11—13.5 nm 波长范围, 实验结

果显示了一个较为缓慢的下降趋势, 而两种理论计算都预测了非常陡峭的下降沿. 与 ATOMIC 相比, 本文预测的下降沿位于更短的波长, 且吸收峰的宽度更宽. 此外, 理论和实验的差异还表现在吸收峰的位置和细致结构上: 一是实验测量的最强吸收峰位于 13.5 nm 左右, 而理论预测的位置均偏低; 二是在上升沿, 实验在 16 和 18 nm 处分别给出了两个吸收峰, 虽然本文预测了 16 nm 处的吸收峰, 但是两种理论均没有预测 18 nm 处的宽吸收峰. 可以看到, 在 13 nm 附近的最强吸收峰, 理论预测吸收是饱和的, 这也是与实验不符的. 为了探究理论与实验差异的可能原因, 本文计算了温度分别为 25, 27 和 32 eV 的透射谱, 如图 5(b) 所示. 容易看出, 温度越高, 吸收峰的宽度越窄. 最强吸收峰的下沿对温度不敏感, 而上升沿对温度比较敏感. 温度越低, 14—20 nm 波长范围的透射率越小. 这是因为电离度随温度降低而变小, 电荷态分布向低电离度离子偏移, 相应的吸收峰向长波范围移动. 对于透射谱上升沿可见的两个吸收结构 (约 16 和 18 nm), 前者来自 Sn¹⁰⁺ 的 4d-5p 跃迁, 后者来自 Sn⁹⁺ 的 4d-5p 跃迁 (理论计算的位置约为 17.6 nm). 在温度下降到 25 eV 时 (黑虚线), 理论预测的这两个吸收峰结构清晰可见, 但是此时理论预测的透射率比实验结果已经明显偏低. 对于理论和实验之间的差异, 可能的物理原因有: 一是原子参数的精度. 振子强度的大小和分布是光谱的决定性因素. 从

图5可知,理论计算的最强吸收峰的位置和强度均与实验不符,提高原子参数精度可以改善理论和实验符合度.二是理论计算是基于局域热平衡假设得到的,真实实验条件下,可能会存在一些非平衡因素,导致理论预测和实验测量的差异.

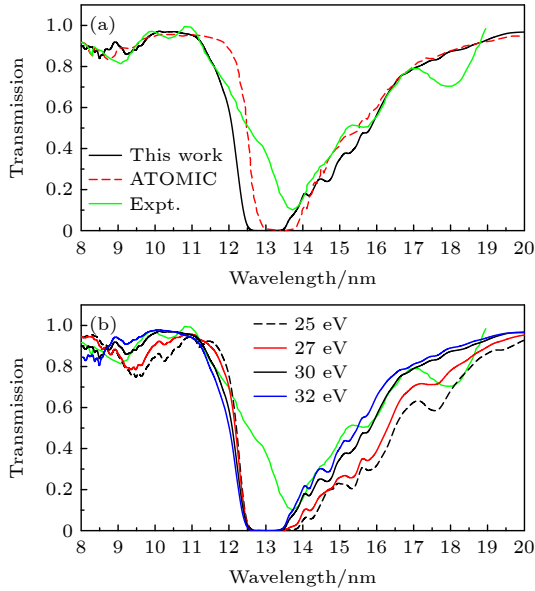


图5 Sn等离子体透射谱 (a) 温度30 eV, 密度0.01 g/cm³时本文计算、ATOMIC^[28]与实验^[22]结果; (b) 本文计算的密度0.01 g/cm³, 温度为25, 27, 30和32 eV的Sn等离子体透射谱. 本文计算取仪器展宽为0.5 eV

Fig. 5. Transmission spectra of Sn plasmas: (a) Present calculation, ATOMIC^[28] and experimental results^[22] of Sn at a temperature of 30 eV and a density of 0.01 g/cm³; (b) present calculated transmission spectra of Sn at a density of 0.01 g/cm³ and temperatures of 25, 27, 30 and 32 eV. The instrumental broadening in the present calculation is set to be 0.5 eV.

图6为温度20 eV, 密度0.0001—0.1 g/cm³的Sn等离子体辐射不透明度和对应条件下的发射谱, 其中红色虚线框标出了中心波长13.5 nm, 带宽2%的波长范围. 在图示的等离子体条件下, Sn等离子体中主要存在的离子类型为Sn⁶⁺-Sn¹²⁺. 在最低的密度0.0001 g/cm³, 等离子体中Sn¹¹⁺离子的丰度最大(约50%). 由它贡献的辐射不透明度主要位于13 nm附近, 而13.5 nm附近的辐射不透明度相对较小. 密度增加至0.001 g/cm³时, Sn¹⁰⁺离子丰度最大(约44%). 此时在13.5 nm附近的辐射不透明度最大. 密度继续增加时, 谱线结构改变明显: 由非常集中的单峰形状变成了多吸收峰的结构. 在最大的密度0.1 g/cm³, 谱线的三吸收峰结

构清晰可见. 密度较低时, 谱线非常集中, 随着密度的增加, 强吸收峰覆盖的波长范围越来越宽, 且形成了准连续的吸收包络. 例如, 在0.001 g/cm³时, 吸收谱集中在13.5 nm附近. 在0.01 g/cm³时, 主要的吸收峰覆盖了12—16 nm, 而在0.1 g/cm³时, 强吸收峰则覆盖了12—17 nm. 这是因为: 密度较低时, 对辐射不透明度起主要贡献的是基态和低激发态, 能量较高的激发态占据数小, 对不透明度的贡献小, 因此谱线较为集中. 随着密度的增加, 电子-电子和电子-离子碰撞速率增大, 激发态占据数增大, 对辐射不透明度的贡献随之增大. 而激发态的能量分布范围很宽, 所以吸收谱的分布范围也变宽了. 同时, 随着密度的增加, 电子复合速率增大, 电离度变低, 电荷态分布向低电离度离子偏移, 而低电荷态离子的吸收谱线分布的波长范围更广. 此外, 密度的增加使得电子碰撞展宽增加, 谱线宽度增大, 因此光谱逐渐形成了准连续的吸收包络.

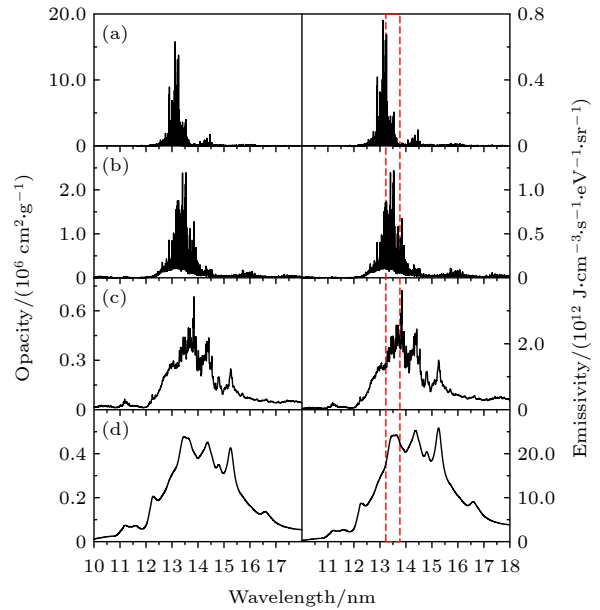


图6 温度为20 eV, 密度为(a) 0.0001, (b) 0.001, (c) 0.01和(d) 0.1 g/cm³的Sn等离子体EUV辐射不透明度(左图)和发射系数(右图). 平均电离度分别为10.96, 9.63, 8.36和7.16, 自由电子密度分别为 5.56×10^{18} , 4.89×10^{19} , 4.24×10^{20} 和 3.63×10^{21} cm⁻³. 红色虚线表示中心波长13.5 nm, 带宽2%的波长范围

Fig. 6. EUV Radiative opacity (left) and emissivity (right) of Sn plasmas at a temperature of 20 eV and densities of (a) 0.0001, (b) 0.001, (c) 0.01 and (d) 0.1 g/cm³. The average ionization is 10.96, 9.63, 8.36 and 7.16, respectively. The free electron density is 5.56×10^{18} , 4.89×10^{19} , 4.24×10^{20} and 3.63×10^{21} cm⁻³, respectively. The red-dashed lines represent the 2% wavelength region centered at 13.5 nm.

发射谱随密度的变化规律和辐射不透明度是类似的, 两者谱线结构相似, 而相对强度不同. 例如, 密度为 0.1 g/cm^3 时, $13\text{--}16 \text{ nm}$ 范围内的强吸收和强发射均有 3 个大的峰. 吸收峰约在 13.5 nm 处最强, 而发射谱在此处是弱的, 最强的发射峰位于约 15.2 nm . 随着密度的增加, 等离子体的发射系数随之增大, 但是光谱范围也越来越宽. 在 EUV 光源设计中, 2% 带宽以外的发射光谱通常是不利于光刻的 [42]. 以 13.5 nm 为中心, 2% 带宽以内的发射率积分得到总的发射功率, 如表 2 所列. 容易看到, 随着物质密度的增加, 总的发射功率是增加的. 这主要是粒子数密度增加造成的, 因为发射系数正比于上能级的粒子数. 同时, 密度的增加使得光谱分布越来越宽, 且发射系数的峰值逐渐偏离 13.5 nm . 所以在 EUV 光源的设计中, 需要综合考虑谱线结构和发射功率. 图 7、图 8 和图 6 类似, 但是温度分别为 23 和 27 eV. 对于相同的温度, 随着密度的增加, 辐射不透明度和发射谱的变化规律与图 6 所示类似. 表现为: 强谱线覆盖范围的越来越宽, 同时强线谱的位置向长波长移动. 这是因为密度增加, 电子复合速率随之增加, 电荷态分布向低电离度偏移导致的.

表 2 不同温度和密度条件下, Sn 等离子体在 $(13.5 \pm 2\%) \text{ nm}$ 波长范围的总发射功率. $a(b)$ 表示 $a \times 10^b$

Table 2. Total emissivity of Sn plasmas in $(13.5 \pm 2\%) \text{ nm}$ wavelength region at a variety of temperature and density. $a(b)$ represents $a \times 10^b$.

T_e / eV	$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	$j_{\text{tot}} / (\text{W} \cdot \text{cm}^{-3})$
20	0.0001	4.52(10)
	0.001	7.86(11)
	0.01	6.68(12)
	0.1	8.36(13)
23	0.0001	5.50(10)
	0.001	1.01(12)
	0.01	1.42(13)
	0.1	1.69(14)
27	0.001	1.13(12)
	0.005	9.07(12)
	0.01	2.24(13)
	0.1	3.11(14)

图 9 给出了密度为 0.0001 g/cm^3 , 不同温度的辐射不透明度. 因为密度很低, 所以主要是基态和低激发态对辐射不透明度有贡献. 此时谱线的电子

碰撞展宽很小 (约 0.5 meV), 表现出明显的分立谱结构, 谱线结构非常复杂. 在 16 eV 时, 等离子体中 Sn^{9+} 和 Sn^{10+} 占据了约 85% 的丰度. 两者在 13.5 nm 附近贡献了丰富的谱线结构. 虽然发射谱集中在 13.5 nm , 但是因为密度低, 所以谱线的强度不大. 随着温度的增加, 电离度增加, 电荷态分布向高电

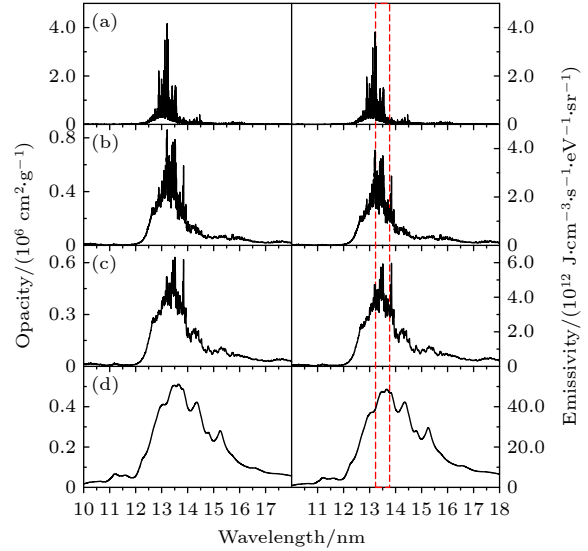


图 7 温度为 23 eV, 密度为 (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 和 (d) 0.1 g/cm^3 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 7. EUV Radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a temperature of 23 eV and densities of (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 and (d) 0.1 g/cm^3 .

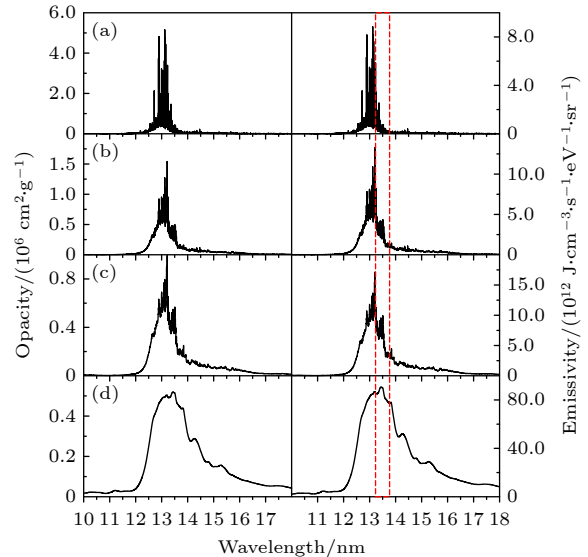


图 8 温度为 27 eV, 密度为 (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 和 (d) 0.1 g/cm^3 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 8. EUV Radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a temperature of 27 eV and densities of (a) 0.001, (b) 0.005, (c) 0.01 and (d) 0.1 g/cm^3 .

荷态偏移, 强谱线随之向短波长范围偏移. 在温度为 23 eV 时, 主要的离子类型是 Sn^{12+} , 最强的谱线在 13 nm 附近, 此时 13.5 nm 处的吸收峰就相对很弱了. 图 10—12 与图 9 类似, 但密度分别为 0.001, 0.01 和 0.1 g/cm^3 . 对于固定的密度, 随着温

度的增加, 谱线结构表现出明显的窄化现象. 如图 11 (密度 0.01 g/cm^3) 所示, 20 eV 时, 吸收和发射最强的谱线覆盖的波长范围是 12.5—15.5 nm. 当温度增加到 30 eV 时, 则几乎集中在 12.5—13.5 nm 很窄的范围内. 这是因为, 温度较低时, 电离度较

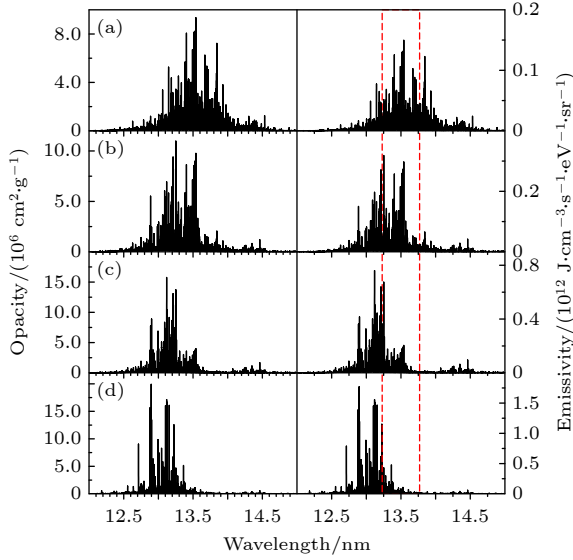


图 9 密度为 0.0001 g/cm^3 , 温度为 (a) 16, (b) 18, (c) 20 和 (d) 23 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 9. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.0001 g/cm^3 and temperatures of (a) 16, (b) 18, (c) 20 and (d) 23 eV.

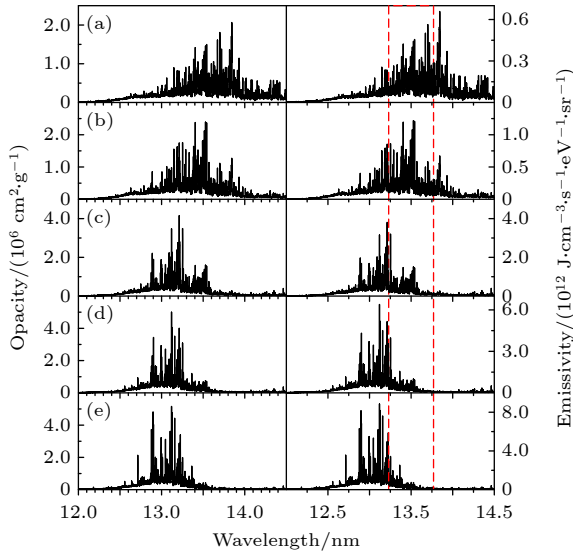


图 10 密度为 0.001 g/cm^3 , 温度为 (a) 18, (b) 20, (c) 23, (d) 25 和 (e) 27 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 10. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.001 g/cm^3 and temperatures of (a) 18, (b) 20, (c) 23, (d) 25 and (e) 27 eV.

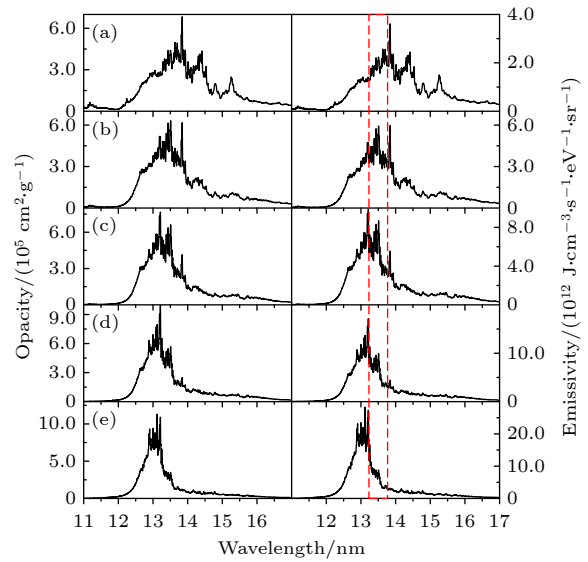


图 11 密度为 0.01 g/cm^3 , 温度为 (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 和 (e) 30 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 11. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.01 g/cm^3 and temperatures of (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 and (e) 30 eV.

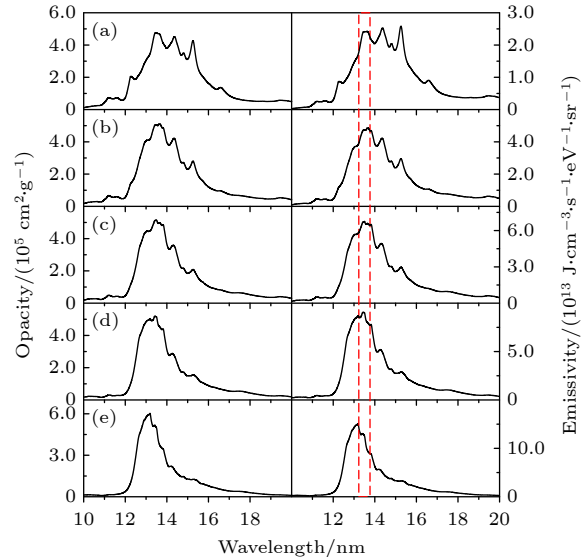


图 12 密度为 0.1 g/cm^3 , 温度为 (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 和 (e) 30 eV 的 Sn 等离子体 EUV 辐射不透明度 (左图) 和发射系数 (右图)

Fig. 12. EUV radiative opacity (left panel) and emissivity (right panel) of Sn plasmas at a density of 0.1 g/cm^3 and temperatures of (a) 20, (b) 23, (c) 25, (d) 27 and (e) 30 eV.

低, 低电荷态离子的结构更为复杂, 谱线覆盖的波长范围更宽. 随着温度增加, 电离度增加, 高电荷态离子丰度增加, 其束缚态电子数目变少, 跃迁线能量更为集中, 因此谱线整体结构变窄. 分析 ($13.5 \pm 2\%$) nm 波长范围的总发射功率可看出, 密度一定时, 随着温度的升高, 总发射功率也随之增加. 例如, 密度为 0.001 g/cm^3 时, 温度为 20, 23 和 27 eV 时的总发射功率分别为 7.86×10^{11} , 1.01×10^{12} 和 $1.13 \times 10^{12} \text{ W/cm}^3$. 温度增加时, 虽然强发射线位置逐渐偏移出了 ($13.5 \pm 2\%$) nm 的范围, 但是高激发态上的粒子占据数增加了, 使得总发射功率增强.

5 结 论

使用 DLA 模型系统研究了作为 EUV 光源典型条件下的 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱 (温度 16—30 eV, 密度 $0.0001\text{--}0.1 \text{ g/cm}^3$). 在此条件下, Sn 等离子体中主要的离子类型是 Sn^{6+} - Sn^{14+} . 基于 MCDF 方法, 采用大规模组态相互作用的计算, 获得了 Sn^{6+} - Sn^{14+} 的能级和辐射跃迁振子强度等基本原子参数, 计算中包括了至多 $4d^4\text{--}4f^4$ 和 $4p^3\text{--}4d^3$ 的电子关联效应. 对较强的振子强度, 其长度和速度表示差异在 20%—30%. 计算了 30 eV, 0.01 g/cm^3 条件下 Sn 等离子体透射谱, 与实验和其他大规模计算的结果基本符合. 系统研究了 Sn 等离子体辐射不透明度和发射谱随温度和密度的变化规律, 展示了 13.5 nm 附近的辐射特性的特点. 温度固定时, 随着密度增加, 吸收谱变宽; 而密度固定时, 随着温度升高, 吸收谱变窄. 研究了中心波长 13.5 nm, 带宽 2% 范围的总发射功率随温度和密度的变化. 需要注意的是, 本文研究的典型条件下 (约 30 eV, 0.01 g/cm^3), Sn 等离子体通常没有严格处于局域热平衡状态, 而是处于非平衡状态^[29]. 非平衡效应会改变粒子数分布, 从而影响辐射不透明度和发射谱的结构和强度^[43,44], 这是 EUV 光源设计需要考虑的物理因素, 也是未来工作中需要细致研究的内容.

参考文献

[1] Pirati A, Van Shoot J, Troost K, van Ballegoij R, Krabbendam P, Stoeldraijer J, Loopstra E, Benschop J, Finders J, Meiling H, van Setten E, Mika N, Driedonkx J,

Stamm U 2017 *Proc. SPIE* **10143** 101430G
 [2] Hutcheson G D 2018 *Proc. SPIE* **10583** 1058303
 [3] David A 2007 *Soft x-rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications* (Cambridge: Cambridge University Press) pp17—20
 [4] Zong N, Hu W M, Wang Z M, Wang X J, Zhang S J, Bo Y, Peng Q J, Xu Z Y 2020 *Chin. Opt.* **13** 28 (in Chinese) [宗楠, 胡蔚敏, 王志敏, 王小军, 张申金, 薄勇, 彭钦军, 许祖彦 2020 *中国光学* **13** 28]
 [5] Versolato O O 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* **28** 083001
 [6] Kieft E R, Garloff K, van der Mullen J J A M, Banine V 2005 *Phys. Rev. E* **71** 036402
 [7] Ueno Y, Soumagne G, Sumitani A, Endo A, Higashiguchi T 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 231501
 [8] Svendsen W, O'Sullivan G 1994 *Phys. Rev. A* **50** 3710
 [9] Churilov S S, Ryabtsev A N 2006 *Opt. Spectrosc.* **101** 169
 [10] D'Arcy R, Ohashi H, Suda S, Tanuma H, Fujioka S, Nishimura H, Nishihara K, Suzuki C, Kato T, Koike F, White J, O'Sullivan G 2009 *Phys. Rev. A* **79** 042509
 [11] Ohashi H, Suda S, Tanuma H, Fujioka S, Nishimura H, Sasaki A, Nishihara K 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 065204
 [12] O'Sullivan G, Li B, D'Arcy R, Dunne P, Hayden P, Kilbane D, McCormack T, Ohashi H, O'Reilly F, Sheridan P, Sokell E, Suzuki C, Higashiguchi T 2015 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 144025
 [13] Windberger A, Torretti F, Borschevsky A, Ryabtsev A, Dobrodey S, Bekker H, Eliav E, Kaldor U, Ubachs W, Hoekstra R, Crespo López-Urrutia J R, Versolato O O 2016 *Phys. Rev. A* **94** 012506
 [14] Torretti F, Windberger A, Ryabtsev A, Dobrodey S, Bekker H, Ubachs W, Hoekstra R, Kahl E V, Berengut J C, Crespo López-Urrutia J R, Versolato O O 2017 *Phys. Rev. A* **95** 042503
 [15] Torretti F, Schupp R, Kurilovich D, Bayerle A, Scheers J, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 045005
 [16] de Gaufridy de Dortan F 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 599
 [17] Koike F, Fritzsche S 2007 *Radiat. Phys. Chem.* **76** 404
 [18] Kagawa T, Tanuma H, Ohashi H, Nishihara K 2007 *J. Phys.: Conf. Ser.* **58** 149
 [19] Eliav E, Kaldor U, Ishikawa Y 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1724
 [20] Berengut J C, Flambaum V V, Kozlov M G 2006 *Phys. Rev. A* **73** 012504
 [21] Lysaght M, Kilbane D, Murphy N, Cummings A, Dunne P, O'Sullivan G 2005 *Phys. Rev. A* **72** 014502
 [22] Fujioka S, Nishimura H, Nishihara K, Sasaki A, Sunahara A, Okuno T, Ueda N, Ando T, Tao Y, Shimada Y, Hashimoto K, Yamaura M, Shigemori K, Nakai M, Nagai K, Norimatsu T, Nishikawa T, Miyanaga N, Izawa Y, Mima K 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 235004
 [23] Cai Y, Wang W T, Yang M, Liu J S, Lu P X, Li R X, Xu Z Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5100 (in Chinese) [蔡懿, 王文涛, 杨明, 刘建胜, 陆培祥, 李儒新, 徐至展 2008 *物理学报* **57** 5100]
 [24] Chen H, Lan H, Chen Z Q, Liu L N, Wu T, Zuo D L, Lu P X, Wang X B 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 075202 (in Chinese) [陈鸿, 兰慧, 陈子琪, 刘璐宁, 吴涛, 左都罗, 陆培祥, 王新兵 2015 *物理学报* **64** 075202]
 [25] Su M G, Min Q, Cao S Q, Sun D X, Hayden P, O'Sullivan G, Dong C Z 2017 *Sci. Rep.* **7** 45212
 [26] Schupp R, Torretti F, Meijer R A, Bayraktar M, Sheil J, Scheers J, Kurilovich D, Bayerle A, Schafgans A A, Purvis

- M, Eikema K S E, Witte S, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 124101
- [27] Zeng J, Gao C, Yuan J 2010 *Phys. Rev. E* **82** 026409
- [28] Colgan J, Kilcrease D P, Jr. Abdallah J, Sherrill M E, Fontes C J, Hakel P, Armstrong G S J 2017 *High Energy Density Phys.* **23** 133
- [29] Torretti F, Sheil J, Schupp R, Basko M M, Bayraktar M, Meijer R A, Witte S, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O, Neukirch A J, Colgan J 2020 *Nat. Commun.* **11** 2334
- [30] Sheil J, Versolato O O, Neukirch A J, Colgan J 2021 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **54** 035002
- [31] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley: University of California Press)
- [32] Jönson P, Gaigalas G, Bieroń, Froese Fischer C, Grant I P 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2197
- [33] Zeng J L, Yuan J M 2006 *Phys. Rev. E* **74** 025401(R)
- [34] Gao C, Zeng J, Jin F, Yuan J 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 419
- [35] Zeng J L, Gao C, Liu P F, Li Y J, Meng C S, Hou Y, Kang D D, Yuan J M 2022 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **65** 233011
- [36] Stewart J C, Pyatt K D Jr. 1966 *Astrophys. J.* **144** 1203
- [37] Li S C 1992 *High Temperature Radiation Physics and Quantum Radiation Theory* (Beijing: National Defense Industry Press) p6 (in Chinese) [李世昌 1992 高温辐射物理与量子辐射理论 (北京: 国防工业出版社) 第 6 页]
- [38] Zeng J L, Zhao G, Yuan J M 2006 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **102** 172
- [39] Wu Z W, Tian Z Q, An Y H, Dong C Z 2021 *Astrophys. J.* **910** 142
- [40] Kühn S, Cheung C, Oreshkina N S, Steinbrügge, Togawa M, Bernitt S, Berger L, Buck J, Hoesch M, Seltmann J, Trinter F, Keitel C H, Kozlov M G, Porsev S G, Gu M F, Porter F S, Pfeifer T, Leutenegger M A, Harman Z, Safronova M S, López-Urrutia J R C, Shah C 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 245001
- [41] Colgan J, Kilcrease D P, Magee N H, Sherrill M E, Abdallah Jr. J, Hakel P, Fontes C J, Guzik J A, Mussack K A 2016 *Astrophys. J.* **817** 116
- [42] Lan H 2016 *Ph. D. Dissertation* (Wuhan: Huazhong University of Science and Technology) (in Chinese) [兰慧 2016 博士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [43] Hansen S B, Chung H K, Fontes C J, Ralchenko Yu, Scott H A, Stambulchik E 2020 *High Energy Density Phys.* **35** 100693
- [44] Gao C, Zeng J, Li Y, Jin F, Yuan J 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 583

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Theoretical investigation on extreme ultraviolet radiative opacity and emissivity of Sn plasmas at local-thermodynamic equilibrium*

Gao Cheng^{1)†} Liu Yan-Peng²⁾ Yan Guan-Peng¹⁾ Yan Jie¹⁾
 Chen Xiao-Qi¹⁾ Hou Yong¹⁾ Jin Feng-Tao¹⁾ Wu Jian-Hua^{1)‡}
 Zeng Jiao-Long¹⁾³⁾ Yuan Jian-Min¹⁾⁴⁾

1) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*State Key Laboratory of Laser Interaction with Matter, Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710000, China*)

3) (*College of Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China*)

4) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100193, China*)

(Received 26 March 2023; revised manuscript received 4 May 2023)

Abstract

Sn is the material for an extreme ultraviolet (EUV) light source working at 13.5 nm, therefore the radiative properties of Sn plasma are of great importance in designing light source. The radiative opacity and emissivity of Sn plasma at local thermodynamic equilibrium are investigated by using a detailed-level-accounting model. In order to obtain precise atomic data, a multi-configuration Dirac-Fock method is used to calculate energy levels and oscillator strengths of Sn^{6+} - Sn^{14+} . The electronic correlation effects of $4d^m-4f^m$ ($m = 1, 2, 3, 4$) and $4p^n-4d^n$ ($n = 1, 2, 3$) are mainly considered, which dominate the radiation near 13.5 nm. The number of fine-structure levels reaches about 200000 for each ionization stage in the present large-scale configuration interaction calculations. For the large oscillator strengths (> 0.01), the length form is in accord with the velocity form and their relative difference is about 20%–30%. The calculated transmission spectra of Sn plasma at 30 eV and 0.01 g/cm^3 are compared with the experimental result, respectively, showing that they have both good consistency. The radiative opacity and emissivity of Sn plasma at the temperature in a range of 16–30 eV and density in a scope of $0.0001\text{--}0.1 \text{ g/cm}^3$ are investigated systematically. The effects of the plasma temperature and plasma density on radiation characteristics are studied. The results show that the radiative properties near 13.5 nm are broadened with the increase of density at a specific temperature, while it is narrowed with the increase of temperature for a specific density. The present investigation should be helpful in designing and studying EUV light source in the future.

Keywords: extreme ultraviolet light source, detailed-level-accounting model, configuration interaction

PACS: 31.15.am, 32.30.-r, 31.15.A-

DOI: [10.7498/aps.72.20230455](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230455)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12074430, 11974423) and the Foundation Research of the State Key Laboratory of Laser Interaction with Matter, China (Grant No. SKLIM2008).

† Corresponding author. E-mail: gaocheng@nudt.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wujh@nudt.edu.cn



局域热平衡Sn等离子体极紫外辐射不透明度和发射谱的理论研究

高城 刘彦鹏 严冠鹏 闫杰 陈小棋 侯永 靳奉涛 吴建华 曾交龙 袁建民

Theoretical investigation on extreme ultraviolet radiative opacity and emissivity of Sn plasmas at local-thermodynamic equilibrium

Gao Cheng Liu Yan-Peng Yan Guan-Peng Yan Jie Chen Xiao-Qi Hou Yong Jin Feng-Tao Wu Jian-Hua Zeng Jiao-Long Yuan Jian-Min

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 183101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230455

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230455>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

相对论多组态相互作用方法计算Mg⁺离子同位素位移

Calculation of isotope shift of Mg⁺ ion by using the relativistic multi-configuration interaction method

物理学报. 2018, 67(1): 013101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171817>

双激光脉冲打靶形成Gd等离子体的极紫外光谱辐射

Characteristics of extreme ultraviolet emission from Gd plasma produced by dual pulse laser

物理学报. 2022, 71(3): 035202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211450>

桌面飞秒极紫外光原子超快动力学实验装置

A tabletop experimental system for investigating ultrafast atomic dynamics based on femtosecond extreme ultraviolet photons

物理学报. 2020, 69(23): 234208 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201035>

EAST等离子体Mo V–Mo XVIII极紫外光谱的识别

Line identification of extreme ultraviolet spectra of Mo V to Mo XVIII in EAST tokamak

物理学报. 2022, 71(11): 115203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212383>

氮气分子电子态的不透明度

Opacities of electronic states for nitrogen molecule

物理学报. 2022, 71(14): 143102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220043>

基于极紫外光的Ne, Xe原子电离

Photoionization of Ne and Xe atoms induced by extreme ultraviolet photons

物理学报. 2022, 71(14): 143201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220341>

国防科技大学建校 70 周年专题

基于深度学习的钻孔辐射压离子加速建模*

张普渡¹⁾ 王伟权^{1)†} 李哲民²⁾ 张资旋¹⁾王叶晨¹⁾ 周泓宇¹⁾ 银燕^{1)‡}

1) (国防科技大学理学院物理系, 长沙 410073)

2) (国防科技大学理学院数学系, 长沙 410073)

(2023 年 4 月 29 日收到; 2023 年 5 月 31 日收到修改稿)

超短超强激光脉冲与固体靶相互作用可通过钻孔辐射压加速机制产生百 MeV 量级的离子束, 离子束的品质强烈依赖于激光和靶的作用参量. 本文以近 400 组激光驱动固体靶的粒子模拟结果作为数据集, 以激光强度、靶密度、靶厚和离子质量作为输入参量, 基于全连接神经网络建立了一个离子峰值能量和截止能量连续映射模型. 该模型用较为稀疏的参量取值获得了较大参量范围内的分析结果, 大大减少了多维参量大范围扫参的计算量. 基于连续映射模型的结果, 得到了钻孔辐射压加速机制下离子峰值能量的修正公式和截止能量的拟合公式, 可为激光离子加速的实验设计提供重要参考.

关键词: 激光离子加速, 神经网络

PACS: 41.75.Jv, 87.85.dq

DOI: 10.7498/aps.72.20230702

1 引言

随着超短超强激光脉冲与等离子体相互作用研究的不断深入, 基于超强激光驱动的离子加速逐渐成为激光等离子体领域的重要研究方向, 在离子束驱动快点火^[1,2]、束靶中子源^[3,4]、温稠密物质加热^[5-7]、质子照相^[8,9]等领域得到了广泛研究与应用. 常见的激光驱动的离子加速机制包含辐射压加速 (radiation pressure acceleration, RPA)^[10,11]、靶背法向鞘层加速 (target normal sheath acceleration, TNSA)^[12,13]、靶破烧蚀加速^[14,15]、无碰撞激波加速^[16,17]等. 其中, RPA 机制由于其能量转化效率高、离子束单能性好以及可加速重离子等特点, 在实验上备受关注. 根据固体靶厚度的不同, RPA

机制可分为薄靶条件下的光帆加速 (light-sail RPA, LS-RPA)^[18,19]和厚靶条件下的钻孔加速 (hole-boring RPA, HB-RPA)^[20,21]. 在 LS-RPA 机制下, 离子与电子将被压缩为“等离子体飞镜 (plasma mirror)”结构被激光脉冲整体推动加速, 但这种机制对激光脉冲对比度要求较高, 且靶厚度和激光脉冲强度之间有严格的匹配关系^[18,19,22]. 而对于 HB-RPA 机制, 激光和靶的参数要求相对宽松, 更容易在实验中实现^[23], 且可在较高激光强度下对重离子实现有效加速^[24].

在基于 HB-RPA 机制的数值模拟和实验设计中, 分析研究对象与参量的关联时需进行参数扫描. 然而, 激光和靶参数的选取范围较为宽泛, 通过开展大量实验或数值模拟进行线性扫参的代价过于高昂. 同时, 不同扫描参量与目标参量间可能

* 国家自然科学基金青年基金 (批准号: 12005298)、国家自然科学基金联合项目“叶企孙”科学基金 (批准号: U2241281)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2022JJ30656)、湖南省自然科学基金青年基金 (批准号: 2021JJ40661) 和国防科技大学科研计划 (批准号: ZK19-25) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: weiquan.wang@nudt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yyin@nudt.edu.cn

存在一定映射关联, 而通过线性扫参只能得到有限的孤立数据点, 基于有限的数据库建立较为可靠的连续映射关系存在较大困难. 因此, 有必要寻找新的研究参量映射规律的手段. 近几年内, 依赖于数据学习的神经网络算法^[25,26]被逐渐应用在科研领域, 例如托卡马克装置中磁场的控制优化^[27]、惯性约束聚变实验结果对实验参数的敏感度研究^[28]、电子加速能谱的自动识别与分类^[29]、高辐射环境下测得的电子能谱图的去噪分析^[30]、预测粒子加速器内粒子束纵向相空间演化趋势^[31]等. 在众多类型的神经网络算法中, 卷积神经网络 (convolutional neural network, CNN) 主要面向二维矩阵数据的处理, 在图像处理和识别等领域应用广泛^[30]. 自组织映射神经网络 (self-organizing map, SOM) 的训练过程为无监督的竞争学习, 适用于高维数据的聚类分析^[29]. 全连接构型人工神经网络 (fully connected neural network, FCNN) 可以建立起数个变量关于单一映射量的连续模型, 适用于数据回归类问题的建模分析. Djordjević等^[32]基于 FCNN 神经网络算法对 TNSA 加速机制的多维参数进行了建模分析, 得到离子截止能量的连续映射模型, 并给出 TNSA 机制下离子能量增大速率的连续映射模型^[33].

本文所研究的 HB-RPA 机制下的参数映射也是一个数据回归类问题, 采用 FCNN 神经网络较为适合. 首先将有限的数值模拟结果整理为数据集输入 FCNN, 然后在数据迭代的过程中, 通过神经元权重的反向传递, 把目标参量关于输入参量的变化特征记录在神经网络中, 从而得到连续映射模型. 这一所得模型可较好反映出扫参空间中所有数据点的映射结果, 并可在训练范围外进行推广, 进而对更大范围的结果进行预测. 本文利用 FCNN 建立了 HB-RPA 机制下离子峰值能量和截止能量关于激光强度、靶密度、靶厚度和离子质量这 4 个输入参量的连续映射模型. 根据该模型与 HB-RPA 的理论公式及 PIC 数值模拟结果的对比结果, 对离子峰值能量公式进行修正, 同时给出离子截止能量的经验公式, 实现了对 HB-RPA 机制下离子峰值能量和截止能量的定量描述.

2 物理模型

当激光强度与靶厚度近似满足 $a < \pi dn / (n_c \lambda_0)$

关系时, HB-RPA 机制将占主导地位^[34], 其中, a 为归一化激光强度, 与激光强度 I_0 的关系满足 $a = \sqrt{I_0 \lambda_0^2 / (1 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2 \cdot \mu\text{m}^2)}$, $\lambda_0 = 1 \mu\text{m}$ 为激光波长, d 为靶厚度, $n_c = \frac{m_e \omega^2}{4\pi e^2}$ 为等离子体临界密度, m_e 为电子质量, ω 为激光频率, e 为电子电荷量. 一维 (one-dimension, 1D) 情况下, 一束强度恒定为 I_0 的圆极化激光正入射到均匀密度为 n 的等离子体, 光束在等离子体表面被完全反射. 由稳态加速离子所满足的动量平衡方程, 可以得到实验室系中相对论条件下动量平衡的稳态离子能量表达式^[20]:

$$E_p = m_i c^2 \left(\frac{2\xi}{1 + 2\sqrt{\xi}} \right), \quad (1)$$

式中, 无量纲参量 $\xi = \frac{I_0}{m_i n c^3}$. 从 (1) 式可以看出, 一维 HB-RPA 机制下, 大量处于平衡态的离子的峰值能量 E_p 主要与激光强度 I_0 、等离子体靶密度 n 和离子质量 m_i 相关.

本文通过 PIC 程序 EPOCH^[35] 对 HB-RPA 过程进行了约 400 次 1D 数值模拟. 在模拟中改变激光脉冲的归一化激光强度 a , 等离子体靶厚度 d , 等离子体靶密度 n 和离子质量 m_i , 模拟参数选取范围均满足 HB-RPA 离子加速机制要求. 由于靶厚度 d 是决定 HB-RPA 加速机制是否起效的重要参量, 将 d 作为输入参量加入到神经网络的训练中, 可以更好地保证训练所得模型的可靠性. 在 1D 数值模拟中, 激光时间脉冲设置为梯形包络, 如下式所示:

$$I(t) = \begin{cases} \frac{t}{5T_0} I_0, & 0 < t < 5T_0, \\ I_0, & t > 5T_0, \end{cases}$$

其中 T_0 为激光周期, I_0 为激光峰值强度. 等离子体为单一离子组分的平面靶, 靶离子为完全电离. 模拟盒子范围为 $0 \leq x \leq 90\lambda_0$, 靶前表面位置处于 $10\lambda_0$ 处. 激光脉冲由左边界入射. 模拟空间分辨率为 $\Delta x = 0.01\lambda_0$, 每个网格内各组分的宏粒子数目为 50 个.

图 1(a) 和图 1(c) 分别为 He^{2+} 离子和 C^{6+} 离子的 x - v 相空间图, 其中, v 为离子速度. x - v 相空间图展现了 HB-RPA 机制的典型振荡特征^[20,21]. 在 HB-RPA 机制中, 激光推动电子形成压缩层, 由此产生的电荷分离场把大量靶内离子加速到稳态速度, 如红色虚线框所示. 加速电场的峰值位于电子

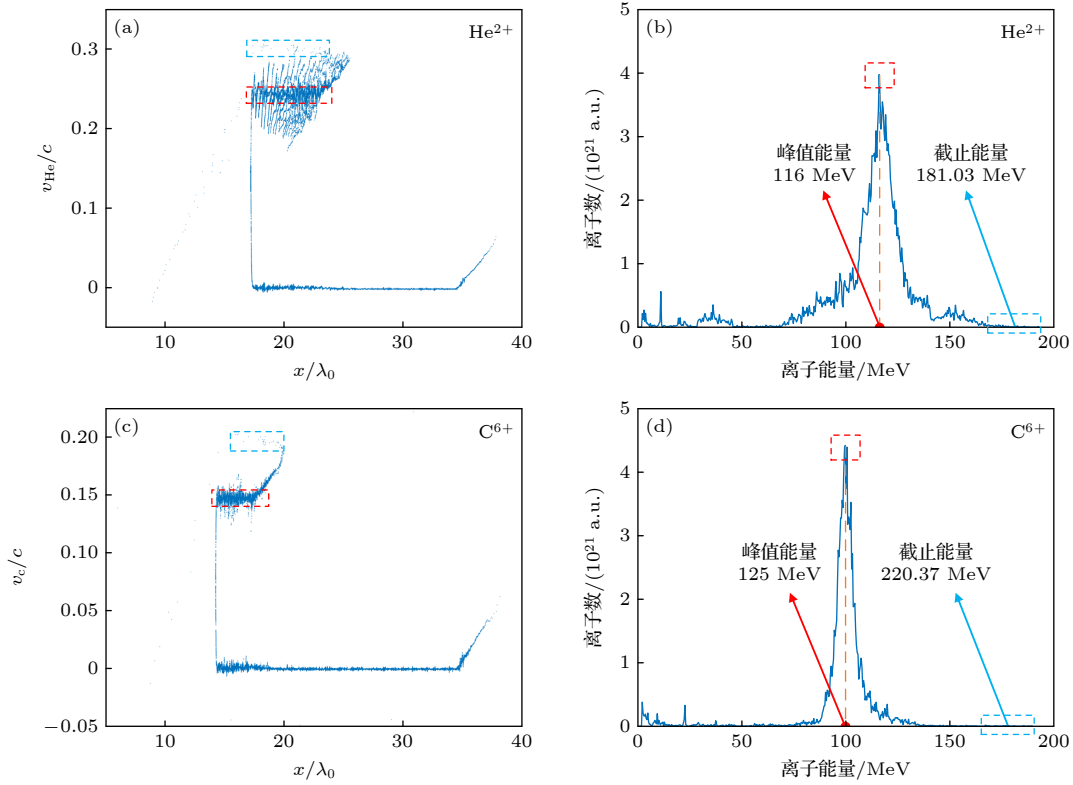


图 1 在 $t = 70T_0$ 时刻, (a) He^{2+} 离子的 x - v 相空间分布, (b) He^{2+} 离子的能谱分布, (c) C^{6+} 离子的 x - v 相空间分布, (d) C^{6+} 离子的能谱分布. 其中, 激光强度 $a = 100$, 靶密度 $n = 25n_c$, 靶厚 $d = 25\lambda_0$; 红色虚线框内为峰值能量所对应的离子, 蓝色虚线框内为截止能量所对应的离子

Fig. 1. At $t = 70T_0$, (a) the x - v phase space diagram of He^{2+} , (b) the energy spectrum of He^{2+} , (c) the x - v phase space diagram of C^{6+} , (d) the energy spectrum of C^{6+} , with $d = 25\lambda_0$, $n = 25n_c$ and $a = 100$. The red dashed box circles the ions with peak energy, and the blue dashed box circles the ions with cutoff energy.

压缩层的前表面, 随时间振荡^[20], 离子在振荡电场作用下形成形似鱼骨的 x - v 相空间结构. 少量滞后的离子被加速电场的上升沿推动至峰值电场区域, 进而被加速至更高能量, 如蓝色虚线框所示. 图 1(b) 和图 1(d) 分别为 He^{2+} 离子和 C^{6+} 离子在 $t = 70T_0$ 时刻的能谱图, 此时离子相空间、离子峰值能量和最大离子能量都已趋于稳定. 在能谱图上略去了能量位于能谱中最低 0.5% 部分的低能离子, 呈现清晰的准单能结构. 对于每组数值模拟, 通过诊断离子的 x - v 相空间分布来确定该组模拟中 HB-RPA 加速机制占主导地位, 通过离子能谱图统计离子束的峰值能量和截止能量. 舍弃掉不符合 HB-RPA 加速机制的数据点, 最终得到 400 组数据集样本数据点.

3 数据准备和搭建神经网络

3.1 数据集生成

整体数据集的采样采用系统抽样方式, 在一定

的参数范围内均匀间隔取值, 通过离子种类将数据集划分为质子集、 He^{2+} 集、 C^{6+} 集、 O^{8+} 集和测试集共 5 个集合. 其中, 质子集合经过数据筛选后总共记录了 231 次数值模拟结果, 具体的输入参数取值为: 靶厚 d 在 $[7.5\lambda_0, 35\lambda_0]$ 范围内间隔 $2.5\lambda_0$ 均匀取值, 靶密度 n 在 $[12.5n_c, 40n_c]$ 范围内间隔 $2.5n_c$ 均匀取值, 激光强度分别取值 4×10^{21} , 6×10^{21} , 8×10^{21} , 1×10^{22} , 2×10^{22} , 3×10^{22} W/cm². He^{2+} 离子集合包含 49 次数值模拟的结果, C^{6+} 离子与 O^{8+} 离子分别包含 50 次数值模拟的结果, 3 种离子的靶厚 d 取值为 $15\lambda_0$ 和 $25\lambda_0$, 靶密度 n 在 $[10n_c, 30n_c]$ 范围内间隔 $5n_c$ 均匀取值, 激光强度取值为 6×10^{21} , 8×10^{21} , 1×10^{22} , 2×10^{22} , 3×10^{22} W/cm². 最后一个集合为独立于其他数据的测试集, 离子种类包括 D^+ , T^+ , He^{2+} , B^{4+} , C^{6+} , F^{9+} , Mg^{12+} 和 Al^{13+} 离子, 在每组数值模拟中, 模拟参数 d , n 和 a 均独立取值, 共 20 个数据点. 记录每组模拟结果的离子峰值能量 E_p 与截止能量 E_m 作为训练参量, 具体取值分布如表 1 所列. 图 2(a)—(d) 更直观地给出了

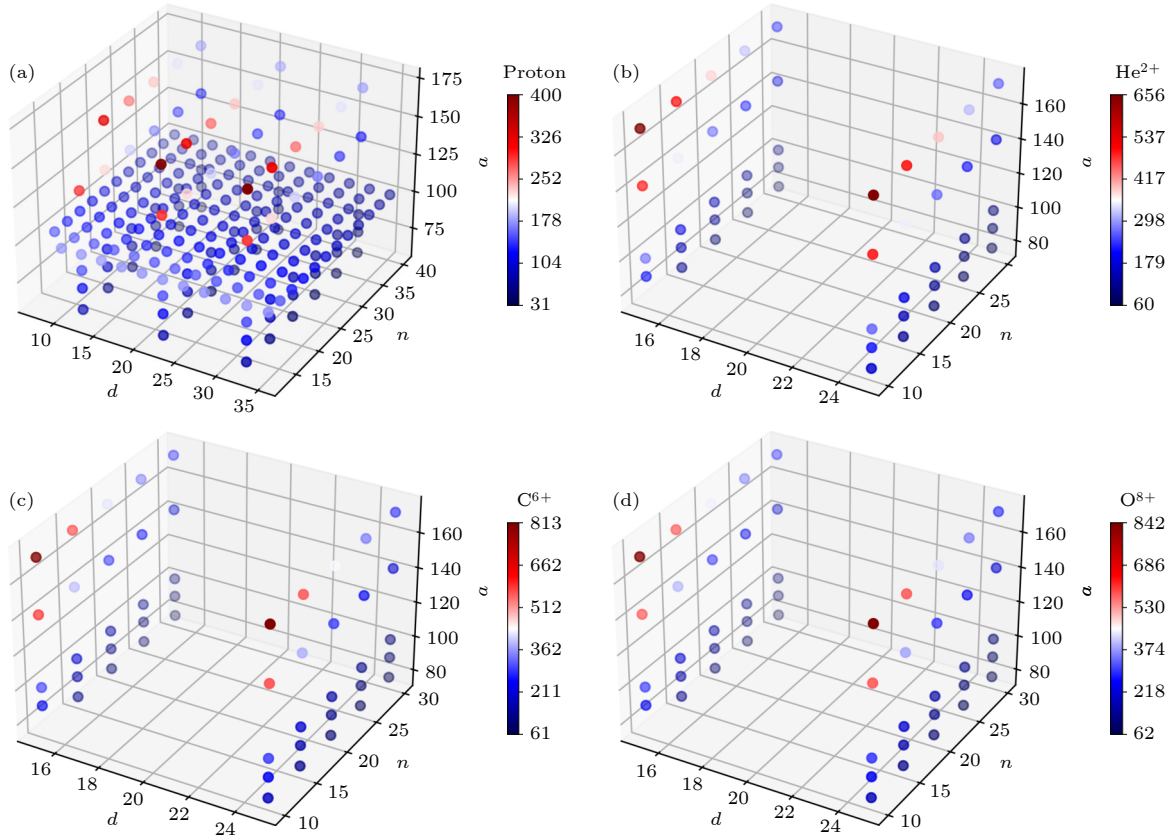


图 2 离子峰值能量随输入参数 d , n 和 a 分布的三维散点图 (a) 质子; (b) He^{2+} 离子; (c) C^{6+} 离子; (d) O^{8+} 离子

Fig. 2. Scatter plot depiction of ion peak energy data ensembles as a function of input parameters d , n and a . (a) Proton case; (b) He^{2+} , (c) C^{6+} ; (d) O^{8+} .

4 种离子的参数取值分布, 并用散点颜色标注了该数据点所对应的离子峰值能量. 为控制输入参数的数量级相近, 靶厚参数 d 以 λ_0 归一化, 靶密度参数 n 以临界密度 n_c 归一化, 激光强度以归一化激光强度 a 输入, 离子质量以原子质量数 A 输入.

表 1 数值模拟数据集参数取值分布

Table 1. Simulation datasets prepared for neural network training.

离子种类	模拟组数	d/λ_0	n/n_c	a
Proton	231	[7.5, 35]	[12.5, 40]	[63.2, 173.2]
He^{2+}	49	15, 25	[10, 30]	[77.5, 173.2]
C^{6+}	50	15, 25	[10, 30]	[77.5, 173.2]
O^{8+}	50	15, 25	[10, 30]	[77.5, 173.2]
其他	20	独立分布		

3.2 神经网络搭建

本文基于 Pytorch 中的 nn 模块来搭建深度神经网络, 所采用的网络类型为 FCNN, 通过测试与对比训练结果对神经网络结构与超参数的选取进行调整, 最终确定神经网络结构如图 3 所示. 经过

筛选和后处理的样本数据被输入到输入层, 4 个神经元分别对应输入参数 d , n , a , A . 经过 6 个隐藏层后, 结果收敛至输出层的单一输出量. E_p 与 E_m 采用相同的神经网络结构.

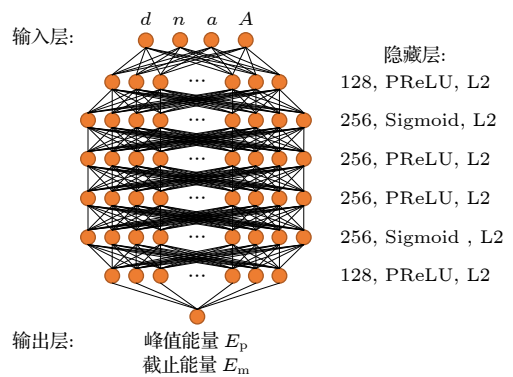


图 3 训练所使用的神经网络结构

Fig. 3. Neural network architecture used in the following training.

神经网络训练参数的选取与所得到代理模型 (surrogates ensemble, SE)^[36] 的泛化能力密切相关. 我们所使用的神经网络采用均方差损失

(mean square error, MSE) 函数, 采用 nn 模块默认的 L_2 正则化, 其中 $L_2 = 2 \times 10^{-5}$. 神经元激活函数选取为 Sigmoid 与 PReLU, 这两种激活函数皆为单调函数, 模型映射曲线在有限的预测范围内保持缓慢平滑变化, 这一特征与 HB-RPA 理论公式相契合. 训练结果表明, 我们所确定的神经网络结构可使模型收敛至接近理论预测结果, 同时保持了较好的平滑程度和泛化性, 这使得分析参量的训练和预测结果都具有一定的可靠性.

3.3 训练与测试

针对模拟数据所展开的训练类型均为监督学习, 在给定输入数据上训练神经网络, 训练过程中优化器选择基于随机梯度下降的 Adam 优化器, 损失函数选择 MSE. 本文将数据集划分为 380 组数据的训练集和 20 组数据的测试集, 训练集与测试集皆为固定. 训练数据在神经网络上迭代次数固定为 8000 次, 学习率固定为 1×10^{-4} , 损失函数误差下降至 1×10^{-4} 时, 模型趋于收敛, 且平滑程度与拟合程度良好.

4 研究结果

4.1 神经网络集合

在初始化权值的训练条件下, 每次的训练结果会略有不同. 由于本文所使用的参数空间相对稀疏, 每次训练所得模型的差异将会更加明显. 为此, 本文对 10 个神经网络同时进行训练, 得到一个神经网络集合, 并根据模型收敛时的损失函数取值对

训练结果做加权平均, 从而生成训练结果的代理模型. 取每个模型最后 2000 次迭代的损失函数均值的倒数作为该模型的权值, 对所有神经网络模型加权平均, 由模型权值进行归一化, 即可得到

$$SE(x) = \left[\sum_{i=1}^N w_i S_i(x) \right] / \left[\sum_{i=1}^N w_i \right], \quad (2)$$

式中, 代理模型 SE 是所有训练模型 S_i 的均值; w_i 为每个训练模型的权值, 为最后 2000 次迭代损失函数均值的倒数; x 为输入参数的取值; $N = 10$ 表示神经网络模型训练个数. 为了衡量代理模型在一定取值范围内的可变性, 定义了标准差 σ :

$$\sigma = \sqrt{N \sum_{i=1}^N w_i (S_i - \bar{S})^2} / \sqrt{N \sum_{i=1}^N w_i}, \quad (3)$$

式中, \bar{S} 为所有模型的均值. 在与测试数据进行比照时, 可将标准差 σ 作为模型可靠程度的参考值, 以红色色块标注在代理模型映射曲线两侧.

4.2 代理模型映射

利用神经网络训练结果和加权所得的代理模型, 在一定范围内的参数空间上对输入参数进行连续扫参, 可得到目标参量关于不同输入参数的映射关系, 并与测试集数据点进行比照.

图 4 为根据神经网络代理模型所绘出的离子峰值能量与截止能量关于靶密度 n 和激光强度 a 的二维连续映射图. 从图 4(a) 可看出, 当激光强度一定时, 峰值能量 E_p 随靶密度的增大而减小; 当靶密度固定时, 峰值能量 E_p 随激光强度的增大而增大. 当激光强度与靶密度满足 $\frac{a^2}{n/n_c}$ 保持不变时,

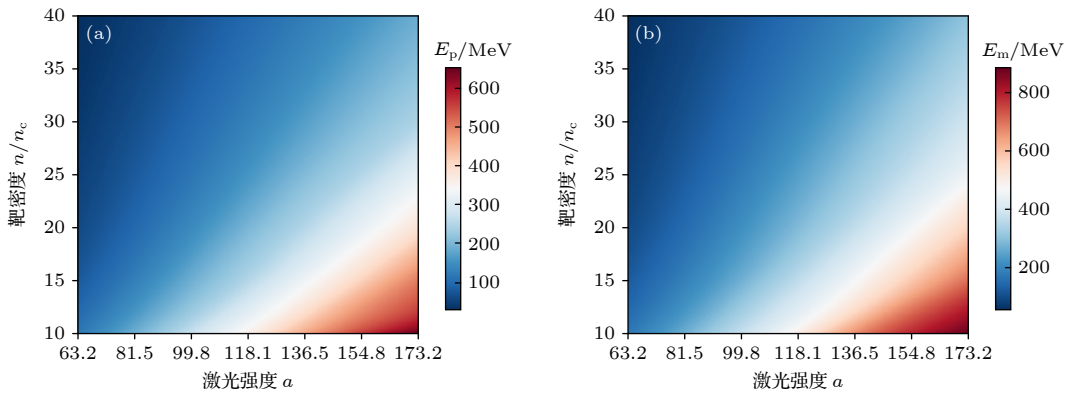


图 4 He^{2+} 离子 (a) 峰值能量 E_p 与 (b) 截止能量 E_m 的二维连续映射图, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 参数映射范围为 $63.2 \leq a \leq 173.2$ 和 $10n_c \leq n \leq 40n_c$

Fig. 4. Two-dimensional continuous mapping of peak energy E_p (a) and cutoff energy E_m (b) for He^{2+} over $63.2 \leq a \leq 173.2$ and $10n_c \leq n \leq 40n_c$ with $d = 15\lambda_0$.

离子峰值能量接近为定值, 峰值能量 E_p 映射结果与 (1) 式理论结果符合很好. 同时, 图 4(b) 给出的截止能量 E_m 随靶密度增大而减小, 随激光强度增大而增大, 与峰值能量 E_p 呈现出一致的映射规律.

图 5 为离子峰值能量代理模型关于单个输入参量的映射曲线和峰值能量理论曲线 (由 (1) 式给出) 的比照结果. 图 5(a) 给出了 He^{2+} 离子峰值能量随靶密度 n 变化的连续映射曲线, 训练参数取值范围为 $10n_c \leq n \leq 30n_c$, 预测参数取值范围为 $30n_c \leq n \leq 50n_c$. 由图 5(a) 所示, 训练参数取值范围内, 代理模型与理论曲线和测试集数据吻合程度相当好; 在预测参数取值范围内, 模型映射值与测试集数据偏差小于 10%, 模型的可靠性可以得到保证. 而当 $n > 50n_c$ 时, 模型映射值与理论值相差超

过 10%, 模型的可靠性不好, 所以这里没有给出映射结果. 若增大训练参数取值范围, 则可在更大范围内保证模型预测的可靠性.

图 5(b) 给出了 He^{2+} 离子峰值能量与激光强度 a 的模型连续映射曲线. 激光强度的训练参数取值范围为 $77.5 < a < 173.2$, 预测参数取值范围为 $63.2 < a < 77.5$, 模型映射曲线在所观测范围内与理论曲线保持了较好的吻合程度. 由于 HB-RPA 机制的参数限制, 在较低的激光强度下, 模拟结果将与理论出现偏差 [37], 而过高的激光强度将破坏离子相空间的振荡结构, 转为“不完全钻孔加速”机制 [38]. 因此, 这里未对激光强度在更大的范围内做外推预测. 图 5(c) 和图 5(d) 分别为 He^{2+} 离子峰值能量与靶厚 d 和离子质量 A 的模型映射曲线. 由

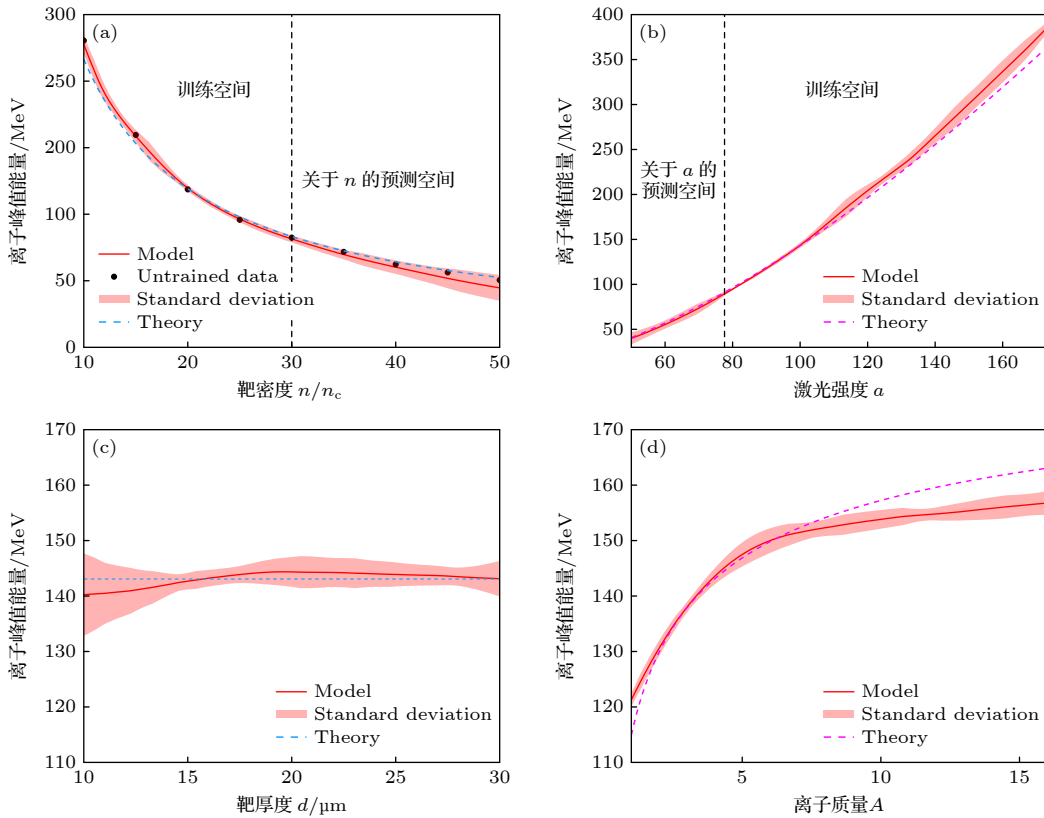


图 5 (a) He^{2+} 离子峰值能量 E_p 关于靶密度 n 的映射曲线, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 激光强度 $a = 100$; (b) He^{2+} 离子峰值能量 E_p 关于激光强度 a 的映射曲线, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 靶密度 $n = 20n_c$; (c) He^{2+} 离子峰值能量 E_p 关于靶厚 d 的映射曲线, 其中靶密度 $n = 20n_c$, 激光强度 $a = 100$; (d) 离子峰值能量 E_p 关于离子质量数 A 的映射曲线, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 靶密度 $n = 20n_c$, 激光强度 $a = 100$. 图中红色实线为代理模型的映射曲线, 模型标准差用红色色块填充于代理模型曲线两侧. 蓝色虚线给出的是根据 HB-RPA 机制理论公式所绘出的离子峰值能量随离子密度变化的曲线, 黑色实心数据点为测试集数据点, 参数取值范围与模型预测范围用黑色虚线分隔

Fig. 5. (a) Parameter scan of He^{2+} peak energy E_p over target density n with $d = 15\lambda_0$, $a = 100$; (b) parameter scan of He^{2+} peak energy E_p over laser intensity a with $d = 15\lambda_0$, $n = 20n_c$; (c) parameter scan of He^{2+} peak energy E_p over target thickness d with $a = 100$, $n = 20n_c$; (d) parameter scan of ion peak energy E_p over ion mass number A with $a = 100$, $n = 20n_c$ and $d = 15\lambda_0$. The SE mapping curves are drawn with red solid, the theoretical curves are drawn with dashed, the red filled region indicates the standard deviation, and the untrained data from test subset are drawn with black dot.

图 5(c) 可知, He^{2+} 离子峰值能量的代理模型映射值在观测范围内几乎不变. 根据 (1) 式, 离子峰值能量与靶厚度无明显依赖关系, 模型映射结果与理论基本一致. 由图 5(d) 可知, 离子质量较低时, 映射曲线与理论曲线吻合程度较好; 而在离子质量较高时, 映射曲线与理论曲线出现一定程度的偏差. 训练神经网络所使用的数据集源自 PIC 数值模拟结果, 能够很好地描述激光驱动离子加速过程中的相对论和非线性效应. 而理论公式是在辐射压与静电压达到动量平衡的理想稳态条件下得到的, 在实际加速条件下这种理想稳态有可能被破坏. 因此, 可认为代理模型的映射结果相比理论结果更符合实际加速情况, 需要结合数值模拟结果对 HB-RPA 机制中的峰值能量公式进行修正.

4.3 离子的峰值能量和截止能量

4.3.1 峰值能量修正

图 5(d) 展现出映射曲线与理论曲线存在偏差, 离子峰值能量在质量较低时略高于理论值, 而在质量较高时略低于理论值, 模型曲线与理论曲线于离子质量数 $A = 5$ 附近相交. 对比了更大范围的数值模拟结果与理论值, 发现这一偏差仍然存在. 结合代理模型所给出的模型和测试集所得模拟数据, 对原理论公式进行修正, 修正后的公式可描述离子质量对离子峰值能量的影响:

$$E'_p = m_i c^2 \left[\frac{2\xi}{1 + 2\sqrt{\xi}} \right] \times [1 + 0.001(5 - A)]^2, \quad (4)$$

式中, A 为离子质量数. 经过修正的模型曲线与测试集数据点对比如图 6 所示.

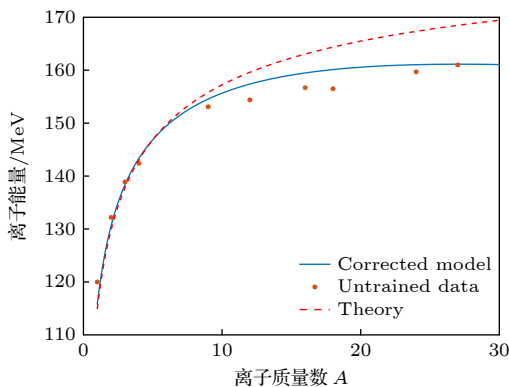


图 6 在 $d = 15\lambda_0$, $n = 20n_c$ 和 $a = 100$ 下, 离子峰值能量随离子质量的变化

Fig. 6. Ion peak energy scan with ion mass number A with $d = 15\lambda_0$, $n = 20n_c$ and $a = 100$.

如图 6 所示, 当质量数 $A > 5$ 时, 数值模拟结果与理论曲线开始出现偏移. 当质量数 $A > 10$ 时, 模拟结果与理论结果差异逐渐增大, 误差率接近 10% 左右. 当采用基于离子质量数的修正公式时, 理论结果与数值模拟结果及模型映射结果符合很好. 对于质量数 $A > 30$ 的中高 Z 离子, 其较为复杂的电离过程将对离子的加速过程产生影响. 在电离度较低的情况下, 重离子将滞后于电子被推动形成的钻孔活塞结构, 此时 HB-RPA 模型不再适用, 离子峰值能量将显著低于理论值^[21]. 因此, 这里基于映射结果给出的修正模型仅适用于 $A < 30$ 的靶材料. 在质量数 $A > 30$ 时, 需增大数据集的质量数取值范围, 并考虑靶材料的离化过程对加速过程的影响.

4.3.2 截止能量映射

当离子截止能量作为目标参量时, 重复与离子峰值能量相同的训练和扫参操作, 可以得到连续映射曲线, 如图 7 所示.

图 7 给出了 He^{2+} 离子的截止能量关于靶密度 n 、激光强度、靶厚和离子质量的映射关系. 结果表明, 离子截止能量随 n 的增大而减小, 随激光强度的增强和离子质量的增大而上升, 而与靶厚无明显关联. 离子截止能量的映射结果与离子峰值能量的映射结果呈现出一致的单调性变化规律. 因此, 将结合离子峰值能量 E_p 与离子截止能量 E_m 的比值映射模型给出 HB-RPA 机制下离子截止能量的经验公式.

4.3.3 能量比值关系

将每组模拟截止能量 E_m 和峰值能量 E_p 的比值记为 $k = E_m/E_p$. 将 k 作为建模参量, 神经网络结构与超参数设置均与训练 E_p 和 E_m 时保持一致, 损失函数阈值设为 2×10^{-4} , 重复与 E_p , E_m 类似的训练和代理模型加权平均操作, 得到 k 关于不同输入参量的映射模型.

图 8 为质子、 He^{2+} 、 C^{6+} 、 O^{8+} 四种离子的截止能量 E_m 与峰值能量 E_p 的比值 k 的二维连续映射图. 由图 8(a) 所示, 质子的能量比值 k 随靶密度 n 增大而增大, 随激光强度 a 增大而减小, k 值在较小范围内缓慢变化且近似均匀. 在 $a < 90$, $n > 25n_c$ 的部分区域, k 变化幅度增大, 呈现出一定非线性变化趋势. 图 8(b)—(d) 显示, 其他 3 种离子的 k

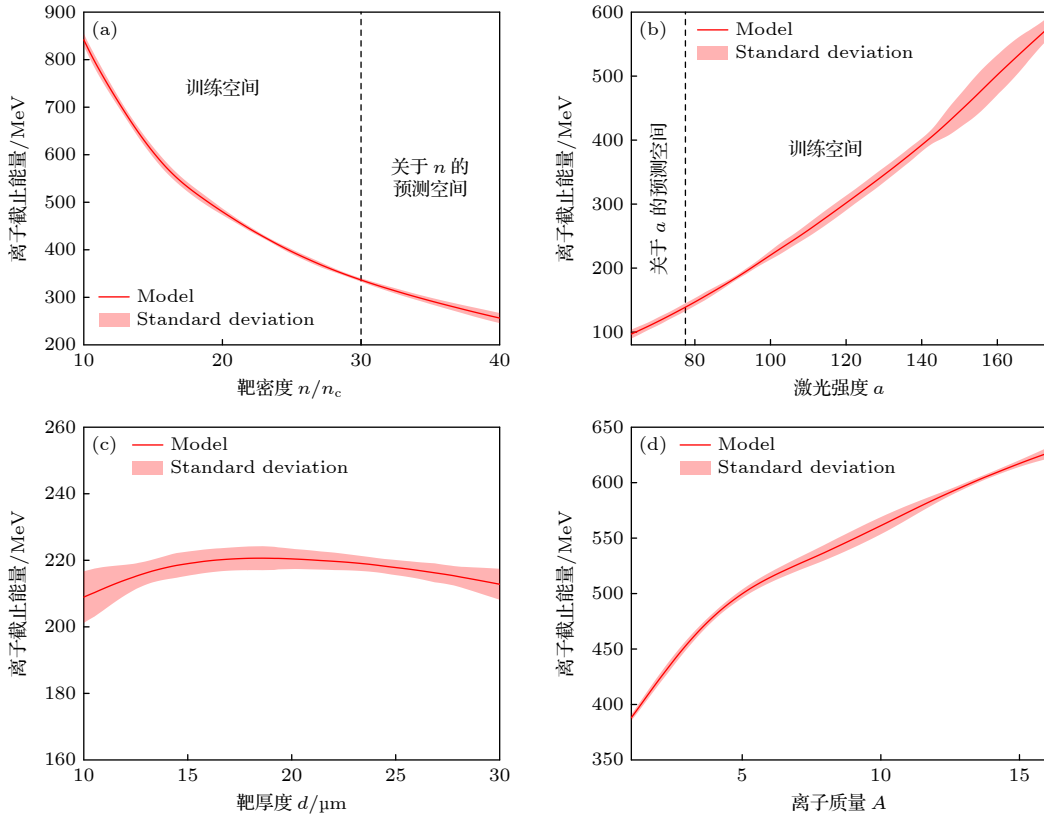


图 7 (a) He^{2+} 离子截止能量 E_m 关于靶密度 n 的映射曲线, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 激光强度 $a = 100$; (b) He^{2+} 离子截止能量 E_m 关于激光强度 a 的映射曲线, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 靶密度 $n = 20n_c$; (c) He^{2+} 离子截止能量 E_m 关于靶厚 d 的映射曲线, 其中靶密度 $n = 20n_c$, 激光强度 $a = 100$; (d) 离子截止能量 E_m 关于离子质量数 A 的映射曲线, 其中靶厚 $d = 15\lambda_0$, 靶密度 $n = 20n_c$, 激光强度 $a = 100$

Fig. 7. (a) Parameter scan of He^{2+} cutoff energy E_m over target density n with $d = 15\lambda_0$, $a = 100$; (b) parameter scan of He^{2+} cutoff energy E_m over laser intensity a with $d = 15\lambda_0$, $n = 20n_c$; (c) parameter scan of He^{2+} cutoff energy E_m over target thickness d with $a = 100$, $n = 20n_c$; (d) parameter scan of ion cutoff energy E_m over ion mass number A with $a = 100$, $n = 20n_c$ and $d = 15\lambda_0$.

值变化趋势与质子相同, 且 k 值的变化范围随离子质量数 A 的增大而增大.

图 9 为能量比值 k 随激光强度和靶密度变化的映射曲线. 图 9(a) 显示, k 随着激光强度 a 的增大近似以线性规律减小, 其斜率随靶密度增大而增大. 图 9(b) 显示, 当 $n < 25n_c$ 时, k 随着靶密度 n 的增大而近似线性增大; 当靶密度 $n > 25n_c$ 时, k 的上升幅度显著变大, 呈现非线性变化趋势. 前面图 1 中关于离子相空间的分析已给出: 峰值能量对应的离子主要在电荷分离场的峰值区域内被加速;

而截止能量对应的离子先被电荷分离场的上升沿预加速, 再进入峰值区域被加速, 所以具有更高的能量. 当激光强度较大或靶密度较低时, 电荷分离场峰值强度增加, 导致离子峰值能量增大, 截止能量与峰值能量差距减小. 当激光强度较小或靶密度较高时, 电荷分离场峰值强度降低, 离子受电荷分离场上升沿加速所获得的能量占比增大, 导致截止能量与峰值能量差距增大. 综合上述映射模型特征和物理过程分析, 给出了能量比值 k 关于输入参量的拟合公式:

$$k = \begin{cases} -2.0625 \times 10^{-3} a [1 + 0.02A + 0.1667(n/n_c)] \\ + 0.01389(n/n_c) + 0.01A + 1.62 & (n < 25n_c), \\ -2.0625 \times 10^{-3} a [1 + 0.02A + 0.0278(n/n_c - 21.127)^2] \\ + 5.787 \times 10^{-8} (n/n_c - 2.3207)^5 + 0.01A + 1.62 & (n > 25n_c). \end{cases} \quad (5)$$

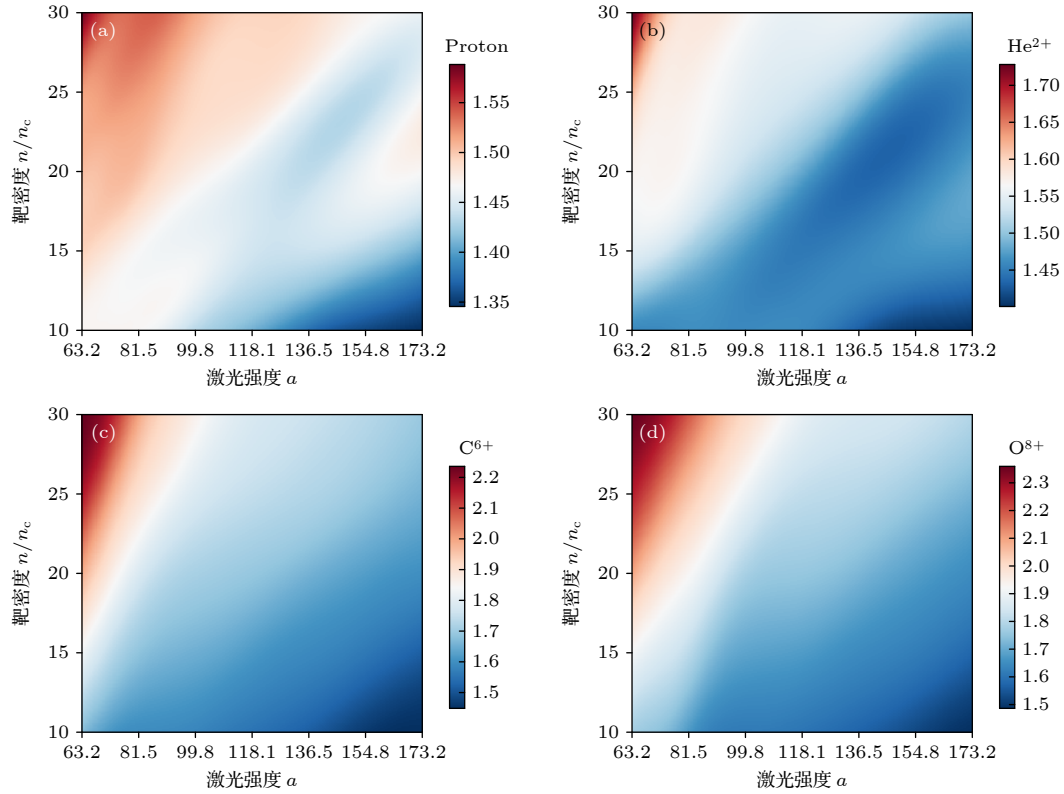


图 8 (a) 质子, (b) He^{2+} , (c) C^{6+} 和 (d) O^{8+} 的能量比值 $k = E_m/E_p$ 的二维连续映射图, 其中靶厚 $d = 20\lambda_0$, 参数映射范围为 $63.2 \leq a \leq 173.2$ 和 $10n_c \leq n \leq 30n_c$

Fig. 8. Two-dimensional continuous mapping of $k = E_m/E_p$ over $63.2 \leq a \leq 173.2$ and $10n_c \leq n \leq 30n_c$ with $d = 20\lambda_0$: (a) Proton case; (b) He^{2+} ; (c) C^{6+} ; (d) O^{8+} .

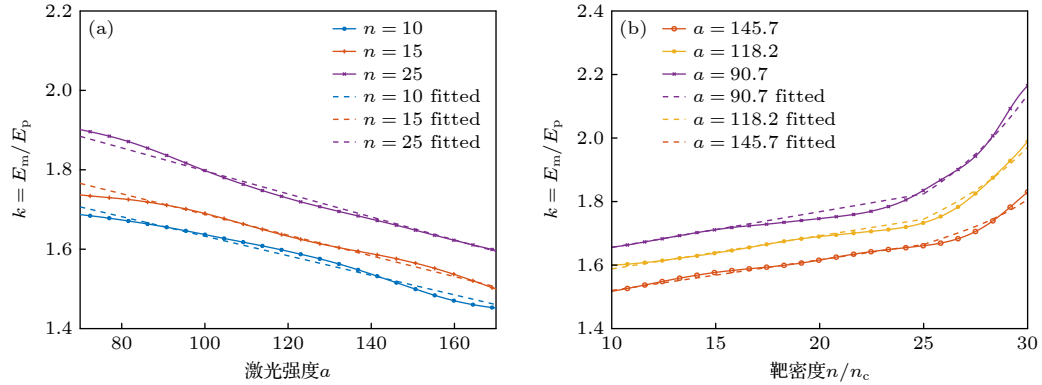


图 9 C^{6+} 离子能量比值 k 随 (a) 激光强度和 (b) 靶密度的映射曲线 (实线) 和拟合公式结果 (虚线), 其中参数范围分别为 $63.2 \leq a \leq 173.2$, $10n_c \leq n \leq 30n_c$, 靶厚 $d = 15\lambda_0$

Fig. 9. Parameter scan (solid) and fitted formula (dashed) of k over (a) $63.2 \leq a \leq 173.2$ and (b) $10n_c \leq n \leq 30n_c$ for C^{6+} with $d = 15\lambda_0$.

在 $n < 25n_c$ 时, (5) 式中第 1 项描述了 k 关于激光强度 a 的线性变化趋势, 以及靶密度 n 和离子质量数 A 对激光强度映射的影响; 第 2 项和第 3 项反映了靶密度 n 和离子质量数 A 对 k 值整体取值分布的影响. $n > 25n_c$ 时, 第 1 项与第 2 项中靶密度 n 增加了高次项, 描述了在较大密度下能量比值关于 n 变化的非线性趋势, 此时上升幅度增大. 离

子截止能量 E_m 可以由下式给出:

$$E_m = k \cdot E'_p, \quad (6)$$

其中, E'_p 为修正后的离子峰值能量.

5 结论与展望

本文基于 FCNN 算法对粒子模拟所生成的数

数据集展开了分析,建立了 HB-RPA 机制下离子峰值能量和截止能量关于激光强度、靶密度、靶厚度和离子质量的连续映射模型. 该模型在与测试集数据和理论公式的比对中表现良好,且具有一定参数范围内的预测能力. 研究发现,当离子质量数较大时,HB-RPA 机制下的峰值能量公式与数值模拟结果存在差异. 基于映射模型和数值模拟结果,给出了离子峰值能量的修正公式和离子截止能量的经验公式. 在基于 HB-RPA 的激光加速离子实验设计中,我们的映射模型和经验公式可为激光和靶参数的选取提供重要参考. 本工作也可以拓展到更多样化的目标参量,对离子束产额、单能性和准直度等束流品质进行分析.

参考文献

- [1] Roth M, Cowan T E, Key M H, et al. 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 436
- [2] Fernandez J C, Honrubia J J, Albright B J, Flippo K A, Gautier D C, Hegelich B M, Schmitt M J, Temporal M, Yin L 2009 *Nucl. Fusion* **49** 065004
- [3] Roth M, Jung D, Falk K, et al. 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 044802.
- [4] Jiang X R, Shao F Q, Zou D B, Yu M Y, Hu L X, Guo X Y, Huang T W, Zhang H, Wu S Z, Zhang G B 2020 *Nucl. Fusion* **60** 076019
- [5] Patel P K, Mackinnon A J, Key M H, Cowan T E, Foord M E, Allen M, Price D F, Ruhl H, Springer P T, Stephens R 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 125004
- [6] Mancic A, Levy A, Harmand M, Nakatsutsumi M, Antici P, Audebert P, Combis P, Fourmaux S, Mazevet S, Peyrusse O, Recoules V, Renaudin P, Robiche J, Dorchie F, Fuchs J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 035002
- [7] Pelka A, Gregori G, Gericke D O, et al. 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 265701
- [8] Faenov A Y, Pikuz T A, Fukuda Y, et al. 2009 *JETP Lett.* **89** 485
- [9] Faenov A Y, Pikuz T A, Fukuda Y, et al. 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 101107
- [10] Esirkepov T, Borghesi M, Bulanov S V, Mourou G, Tajima T 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 175003
- [11] Pegoraro F, Bulanov S V. 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 065002
- [12] Snavely R A, Key M H, Hatchett S P, et al. 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 2945
- [13] Mackinnon A J, Borghesi M, Hatchett S, Key M H, Patel P K, Campbell H, Schiavi A, Snavely R, Wilks S C, Willi O 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1769
- [14] Yin L, Albright B J, Hegelich B M 2006 *Laser Part. Beams* **24** 291
- [15] Yin L, Albright B J, Hegelich B M, Bowers K J, Flippo K A, Kwan T J T, Fernández J C 2007 *Phys. Plasmas* **14** 056706
- [16] Silva L O, Marti M, Davies J R, Fonseca R A, Ren C, Tsung F S, Mori W B 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 015002
- [17] Chen M, Sheng Z M, Dong Q L, He M, Li Y T, Bari M A, Zhang J 2007 *Phys. Plasmas* **14** 053102
- [18] Simmons J F L, McInnes C R 1993 *Am. J. Phys.* **61** 205
- [19] Macchi A, Veghini S, Pegoraro F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 085003
- [20] Robinson A P L, Gibbon P, Zepf M, Kar S, Evans R G, Bellei C 2009 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **51** 024004
- [21] Robinson A P L, Kwon D H, Lancaster K 2009 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **51** 095006
- [22] Yan X Q, Lin C, Sheng Z M, Guo Z Y, Liu B C, Lu Y R, Fang Y R, Fang J X 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 135003
- [23] Kar S, Kakolee K F, Qiao B, et al. 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 185006
- [24] Nishiuchi M, Dover N P, Hata M, Sakaki H, Kondo K, Lowe H F, Miyahara T, Kiriya H, Koga J K, Iwata N, Alkhimova M A, Pirozhkov A S, Faenov A Y, Pikuz T A, Sagisaka A, Watanabe Y, Kando M, Kondo K, Ditter E J, Ettliger O C, Hicks G S, Najmudin Z, Ziegler T, Zeil K, Schramm U, Sentoku Y 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033081
- [25] LeCun Y, Bengio, Hinton G 2015 *Nature* **521** 436
- [26] Abadi M, Agarwal A, Barham P, et al. 2016 *arXiv:1603.04467 [cs.DC]*
- [27] Degraeve J, Felici F, Buchli J, et al. 2022 *Nature* **602** 414
- [28] Nakhleh J B, Fernandez G M G, Grosskopf M J, Wilson B M, Kline J, Srinivasan G 2021 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **49** 2238
- [29] Volkova T M, Nerush E N, Kostyukov I Y 2021 *Quantum Electron.* **51** 854
- [30] Miyatake T, Shiokawa K, Sakaki H, Dover N P, Nishiuchi M, Lowe H F, Kondo K, Kon A, Kando M, Kondo K, Watanabe Y 2021 *Nucl. Instrum. Methods in Phys. Res. Sect. A* **999** 165227
- [31] Emma C, Edelen A, Hogan M J, Shea B O, White G, Yakimenko V 2018 *Phys. Rev. Accel. Beams* **21** 112802
- [32] Djordjević B Z, Kemp A J, J Kim 2021 *Phys. Plasmas* **28** 043105
- [33] Djordjević B Z, Kemp A J, J Kim Ludwig J, Simpson R A, Wilks S C, Ma T, Mariscal D A 2021 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **63** 094005
- [34] Qiao B, Zepf M, Borghesi M, Dromey B, Geissler M, Karmakar A, Gibbon P 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 155002
- [35] Arber T D, Bennett K, Brady C S, Lawrence D A, Ramsay M G, Sircombe N J, Gillies P, Evans R G, Schmitz H, Bell A R, Ridgers C P 2015 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **57** 113001
- [36] Zhou Z H, Wu J X, Tang W 2002 *Artif. Intell.* **137** 239
- [37] Robinson A P L 2011 *Phys. Plasmas* **18** 056701
- [38] Weng S M, Murakami M, Mulser P, Sheng Z M 2012 *New J. Phys.* **14** 063026

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Modeling of ion accelerated by borehole radiation pressure based on deep learning^{*}

Zhang Pu-Du¹⁾ Wang Wei-Quan^{1)†} Li Zhe-Min²⁾ Zhang Zi-Xuan¹⁾
 Wang Ye-Chen¹⁾ Zhou Hong-Yu¹⁾ Yin Yan^{1)‡}

1) (*Department of Physics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Department of Mathematics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 29 April 2023; revised manuscript received 31 May 2023)

Abstract

Laser-driven ion acceleration has potential applications in high energy density matter, ion beam-driven fast ignition, beam target neutron source, warm dense matter heating, etc. Ultrashort relativistic laser interacting with solid target can generate ion beam with several hundreds of MeV in energy, and the quality of the ion beam depends strongly on the interaction parameters between the laser and the target. Development in deep learning can provide new method of analyzing the relationship between parameters in physics system, which can significantly reduce the computational and experimental cost. In this paper, a continuous mapping model of ion peak and cutoff energy is developed based on a fully connected neural network (FCNN). In the model, the dataset is composed of nearly 400 sets of particle simulations of laser-driven solid targets, and the input parameters are laser intensity, target density, target thickness, and ion mass. The model uses sparse parameter values to obtain the analysis results in a large range of parameters, which greatly reduces the computational amount of multi-dimensional parameters sweeping in a wide range. Based on the results of this model mapping, the correction formula for the ion peak energy is obtained. Furthermore, the ratio of ion cutoff energy to peak energy of each set of particle simulation is calculated. Repeating the same training process of ion peak energy and cutoff energy, the continuous mapping model of energy ratio is developed. According to the energy ratio model mapping results, the quantitative description of the relationship between ion cutoff energy and peak energy is realized, and the fitting formula for the cutoff energy of the hole-boring radiation pressure acceleration (HB-RPA) mechanism is obtained, which can provide an important reference for designing the laser-driven ion acceleration experiments.

Keywords: laser-driven ion acceleration, neural Networks

PACS: 41.75.Jv, 87.85.dq

DOI: [10.7498/aps.72.20230702](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230702)

^{*} Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12005298), the “Ye Qisun” Science Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U2241281), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2022JJ30656), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2021JJ40661), and the Research Programm of NUDT (Grant No. ZK 19-25).

[†] Corresponding author. E-mail: weiquan.wang@nudt.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: yyin@nudt.edu.cn



基于深度学习的钻孔辐射压离子加速建模

张普渡 王伟权 李哲民 张资旋 王叶晨 周泓宇 银燕

Modeling of ion accelerated by borehole radiation pressure based on deep learning

Zhang Pu-Du Wang Wei-Quan Li Zhe-Min Zhang Zi-Xuan Wang Ye-Chen Zhou Hong-Yu Yin Yan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 184103 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230702

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230702>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

激光加速高能质子实验研究进展及新加速方案

Experimental progress of laser-driven high-energy proton acceleration and new acceleration schemes

物理学报. 2021, 70(8): 084102 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202115>

基于物理信息神经网络的光斑质心计算

Calculation of spot centroid based on physical informed neural networks

物理学报. 2022, 71(20): 200601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220670>

识别Z玻色子喷注的卷积神经网络方法

Tag Z boson jets via convolutional neural networks

物理学报. 2021, 70(6): 061301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201557>

利用神经网络识别高分子链在表面的吸附相变

Recognition of adsorption phase transition of polymer on surface by neural network

物理学报. 2019, 68(20): 200701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190643>

基于深度学习的光学表面杂质检测

Deep-learning-assisted micro impurity detection on an optical surface

物理学报. 2021, 70(16): 168702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210403>

长短脉冲联合驱动双层结构靶优化伽马射线的产生

Gamma-ray generation optimized by long and short pulses jointly driving double-layer target

物理学报. 2022, 71(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212042>

国防科技大学建校 70 周年专题

双束对射激光驱动超薄靶的超短脉冲中子源*

冯凯源¹⁾ 邵福球¹⁾ 蒋祥瑞¹⁾ 邹德滨^{1)†} 胡理想¹⁾
张国博²⁾ 杨晓虎²⁾ 银燕¹⁾ 马燕云³⁾ 余同普¹⁾

1) (国防科技大学理学院物理系, 长沙 410073)

2) (国防科技大学理学院核科学与技术系, 长沙 410073)

3) (国防科技大学前沿交叉学科学院第一学科交叉中心, 长沙 410073)

(2023 年 4 月 30 日收到; 2023 年 6 月 9 日收到修改稿)

使用粒子模拟程序和蒙特卡罗方法研究了双束对射圆极化激光与超薄氘靶相互作用中氘氘聚变反应产生中子的过程. 研究发现, 由于净光压和横向不稳定性发展的差异, 激光电场矢量旋转方向和初始相对相位差对氘靶压缩及中子特性有重要影响. 选择相对相位差为 0 且电场矢量旋转方向相同的双束光, 可获得最高的中子产额; 而采用相对相位差为 0.5π 或 1.5π 且电场矢量旋转方向不同的对射光, 中子具有定向的空间分布. 对于强度为 1.23×10^{21} W/cm²、脉宽为 33 fs、相对相位差为 0.5π 的左旋光和右旋光, 可获得产额为 8.5×10^4 n、强度为 1.2×10^{19} n/s、脉宽为 23 fs、前冲性较好且分布可调谐的脉冲中子源.

关键词: 双束对射圆极化激光, 相对相位差, 电场矢量旋转方向, 脉冲中子源**PACS:** 52.38.-r, 29.25.Dz, 52.27.Ny, 52.65.Pp**DOI:** 10.7498/aps.72.20230706

1 引言

中子呈电中性, 具有穿透性强的特点, 是研究物质结构和动力学性质的理想探针. 常用的中子源包括同位素中子源、中子管中子源、加速器中子源、反应堆中子源和散裂中子源等. 散裂中子源是新一代的脉冲式高通量白光中子源, 通量高达 10^{17} n·cm⁻²·s⁻¹ 量级, 脉宽可短至百 ns 量级^[1], 成为物理、化学、生物、材料以及能源研究等基础科学研究的重要科学平台. 为了实现更高的时空分辨, 研究人员仍然在不断探寻更高通量、更短脉宽的中子源.

强激光驱动的中子源是伴随超强超短激光技术发展起来的新型中子源技术, 具有焦斑小、脉

宽短和峰值通量高等优点, 在中子照相、材料无损分析、核截面测量以及核合成等研究领域展现出重要的应用价值^[2-6]. 针对不同的激光和靶条件, 研究人员已提出多种强激光驱动中子源方案, 包括聚变中子源^[7-11]、团簇中子源^[12,13]、束靶中子源^[14-17]和光核中子源^[18-24]等. 目前, 依托这些方案实验证实已可获得脉宽短至 ns 甚至几十 ps 的高通量中子源^[25]. 为产生脉宽更短、强度更高的中子源, 沈百飞等^[26]和张晓梅等^[27]结合一维动力学稳态模型, 提出了双束对射飞秒激光驱动超薄靶的短脉冲中子源方案^[23]及其基于预形成通道的改进模型^[27]. 随后, Macchi^[28]利用一维数值模拟证实这种构型获得的高能量密度离子束通过碰撞可产生脉宽短至 fs 量级、产额约 10^3 n/J 的聚变中子源. 然而, 以上研究仅限于一维情况, 无法考虑横向不

* 国家自然科学基金 (批准号: 12175310, 12275356, U22411281)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2022JJ20042)、国防科技大学青年创新奖一等奖配套项目 (批准号: 20190102) 和湖南省研究生科研创新项目 (批准号: CX20210006) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: debinzou@nudt.edu.cn

稳定性等高维效应的影响^[26]. 近来, 胡理想等^[29]研究了二维情况下基于双锥构型的激光氘离子加速及中子产生过程, 发现锥形通道实现激光脉冲的有效导引、聚焦和强度放大, 大幅提升了氘离子的能量密度和中子体产生率. 不过该方案中锥顶直径仅 1 个激光波长, 与超薄靶横向不稳定性发展的特征空间尺度相当^[30–32], 所以并未观察到横向不稳定性对靶压缩过程及中子产生的影响.

本文采用粒子模拟方法和蒙特卡罗方法, 研究了二维环境下双束圆极化激光压缩氘靶并通过氘核反应产生中子的细致物理过程, 模拟发现, 由于激光净光压和横向不稳定性发展的差异, 激光电场矢量旋转方向和初始相对相位差对于氘 (D^+) 离子的能谱、空间分布产生较大影响. 相同激光强度下, 通过调整激光电场矢量旋转方向和相对相位差可以实现中子产额和空间分布的调控. 使用强度为 1.23×10^{21} W/cm²、脉宽为 33 fs、相对相位差为 0.5π 的左旋光和右旋光, 获得了产额为 8.5×10^4 n、强度为 1.2×10^{19} n/s、脉宽为 23 fs、前冲性较好且分布可调谐的脉冲中子源.

2 数值模拟与参数设置

2.1 激光与氘靶相互作用模拟

通过使用二维粒子模拟 (particle-in-cell, PIC) 程序 EPOCH^[33] 对激光与氘靶相互作用动力学进行数值模拟. 设置模拟盒子 x 方向的长度为 $36 \mu\text{m}$, y 方向的高度为 $24 \mu\text{m}$, 空间分辨率为 $0.02 \mu\text{m}$, 每个网格放置 100 个粒子. 氘靶位于模拟盒子的中

央, 其高度 $h = 24 \mu\text{m}$, 厚度 $d = 0.1 \mu\text{m}$, 靶前表面距离模拟盒子左边界长度 $d_1 = 17.95 \mu\text{m}$. 氘靶是由完全电离的氘等离子体所组成, 氘 (D^+) 离子和电子的数密度均为 $50n_c$, 其中 $n_c = m_e\omega_0^2/4\pi e^2$ 是等离子体的临界密度, ω_0 是激光频率, e 和 m_e 分别是电子电荷和静止质量. 两束波长为 $\lambda_0 = 1 \mu\text{m}$ 的圆极化激光从模拟盒左右边界沿 x 轴方向垂直入射, 同时到达氘靶前后表面. 两束激光的归一化振幅可表示为

$$\mathbf{a} = a_0 \sin^2(\pi t/2\tau_L) \exp(-r^2/\sigma_L^2) \times [(\sin \phi) \hat{e}_y \pm (\cos \phi) \hat{e}_z], \quad (1)$$

式中 $a_0 = eE_0/(m_e\omega_L c) = 15\sqrt{2}$, E_0 为激光最大电场幅值, ω_L 为激光角频率, c 为在真空中的光速; 激光焦斑半径 $\sigma_L = 6 \mu\text{m}$, 脉宽 $\tau_L = 10T_0$, 其中激光周期 $T_0 = 3.3$ fs; “ \pm ”号分别代表圆极化激光的左旋和右旋; ϕ 代表激光的相位. 对于相位为 ϕ_1 和 ϕ_2 的双束激光, 初始相对相位差由 $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$ 给出. 图 1 展示了 $\Delta\phi = 0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$ 时左旋 (LCP, 激光电场矢量 \mathbf{E}_r 沿 x 方向顺时针旋转) 和右旋 (RCP, 激光电场矢量 \mathbf{E}_r 沿 $-x$ 方向逆时针旋转) 圆极化激光与氘靶相互作用示意图, 其中 \mathbf{k} 代表坡印亭矢量.

2.2 中子产生模拟

当双束圆极化激光与超薄氘靶相互作用时, 氘离子在靶压缩过程中将会发生碰撞, 从而诱发 $D(d, n)^3\text{He}$ 核反应产生大量中子. 本文使用课题组开发的蒙特卡罗后处理程序 PICNP^[16,29] 模拟中子

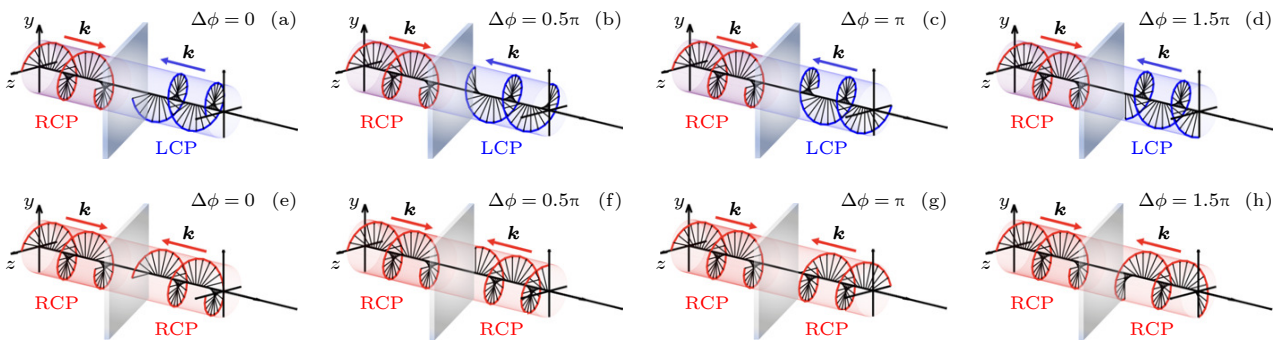


图 1 双束对射圆极化激光与超薄氘靶相互作用示意图, 其中红色曲线包络代表右旋光, 蓝色曲线包络代表左旋光, \mathbf{k} 代表坡印亭矢量 (a)–(d) 代表一束右旋光与一束左旋光的情况 (RCP+LCP); (e)–(h) 代表两束右旋光的情况 (RCP+RCP), 从左至右初始相对相位差 $\Delta\phi$ 依次为 $0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$

Fig. 1. Schematic diagram of two counter-propagating circularly polarized laser pulses interacting with ultrathin deuterium target: (a)–(d) The cases of a left-rotating light and a right-rotating light (RCP+LCP); (e)–(h) the cases of two right-rotating light (RCP+RCP). From left to right, the initial relative phase difference $\Delta\phi$ is $0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$, respectively. Here, red and blue curves represent the right- and left-rotating light and \mathbf{k} is Poynting vector.

产生过程. 程序每间隔一段时间 (本文选择 1 个激光周期) 从 PIC 模拟数据中获取离子位置和速度信息, 根据位置分配到不同网格, 然后对每个网格内离子进行随机抽样并两两配对, 计算得到每对离子对产生中子的信息^[16,34]. 通过核反应产生中子是一个随机过程, 网格内不同氦离子之间发生核反应产生中子的概率不尽相同, 因此程序中采用随机抽样来计算中子产率, 然后进行统计平均获得中子产额等信息, 这也是当前蒙特卡罗程序在模拟中子产生过程时普遍采用的思想. 以 $D(d, n)^3\text{He}$ 核反应为例, 利用 PIC 程序中输出的 D^+ 离子速度 \mathbf{v}_1 和 \mathbf{v}_2 , 可以求出 D^+ 碰撞离子的相对速度 $v = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ 、碰撞中心的质量能 $\varepsilon_r = m_r v^2/2$, 以及参量 $\eta = (M_n + M_{\text{He}}) \cdot (M_{\text{He}} - M_D + M_{\text{He}}Q/\varepsilon_r)/(M_D M_n)$, 式中 M_D 为氘核质量. 以角度 θ_n (相对于氦氘碰撞方向) 出射的中子的能量为^[16,35,36]

$$\varepsilon_n = \frac{M_D M_n}{(M_n + M_{\text{He}})^2} \varepsilon_r \left(\sqrt{\eta + \cos^2 \theta_n} + \cos \theta_n \right)^2, \quad (2)$$

其中 $m_r = m_D m_D / (m_D + m_D) = m_D/2$ 是约化质量; m_D , M_n 和 M_{He} 分别是 D^+ 离子、中子和氦核质量, $Q = 3.266 \text{ MeV}$ 是反应能. 通过对微分反应截面进行插值, 得到每个碰撞能 ε_n 与微分截面的映射关系, 这样就可通过 $\sigma = \int (d\sigma/d\Omega) d\Omega$ 计算得到反应总截面 σ , 其中 $d\Omega$ 为立体角, $D(d, n)^3\text{He}$ 反应的微分截面 $d\sigma/d\Omega$ 可通过数据库查询^[37]. 每个网格对应的中子体产生率为 $R_n = n_D^2 \sigma v/2$, 式中 n_D 为氦离子密度, 再对网格体积进行积分得到中子产生率 $P_n = \int R_n dV$, 中子产额也可以通过 $N_n = \int P_n dt$ 计算得到. 根据 (2) 式和微分截面数据也能得到中子的能量分布与角分布.

3 模拟结果与讨论

3.1 双束对射激光与氦靶相互作用动力学

图 2(a)–(h) 给出相对相位差 $\Delta\phi$ 和电场矢量 \mathbf{E}_r 旋转方向不同 (RCP+LCP) 情况下 PIC 模拟获得的 $t = 32T_0$ 时刻的电子和 D^+ 离子密度分布. 从图 2(a)–(h) 可以看到, 对于 \mathbf{E}_r 旋转方向不同的对射光, 当 $\Delta\phi = 0.5\pi$ 和 1.5π 时, 氦靶被明显地向右和向左推动, 而在 $\Delta\phi = \pi$ 时几乎在初始位置保持不动. 这是因为双束对射激光作用于薄靶时, 净

光压 P 可表示为^[26]

$$P = P_1 [\Delta\phi + P_2 \sin(\Delta\phi)], \quad (3)$$

其中 $P_1 (> 0)$ 和 $P_2 (> 0)$ 是由入射激光的强度、靶厚度和数密度确定的常数, 与 $\Delta\phi$ 无关. 当 $\Delta\phi = 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$ 时, P 将分别大于、等于或小于 0, 导致氦靶被向右推动、保持不动和被向左推动. 然而, 当 $\Delta\phi = 0$ 时, 尽管 $P = 0$, 但由于靶被压缩至与趋附深度相当的厚度时, 两束激光的透射光将会相互交叠而组合成一束线极化光, 其有质动力含有振荡项成分, $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$ 电子加热将起到主导作用, 横向不稳定性发展迅速^[38,39], 靶遭到破坏且其中心区域呈现典型的半波长横向周期分布. 对于电场旋转方向相同的对射光 (即 RCP+RCP 情况), 电子和离子密度如图 2(i)–(p) 所示. 这里仅给出两束右旋光情况, 两束左旋光情况与此类似. 该情形下并不存在电子的纵向速度消失时的稳态解, 薄靶受到两束激光的净光压恒为 0, 靶未发生左右移动而呈现细丝状的对称分布, 激光与薄靶相互作用将会呈现更强的非线性特性. 与上述情况类似, $\Delta\phi = 0$ 时横向不稳定性的发展最为剧烈, 而在 $\Delta\phi = \pi$ 时发展最为缓慢, 不稳定性的增长率与靶打穿后叠加的电场强度密切相关.

图 3 给出了双束对射激光与薄膜靶相互作用过程中 $t = 50T_0$ 时刻的电子和 D^+ 离子能谱分布, 此时激光等离子体相互作用已基本结束. 从图 3 可以看到, 对于 RCP+LCP 的情况, 由于在 $\Delta\phi = 0$ 时横向不稳定性的发展最为剧烈, 超热电子温度最高, D^+ 离子的加速也最为充分, 其 D^+ 离子截止能量可达 35.1 MeV, 从图 2(a) 和图 2(e) 可以明显观察到周期状的细丝结构, 且固体靶呈现出明显的向左运动的现象. 而对于另外三种情况, 净光压不同导致最终离子加速效果存在差异. 对于 RCP+RCP 时不存在稳态解的情况, 可以看到, 由于 $P \equiv 0$, $\Delta\phi = 0, 0.5\pi, 1.5\pi$ 时几乎呈现相同的电子能谱分布, 仅电子截止能量依次稍有降低, D^+ 离子温度和截止能量也呈现相同的下降趋势. 需要注意的是, $\Delta\phi = \pi$ 时的电子加热和离子加速效果低于其余三种情况, 这是由于横向不稳定性导致靶的破坏, 部分电子仅感受到电场矢量方向相反的等强度对射激光电场的作用, 如图 2(k) 所示, 电子加热效应被明显抑制, 电子和 D^+ 离子密度分布中的细丝结构几乎消失.

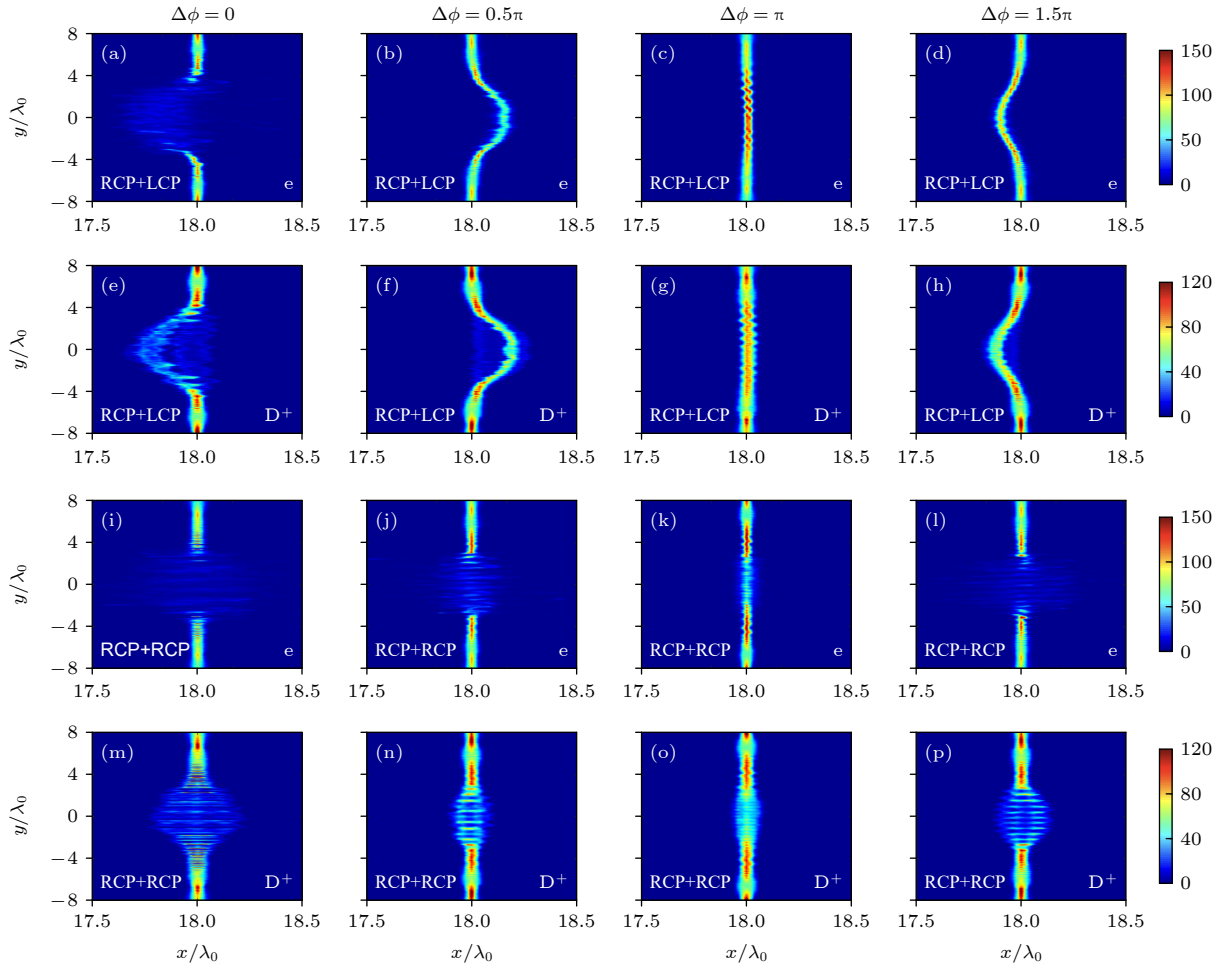


图 2 $t = 32T_0$ 时, 不同电场矢量 \mathbf{E}_r 旋转方向和不同初始相对相位差 ($\Delta\phi = 0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$) 情况下, 电子 ((a)—(d) 和 (i)—(l)) 和 D^+ 离子 ((e)—(h) 和 (m)—(p)) 的密度空间分布, 其中 (a)—(h) 和 (i)—(p) 分别代表 RCP+LCP 和 RCP+RCP 的情况

Fig. 2. Spatial distributions of both electrons ((a)—(d) and (i)—(l)) and ions ((e)—(h) and (m)—(p)) for different rotation direction of electric fields \mathbf{E}_r and initial relative phase ($\Delta\phi = 0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$) at $t = 32T_0$. Here, (a)—(h) and (i)—(p) represent the cases of RCP+LCP and RCP+RCP, respectively.

3.2 双束对射激光驱动的短脉冲中子源

(2) 式表明, 出射中子能量与核反应过程中 D^+ 离子的相对速度密切相关. 综合不同激光电场矢量旋转方向和初始相对相位差情况下的电子、 D^+ 离子的密度和能谱分布, 可以初步判断, 无论是 RCP+LCP 还是 RCP+RCP 情况, $\Delta\phi = 0$ 时中子的产额和能量最高. 虽然 $\Delta\phi = \pi$ 时 D^+ 离子能量较低, 然而由于该条件下净光压为 0, D^+ 离子的相对速度 $v = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ 较高且 D^+ 离子容易被压缩至更高的密度 n_D . 根据 $D(d, n)^3\text{He}$ 核反应的中子体产生率^[16]:

$$R_n \approx 2.72 \times 10^{-14} n_D^2 \frac{1 + 0.0054 T_D^{0.97}}{T_D^{2/3}} \exp\left(-\frac{19.8}{T_D^{1/3}}\right). \quad (4)$$

中子产额并非最低, 其中 T_D 是 D^+ 离子的温度. 考虑到 RCP+LCP 情况下 $\Delta\phi = 0.5\pi$ 和 1.5π 时 D^+ 离子

获得较稳定的加速, 前向与侧向的中子产额比可能最高, 这非常有利于提升峰值中子通量.

利用 PICNP 程序计算不同时刻的中子产生率 P_n 、中子产额 N_n 、角分布和能谱分布. 图 4(a)—(h) 给出不同 $\Delta\phi$ 情况下 $t = 32T_0$ 时中子产生率的空间分布. 与图 2 对比发现, 中子产生率分布与 D^+ 离子密度的空间分布保持较好一致性, RCP + RCP 情况下中子产生率呈现较好的对称性, 其中心区域出现周期性的结构, 而在 RCP+LCP 情况下 $\Delta\phi \neq \pi$ 时, 中子产生率均呈现非对称分布. 现统计 $t = 50T_0$ 时不同情况下中子的累计产额分布, 如图 4(i)—(p) 所示. 令人感兴趣的是, 对于 RCP+LCP 情况, $\Delta\phi = \pi/2$ 时几乎所有的中子都分布在右侧, 而 $\Delta\phi = 3\pi/2$ 时, 中子都集中在靶左侧. 因此, 可以通过调整对射激光电场矢量旋转方向和初始相对相位差实现中子空间分布的调控.

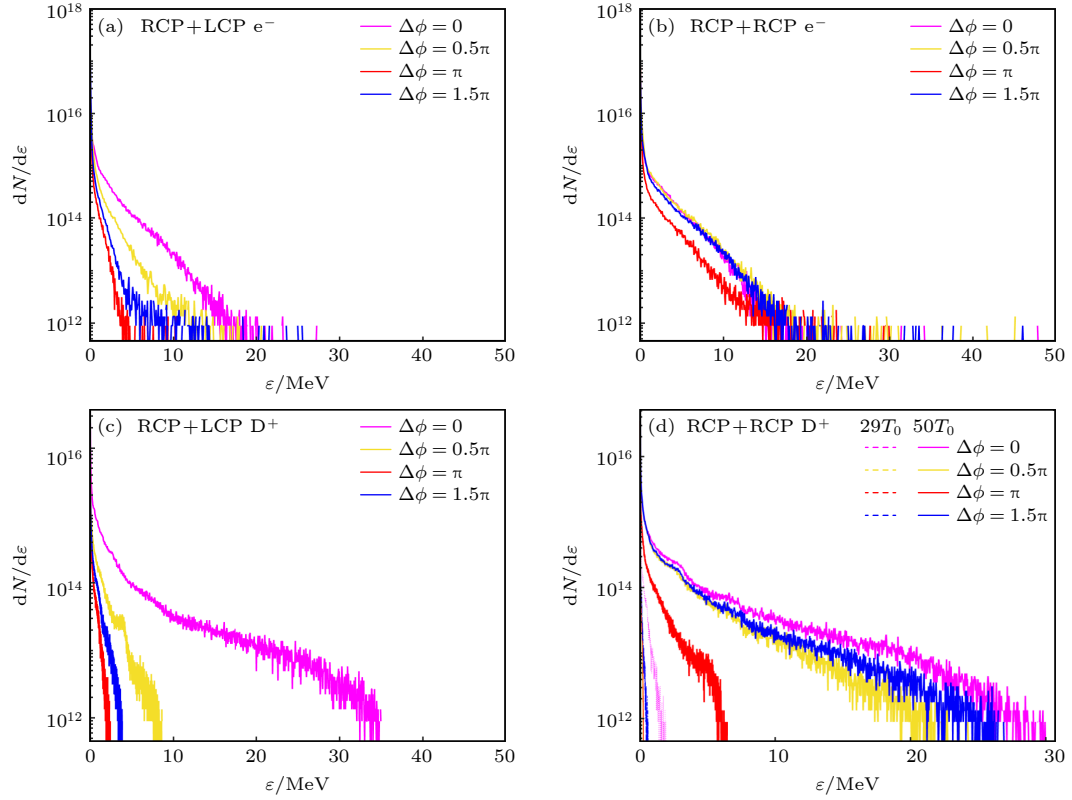


图 3 不同电场矢量 \mathbf{E}_r 旋转方向和不同初始相对相位差 ($\Delta\phi = 0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$) 情况下, $t = 50T_0$ 时电子 ((a), (b)) 和 D^+ 离子 ((c), (d)) 的能谱分布 (a), (c) RCP+LCP; (b), (d) RCP+RCP

Fig. 3. Spectral distributions of (a), (b) electrons and (c), (d) ions for the cases of different rotation direction of the electric fields \mathbf{E}_r of two counter-propagating laser pulses and their initial relative phase ($\Delta\phi = 0, 0.5\pi, \pi, 1.5\pi$) at $t = 50T_0$: (a), (c) RCP+LCP; (b), (d) RCP+RCP.

中子源的脉宽是衡量中子源品质的重要参量之一, 不同脉宽的中子源具有不同的应用价值. 图 5(a) 和图 5(b) 给出不同情况下 P_n 随时间的演化. 从图 5(a) 和图 5(b) 可以看到, P_n 随时间的演化趋势基本一致, 呈现明显的双峰结构. 原因在于, 在 $t = 25T_0$ 时, 在圆极化对射激光的光压作用下, 氘离子密度被压缩至最高且相对速度较大, 该阶段可认为是薄靶对称压缩阶段, 此时出现 P_n 的第一个峰值. 然而, 伴随着横向不稳定性的发展和靶的变形, n_D 开始降低. 在 $t = 30T_0$ 时, 由于薄靶两侧的净光压不再相等, 靶被继续向左推动, 激光焦斑区域内几乎所有的 D^+ 离子离开了靶初始所在区域, D^+ 离子能量不断提升. 由于 D^+ 离子平均能量 (即温度 T_D) 的提升, 根据方程 (4), 中子反应率也会逐渐提升. 在 $t = 32T_0$ 时刻后, D^+ 离子横向振荡的细丝结构已非常明显, $t = 35T_0$ 时薄靶几乎已被击穿. 此时 n_D 降低的幅度相对于 T_D 增加的幅度更大, 导致 P_n 再一次降低, 出现 P_n 的第二个峰值. 整体看来, 双束对射激光驱动中子源的脉宽约几十

fs, 相对于激光驱动的光核中子源和束靶中子源 [2,3] (通常在几十 ps 至百 ns 之间) 更短. 这是因此该方案不需要光核中子源和束靶中子源中的转换体, 不涉及电子束和离子束在转换体中传输时的时间展宽过程, 中子伴随着激光与等离子体相互作用或 D^+ 离子的加速同时产生. 如此短脉冲的中子源将具有更高的时间或能量分辨率, 在中子核数据测量等领域具有重要的应用潜力. 值得注意的是, 对于 RCP+RCP 时的 $\Delta\phi = 0$ 情况, P_n 的第二个峰值大于第一个峰值的大小, 最大的中子产生率达到 1.2×10^{19} n/s. 这是由于此时 D^+ 离子的温度约 1.1 MeV, 接近 DD 反应中 P_n 达到最大值时的最佳温度 1.25 MeV, 而其余几种情况下 D^+ 离子温度均低于 0.6 MeV.

图 5(c) 和图 5(d) 展示出不同情况下 N_n 随时间的演化. 与图 5(a) 和图 5(b) 一致, $t = 23T_0$ 时中子开始产生, $t = 35T_0$ 时激光与靶相互作用基本完毕后开始进入饱和状态 (此时, D^+ 离子不会立刻降温, 中子仍可继续产生, 只不过 P_n 相比于之前降低

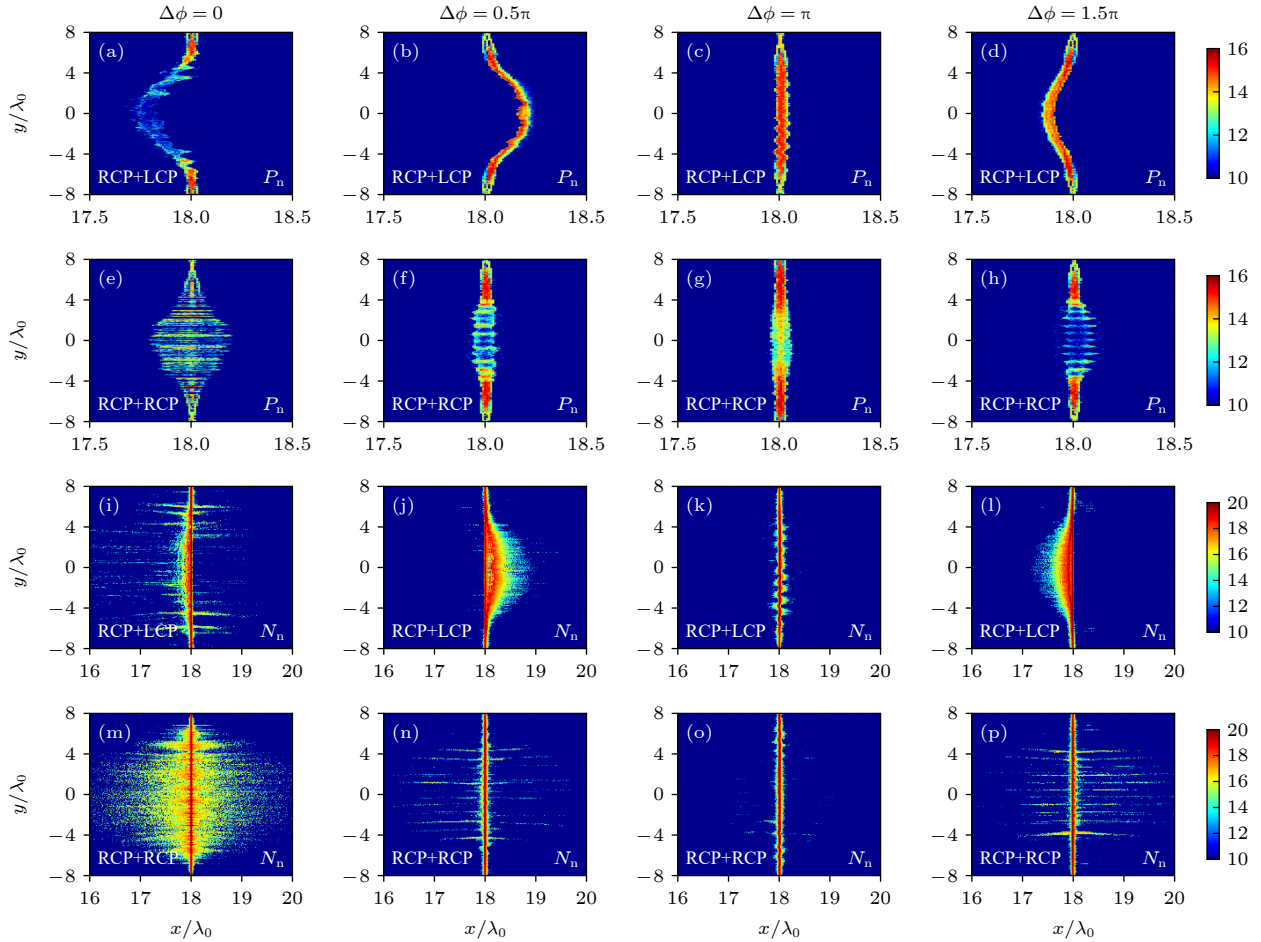


图 4 不同电场矢量 \mathbf{E}_r 旋转方向和不同初始相对相位差 $\Delta\phi$ 情况下, $t = 32T_0$ 时刻的中子产生率 P_n ((a)—(h)) 和 $t = 50T_0$ 时的总中子产额 N_n 分布 ((i)—(p))

Fig. 4. Spatial distributions of (a)—(h) neutron production rate P_n at $t = 32T_0$ and (i)—(p) total neutron yield N_n at $t = 50T_0$ in the cases of different rotation direction of electric fields \mathbf{E}_r of two counter-propagating laser pulses and their initial relative phase $\Delta\phi$.

近 3 个数量级, 对于 N_n 影响不大). 当 $\Delta\phi = 0$ 时, N_n 最高, 这是由于 D^+ 离子的能量越大, 碰撞 D^+ 离子的相对速度 $v = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ 出现最大的概率越大. 对于 RCP+LCP 情况, 虽然不同 $\Delta\phi$ 时 D^+ 离子的能量差异较大, 然而由于 $\Delta\phi \neq 0$ 时 D^+ 离子的相对速度和密度较高, N_n 相差并不大, 而对于 RCP+RCP 的情况, 从图 5(d) 可以看到, $\Delta\phi = 0.5\pi$ 和 1.5π 情况下的 N_n 的确相差不大, 大约为 7×10^4 个, 而当 $\Delta\phi = 0$ 和 π 时, N_n 分别为 1.37×10^5 和 1.1×10^5 , 提升接近 2 倍. 当 $\Delta\phi = 0$ 时, 两种情况下的 N_n 均是最高的, 分别达到 9.1×10^4 和 1.37×10^5 . 值得注意的是, 对于 RCP+LCP 情况, 当 $\Delta\phi = \pi/2$ 或 $3\pi/2$ 时, 不仅 N_n 处于较高的水平, 而且中子的左右分布具有一定的选择性. 对于强度为 1.23×10^{21} W/cm²、脉宽为 33 fs、能量为 46 J 且相对相位差为 0.5π 的左旋光和右旋光, 可以获得产额为

8.5×10^4 n、产生率为 1.2×10^{19} n/s、脉宽为 23 fs 的脉冲中子源.

图 6 给出 $t = 50T_0$ 时不同 E_r 旋转方向和不同 $\Delta\phi$ 情况下的中子能谱分布. 对于 RCP + LCP 情况, 最高中子能量随 $\Delta\phi$ 的变化与图 3(c) 中在 D^+ 离子截止能量变化趋势保持一致. $\Delta\phi = 0$ 时, 中子能量分布范围更广, 主要位于 2.45—13.2 MeV 之间, 相同能量时的中子数目几乎均最高. 对于 RCP+RCP 情况, 除 $\Delta\phi = \pi$ 外其余三种情况中子能量范围几乎相同, 最高中子能量约 14 MeV; 而当 $\Delta\phi = \pi$ 时, 最高中子能量最低, 仅为 10.4 MeV, 但低能中子数目更多, 最高能量的变化趋势与图 3(d) 中在 D^+ 离子截止能量变化趋势几乎相同.

使用微分截面进行计算, 可得到 $t = 25T_0$ 和 $t = 50T_0$ 时刻的中子角分布特征, 如图 7 所示. 从图 7 以发现, 对于 RCP+LCP 情况, 中子在从 0°

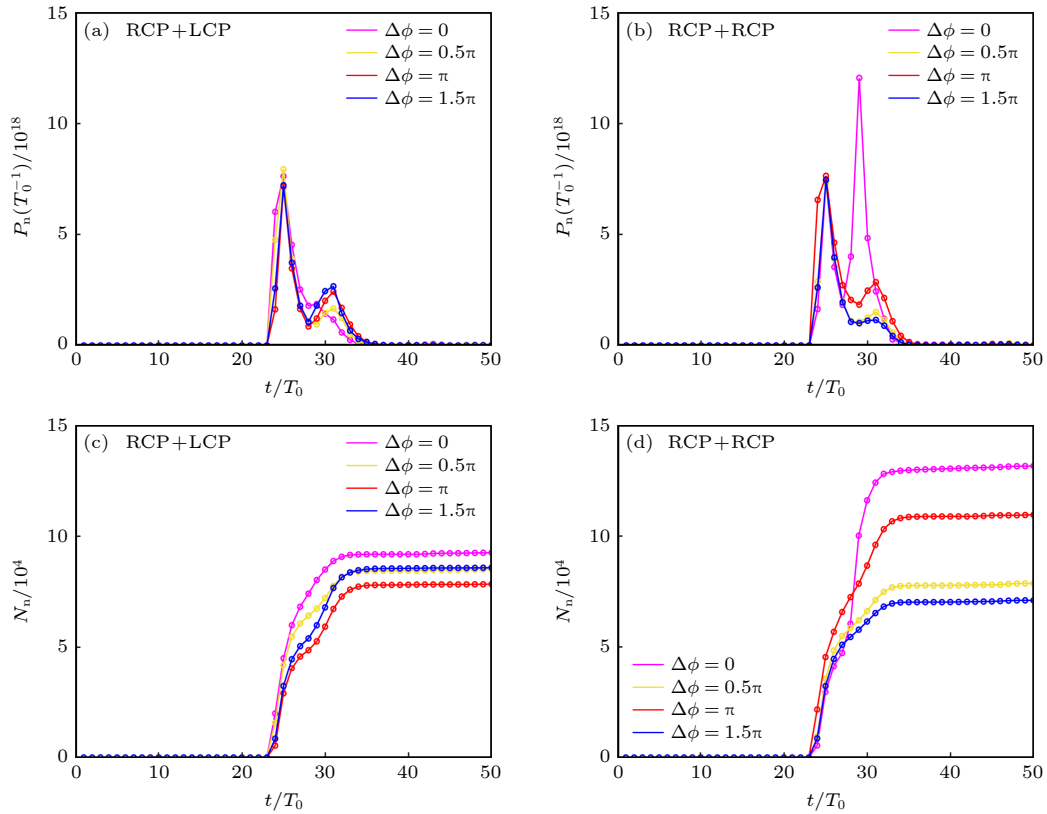


图 5 不同电场矢量 \mathbf{E}_r 旋转方向和不同初始相对相位差 $\Delta\phi$ 情况下, 中子产生率 P_n ((a), (b)) 和总中子产额 N_n ((c), (d)) 随时间的演化

Fig. 5. Temporal evolutions of (a), (b) neutron production rate P_n and (c), (d) total neutron yield N_n in the cases of different rotation direction of electric fields \mathbf{E}_r of two counter-propagating laser pulses and their initial relative phase $\Delta\phi$.

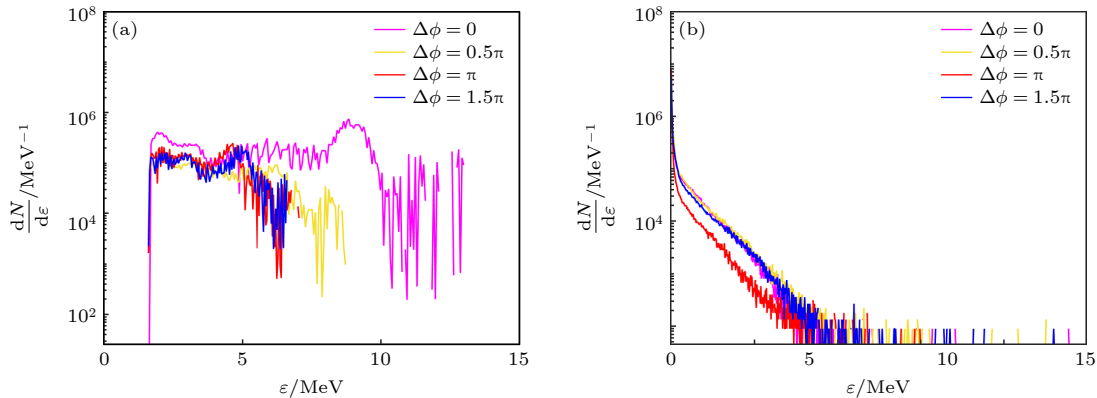


图 6 不同电场矢量 \mathbf{E}_r 旋转方向和不同初始相对相位差 $\Delta\phi$ 情况下, $t = 50T_0$ 时的中子能谱 (a) RCP+LCP; (b) RCP+RCP
Fig. 6. Spectra of the emitted neutrons at $t = 50T_0$ in the cases of different rotation direction of the electric fields \mathbf{E}_r of two counter-propagating laser pulses and their initial relative phase $\Delta\phi$: (a) RCP+LCP; (b) RCP+RCP.

到 360° 的各个方向均有分布, 这种沿各个方向发射的各向同性的中子起源于化合物反应^[6]. 通过统计沿 0° 和 90° 的中子产额, 能够获得前向与侧向中子产额比约 3:1, 意味着中子源具有较高的前冲性, 这主要由裂解、剥离和预平衡反应产生的强正向或负向中子发射导致^[6]. 需要指明的是, 尽管 $\Delta\phi = \pi/2$ 或 $\Delta\phi = 3\pi/2$ 时中子的空间位置分布主要集中在

右侧或左侧, 但这仅体现了中子的产生位置, 由于激光驱动的 D^+ 离子几乎都在靶前方或后方, 因此中子的产生位置具有一定的取向性. 中子角分布与 D^+ 离子的空间分布并没有直接关联. (2) 式中的角度是中子出射方向与 D^+ 离子碰撞方向 (随机抽取的两个 D^+ 离子的相对速度方向) 的夹角, 通过加上 D^+ 离子碰撞方向来获得实验室坐标系下中子

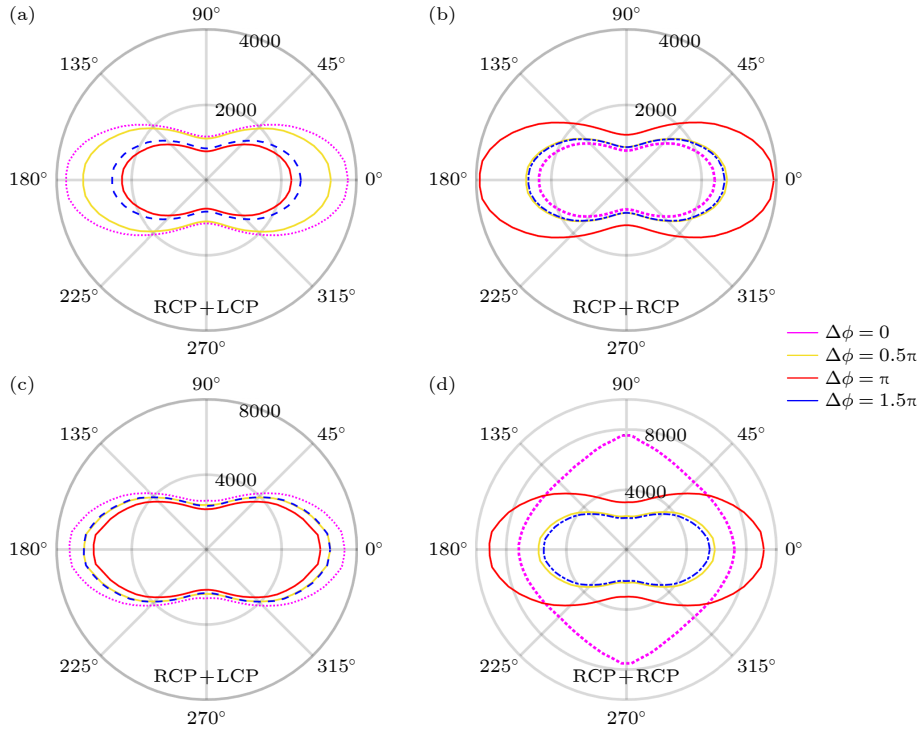


图 7 不同电场矢量 E_r 旋转方向和不同初始相对相位差 $\Delta\phi$ 情况下, $t = 25T_0$ (a), (b) 和 $t = 50T_0$ (c) 和 (d) 时刻的中子角分布
 Fig. 7. Angular distributions of the accumulated neutrons at $t = 25T_0$ (a), (b) and $t = 50T_0$ (c), (d) in the cases of different rotation direction of electric fields E_r of two counter-propagating laser pulses and their initial relative phase $\Delta\phi$.

的角分布. 因此中子角分布主要由 D^+ 离子间相对速度方向决定, 而不是与 D^+ 离子束的角分布直接相关. 对于定向运动的 D^+ 离子束, 随机抽样的两个 D^+ 离子的相对速度方向并不一定与氦离子束的整体运动方向相同, 也有一定概率为其反方向, 因此中子角分布呈现前后对称分布的特征. 对于 RCP+RCP 情况, 可以看到, 在 $t = 25T_0$ 时刻的中子分布与图 7(a) 几乎一致, 不过由于 $\Delta\phi = \pi$ 时相对速度 $v = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ 和靶被压缩后的密度较大, 且不稳定性发生较为缓慢 (如图 2(k) 和图 2(o)), 其中子角分布曲线分布在最外围. 由于 $\Delta\phi = 0$ 时横向不稳定性发展最为剧烈, D^+ 离子能量更高 (见图 3(d)), 在 $t = 50T_0$ 时刻中子产额变得更高, 即图 7(d) 中粉色曲线大于红色实线所围面积. 此外, 由于不稳定性导致 D^+ 离子空间分布呈现一定的随机性, 如图 2(m) 所示, 导致最终中子角分布呈现几乎是各向同性的.

需要指明的是, 双束激光与超薄靶相互作用是三维情形, 仅仅通过全三维数值模拟才可真实再现涉及的物理过程. 不过, 先前为了认识超强圆极化激光与单层薄靶相互作用的基本特征, 大多数激光辐射压离子加速及不稳定性相关研究 [30–32, 38–41]

均在二维条件下开展, 实验结果 [42–44] 也证实了二维结果的可靠性. 考虑到所讨论内容的复杂性以及全三维大尺度模拟所需计算资源的问题, 以上模拟研究仅限于二维情形. 在三维情况下, 先前研究结果 [45–47] 表明, 激光与薄靶相互作用中横向不稳定性的发展规律以及离子加速效果相对于二维情形均展现一定的差异. 对于双束激光与超薄靶相互作用的情形, 类似的差异以及实验条件下的激光预脉冲对于中子源特征的影响需要进一步评估.

4 结 论

利用粒子模拟方法和蒙特卡罗方法研究了双束对射圆极化激光与超薄氦靶的相互作用动力学以及 $D(d, n)^3\text{He}$ 核反应产生中子的过程, 给出了激光电场矢量旋转方向和初始相对相位差对氦靶压缩及中子特性的影响规律. 结果表明, 选择相对相位差为 0 且电场矢量旋转方向相同的对射光, 可实现最高的中子产额; 而对于电场矢量旋转方向不同的对射光, 可以通过调整其相对相位差为 0.5π 或 1.5π 实现中子分布的方向调控. 在强度 $1.23 \times 10^{21} \text{ W/cm}^2$ 、脉宽 33 fs、能量 46 J 的激光脉冲条

件下, 模拟证实可产生额为 8.5×10^4 n、产生率为 1.2×10^{19} n/s、脉宽为 23 fs 且前冲性较好的脉冲中子源, 脉宽相对于强激光驱动光核中子源和束靶中子源大幅降低, 在中子核数据测量等领域具有一定的应用潜力. 研究结果有望对实验获得短脉宽、高产率、前冲性好的紧凑型中子源提供参考.

参考文献

- [1] Bao J, Chen Y H, Zhang X P, et al. 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 080101 (in Chinese) [鲍杰, 陈永浩, 张显鹏, 等 2019 物理学报 **68** 080101]
- [2] Xia J F, Zhang J 2000 *Physics* **29** 270 (in Chinese) [夏江帆, 张杰 2000 物理 **29** 270]
- [3] Alvarez J, Fernández-Tobias J, Mima K, Nakai S, Kar S, Kato Y, Perlado J M 2014 *Physics Procedia* **60** 29
- [4] Chen S N, Negoita F, Spohr K, d'Humières E, Pomerantz I, Fuchs J 2019 *Matter Radiat. Extremes* **4** 054402
- [5] Günther M M, Rosmej O N, Tavana P, Gyrdymov M, Skobliakov A, Kantsyrev A, Zähler S, Borisenko N G, Pukhov A, Andreev N E 2022 *Nat. Commun.* **13** 170
- [6] Zimmer M, Scheuren S, Kleinschmidt A, Mitura N, Tebartz A, Schaumann G, Abel T, Ebert T, Hesse M, Zähler S, Vogel S C, Merle O, Ahlers R J, Duarte Pinto S, Peschke M, Kröll T, Bagnoud V, Rödel C, Roth M 2022 *Nat. Commun.* **13** 1173
- [7] Kodama R, Norreys P A, Mima K, Dangor A E, Evans R G, Fujita H, Kitagawa Y, Krushelnick K, Miyakoshi T, Miyanaga N, Norimatsu T, Rose S J, Shozaki T, Shigemori K, Sunahara A, Tampo M, Tanaka K A, Toyama Y, Yamanaka T, Zepf M 2001 *Nature* **412** 798
- [8] Hurricane O A, Callahan D A, Casey D T, Celliers P M, Cerjan C, Dewald E L, Dittrich T R, Döppner T, Hinkel D E, Hopkins L F B, Kline J L, Le Pape S, Ma T, MacPhee A G, Milovich J L, Pak A, Park H S, Patel P K, Remington B A, Salmonson J D, Springer P T, Tommasini R 2014 *Nature* **506** 343
- [9] Ren G, Yan J, Liu J, Lan K, Chen Y H, Huo W Y, Fan Z, Zhang X, Zheng J, Chen Z, Jiang W, Chen L, Tang Q, Yuan Z, Wang F, Jiang S, Ding Y, Zhang W, He X T 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 165001
- [10] Curtis A, Calvi C, Tinsley J, Hollinger R, Kaymak V, Pukhov A, Wang S, Rockwood A, Wang Y, Shlyaptsev V N, Rocca J J 2018 *Nat. Commun.* **9** 1077
- [11] Labaune C, Baccou C, Depierreux S, Goyon C, Loisel G, Yahia V, Rafelski J 2013 *Nat. Commun.* **4** 2506
- [12] Ditmire T, Zweiback J, Yanovsky V P, Cowan T E, Hays G, Wharton K B 1999 *Nature* **398** 489
- [13] Lu H Y, Liu J S, Wang C, Wang W T, Zhou Z L, Deng A H, Xia C Q, Xu Y, Lu X M, Jiang Y H, Leng Y X, Liang X Y, Ni G Q, Li R X, Xu Z Z 2009 *Phys. Rev. A* **80** 051201
- [14] Roth M, Jung D, Falk K, Guler N, Deppert O, Devlin M, Favalli A, Fernandez J, Gautier D, Geissel M, Haight R, Hamilton C E, Hegelich B M, Johnson R P, Merrill F, Schaumann G, Schoenberg K, Schollmeier M, Shimada T, Taddeucci T, Tybo J L, Wagner F, Wender S A, Wilde C H, Wurden G A 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 044802
- [15] Mirfayzi S R, Alejo A, Ahmed H, Raspino D, Ansell S, Wilson L A, Armstrong C, Butler N M H, Clarke R J, Higginson A, Kelleher J, Murphy C D, Notley M, Rusby D R, Schooneveld E, Borghesi M, McKenna P, Rhodes N J, Neely D, Brenner C M, Kar S 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 044101
- [16] Jiang X R, Shao F Q, Zou D B, Yu M Y, Hu L X, Guo X Y, Huang T W, Zhang H, Wu S Z, Zhang G B, Yu T P, Yin Y, Zhuo H B, Zhou C T 2020 *Nucl. Fusion* **60** 076019
- [17] Cui B, Zhang Z M, Dai Z H, Qi W, Deng Z G, Huang H, He S K, Wang W W, Teng J, Zhang B, Liu H J, Chen J B, Xiao Y Q, Wu D, Ma W J, Hong W, Su J Q, Zhou W M, Gu Y Q 2021 *High Power Laser Part. Beams* **33** 123 (in Chinese) [崔波, 张智猛, 戴曾海, 齐伟, 邓志刚, 黄华, 贺书凯, 王为武, 滕建, 张博, 刘红杰, 陈家斌, 肖云青, 吴笛, 马文君, 洪伟, 粟敬钦, 周维民, 谷渝秋 2021 强激光与粒子束 **33** 123]
- [18] Shkolnikov P L, Kaplan A E, Pukhov A, Meyer-ter-Vehn J 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 3471
- [19] Ledingham K W D, Spencer I, McCanny T, Singhal R P, Santala M I K, Clark E, Watts I, Beg F N, Zepf M, Krushelnick K, Tatarakis M, Dangor A E, Norreys P A, Allott R, Neely D, Clark R J, Machacek A C, Wark J S, Cresswell A J, Sanderson D C W, Magill J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 899
- [20] Arikawa Y, Utsugi M, Alessio M, Nagai T, Abe Y, Kojima S, Sakata S, Inoue H, Fujioka S, Zhang Z, Chen H, Park J, Williams J, Morita T, Sakawa Y, Nakata Y, Kawanaka J, Jitsuno T, Sarukura N, Miyanaga N, Nakai M, Shiraga H, Nishimura H, Azechi H 2015 *Plasma Fusion Res* **10** 2404003
- [21] Jiao X J, Shaw J M, Wang T, Wang X M, Tsai H, Poth P, Pomerantz I, Labun L A, Toncian T, Downer M C, Hegelich B M 2017 *Matter Radiat. Extremes* **2** 296
- [22] Feng J, Fu C, Li Y, Zhang X, Wang J, Li D, Zhu C, Tan J, Mirzaie M, Zhang Z, Chen L 2020 *High Energy Density Phys.* **36** 100753
- [23] Jiang X R, Zou D B, Zhao Z J, Hu L X, Han P, Yu J Q, Yu T P, Yin Y, Shao F Q 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 034032
- [24] Qi W, Zhang X H, Zhang B, He S K, Zhang F, Cui B, Yu M H, Dai Z H, Peng X Y, Gu Y Q 2019 *Phys. Plasmas* **26** 043103
- [25] Pomerantz I, McCary E, Meadows A R, Arefiev A, Bernstein A C, Chester C, Cortez J, Donovan M E, Dyer G, Gaul E W, Hamilton D, Kuk D, Lestrade A C, Wang C, Ditmire T, Hegelich B M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 184801
- [26] Shen B F, Meyer-ter-Vehn J 2001 *Phys. Plasmas* **8** 1003
- [27] Zhang X M, Shen B F 2006 *J. Plasma Phys.* **72** 635
- [28] Macchi A 2006 *Appl. Phys. B* **82** 337
- [29] Hu L X, Yu T P, Shao F Q, Zhu Q J, Yin Y, Ma Y Y 2015 *Phys. Plasmas* **22** 123104
- [30] Pegoraro F and Bulanov S V 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 065002
- [31] Yan X Q, Wu H C, Sheng Z M, Chen J E, Meyer-ter-Vehn J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 135001
- [32] Wan Y, Pai C H, Zhang C J, Li F, Wu Y P, Hua J F, Lu W, Gu Y Q, Silva L O, Joshi C, Mori W B 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 234801
- [33] Ridgers C P, Brady C S, Ducloux R, Kirk J G, Bennett K, Arber T D, Robinson A P L, Bell A R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 165006
- [34] Wu D, Sheng Z M, Yu W, Fritzsche S, He X T 2021 *AIP Advances* **11** 075003
- [35] Deng H X, Sha R, Hu L X, Jiang X R, Zhao N, Zou D B, Yu T P, Shao F Q 2022 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **64** 085004
- [36] Toupin C, Lefebvre E, Bonnaud G 2001 *Phys. Plasmas* **8** 1011
- [37] Liskien H, Paulsen A 1973 *At. Data Nucl. Data Tables* **11** 569
- [38] Macchi A, Cattani F, Liseykina T V, Cornolti F 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 165003

- [39] Yan X Q, Lin C, Sheng Z M, Guo Z Y, Liu B C, Lu Y R, Fang J X, Chen J E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 135003
- [40] Ji L L, Shen B F, Zhang X M, Wang F C, Jin Z Y, Li X M, Wen M, Cary J R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 164802
- [41] Qiao B, Kar S, Geissler M, Gibbon P, Zepf M, Borghesi M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 115002
- [42] Henig A, Steinke S, Schmittner M, Sokollik T, Hörlein R, Kiefer D, Jung D, Schreiber J, Hegelich B M, Yan X Q, Meyer-ter-Vehn J, Tajima T, Nickles P V, Sandner W, Habs D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 245003
- [43] Kar S, Kakolee K F, Qiao B, Macchi A, Cerchez M, Doria D, Geissler M, McKenna P, Neely D, Osterholz J, Prasad R, Quinn K, Ramakrishna B, Sarri G, Willi O, Yuan X H, Zepf M, Borghesi M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 185006
- [44] Palmer C A J, Schreiber J, Nagel S R, Dover N P, Bellei C, Beg F N, Bott S, Clarke R J, Dangor A E, Hassan S M, Hilz P, Jung D, Kneip S, Mangles S P D, Lancaster K L, Rehman A, Robinson A P L, Spindloe C, Szerypo J, Tatarakis M, Yeung M, Zepf M, Najmudin Z 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 225002
- [45] Zhang X M, Shen B F, Ji L L, Wang W P, Xu J C, Yu Y H, Wang X F 2011 *Phys. Plasmas* **18** 073101
- [46] Sgattoni A, Sinigardi S, Macchi A 2014 *Appl. Phys. Lett.* **15** 084105
- [47] Sgattoni A, Sinigardi S, Fedeli L, Pegoraro F, Macchi A 2015 *Phys. Rev. E* **91** 013106

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Ultrashort pulsed neutron source driven by two counter-propagating laser pulses interacting with ultra-thin foil*

Feng Kai-Yuan¹⁾ Shao Fu-Qiu¹⁾ Jiang Xiang-Rui¹⁾ Zou De-Bin^{1)†}
 Hu Li-Xiang¹⁾ Zhang Guo-Bo²⁾ Yang Xiao-Hu²⁾ Yin Yan¹⁾
 Ma Yan-Yun³⁾ Yu Tong-Pu¹⁾

1) (*Department of Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Department of Nuclear Science and Technology, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

3) (*The First Interdisciplinary Center, College of Advanced Interdisciplinary Studies, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 30 April 2023; revised manuscript received 9 June 2023)

Abstract

Neutron production via $D(d, n)^3\text{He}$ nuclear reaction during the interaction of two counter-propagating circularly polarized laser pulses with ultra-thin deuterium target is investigated by particle-in-cell simulation and Monte Carlo method. It is found that the rotation direction and initial relative phase difference of laser electric field vector have important effects on deuterium foil compression and neutron characteristics. The reason is attributed to the net light pressure and the difference in transverse instability development. The highest neutron yield can be obtained by choosing two laser pulses with a relative phase difference of 0 and the same rotation direction of the electric field vector. When the relative phase difference is 0.5π or 1.5π and the rotation direction of electric field vector is different, the neutrons have a directional spatial distribution and the neutron yield only slightly decreases. For left-handed circularly polarized laser pulse and right-handed circularly polarized laser pulse, each with an intensity of 1.23×10^{21} W/cm², a pulse width of 33 fs and a relative phase difference of 0.5π , it is possible to produce a pulsed neutron source with a yield of 8.5×10^4 n, production rate of 1.2×10^{19} n/s, pulse width of 23 fs and good forward direction as well as tunable spatial distribution. Comparing with photonuclear neutron source and beam target neutron source driven by ultraintense laser pulses, the duration of neutron source in our scheme decreases significantly, thereby possessing many potential applications such as neutron nuclear data measurement. Our scheme offers a possible method to obtain a compact neutron source with short pulse width, high production rate and good forward direction.

Keywords: two counter-propagating laser pulses, relative phase difference, rotation direction of electric-field vector, pulsed neutron source

PACS: 52.38.-r, 29.25.Dz, 52.27.Ny, 52.65.Pp

DOI: 10.7498/aps.72.20230706

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12175310, 12275356, U22411281), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2022JJ20042), the Youth Innovation Award of NUDT (Grant No. 20190102), and the Postgraduate Scientific Research Innovation Project of Hunan Province, China (Grant No. CX20210006).

† Corresponding author. E-mail: debinzou@nudt.edu.cn

双束对射激光驱动超薄靶的超短脉冲中子源

冯凯源 邵福球 蒋祥瑞 邹德滨 胡理想 张国博 杨晓虎 银燕 马燕云 余同普

Ultrashort pulsed neutron source driven by two counter-propagating laser pulses interacting with ultra-thin foil

Feng Kai-Yuan Shao Fu-Qiu Jiang Xiang-Rui Zou De-Bin Hu Li-Xiang Zhang Guo-Bo Yang Xiao-Hu Yin Yan Ma Yan-Yun Yu Tong-Pu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 185201 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230706

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230706>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

中国散裂中子源反角白光中子源束内伽马射线研究

In-beam γ -rays of back-streaming white neutron source at China Spallation Neutron Source

物理学报. 2020, 69(17): 172901 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200718>

中国散裂中子源反角白光中子束流参数的初步测量

Experimental result of back-streaming white neutron beam characterization at Chinese spallation neutron source

物理学报. 2019, 68(8): 080101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182191>

基于中国散裂中子源反角白光中子束线的天然锂中子全截面测量

Measurement of total neutron cross section of natural lithium at China Spallation Neutron Source Back-n facility

物理学报. 2022, 71(5): 052901 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211646>

利用气泡探测器测量激光快中子

Laser fast neutron measured by bubble detector

物理学报. 2018, 67(22): 222101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181035>

中国散裂中子源在大气中子单粒子效应研究中的应用评估

Application and evaluation of Chinese spallation neutron source in single-event effects testing

物理学报. 2019, 68(5): 052901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181843>

应用中国散裂中子源9号束线端研究65 nm微控制器大气中子单粒子效应

Atmospheric neutron single event effect in 65 nm microcontroller units by using CSNS-BL09

物理学报. 2019, 68(23): 238502 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191196>

国防科技大学建校 70 周年专题

大规模、量子精度的分子动力学模拟： 以极端条件液态铁为例*

曾启昱¹⁾²⁾ 陈博¹⁾²⁾ 康冬冬^{1)2)†} 戴佳钰^{1)2)‡}

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学, 极端条件物理及应用湖南省重点实验室, 长沙 410073)

(2023 年 8 月 2 日收到; 2023 年 9 月 9 日收到修改稿)

液态铁作为类地行星内核的主要组成成分, 其在高温高压条件下的热力学、输运及动力学性质研究, 对理解行星演化有着重要意义. 极端条件物态物性在实验条件下产生困难且诊断手段有限, 而理论模拟在动力学、输运性质计算方面面临着规模、精度的双重要求, 极大限制了这方面的有效进展. 本文结合深度学习技术, 通过神经网络构造液态铁的高维相互作用势能面, 在保证第一性原理计算精度的前提下, 将计算规模从数百原子扩展到数十万原子体系. 研究了从常压到核幔边界条件下液态铁的动力学及输运性质, 并与 X 射线衍射、非弹性 X 射线散射实验对比, 二者的一致性指出, 深度学习技术与分子模拟的结合为我们高通量研究极端条件下真实体系的物态物性及动力学提供了有效手段.

关键词: 分子动力学, 神经网络, 极端条件, 动力学性质**PACS:** 71.15.Pd, 07.05.Mh**DOI:** 10.7498/aps.72.20231258

1 引言

类地行星往往由致密的金属内核与硅酸盐、氧化物的地幔构成. 以地球为例, 地核分为液态外核与固态内核两个部分, 其中铁占据了主要成分, 而镍的占比只有 5%—15%^[1]. 地球的液态外核占据了地核总体积的 96%, 跨越内部 2900—5150 km 深度的范围. 随着深度增加, 压强范围跨越 135—330 GPa, 温度范围在 3500—6500 K^[2,3]. 对地核的研究, 有利于理解行星内部演化的诸多问题, 包括地核余热的释放、地核的热对流与质量输运、行星的磁场产生等. 因此, 作为地核主要组成成分, 铁及其掺杂体系在极端条件下的物态物性^[4–8], 一直

以来是行星物理密切相关的重要主题之一.

在实验室条件下高温高压状态的产生, 可以利用激光、离子束、超高速撞击等方式使物质状态沿着不同的热力学路径 (等容线、冲击绝热线或准等熵线) 演化^[9]. 由于高能量密度物理的特性, 极端条件物态往往是瞬态, 其诊断严重依赖于时间分辨的实验技术. 完备的热力学状态方程、静态结构、动态结构及输运性质测量, 依然是实验技术前沿. 因此从量子理论出发的数值模拟一直以来是不可或缺的重要研究手段, 但是受限于效率-精度两难困境.

精度方面, 是以密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 为代表的的第一性原理分子动力学 (*ab initio* molecular dynamics, AIMD), 其核心思想是求解多电子的薛定谔方程. 在获得了电

* NSAF 联合基金 (批准号: U1830206)、国家自然科学基金 (批准号: 11874424, 12104507) 和湖南省科技创新领军人才项目 (批准号: 2021RC4026) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ddkang@nudt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: jydai@nudt.edu.cn

子对离子的平均场之后,可以有效计算原子的受力、应力张量,从而获得离子系统的统计、关联信息.在 Kohn-Sham DFT 的框架中,多电子系统的基态电荷密度等价于给定外场下单电子系统的基态电荷密度,通过引入交换关联泛函,将单电子近似引入的误差归到其中,这使得计算真实体系的电子结构成为可能.但是 DFT 方法的主要计算开销在 Kohn-Sham 方程的自洽场迭代求解上,其计算复杂度与自由度的立方成正比,即 $\mathcal{O}(N^3)$,这就使得模拟规模受限于算力,往往只能在周期性边界条件下计算包含数十、数百原子的小系统.

效率方面,经典分子动力学 (classic molecular dynamics, CMD) 通过先验知识构造离子间等效相互势能面的解析表达式,跳过了电子结构的求解,使得计算复杂度降低到了线性标度.结合高性能并行计算,数千万乃至上亿原子的大规模模拟成为可能,我们可以从原子尺度出发,去研究动理论甚至是流体力学尺度的科学问题.但是,由于势能面的准确性受限于模型复杂度,使得 CMD 在描述真实体系的物态物性上精度有限,往往无法处理宽热力学区间、多相共存、多元素等复杂体系的物质结构及动力学.

近年来,机器学习技术的发展为建模高维、非线性的势能面提供了有效工具.2007年,Behler和Parrinello^[10]首先将人工神经网络用于势能面建模问题,提出了单原子能量分解、原子环境描述符以满足势能面建模对广延性、对称性的要求.后续陆续涌现出了高斯近似势 (Gaussian approximation potential, GAP)^[11]、谱近邻分析势 (spectral neighbor analysis potential, SNAP)^[12]、深度势能 (deep potential, DP)^[13] 等一系列机器学习势能面构造的应用,不同技术方案的差异在局域原子环境的描述、拟合描述子与能量之间的技术上.在 Behler-Parrinello 网络中,局域原子环境描述符往往需要针对不同的材料体系,人为地构造和选取相适应的原子对称函数,限制了该方法的适用性和泛化性.DP 方法则提出了端到端的描述子方案^[14],构造嵌入网络以描述复杂的局域原子环境,使得神经网络势能面可以有效应用到金属键、共价键、离子键等不同键合的晶体、团簇、无序体系.随着不断发展,基于机器学习的势能面方法通过学习第一性原理计算标签好的数据集 (能量、受力、应力张量),逐步成为建模多相、多元素系统在不同温度、密度条件下相互作用的有效方案^[15,16].在保持量子精度的

同时,神经网络势能面把计算开销从求解单电子薛定谔方程转变为神经网络模型的推断,有效解决了建模领域的效率精度两难问题,使得研究大尺度、长时间的性质及动力学成为可能^[17-21].

本文基于深度势能分子动力学 (deep potential molecular dynamics, DPMD),探究了常压到核幔边界条件 ($p = 136$ GPa, $T = 4100$ K) 下液态铁的动力学与输运性质,并与 X 射线非弹性散射实验^[22-24]进行对比.二者的一致性使得从实验到理论之间建立了有效的桥梁,使得大规模研究极端条件下真实复杂体系的理化性质成为可能.

2 方法

在分子动力学模拟中,体系中的原子处理为经典的质点,原子间相互作用由势能面 V 主导,可以写出相应的牛顿运动方程,即

$$M \frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = -\nabla V, \quad (1)$$

其中 M 为原子质量, \mathbf{R} 表示原子的坐标.该原子间相互作用势能面,由核-核之间的库仑相互作用与电子提供的平均场构成.在传统的 KS-DFT 框架中,后者需要通过求解 Kohn-Sham 方程来获得.在经典分子动力学的框架中,则是构造解析形式的力场模型去建模势能面.相比之下,在 DPMD 中,我们采用了神经网络形式的势能面,它具有更强的描述能力与泛化性能.

深度势能为势能面构造提供了端到端的对称性保持方案,通过嵌入网络提取原子局域环境的特征,以构造保持平移、旋转、置换不变性的描述子.进一步通过拟合网络,建立描述子到单原子能量的高维关系,其模型的数学表述为^[14]

$$E = \sum_i \mathcal{N}_{\alpha_i}(\mathcal{D}_{\alpha_i}(\mathbf{r}_i, \{\mathbf{r}_j\}_{j \in n(i)})), \quad (2)$$

其中, \mathcal{D}_{α_i} 表示第 i 个原子 (元素类型为 α) 的局域环境描述子, \mathcal{N}_{α_i} 表示通过神经网络来建立原子 i 局域环境的描述子到单原子能量 $E_{\alpha_i}^i$ 的高维映射.有了能量与原子坐标的关系,就可以良好定义力矩阵 $\mathcal{F}(\mathcal{R}) \equiv \mathcal{F} \in \mathbf{R}^{N \times 3}$ 和 3×3 的维里张量 (Virial tensor) $\mathcal{E}(\mathcal{R}) \equiv \mathcal{E} \in \mathbf{R}^{3 \times 3}$:

$$\mathcal{F} = -\nabla_{\mathcal{R}} E \quad (\mathcal{F}_{ij} = -\nabla_{\mathcal{R}_{ij}} E), \quad (3)$$

$$\mathcal{E} = \text{tr}[\mathcal{R} \otimes \mathcal{F}] \quad \left(\mathcal{E}_{ij} = \sum_{k=1}^N \mathcal{R}_{ki} \mathcal{F}_{kj} \right). \quad (4)$$

在求解多离子的牛顿运动方程中, 每步根据原子在其截断半径内所有近邻原子的相对位置, 计算受力、维里张量, 并更新下一步每个原子的位置、动量. 在获得每个原子的位置与动量 ($\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{p}_i\}$) 后, 就可以获得系统的任意力学量 $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. 通过统计理论可以获得系统的关联与热力学信息.

本文的研究对象是液态铁, 初始结构为包含 54 个原子的无序结构. 首先通过 VASP 软件包 [25] 在一定的温度、密度条件下产生了长度为 2 ps 的第一性原理分子动力学轨迹, 时间步长为 1 fs. 每 50 步选取一个构型, 得到初始训练集. 如图 1 所示, 在初始训练集的基础上, 结合同步学习方案, 同时训练 4 个初始随机数种子不同的 DP 模型, 沿着铁的熔化曲线探索, 从 $p = 0$ GPa, $T = 1873$ K 到 $p = 136$ GPa, $T = 4250$ K, 总共采样了 1280 个液相构型, 图中黑色实线为 Morard 等 [26] 确定的相边界.

在 KS-DFT 的计算中, 采用了 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 交换关联泛函 [27]. 赝势则采用

了投影缀加平面波 (projector augmented-wave, PAW) 形式 [28], 包含了 16 个价电子 ($3s^23p^63d^64s^2$). 采用了 900 eV 的动能截断. Brillouin 区的 k 点采样网格为 $2 \times 2 \times 2$. 此外, 考虑到铁的价电子在 d 轨道是不满壳层占据, 因此计算时考虑了自旋极化. 只有考虑自旋极化时, 液态铁的静态结构才具有相对可靠的描述 [29,30].

在势函数训练步骤, 采用开源的深度势包 DeePMD-kit [31,32]. 训练过程中, 嵌入网络 (embedding net) 包含三层隐藏全连接层, 每层的神经元分别为 25, 50 和 100 个. 拟合网络 (fitting net) 也包含三层隐藏层, 每层用了 240 个神经元节点, 同样为全连接网络. 将能量、力和维里项的训练权重初始时刻设置为 0.02, 1000 和 0.02, 在训练后期逐渐变化为 1.0, 1.0 和 1.0. 训练权重随训练步数变化的主要目的是使神经网络在训练前期优先拟合受力, 即势能面的梯度, 加快训练的收敛. 这是因为梯度内禀包含了能量的相对值以及维里的信息. 在训练后期再逐步增加对能量、维里项的权重, 使得三者具有相同的拟合权重, 保证神经网络对于能量、压强的拟合精度. 深度势的截断半径取 6.0 \AA , 训练步数设置为 40 万步. 最终得到的液态铁多体相互作用势在数学形式上是一个权值冻结的深度神经网络, 嵌入网络、拟合网络中各神经元的权重、偏置, 在训练中通过反向传播算法得到充分优化. 在分子动力学模拟中, 神经网络只保留前向传播过程, 以进行能量、受力、维里的推断. 如图 2 所示, 以测试集的均方根偏差 (root mean squared error, RMSE) 来评估模型的准确性, 单原子的能量预测偏差为 7.36 meV/atom , 受力偏差为 0.36 eV/\AA , 压强偏差为 0.41 GPa , 结果表现出良好的一致性.

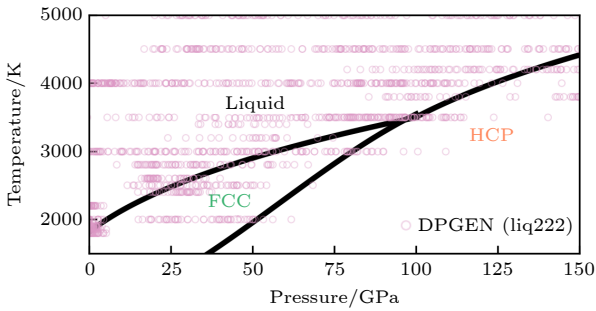


图 1 液态铁的训练集采样示意图, 紫色空心圆圈表示在该 (p, T) 条件下采样的液态结构, 黑色实线为 Morard 等 [26] 确定的相边界

Fig. 1. Atomic configurations sampling in P - T space, where the black solid line denotes the experimental measured phase boundaries by Morard et al [26].

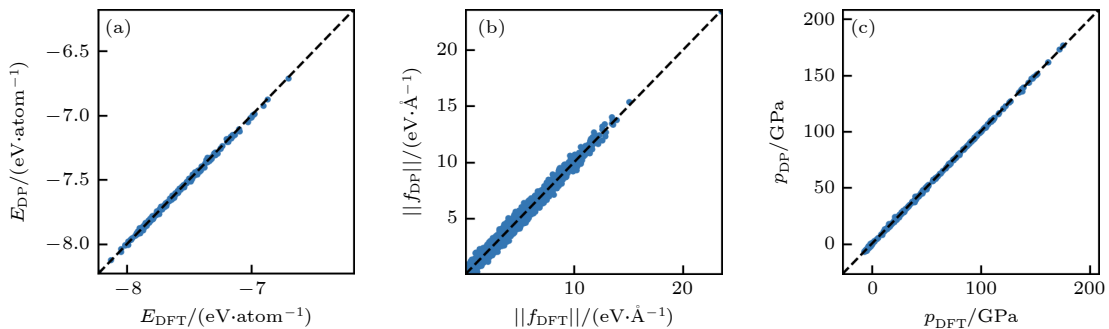


图 2 液态铁的能量、受力与压强在训练集上的预测偏差 (a) $\sigma_E = 7.36 \text{ meV/atom}$; (b) $\sigma_f = 0.36 \text{ eV/\AA}$; (c) $\sigma_p = 0.41 \text{ GPa}$
 Fig. 2. DP-predicted energy per atom, force, and pressures versus the true KS-DFT calculations in the testing dataset: (a) $\sigma_E = 7.36 \text{ meV/atom}$; (b) $\sigma_f = 0.36 \text{ eV/\AA}$; (c) $\sigma_p = 0.41 \text{ GPa}$.

3 结果

3.1 静态结构

液体作为动态无序系统, 其原子在中短程的分布特征通常通过径向分布函数 $g(r)$, 或者是静态结构因子 (static structure factor, SSF) $S(q)$ 来描述. 二者互为傅里叶变换, 等价描述了粒子数密度的空间关联信息. 通常, 由于后者可以通过 X 射线衍射 (X-ray diffraction, XRD) 测量直接获得. 近年来, Kuwayama 等^[23] 测量了从常压到核幔边界条件下液态铁的静态结构因子, 为验证理论计算的准确性提供了基准.

图 3 所示为不同热力学条件下液态铁的静态结构因子, 表现出典型的无序系统特征, 失去了长程有序性, 并具有明显的壳层结构. 可以看到, 在 $2.6\text{--}2.8\text{ \AA}^{-1}$ 的波数范围内, SSF 展示出一个对称的主峰, 其峰值位置随着压强的增加而增加, 描述了第一近邻的分布强度. 结合径向分布函数可以发现, 液态铁作为典型的液体金属系统, 配位数在 12.6 左右, 是典型的密排结构. 而非对称的次近邻峰则说明, 液态铁具有非常明确的局域二十面体短

程结构. 与 Kuwayama 等^[23] 的漫散射 XRD 测量信号对比, DPMD 的结果表现出良好的一致性, 说明 PBE 交换关联泛函与自旋极化的考虑准确描述了液态铁的短程结构, 而神经网络模型准确还原了第一性原理计算的精度. 作为对比, 选取 Sun 等^[33] 针对地球内核热力学条件优化的嵌入原子势 (embedded-atom-method, EAM), 该 EAM 势在核幔边界条件及高温高压区间 ($p \geq 53\text{ GPa}$, $T \geq 3300\text{ K}$) 同样表现出较好的精度, 但是随着压强过渡到常压, 对于液态铁的结构描述偏差变大. 考虑到经验势在计算效率和规模上的优势, 我们可以认为, 经验势在针对某些特定条件下的物理问题依然有优势. 但是由于经验势的模型复杂度有限, 通常无法兼顾从常态到高温高压状态的统一描述.

3.2 动态结构

动态无序系统的动力学性质, 包含了其输运性质与集体激发模式. 离子-离子动态结构因子 (ion-ion dynamic structure factor, DSF), 通过密度涨落的时空关联, 描述了一个系统内在不同空间尺度上的弛豫过程与传播过程, 是研究离子集体动力学的关键物理量. 对于均匀的流体系统, 通过对密度-

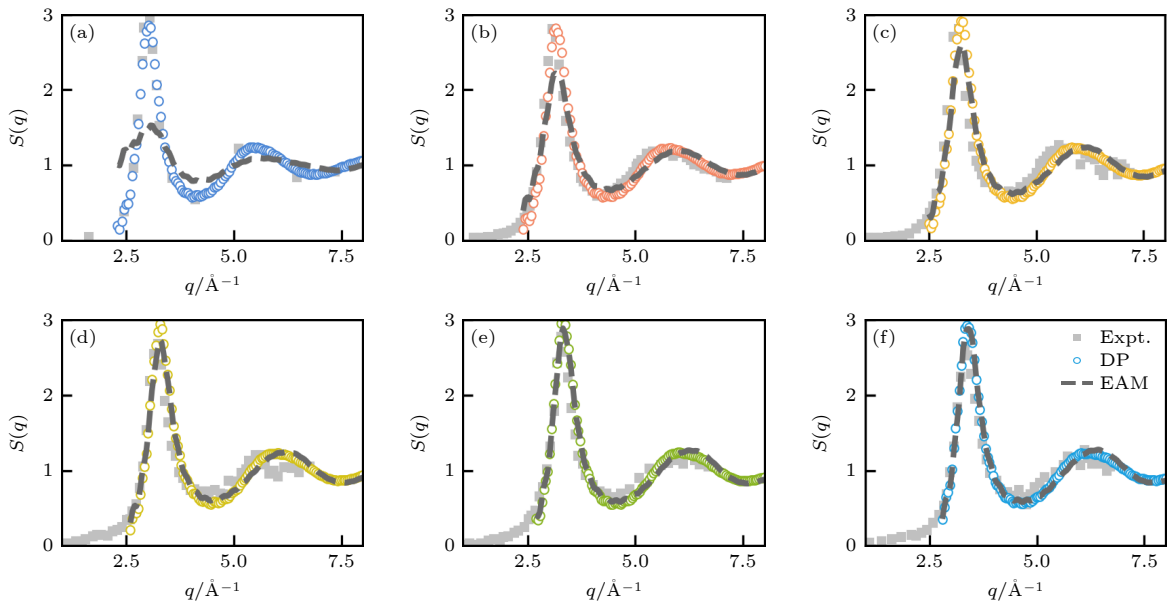


图 3 液态铁的静态结构因子 (a) $p = 0\text{ GPa}$, $T = 1873\text{ K}$; (b) $p = 21\text{ GPa}$, $T = 2600\text{ K}$; (c) $p = 40\text{ GPa}$, $T = 3000\text{ K}$; (d) $p = 53\text{ GPa}$, $T = 3300\text{ K}$; (e) $p = 74\text{ GPa}$, $T = 3600\text{ K}$; (f) $p = 106\text{ GPa}$, $T = 4250\text{ K}$. 彩色点为 DPMD 计算结果, 灰色点为 Inui 等^[24] (常压) 和 Kuwayama 等^[23] (高温高压) 的实验测量结果, 灰色虚线为基于 EAM 势的 CMD 计算结果

Fig. 3. Static structure factor of liquid iron: (a) $p = 0\text{ GPa}$, $T = 1873\text{ K}$; (b) $p = 21\text{ GPa}$, $T = 2600\text{ K}$; (c) $p = 40\text{ GPa}$, $T = 3000\text{ K}$; (d) $p = 53\text{ GPa}$, $T = 3300\text{ K}$; (e) $p = 74\text{ GPa}$, $T = 3600\text{ K}$; (f) $p = 106\text{ GPa}$, $T = 4250\text{ K}$. Colored circles indicate the results from DPMD simulation, the gray square denotes the experimental measurements by Inui et al.^[24] and Kuwayama et al.^[23], the gray dashed line denotes the results from CMD simulation with EAM potential.

密度时空关联函数做两次傅里叶变换, 从时域 t 到频域 ω , 从实空间 \mathbf{r} 到倒空间 \mathbf{k} , 可以写出 DSF 的表达式为

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{1}{N} \langle \rho(\mathbf{k}, t) \rho(-\mathbf{k}, 0) \rangle e^{i\omega t} dt, \quad (5)$$

其中, $\rho(\mathbf{k}, t)$ 表示对粒子数倒空间密度的含时演化. DSF 可以通过非弹性 X 射线散射 (inelastic X-ray scattering, IXS) 或者是非弹性中子散射 (inelastic neutron scattering, INS) 实验测量得到, 因此它同样为标定方法进而提供了有效基准. 对此, 我们实现了包含 32000 个铁原子的大尺度模拟, 与常压条件 ($p = 0$ GPa, $T = 1873$ K) 下 Hosokawa 等^[22] 通过 IXS 实验测量的液态铁数据进行对比.

如图 4 所示, 可以看到 DSF 由零频的弹性峰与有限频率的非弹性峰构成, 后者描述了入射 X 射线光子或者中子与离子集体激发模式发生能量交换的非弹性散射过程. 随着 q 值从小到大, 描述离子集体模式的非弹性峰频率发生蓝移. 从中可以提取出相应的色散关系 $\omega = \omega(q)$, 其斜率为绝热声速. 在常压下, DPMD 通过提取纵向集体模式的色散关系得到声速为 3891 m/s, 与实验测量的值 (3820 ± 150 m/s) 非常接近. DPMD 计算的 DSF 与 IXS 实验信号整体符合也非常好, 尤其是小波矢下的弹性峰与非弹性峰的高度、宽度. 当波矢足

够小的情况下, 倒空间无穷小对应实空间无穷大, 此时的 DSF 过渡到流体力学区间, 描述了宏观过程的弛豫与传播过程. 在流体力学极限下, DSF 表现出明显的 Lorentz 线形, 其高度、宽度具有明确的物理意义, 可以从中提取出热扩散系数、声衰减系数和比热容比等信息^[17]. 在 3.1 节中, EAM 势在极端条件下对液态铁的静态结构同样具有良好的描述, 因此我们进一步对比了 DP 势与 EAM 势在核幔边界条件下的动态结构. 有趣的一点是, 在小波矢情况下 ($q = 0.38 \text{ \AA}^{-1}$), EAM 势准确描述了液态铁在长波下的集体行为. 但随着波矢增加, 在动理论区间, 可以明显看到 EAM 势相比 DP 势所描述的液态铁具有相对较高的集体模式能量, 相应的纵波声速分别为 7934 和 7600 m/s. 这说明 EAM 势虽然很好地描述了体系的静态结构, 但是在离子动力学上依然有差异.

3.3 输运性质

由于 DPMD 计算的效率, 可以进一步研究对模拟体系大小非常敏感的输运性质. 自扩散系数描述了动态无序系统中原子的迁移能力, 它可以通过两种方法获得, 一个是通过均方根位移 (mean-square displacement, MSD):

$$D^R = \frac{1}{6t} \langle |R_i(t) - R_i(0)|^2 \rangle, \quad (6)$$

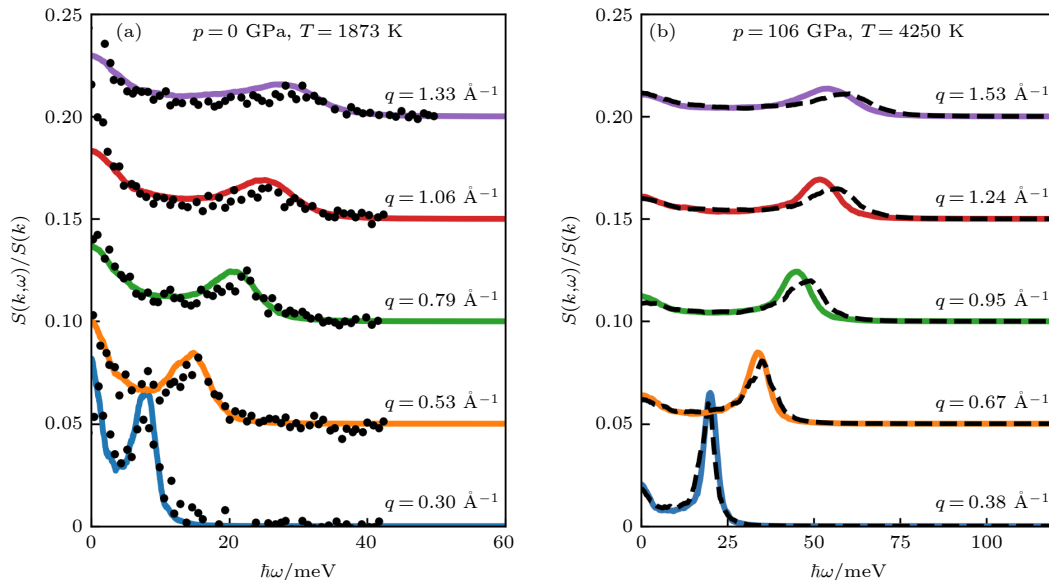


图 4 (a) 常压和 (b) 核幔边界条件下液态铁的动态结构因子, 彩色实线为 DPMD 计算结果, 黑色圆圈为 Hosokawa 等^[22] 的非弹性 X 射线散射实验测量结果, 黑色虚线为基于 Sun 等^[33] 开发的 EAM 势计算的结果

Fig. 4. Dynamic structure factor of liquid iron under (a) ambient pressure condition and (b) core-mantle boundary condition. Colored lines indicate the results from DPMD simulation, the black circles denote the experimental measurements by Hosokawa et al.^[22], the black dashed lines denote the CMD simulation with EAM potential developed by Sun et al.^[33].

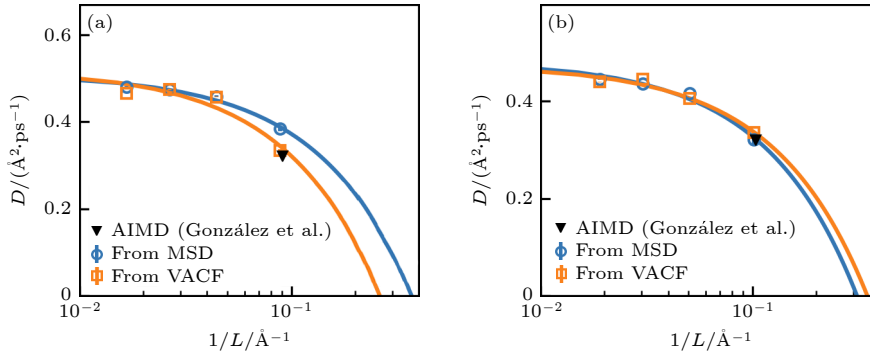


图 5 液态铁的扩散系数 (a) $p = 0$ GPa, $T = 1873$ K; (b) $p = 96$ GPa, $T = 3800$ K; 彩色点为 DPMD 计算结果, 实线为线性关系的拟合结果, 黑色三角为 González 等^[7]的 AIMD 计算结果

Fig. 5. Self-diffusion coefficient of liquid iron: (a) $p = 0$ GPa, $T = 1873$ K; (b) $p = 96$ GPa, $T = 3800$ K. Colored circles denote the results from DPMD simulation, colored solid lines denote the fitting curve for removal of size effect, and the black triangle denotes the previous AIMD calculation by González et al.^[7].

其中, $R_i(t)$ 表示原子 i 在 t 时刻的位移. 另一种方式是通过速度自关联函数 (velocity autocorrelation function, VACF) 做积分:

$$D = \int_0^{\infty} \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle dt, \quad (7)$$

其中, \mathbf{v} 表示原子的速度. 本文采用这两种方法, 计算了从 108 原子体系到 16384 原子不同体系大小下的扩散系数. 其中时间步长为 1 fs, 总时间长度为 10 ps. 每个模拟独立运行了 50 次, 每次体系有着独立的初始速度分布, 目的是做足够多的采样以获得充分系综平均的结果.

如图 5 所示, 扩散系数在常压和极端条件下都表现出明显的尺寸效应. 注意到, 基于 MSD 和 VACF 两种不同的方法在小体系下表现出较大的差异, 但是随着体系的增加而逐渐收敛到相同结果. 在 108 原子体系时, 基于 VACF 的计算结果, 与之前 González 等^[7]同样采用 100 原子体系结合 VACF 方法的计算结果非常接近. 这说明, DPMD 准确还原了 AIMD 的精度, 同时 DPMD 的计算效率使得可以扩大计算规模, 消除尺寸效应, 获得更为合理的结果.

由于扩散系数表现出强烈的尺度依赖关系, 这里引入线性的尺度修正公式 $D^{\text{corr}} = D^{\text{calc}} + k_B T \xi / (6\pi\eta L)$ 来获得无穷大体系下的扩散系数数值. 其中, D^{corr} 为修正值, 即无穷大体系的扩散系数, D^{calc} 为有限尺寸 L 下计算得到的值, η 为剪切黏度, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为离子温度, ξ 为未知系数, 用于拟合. 经过拟合, 得到在常态 ($p = 0$ GPa, $T = 1873$ K) 条件下, 液态铁的扩散系数

为 $0.52 \text{ \AA}^2/\text{ps}$, 在接近核幔边界条件下, 液态铁的扩散系数为 $0.48 \text{ \AA}^2/\text{ps}$. 该结果指出, DPMD 在研究输运性质时, 相比 AIMD, 表现出计算规模上的优越性.

4 结 论

本文构造了液态铁势能面的神经网络模型, 热力学条件从常压到核幔边界. 在此基础上, 结合有限的实验测量数据, 验证了 DP 模型对液态铁的静态结构、动态结构、热力学性质及输运性质的描述能力.

经过数值实验发现, DP 可以准确描述极端条件下液态铁静态结构, 使其与漫散射 XRD 信号一致. 在常压下, 液态铁的集体动力学对相互作用描述要求精度更高, 要求准确描述密度涨落的时空关联, 而 DP 模型计算的动态结构因子与 IXS 实验基本符合, 并给出准确的绝热声速. 采用针对核幔条件下液态铁优化的 EAM 势, 同样计算了常压到核幔边界液态铁的静态结构与动态结构. 结果发现, 即使是对于液态铁这种结构沿着熔化曲线并不敏感的液态金属体系, 传统的 EAM 也难以兼顾常压到高温高压的统一描述.

进一步讨论了扩散系数的尺寸效应, DPMD 使得我们可以把计算尺度从传统的数百原子体系扩展到数万原子体系. 结果发现扩散系数强烈依赖于模拟尺寸, 并与模拟尺寸的倒数表现出线性依赖关系. 这意味着传统 AIMD 的计算能力还远远没有达到收敛的条件, 也意味着在输运性质的研究

上, 深度学习与分子模拟的结合会发挥出更大的优势.

参考文献

- [1] Vočadlo L 2015 *Treatise on Geophysics 2.06—Earth's Core: Iron and Iron Alloys* (Amsterdam: Elsevier) pp117–147
- [2] Dziewonski A M, Anderson D L 1981 *Phys. Earth Planet. Inter.* **25** 297
- [3] Wagner F W, Sohl F, Hussmann H, Grott M, Rauer H 2011 *Icarus* **214** 366
- [4] Dai J, Kang D, Zhao Z, Wu Y, Yuan J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 175701
- [5] Dai J, Hou Y, Kang D, Sun H, Wu J, Yuan J 2013 *New J. Phys.* **15** 045003
- [6] Li Q, Sun T, Zhang Y G, Xian J W, Vocadlo L 2021 *J. Chem. Phys.* **155** 194505
- [7] González L E, González D J 2023 *J. Geophys. Res. Solid Earth* **128** e2022JB025119
- [8] Ramakrishna K, Lokamani M, Baczewski A, Vorberger J, Cangi A 2023 *Phys. Rev. B* **107** 115131
- [9] Kang D, Zeng Q, Zhang S, Wang X, Dai J 2020 *High Power Laser Part. Beams* **32** 092006
- [10] Behler J, Parrinello M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 146401
- [11] Bartok A P, Payne M C, Kondor R, Csanyi G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 136403
- [12] Thompson A P, Swiler L P, Trott C R, Foiles S M, Tucker G J 2015 *J. Comput. Phys.* **285** 316
- [13] Zhang L, Han J, Wang H, Car R, E W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 143001
- [14] Zhang L 2018 arXiv: 180509003 [physics.comp-ph]
- [15] Zhang Y, Gao C, Liu Q, Zhang L, Wang H, Chen M 2020 *Phys. Plasmas* **27** 122704
- [16] Chen X, Gao X, Zhao Y, Lin D, Chu W, Song H 2020 *Comput. Phys. Commun.* **250** 107057
- [17] Zeng Q, Yu X, Yao Y, Gao T, Chen B, Zhang S, Kang D, Wang H, Dai J 2021 *Phys. Rev. Research* **3** 033116
- [18] Chen B, Zeng Q, Wang H, Zhang S, Kang D, Lu D, Dai J 2021 arXiv: 200613136 [cond-mat.mtrl-sci]
- [19] Chen B, Zeng Q, Yu X, Chen J, Zhang S, Kang D, Dai J 2022 arXiv: 220801830 [astro-ph.EP]
- [20] Yang F, Zeng Q, Chen B, Kang D, Zhang S, Wu J, Yu X, Dai J 2022 *Chin. Phys. Lett.* **39** 116301
- [21] Zeng Q, Chen B, Zhang S, Kang D, Wang H, Yu X, Dai J 2023 arXiv: 230813863 [physics.comp-ph]
- [22] Hosokawa S, Inui M, Matsuda K, Ishikawa D, Baron A Q R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 174203
- [23] Kuwayama Y, Morard G, Nakajima Y, Hirose K, Baron A Q R, Kawaguchi S I, Tsuchiya T, Ishikawa D, Hirao N, Ohishi Y 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 165701
- [24] Inui M, Maruyama K, Kajihara Y, Nakada M 2009 *Phys. Rev. B* **80** 180201(R)
- [25] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 16
- [26] Morard G, Boccato S, Rosa A D, Anzellini S, Miozzi F, Henry L, Garbarino G, Mezouar M, Harmand M, Guyot F, Boulard E, Kantor I, Irifune T, Torchio R 2018 *Geophys. Res. Lett.* **45** 2018GL079950
- [27] Perdew J, Burke J, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [28] Holzwarth N, Tackett A, Matthews G 2001 *Comput. Phys. Commun.* **135** 3
- [29] Marqués M, González L E, González D J 2015 *Phys. Rev. B* **92** 134203
- [30] Marqués M, González L E, González D J 2016 *J. Phys. Condens. Matter* **28** 075101
- [31] Wang H, Zhang L, Han J, E W 2018 *Comput. Phys. Commun.* **228** 178
- [32] Zeng J, Zhang D, Lu D, Mo P, Li Z, Chen Y, Rynik M, Huang L, Li Z, Shi S, Wang Y, Ye H, Tuo P, Yang J, Ding Y, Li Y, Tisi D, Zeng Q, Bao H, Xia Y, Huang J, Muraoka K, Wang Y, Chang J, Yuan F, Bore S L, Cai C, Lin Y, Wang B, Xu J, Zhu J X, Luo C, Zhang Y, Goodall R E A, Liang W, Singh A K, Yao S, Zhang J, Wentzcovitch R, Han J, Liu J, Jia W, York D M, E W, Car R, Zhang L, Wang H 2023 *J. Chem. Phys.* **159** 054801
- [33] Sun Y, Zhang F, Mendelev M I, Wentzcovitch R M, Ho K M 2022 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **119** e2113059119

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Large scale and quantum accurate molecular dynamics simulation: Liquid iron under extreme condition*

Zeng Qi-Yu¹⁾²⁾ Chen Bo¹⁾²⁾ Kang Dong-Dong^{1)2)†} Dai Jia-Yu^{1)2)‡}¹⁾ (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)²⁾ (*Hunan Key Laboratory of Extreme Matter and Applications, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 2 August 2023; revised manuscript received 9 September 2023)

Abstract

Liquid iron is the major component of planetary cores. Its structure and dynamics under high pressure and temperature is of great significance in studying geophysics and planetary science. However, for experimental techniques, it is still difficult to generate and probe such a state of matter under extreme conditions, while for theoretical method like molecular dynamics simulation, the reliable estimation of dynamic properties requires both large simulation size and *ab initio* accuracy, resulting in unaffordable computational costs for traditional method. Owing to the technical limitation, the understanding of such matters remains limited. In this work, combining molecular dynamics simulation, we establish a neural network potential energy surface model to study the static and dynamic properties of liquid iron at its extreme thermodynamic state close to core-mantle boundary. The implementation of deep neural network extends the simulation scales from one hundred atoms to millions of atoms within quantum accuracy. The estimated static and dynamic structure factor show good consistency with all available X-ray diffraction and inelastic X-ray scattering experimental observations, while the empirical potential based on embedding-atom-method fails to give a unified description of liquid iron across a wide range of thermodynamic conditions. We also demonstrate that the transport property like diffusion coefficient exhibits a strong size effect, which requires more than at least ten thousands of atoms to give a converged value. Our results show that the combination of deep learning technology and molecular modelling provides a way to describe matter realistically under extreme conditions.

Keywords: molecular dynamics, neural network, extreme condition, dynamic properties**PACS:** 71.15.Pd, 07.05.Mh**DOI:** [10.7498/aps.72.20231258](https://doi.org/10.7498/aps.72.20231258)

* Project supported by the NSAF Joint Fund (Grant No. U1830206), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874424, 12104507), and the Science and Technology Innovation Program of Hunan Province, China (Grant No. 2021RC4026).

† Corresponding author. E-mail: ddkang@nudt.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: jydai@nudt.edu.cn



大规模、量子精度的分子动力学模拟：以极端条件液态铁为例

曾启昱 陈博 康冬冬 戴佳钰

Large scale and quantum accurate molecular dynamics simulation: Liquid iron under extreme condition

Zeng Qi-Yu Chen Bo Kang Dong-Dong Dai Jia-Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 187102 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20231258

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231258>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

水滴撞击结冰过程的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of freezing process of water droplets impinging on cold surface

物理学报. 2018, 67(5): 054702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172174>

纳米多孔银力学性能表征分子动力学模拟

Characterization of nanoporous silver mechanical properties by molecular dynamics simulation

物理学报. 2018, 67(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172193>

单晶Ce冲击相变的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of shock-induced isostructural phase transition in single crystal Ce

物理学报. 2020, 69(11): 116202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200323>

非牛顿流体剪切稀化特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation on shear thinning characteristics of non-Newtonian fluids

物理学报. 2021, 70(12): 124701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202116>

高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究

Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate

物理学报. 2019, 68(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190920>

基于机器学习构建的环三亚甲基三硝胺晶体势

Energetic potential of hexogen constructed by machine learning

物理学报. 2020, 69(23): 238702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200690>

国防科技大学建校 70 周年专题

强飞秒激光场下二氧化碳二聚体
四价离子的多体解离动力学*曾平¹⁾ 宋盼^{1)2)†} 王小伟¹⁾ 赵晶¹⁾ 张栋文¹⁾ 袁建民¹⁾³⁾ 赵增秀^{1)‡}

1) (国防科技大学理学院, 湖南省极端条件物理及应用重点实验室, 长沙 410073)

2) (河南师范大学物理学院, 河南省红外材料光谱测量与应用重点实验, 新乡 453007)

3) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193)

(2023 年 4 月 29 日收到; 2023 年 5 月 23 日收到修改稿)

开展了强飞秒激光场诱导的二氧化碳二聚体离子 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 的三体库仑爆炸过程的实验研究. 利用冷靶反冲离子动量成像谱仪测量了关联的碎片离子的三维动量矢量和动能. 结果表明, $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子通过序列解离通道和非序列解离通道分解为 $\text{CO}_2^+ + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 离子. 在序列解离过程中, 弱范德瓦耳斯键先断裂, 然后是强的共价键 $\text{C}=\text{O}$ 断裂; 而在非序列解离过程中, 3 个碎片离子在一次动力学事件内几乎同时产生. 通过对比两个解离通道的事件比率, 表明序列的解离通道在 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子的三体库仑爆炸中占主导作用. 发现这种同时包含范德瓦耳斯键和共价键的二聚体或团簇在多体库仑爆炸过程中相比单体和仅有范德瓦耳斯键的团簇具有特殊的动力学性质, 两种化学键在强场动力学过程中扮演不同的角色.

关键词: 二聚体, 库仑爆炸, 序列解离, 非序列解离

PACS: 79.77.+g, 34.80.Ht, 33.20.Xx, 33.80.Rv

DOI: 10.7498/aps.72.20230699

1 引言

二聚体和团簇是原子分子通过弱的范德瓦耳斯键 (van der Waals, vdW) 结合在一起形成的. 通过研究二聚体和团簇的物理和化学性质, 可以填补对单体原子分子行为和凝聚态物质之间的认知空白. 气体分子形成的二聚体通常有着更长的核间距, 这导致了电子局域于两个分子附近, 二聚体两个单体之间的分子轨道几乎不重合. 二聚体物质在强激光场作用下会表现出与单体原子分子不同的电离解离方式, 有着更为丰富的强场动力学现象,

使得二聚体成为研究电荷共振增强电离^[1,2]、原子间的库仑衰变^[3,4]、分子间的库仑衰变^[5,6]、辐射电荷转移^[7,8]等分子动力学过程的理想候选者.

目前, 二聚体和团簇在强激光场中的电离和碎片解离动力学得到了广泛的研究^[9–15]. 由于气体分子组成的二聚体是强共价键和弱 vdW 键共存的复合体, 不同性质的化学键相对激光场的取向影响强场电离以及多电离中电子释放的顺序, 进而影响二聚体的多体解离动力学过程. 二氧化碳二聚体具有平行滑动结构^[16–18], 它在强激光中表现出丰富的动力学现象. 2019 年 Iskandar 等^[19] 采用单光子吸收电离的方式, 发现了二氧化碳二聚体在单体的双

* 国家重点研发计划 (批准号: 2019YFA0307703)、国家自然科学基金重大研究计划 (批准号: 91850201)、国家自然科学基金重点项目 (批准号: 12234020)、国家自然科学基金 NSAF 重点项目 (批准号: U1830206) 和国家自然科学基金 (批准号: 11974426, 11974425, 11774322) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: songpan14@nudt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zhaozengxiu@nudt.edu.cn

电离阈值时发生分子间库仑衰变的实验证据. 最近的研究表明, $(\text{CO}_2)_2$ 的电离和解离过程强烈地依赖于激光强度, 在低光强下弱 vdW 键在强场电离中起着重要作用^[20].

近年来, 由于激光技术和符合测量技术的进步, 对高价分子离子多体库仑爆炸过程产生的碎片离子的符合测量成为可能. 在强激光场下, 激光与二聚体的相互作用是极其复杂的, 由于库仑排斥力的作用, 光诱导的高电荷分子离子通常是不稳定的并快速解体而发生库仑爆炸. 产生 3 个碎片离子的库仑爆炸过程可通过序列或非序列的方式发生^[21–23], 在序列解离过程中, 碎片离子是分步产生的, 其时间间隔长于中间体的旋转周期, 而非序列解离过程所有碎片离子都是在一次动力学事件中产生的. 通过多体符合测量技术直接测定相关碎片离子的内部量子态和三维动量分布, 可精确地识别和筛选序列解离通道和非序列解离通道. 2016 年, Fan 等^[24]对 $(\text{CO}_2)_2^{3+}$ 离子的三体库仑爆炸通道进行了研究, 结果表明二聚体的三体解离以序列解离通道为主, 弱 vdW 键先断裂, 再是强共价键断裂. 而 Song 等^[25]的研究提供了 $(\text{CO}_2)_2^{3+}$ 离子序列解离和非序列解离都存在的证据, 并尝试揭示了两种解离通道的本质, 它们与 CO_2^{2+} 离子分解为 CO^+ 离子和 O^+ 离子的动力学过程中的亚稳态解离和瞬时解离相一致.

本文在实验上探究了二氧化碳二聚体在强飞秒激光场中发生了四电离之后的解离动力学过程, 利用多体符合测量技术收集了解离通道 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 产生的所有离子碎片的三维动量和动能. 结果表明, 在强激光场的作用下 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子的三体库仑爆炸通过序列和非序列两种通道发生, 并且序列解离通道占主导作用.

2 实验条件

本文的实验是基于自建的冷靶反冲离子动量成像谱仪系统 (cold-target recoil-ion momentum spectrometer, COLTRIMS)^[26,27] 完成的. 二氧化碳二聚体由 10 bar (1 bar = 10^5 Pa) 的 CO_2 气体经过 30 μm 的喷嘴进入真空腔体超音速膨胀时产生. 通过掺钛蓝宝石激光脉冲放大系统输出中心波长 790 nm, 脉冲持续时间 25 fs, 重复频率 10 kHz 的线偏振激光脉冲, 并且使用焦距为 75 mm 的球面

镜聚焦于分子束上, 实验过程使用的激光峰值光强为 8×10^{14} W/cm². 此次实验只采集了离子数据, 激光脉冲从 $(\text{CO}_2)_2$ 分子上电离掉 4 个电子, 产生的离子在 60 V/cm 的匀强电场的约束和引导下到达位于探测腔底部的延迟线位置灵敏探测器 (MCP). 通过探测器获得所有离子碎片的飞行时间和位置信息, 从而重构它们的三维动量.

3 结果与讨论

图 1 给出了强飞秒激光场诱导的二氧化碳超音速分子束产生的 3 个碎片离子的飞行时间关联图, 峰值光强为 8×10^{14} W/cm², 它是探测器同一次事件内探测到的第 1 个离子与第 3 个离子的飞行时间之和对第 2 个离子的飞行时间的函数, 称为光离子-光离子-光离子符合谱. 其中沿反对角线方向的亮线表示不同的三体库仑爆炸通道, 而平行或垂直坐标轴的亮线是误符合的结果. COLTRIMS 系统的优点之一是在一次实验中可以记录所有反应通道的数据, 在离线分析中, 来自不同反应通道的数据可通过对实验数据施加不同的筛选条件得以区分.

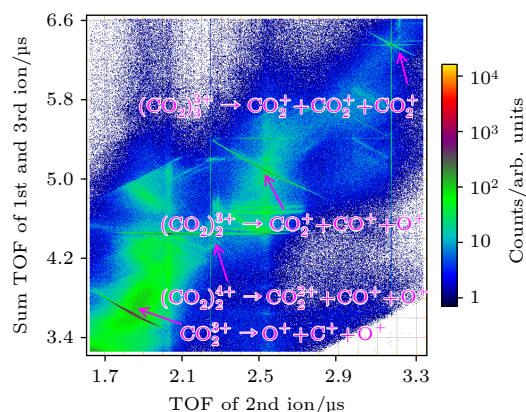


图 1 光离子-光离子-光离子符合谱, 即 CO_2 超音速分子束冷靶在光强为 8×10^{14} W/cm² 的强飞秒激光场作用下产生的 3 个碎片离子的关联图. 其中横轴是第 2 个离子的飞行时间, 纵轴是第 1 个和第 3 个离子的飞行时间之和. Fig. 1. Coincidence spectrum of the time of flight of three correlated fragmentation ions for CO_2 gas breakup using intense femtosecond laser field, namely, photoion-photoion-photoion coincidence plot. The X axis is the time of flight for the second ion, whereas the Y axis is the sum of the time of flight for the first and third ions.

这里筛选了三体库仑爆炸通道 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 作为研究对象, 并选择爆炸

通道 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^+ + \text{CO}_2^+$ 和 $\text{CO}_2^+ \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 作为参考. 对于三体解离通道, 为了保证符合测量的真实性, 设置了相应的筛选条件用来过滤原始的实验数据: 1) 根据反应通道产生的离子种类和数量, 设置了每个激光脉冲事件内 MCP 采集到有且仅有一个 CO_2^+ , CO^+ 和 O^+ 离子, 此筛选条件可以保证得到产生 3 个离子碎片的数据; 2) 每个激光脉冲事件内测得的 3 个碎片离子必须满足动量守恒条件: $|\mathbf{P}(\text{CO}_2^+) + \mathbf{P}(\text{CO}^+) + \mathbf{P}(\text{O}^+)| < 10 \text{ a.u.}$, 动量守恒是非常严格的物理条件, 这个筛选条件可以确保 3 个碎片离子是关联的, 也就是来自同一个母体离子, 但是动量守恒条件不能过滤零动量附近的离子, 因此还需要设置第 3 个筛选条件; 3) 它们的相对动量须足够大: $|\mathbf{P}(\text{CO}^+) - \mathbf{P}(\text{O}^+)| > 50 \text{ a.u.}$ 和 $|\mathbf{P}(\text{CO}_2^+)| > 50 \text{ a.u.}$, 测量结果显示, 此三体库仑爆炸产生的 3 个碎片离子的动量大小都在 100 a.u. 以上, 因此设置相对动量大于 50 a.u. 是合理的. 通过这些筛选条件能够尽可能地排除误符合事件, 获得的碎片离子可以确保是关联的, 也就是来自同一个 $(\text{CO}_2)_2$ 母体粒子的真实库仑爆炸事件. 通过设置不同的过滤条件, 可以将不同反应通道的数据分离开来, 并且提取出特定反应通道的数据.

为分析三体库仑爆炸通道 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^+ + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 的解离机制, 将 3 个关联的碎片离子 $\text{CO}_2^+ + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 的动量矢量固定在一个平面内获得动量关联图. 首先, 将每一个三体库仑爆炸事件中 CO_2^+ 离子的动量归一化赋值为 1 个原子单位, 并以 CO_2^+ 离子的动量方向作为 p_x ; 其次, 将另外两个离子 CO^+ 和 O^+ 的动量按照 CO_2^+ 离子的动量大小进行归一, 并将 O^+ 离子的动量矢量旋转至动量关联图的上半平面, 将 CO^+ 离子的动量矢量旋转至下半平面, 这样作出的二维动量关联图称为牛顿图 (如后文图 3). 牛顿图可以直观地显示 3 个反应产物的动量关联, 并清晰有效地识别三体库仑爆炸过程的解离机制^[28–30]. 图 2 给出了此三体库仑爆炸过程产生的 CO^+ 和 O^+ 离子的动能关联图, 可以看到两个离子的关联效应主要分为两部分, 其中红色圆圈内的数据表现为 CO^+ 和 O^+ 离子的动能具有确定的值, 说明两个离子是通过直接的库仑爆炸过程产生的, 这是非序列解离的特征; 而红色梯形内的数据表现为 CO^+ 和 O^+ 离子的动能

不是确定的值, 这与序列解离的情况相符合.

将图 2 中的两部分数据分别标记为通道 I 和通道 II, 它们对应的牛顿图分别如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 从图 3(a) 可以看出, 牛顿图中两个离子 O^+ 和 CO^+ 的动量矢量分布于两个错位的半圆形的环上, 这种移位源于 CO^+ 和 O^+ 离子的质量不同. 牛顿图中的半圆形结构表明发生了序列的三体库仑爆炸过程, 它是分步解离的. 在第一步中, 二聚体离子 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 中的弱 vdW 键断裂, 解离成两个 CO_2^+ 离子, 这两个离子在库仑排斥力下自由传播; 当第一步产生的两个中间产物 CO_2^+ 离子之间的距离足够远且相互作用可以忽略不计时, 其中一个中间产物 CO_2^+ 离子会在库仑排斥力作用下进一步破裂而发生第二步解离, CO_2^+ 离子中一个共价键断裂产生 CO^+ 和 O^+ 离子, 并且这两步解离过程是相对独立的. 中间产物 CO_2^+ 离子在第一步解离时获得角动量, 旋转的 CO_2^+ 离子在第二步解离的过程中将角动量分配给 CO^+ 和 O^+ 离子, 导致了序列解离事件产生的 3 个碎片离子的动量矢量之间的夹角发生了变化, 在牛顿图中表现为环形结构. 相比之下, 图 3(b) 中展示的牛顿图 3 个碎片离子的动量分别集中于特定的区域, 没有出现环形的结构, 说明三体解离过程是非序列的, 即 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子在

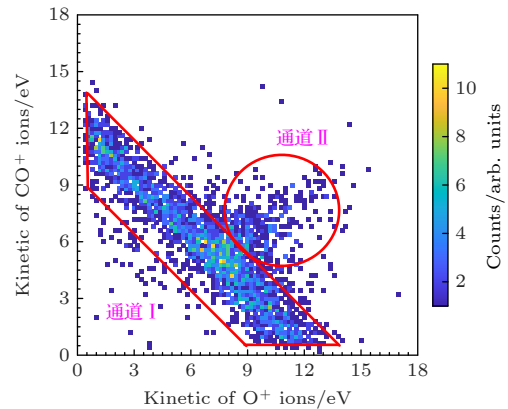


图 2 三体库仑爆炸产生的 CO^+ 和 O^+ 离子的动能关联图. 将数据分为两部分以作为通道筛选的条件, 其中红色梯形内的数据记为通道 I, 此部分数据对应序列解离; 红色圆圈内的数据记为通道 II, 此部分数据对应非序列解离. Fig. 2. Kinetic energy correlation diagram of CO^+ and O^+ ions generated by three-body Coulomb explosion. We divide the data into two parts, which can be used as the conditions for channel selecting. The data in the red trapezoid is denoted as channel I, which is sequential dissociation; and the data in the red circle is denoted as channel II, which is non-sequential dissociation.

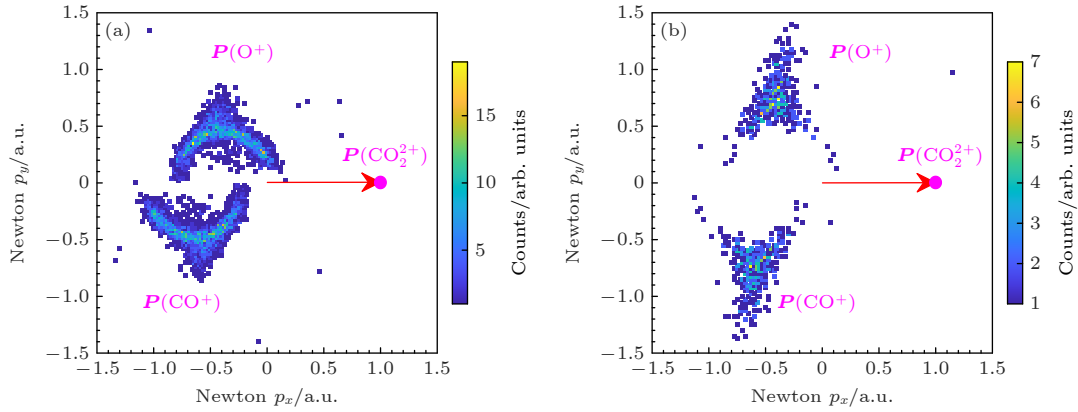


图 3 两种三体库仑爆炸通道对应的牛顿图 (a) 通道 I 对应于序列解离; (b) 通道 II 对应于非序列解离

Fig. 3. Newton diagrams corresponding to two kinds of three-body Coulomb explosion channels: (a) Channel I is sequential breakup; (b) channel II is non-sequential fragmentation.

一次动力学事件中几乎同时破裂成 3 个碎片离子 $\text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$.

这两种解离机制也可以从库仑爆炸释放的能量中进一步区分开来. 图 4 给出了三体库仑爆炸通道 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 两种解离机制释放的总动能谱 (kinetic energy release, KER). COLTRIMS 系统可以测量每个解离通道产生的所有碎片离子的三维动量, 进而可以获得每个碎片离子的动能, 在特定的解离通道中, 所有产物 (碎片离子) 的动能之和是这个解离过程释放的总动能. 其中黄色正三角线表示解离通道 I 的 KER 谱, 其峰值位于 20.1 eV; 紫色倒三角线为解离通道 II 的 KER 谱, 其峰值位于 21.8 eV, 两个解离通道对应的能量释放有明显的差异. 为了说明 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子两种不同的三体库仑爆炸过程, 选取 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}_2^{2+}$ 和 CO_2 单体的破裂通道 $\text{CO}_2^{2+} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 作为参考, 这两个通道的 KER 谱如图 4 中的棕色方形线 (峰值为 14.8 eV) 和蓝色圆圈线 (峰值为 5.4 eV). 可以看到解离通道 I 释放的能量等于两个参考通道释放的能量之和, 这是由于序列解离过程中的两步解离是相对独立的, 两步解离释放的能量按照动量守恒最终分配给序列解离过程产生的 3 个碎片离子.

如图 2 所示, 梯形区域内 CO^+ 和 O^+ 离子的动能大小此消彼长, 并且两个离子的动能之和几乎不变, 这是由于 CO^+ 和 O^+ 离子的动能除了在序列解离的第二步共价键 ($\text{C}=\text{O}$ 键) 断裂获得的能量之外, 还包含中间离子 CO_2^{2+} 在序列解离第一步 vdW 键断裂的解离中获得的能量. 根据图 3(a) 牛顿图

中出现完整的圆环可知, 中间产物 CO_2^{2+} 离子在解离之前发生了旋转并至少旋转了一个完整的周期^[24]. 在序列解离的第一步解离过程中 CO_2^{2+} 离子在库仑排斥力的作用下除了获得平动动能之外, 还获得了较高的转动动能, 此时 CO_2^{2+} 离子并不处于转动基态, 转动一周需要的时间远小于 CO_2 分子的转动周期 (42.7 ps). 当中间离子 CO_2^{2+} 旋转到不同取向发生第二步解离时, 中间离子 CO_2^{2+} 在第一步中获得的动能以不同的比例分配给 CO^+ 和 O^+ 离子. 解离通道 $\text{CO}_2^{3+} \rightarrow \text{O}^+ + \text{C}^+ + \text{O}^+$ 作为三体库仑爆炸的原型系统被广泛地研究^[31–34]. 通过强飞秒激光脉冲作用产生 CO_2^{3+} 离子的三体库仑爆炸同时存在序列和非序列通道, 但最近的实验结果表明, CO_2^{2+}

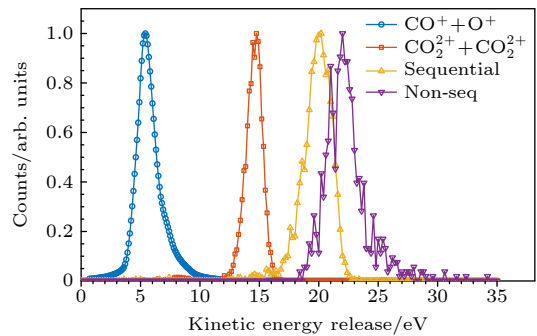


图 4 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子三体库仑爆炸序列解离通道 (黄色正三角线) 和非序列解离通道 (紫色倒三角线) 释放的动能谱, 以及参考通道 $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}_2^{2+}$ (棕色方形线) 和 $\text{CO}_2^{2+} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O}^+$ (蓝色圆圈线) 的动能谱

Fig. 4. Kinetic energy release of $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ ion by the three-body Coulomb explosion sequential (yellow triangle line) and nonsequential fragmentation (purple inverted triangular line) channel, and kinetic energy release from reference channels $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}_2^{2+}$ (brown square line) and $\text{CO}_2^{2+} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O}^+$ (blue circle line).

($n = 4-6$) 离子只存在非序列的解离通道^[35], 并且三体库仑爆炸产生的所有碎片离子都处于基电子态. 团簇 Ar_3^{n+} ($n = 3-6$) 离子的三体库仑爆炸也均以非序列通道为主, 产生的碎片离子既可以处于基电子态, 也可以处于高里德伯态^[36]. 而 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子的三体库仑爆炸两种解离机制释放的能量都是有且仅有一个高斯分布的峰, 说明 3 个碎片离子都是处于电子基态. 如图 2 所示, 我们注意到通道 I 中的事件数明显多于通道 II, 这是由于 vdW 键相较于强共价键要弱得多, vdW 键更容易断裂, 因此采集到的非序列解离通道的事件数远少于序列解离通道, 这说明 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子主要是以序列解离过程破裂成 $\text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$.

4 结 论

综上所述, 本文利用冷靶反冲离子动量成像谱仪实验研究了二氧化碳二聚体在强飞秒激光场中的多电离和解离动力学. 利用符合测量技术将不同反应通道的数据筛选出来, 通过对相关碎片离子的三维动量和动能进行统计分析之后, 结果表明 $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 离子破碎成 $\text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ 的三体库仑爆炸通过序列解离和非序列解离两种机制发生, 但是以序列解离机制为主. 其中非序列解离在同一次动力学事件中几乎同时产生 3 个碎片离子. 而序列解离是分步的, 首先, 弱的 vdW 键断裂, $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ 破裂成 $\text{CO}_2^{2+} + \text{CO}_2^{2+}$ 离子; 然后, 其中一个 CO_2^{2+} 离子共价键断裂进一步解离成 $\text{CO}^+ + \text{O}^+$. 根据牛顿图中的圆环结构可知这两步之间时间间隔大于 CO_2^{2+} 离子的旋转周期.

参考文献

- [1] Seideman T, Ivanov M Y, Corkum P B 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 2819
- [2] Wu J, Meckel M, Schmidt L Ph H, Kunitski M, Voss S, Sann H, Kim H, Jahnke T, Czasch A, Dörner R 2012 *Nat. Commun.* **3** 1113
- [3] Schnorr K, Senftleben A, Kurka M, Rudenko A, Foucar L, Schmid G, Broska A, Pfeifer T, Meyer K, Anielski D, Boll R, Rolles D, Kübel M, Kling M F, Jiang Y H, Mondal S, Tachibana T, Ueda K, Marchenko T, Simon M, Brenner G, Treusch R, Scheit S, Averbukh V, Ullrich J, Schröter C D, Moshhammer R 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 093402
- [4] Kim H K, Gassert H, Schöffler M S, Titze J N, Waitz M, Voigtsberger J, Trinter F, Becht J, Kalinin A, Neumann N, Zhou C, Schmidt L Ph H, Jagutzki O, Czasch A, Merabet H, Schmidt-Böcking H, Jahnke T, Cassimi A, Dörner R 2013 *Phys. Rev. A* **88** 042707
- [5] Jahnke T, Sann H, Havermeier T, Kreidi K, Stuck C, Meckel M, Schöffler M, Neumann N, Wallauer R, Voss S, Czasch A, Jagutzki O, Malakzadeh A, Afaneh F, Weber T, Schmidt-Böcking H, Dörner R 2010 *Nat. Phys.* **6** 139
- [6] Zhou J Q, Yu X T, Luo S Z, Xue X R, Jia S K, Zhang X Y, Zhao Y T, Hao X T, He L H, Wang C C, Ding D J, Ren X G 2022 *Nat. Commun.* **13** 5335
- [7] Matsumoto J, Leredde A, Flécharde X, Hayakawa K, Shiromaru H, Rangama J, Zhou C L, Guillous S, Hennecart D, Muranaka T, Mery A, Gervais B, Cassimi A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 263202
- [8] Ren X G, Al Jabbour M E, Dorn A, Denifl S 2016 *Nat. Commun.* **7** 11093
- [9] Ulrich B, Vredenburg A, Malakzadeh A, Meckel M, Cole K, Smolarski M, Chang Z, Jahnke T, Dörner R 2010 *Phys. Rev. A* **82** 013412
- [10] Wu J, Vredenburg A, Ulrich B, Schmidt L Ph H, Meckel M, Voss S, Sann H, Kim H, Jahnke T, Dörner R 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 043003
- [11] von Veltheim A, Manschwetus B, Quan W, Borchers B, Steinmeyer G, Rottke H, Sandner W 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 023001
- [12] Amada M, Sato Y, Tsuge M, Hoshina K 2015 *Chem. Phys. Lett.* **624** 24
- [13] Ding X Y, Haertelt M, Schlauderer S, Schuurman M S, Naumov A Y, Villeneuve D M, McKellar A R W, Corkum P B, Staudte A 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 153001
- [14] Gong X C, Heck S, Jelovina D, Perry C, Zinchenko K, Lucchese R, Wörner H J 2022 *Nature* **609** 507
- [15] Wang Y L, Lai X Y, Yu S G, Sun R P, Liu X J, Dorner-Kirchner M, Erattupuzha S, Larimian S, Koch M, Hanus V, Kangaparambil S, Paulus G, Baltuška A, Xie X H, Kitzler-Zeiler M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 063202
- [16] Dehghany M, McKellar A R W, Afshari M, Moazzen-Ahmadi N 2010 *Mol. Phys.* **108** 2195
- [17] Xie X G, Wu C, Liu Y R, Huang W, Deng Y K, Liu Y Q, Gong Q H, Wu C Y 2014 *Phys. Rev. A* **90** 033411
- [18] Schriver A, Schriver-Mazzuoli L, Vigasin A A 2000 *Vib. Spectrosc.* **23** 83
- [19] Iskandar W, Gatton A S, Gaire B, Sturm F P, Larsen K A, Champenois E G, Shivaram N, Moradmand A, Williams J B, Berry B, Severt T, Ben-Itzhak I, Metz D, Sann H, Weller M, Schoeffler M, Jahnke T, Dörner R, Slaughter D, Weber Th 2019 *Phys. Rev. A* **99** 043414
- [20] Song P, Zhu Y L, Yang Y, Wang X W, Meng C S, Zhao J, Liu J L, Lv Z H, Zhang D W, Zhao Z X, Yuan J M 2022 *Phys. Rev. A* **106** 023109
- [21] Lin K, Hu X Q, Pan S Z, Chen F, Ji Q Y, Zhang W B, Li H X, Qiang J J, Sun F H, Gong X C, Li H, Lu P F, Wang J G, Wu Y, Wu J 2020 *J. Phys. Chem. Lett.* **11** 3129
- [22] Rajput J, Severt T, Berry B, Jochim B, Feizollah P, Kaderiya B, Zohrabi M, Ablikim U, Ziaee F, Raju P K, Rolles D, Rudenko A, Carnes K D, Esry B D, Ben-Itzhak I 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 103001
- [23] Yu X T, Zhang X Y, Hu X Q, Zhao X N, Ren D X, Li X K, Ma P, Wang C C, Wu Y, Luo S Z, Ding D J 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 023001
- [24] Fan Y M, Wu C Y, Xie X G, Wang P, Zhong X Q, Shao Y, Sun X F, Liu Y Q, Gong Q H 2016 *Chem. Phys. Lett.* **653** 108
- [25] Song P, Wang X W, Meng C S, Dong W P, Li Y J, Lv Z H, Zhang D W, Zhao Z X, Yuan J M 2019 *Phys. Rev. A* **99**

053427

- [26] Ullrich J, Moshhammer R, Dorn A, Dörner R, Schmidt L P H, Schmidt-Böcking H 2003 *Rep. Prog. Phys.* **66** 1463
- [27] Ullrich J, Moshhammer R, Dörner R, Jagutzki O, Mergel V, Schmidt-Böcking H, Spielberger L 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 2917
- [28] Neumann N, Hant D, Schmidt L Ph H, Titze J, Jahnke T, Czasch A, Schöffler M S, Kreidi K, Jagutzki O, Schmidt-Böcking H, Dörner R 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 103201
- [29] Pitzer M, Kunitski M, Johnson A S, Jahnke T, Sann H, Sturm F, Schmidt L Ph H, Schmidt-Böcking H, Dörner R, Stohner J, Kiedrowski J, Reggeline M, Marquardt S, Schiesser A, Berger R, Schoeffler M S 2013 *Science* **341** 1096
- [30] Lu C X, Shi M H, Pan S Z, Zhou L R, Qiang J J, Lu P F, Zhang W B, Wu J 2023 *J. Chem. Phys.* **158** 094302
- [31] Singh R K, Lodha G S, Sharma V, Prajapati I A, Subramanian K P, Bapat B 2006 *Phys. Rev. A* **74** 022708
- [32] Wu C, Wu C Y, Song D, Su H M, Yang Y D, Wu Z F, Liu X R, Liu H, Li M, Deng Y K, Liu Y Q, Peng L Y, Jiang H B, Gong Q H 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 103601
- [33] Wang E L, Shan X, Shen Z J, Gong M M, Tang Y G, Pan Y, Lau K C, Chen X J 2015 *Phys. Rev. A* **91** 052711
- [34] Jana M R, Ghosh P N, Bapat B, Kushawaha R K, Saha K, Prajapati I A, Safvan C P 2011 *Phys. Rev. A* **84** 062715
- [35] Wu C Y, Wu C, Fan Y M, Xie X G, Wang P, Deng Y K, Liu Y Q, Gong Q H 2015 *J. Chem. Phys.* **142** 124303
- [36] Xie X G, Wu C Y, Yuan Z Q, Ye D F, Wang P, Deng Y K, Fu L B, Liu J, Liu Y Q, Gong Q H 2015 *Phys. Rev. A* **92** 023417

SPECIAL TOPIC—The 70th anniversary of National University of Defense Technology

Dynamics of many-body fragmentation of carbon dioxide dimer tetravalent ions produced by intense femtosecond laser fields*

Zeng Ping¹⁾ Song Pan^{1)2)†} Wang Xiao-Wei¹⁾ Zhao Jing¹⁾
 Zhang Dong-Wen¹⁾ Yuan Jian-Min¹⁾³⁾ Zhao Zeng-Xiu^{1)‡}

1) (*Hunan Key Laboratory of Extreme Matter and Applications, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Henan Key Laboratory of Infrared Materials & Spectrum Measures and Applications, School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China*)

3) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100193, China*)

(Received 29 April 2023; revised manuscript received 23 May 2023)

Abstract

We study experimentally the three-body Coulomb explosion dynamics of carbon dioxide dimer $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ ions produced by intense femtosecond laser field. The three-dimensional momentum vectors as well as kinetic energy are measured for the correlated fragmental ions in a cold-target recoil-ion momentum spectrometer (COLTRIMS). Carbon dioxide dimer is produced during the supersonic expansion of $(\text{CO}_2)_2$ gas from a 30 μm nozzle with 10 bar backing pressure. The linearly polarized laser pulses with a pulse duration (full width at half maximum of the peak intensity) of 25 fs, a central wavelength of 790 nm, a repetition rate of 10 kHz, and peak laser intensities on the order of $8 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ are produced by a femtosecond Ti:sapphire multipass amplification system. We concentrate on the three-particle breakup channel $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$. The two-particle breakup channels, $(\text{CO}_2)_2^{4+} \rightarrow \text{CO}_2^{2+} + \text{CO}_2^{2+}$ and $\text{CO}_2^{2+} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O}^+$, are selected as well for reference. The fragmental ions are guided by a homogenous electric field of 60 V/cm toward microchannel plates position-sensitive detector. The time of flight (TOF) and position of the fragmental ions are recorded to reconstruct their three-dimensional momenta. By designing some constraints to filter the experimental data, we select the data from different dissociative channels. The results demonstrate that the three-body Coulomb explosion of $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ ions break into $\text{CO}_2^{2+} + \text{CO}^+ + \text{O}^+$ through two mechanisms: sequential fragmentation and non-sequential fragmentation, in which the sequential fragmentation channel is dominant. These three fragmental ions are produced almost instantaneously in a single dynamic process for the non-sequential fragmentation channel but stepwise for the sequential fragmentation. In the first step, the weak van der Waals bond breaks, $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ dissociates into two CO_2^{2+} ions; and then one of the C=O covalent bonds of CO_2^{2+} breaks up, the CO_2^{2+} ion breaks into CO^+ and O^+ . The time interval between the two steps is longer than the rotational period of the intermediate CO_2^{2+} ions, which is demonstrated by the circle structure exhibited in the Newton diagram. We find that the sequential fragmentation channel plays a dominant role in the three-body Coulomb explosion of $(\text{CO}_2)_2^{4+}$ ions in comparison of the event ratio of the two fragmentation channels.

Keywords: dimer, Coulomb explosion, sequential breakup, nonsequential fragmentation

PACS: 79.77.+g, 34.80.Ht, 33.20.Xx, 33.80.Rv

DOI: 10.7498/aps.72.20230699

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2019YFA0307703), the Major Research Plan of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91850201), the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12234020), the Key Program of the NSAF Joint Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1830206), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11974426, 11974425, 11774322).

† Corresponding author. E-mail: songpan14@nudt.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhaozengxiu@nudt.edu.cn



强飞秒激光场下二氧化碳二聚体四价离子的多体解离动力学

曾平 宋盼 王小伟 赵晶 张栋文 袁建民 赵增秀

Dynamics of many-body fragmentation of carbon dioxide dimer tetravalent ions produced by intense femtosecond laser fields

Zeng Ping Song Pan Wang Xiao-Wei Zhao Jing Zhang Dong-Wen Yuan Jian-Min Zhao Zeng-Xiu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 187901 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230699

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230699>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

BCl₃同位素分离中二聚体的浓度

Concentration of dimers for BCl₃ and rare gas atoms in BCl₃ isotope separation

物理学报. 2022, 71(24): 243401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221517>

金属纳米颗粒二聚体阵列的消光截面

Extinction cross section of dimer array of metallic nanoparticles

物理学报. 2021, 70(2): 024201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20200964>

劈裂环-盘二聚体结构的多重Fano共振

Multiple Fano resonances in gold split ring disk dimers

物理学报. 2022, 71(2): 027802 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210855>

等离子体风洞中释放二氧化碳降低电子密度

Electron density depletion by releasing carbon dioxide in plasma wind tunnel

物理学报. 2022, 71(14): 145202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212353>

不依赖激发光偏振方向的芯帽异构二聚体

Core-cap heterodimer independent of polarization direction of excitation light

物理学报. 2022, 71(3): 037801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211381>

中能Ne⁴⁺离子诱导的羰基硫分子三体碎裂动力学分析

Three-body fragmentation dynamics of OCS₃⁺ induced by intermediate energy Ne⁴⁺ ion impact

物理学报. 2018, 67(4): 043401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172163>

综述

集成二维材料非线性光学特性研究进展

刘宁¹⁾²⁾³⁾ 刘肯^{1)2)3)†} 朱志宏^{1)2)3)‡}

1) (国防科技大学前沿交叉学科学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学, 新型纳米光电信息材料与器件湖南省重点实验室, 长沙 410073)

3) (国防科技大学, 南湖之光实验室, 长沙 410073)

(2023年5月5日收到; 2023年6月11日收到修改稿)

全光信号处理中具有优异非线性光学特性的光子平台对于提升器件的集成度、调制速度以及工作带宽等性能参数至关重要。成熟的硅、氧化硅以及氮化硅光子平台由于材料本身中心对称, 基于这些平台的集成光子器件可实现的非线性光学功能受限; 二维材料尽管有着优异的非线性光学特性, 但只有原子层厚, 其非线性潜能无法被充分利用。将二维材料与成熟的光子平台集成, 在充分利用光子平台成熟加工工艺的基础上, 可以显著提高光与二维材料的相互作用, 提升光子平台的非线性光学性能。基于以上背景, 本文总结了近年来在基于转移方法和直接生长法制备的多种异质集成二维材料光子器件中进行非线性光学特性研究的最新进展; 阐述了相较于传统转移方法, 基于直接生长方法进行集成二维材料非线性光学研究的优势以及未来需要解决的技术难点; 指明了该领域未来的研究发展趋势; 并指出直接在各种成熟的光子平台上生长二维材料进行集成非线性光学特性的研究会对未来光通信、信号处理、光传感以及量子技术等领域的发展产生深远影响。

关键词: 硅/氮化硅光子平台, 二维材料, 光子集成, 非线性增强, 材料生长**PACS:** 42.65.-k, 42.65.Ky, 78.67.-n, 81.07.-b**DOI:** 10.7498/aps.72.20230729

1 引言

集成光子学近来发展迅猛^[1,2], 是5G通信和信号处理等领域的一种关键技术^[3-6]。集成光子芯片的数据传输容量以及调制速率等参数远优于传统的电子芯片^[7,8]。借助材料的非线性光学特性可实现频率转换^[9]、全光调制^[10]以及光谱展宽^[11]等多种功能, 因此芯片材料的非线性特性对提升器件集成度、调制速度及工作带宽等性能参数至关重要^[12]。绝缘体上硅 (silicon-on-insulator, SOI) 制备工艺成熟, 与互补金属氧化物半导体 (complementary metal oxide semiconductor, CMOS) 工艺兼容, 同时具有较大的克尔非线性^[13], 在集成非线性领域具有广泛的应用^[14-16]。虽然基于硅 (Si) 材料可以

制备出超低损耗的集成光学元件^[17], 但是在通信波段 Si 材料固有的双光子吸收 (two-photon absorption, TPA) 以及自由载流子吸收 (free-carrier absorption, FCA) 效应限制了 SOI 元件在光通信领域的应用^[18,19]; 相比之下, 氮化硅 (Si_3N_4) 材料在通信波段的 TPA 效应基本可以忽略^[20], 加之其较强的克尔非线性、宽透明窗口、高折射率以及成熟的微纳加工工艺等优势^[21-24], 是通信波段一种较为理想的集成非线性光学平台。但是由于 Si 和 Si_3N_4 材料本身的中心对称性, 二者不具有二阶非线性, 集成光子平台的非线性功能受限^[25]。在充分利用现有较为成熟的集成光子平台的基础上, 可以尝试在单一的光子平台中引入新的具有优异非线性光学特性的材料^[26], 在不破坏光学模式分布以及光传输特性的前提下, 提升集成平台的非线性光学表现。

† 通信作者. E-mail: liukener@163.com

‡ 通信作者. E-mail: zzhwcx@163.com

以石墨烯^[27]为代表的多种二维材料^[28–30]具有优异的非线性光学特性^[31,32],在频率转换、光调制以及光开关等非线性光学领域都有着广泛的应用^[33–42].然而,受限于其原子层厚度,光与二维材料之间的相互作用受限,其优异的非线性光学潜能无法被充分利用^[43].将二维材料与成熟的光子平台^[44]集成是充分发挥二维材料优异非线性光学特性的一种理想解决方案^[45]:首先,二维材料具有原子层厚度,与光子平台集成时不会破坏其中的光场分布以及光的传输特性;其次,二维材料表面自然钝化,没有悬空键,与光子结构集成时不用考虑晶格失配的问题;最后,集成平台中光与二维材料的相互作用增大,突破了二维材料原子层厚度的限制^[46–49],从而显著提升集成平台的非线性光学性能.

本综述从非线性光学的基本原理出发(第2节),总结了近年来在基于传统转移方法(第3节)和新兴的直接生长法(第4节)制备的多种集成二维材料-光子平台(谐振腔、超表面、光纤、片上波导等)中进行非线性光学特性研究的最新进展.直接在各种光子结构上生长二维材料克服了传统转移方法存在的各种弊端;但同时如何精确控制二维材料的生长位置,如何实现在纳米结构上均匀连续地生长二维材料等问题也亟待解决.相较于传统转移法,基于直接生长法还有很多领域亟待探索,如图1中红色字体部分所示.未来直接在各种成熟的

光子平台上直接生长二维材料进行集成光学非线性性的研究将是该领域的一个研究热点,持续深入的研究也会对光通信、信号处理、光传感以及量子技术等领域的发展产生深远影响.

2 非线性光学基本原理

非线性光学现象发生的一个前提条件是强光与非线性介质的相互作用^[50].由于激光的发现,1961年, Franken等^[51]第一次在石英中发现了二次谐波的产生(second harmonic generation, SHG)现象,开启了非线性光学实验研究的大门.非线性光学过程可以通过材料的极化 $P(r, t)$ 相对于入射光场 $E(r, t)$ 的泰勒级数展开^[52]来理解,其中 $P(r, t)$ 包括线性极化部分 $P_L(r, t)$ 和非线性极化 $P_{NL}(r, t)$ 部分:

$$P(r, t) = P_L(r, t) + P_{NL}(r, t), \quad (1)$$

$$P_L(r, t) = \chi^{(1)}E(r, t), \quad (2)$$

$$P_{NL}(r, t) = \chi^{(2)}E(r, t)^2 + \chi^{(3)}E(r, t)^3 + \dots + \chi^{(n)}E(r, t)^n, \quad (3)$$

其中, $\chi^{(n)}$ 为 n 阶电极化率.

当光强较弱时,非线性极化率部分可以忽略不计,只考虑线性光学过程.(2)式中 $\chi^{(1)}$ 决定材料的线性折射率,与材料的折射和吸收特性相关^[53].

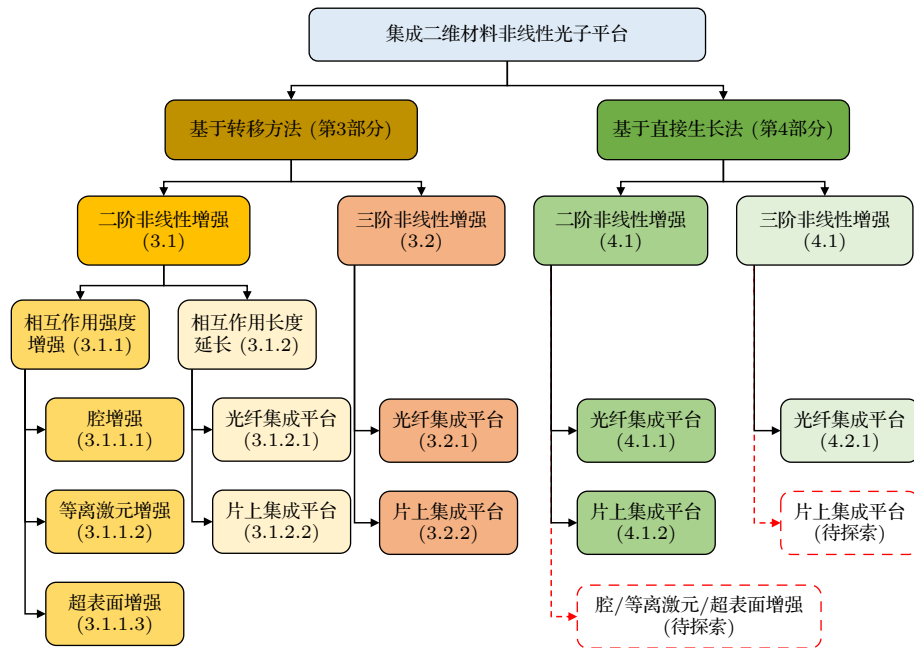


图1 集成二维材料非线性光子平台研究框架

Fig. 1. Research framework of nonlinear photonic platforms integrated with two-dimensional materials.

当光强较强时 ($E(r, t)$ 一般需要在 10^5 — 10^8 V/m 之间), 会发生非线性光学过程, (3) 式中的 $\chi^{(2)}$ 与二阶非线性过程相关, 如 SHG, 和频产生 (sum frequency generation, SFG) 等. $\chi^{(2)}$ 在具有中心对称性的材料中数值为零, 常见的 Si, 氧化硅 (SiO_2), Si_3N_4 材料平台都因材料本身的中心对称性而不具有二阶非线性; $\chi^{(3)}$ 与材料的三阶非线性光学过程相关, 如三次谐波产生 (third harmonic generation, THG), 四波混频 (four wave mixing, FWM), 自发相位调制 (self phase modulation, SPM) 等. 所有材料都具有三阶非线性, 与材料是否具有中心对称性无关; $\chi^{(n)}$ 为高阶电极化率, 与高阶非线性过程相关. 以石英为例, 从理论上推算, 石英的 $\chi^{(3)}$ 比其 $\chi^{(2)}$ 低 11 个数量级 [54], 触发同一种材料平台中的高阶非线性过程所需场强要比触发低阶非线性过程高得多. 因此, 二阶和三阶非线性过程是研究最为广泛的非线性光学过程. 常见非线性过程的能量转变图如图 2 所示.

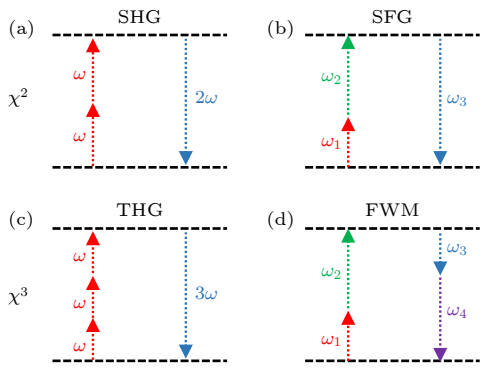


图 2 非线性光学过程中典型的频率转换过程能量示意图, 其中包括二阶非线性过程中的 SHG (a) 和 SFG (b) 以及三阶非线性过程中的 THG (c) 和 FWM (d)

Fig. 2. Typical energy diagrams of frequency conversion process in nonlinear optical processes, including SHG (a) and SFG (b) in second-order nonlinear process and THG (c) and FWM (d) in third-order nonlinear process.

3 基于转移方法制备的集成二维材料非线性光子器件

3.1 二阶非线性过程增强的二维材料集成平台

二维材料中的二阶非线性光学过程 (主要包括 SHG 和 SFG 过程) 在许多经典和量子应用中扮演着十分重要的角色 [55]. 二维材料中二阶非线性过程增强的思路可分为两种: 一是使用各种光子

结构 (谐振腔、表面等离子激元、介质超表面等) 增大局域光场的强度, 将二维材料与上述光子结构集成, 提高光与二维材料相互作用的强度 (见 3.1.1 节); 二是将二维材料与微纳光纤 [56,57] 或片上微纳结构集成, 通过倏逝场与二维材料的相互作用增大光与二维材料的相互作用长度 (见 3.1.2 节).

3.1.1 光与二维材料相互作用强度增强的集成平台

3.1.1.1 二维材料中空增强的 SHG 过程

单层过渡金属硫族化合物 (transition metal chalcogenides, TMDCs) 为直接带隙半导体, 带隙覆盖可见光到近红外光谱范围, 具有很高的非线性, 是集成非线性光子器件研究中较为理想的一种二维材料 [58–63]. 将二维材料与各种光学微腔集成, 借助腔内光场的谐振增强效应可实现 SHG 的显著增强. 2016 年, Yi 等 [64] 基于微机电系统设计了一种可调谐的片上法布里-珀罗 (F-P) 谐振腔, 通过改变电压就可以调节 F-P 腔的长度, 进而改变谐振条件. 将单层硫化钼 (MoS_2) 置于其中 (图 3(a)), 实现了 SHG 信号 3300 倍的增强; 2016 年, Day 等 [65] 将单层 MoS_2 转移至由分布式布拉格反射镜 (distributed Bragg reflector, DBR) 构成的 F-P 腔中间 (图 3(b)), 通过增强腔内泵浦光束与二维材料的相互作用强度实现 SHG 的增强.

然而, 上述两个工作中的 F-P 腔都是微米量级, 很难做到片上集成, 且腔的品质因子 (quality factor, Q 值) 不够高, SHG 的触发需要较高的功率条件. 因此, 2017 年, Fryett 等 [66] 将机械剥离的单层硒化钨 (WSe_2) 与 Si 光子晶体谐振腔集成 (图 3(c)), 通过在光子晶体腔模式附近泵浦, 借助泵浦光子与腔模式之间的耦合效应实现了 SHG 约 200 倍的增强; 然而, 上述基于腔增强的 SHG 过程使用的泵浦源都是脉冲激光器, 需要较高的峰值功率. 借助 GaSe 材料超高的二阶非线性 [67] 以及光子晶体腔中的局域模式谐振, 2018 年, Gan 等 [68] 将二维硒化镓 (GaSe) 与 Si 光子晶体集成 (图 3(d)), 实现了在二维 GaSe 中低功率连续波激光器泵浦条件下的高效 SHG 过程.

2020 年, Han 等 [69] 提出了一种纳米颗粒置于镜面上的系统 (图 3(e)), 当此纳米腔的表面等离子激元共振波长与单层硫化钼 (WS_2) 的二次谐波波长发生共振时, 就可以实现 SHG 的显著增强; 2022 年,

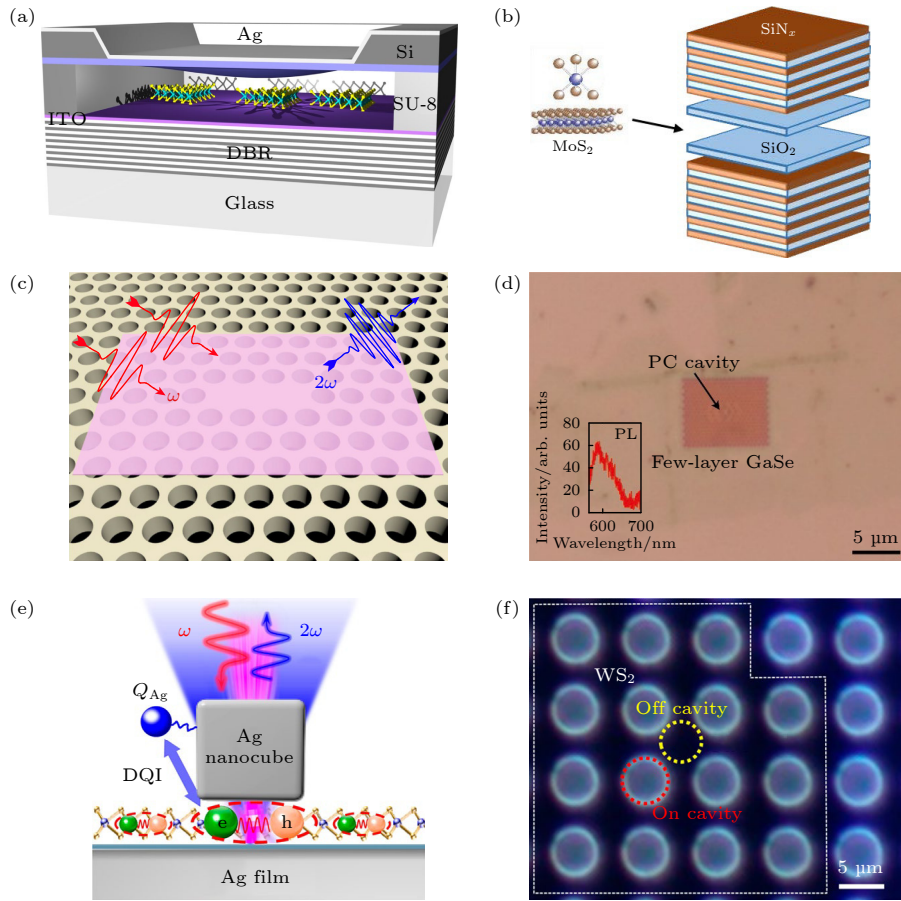


图 3 二维材料中空腔增强的 SHG 过程研究进展 (a) 二维材料中 SHG 的光机械增强^[64]; (b) 二维 MoS₂ 中空腔增强的 SHG^[65]; (c) 单层 WSe₂^[66] 以及 (d) 层状 GaSe^[68] 中 Si 光子晶体腔增强的 SHG; (e) 单层 WS₂-Ag 纳米腔中谐波谐振增强的 SHG^[69]; (f) 单层 WS₂ 置于 Si 基底上实现 SHG 的增强^[70]

Fig. 3. Research progress on cavity-enhanced SHG process in 2D materials: (a) Optomechanical enhancement of SHG in 2D material^[64]; (b) microcavity enhanced SHG in 2D MoS₂^[65]; silicon photonic crystal cavity enhanced SHG from monolayer WSe₂^[66] (c) and layered GaSe^[68] (d); (e) harmonic resonance enhanced SHG in a monolayer WS₂-Ag nanocavity^[69]; (f) enhancement of SHG from monolayer WS₂ on Si substrate^[70].

Shi 等^[70] 将单层 WS₂ 置于 Si 的孔洞阵列上方, 借助 F-P 腔内电场的增强以及悬空二维材料中激子震荡强度的增强, 实现了 SHG 约 600 倍的增强; 该课题组还设计了一种简易的二次谐波信号放大器, 将 MoS₂/WS₂ 异质结构悬空置于具有孔洞结构的 SiO₂/Si 衬底上, 在 355—470 nm 波长范围内实现了高效的 SHG 过程^[71].

3.1.1.2 二维材料中等离激元增强的 SHG 过程

除了利用各种光学腔增强光与二维材料的相互作用强度外, 也可以利用表面等离子激元或介质超表面实现对泵浦光场的局域及增强, 从而实现 SHG 的增强.

图 4 所示为二维材料-金属表面等离子激元集成结构中 SHG 增强的研究进展. 2018 年, Wang 等^[72] 将单层 WSe₂ 转移到带有纳米沟槽的金 (Au) 薄膜上 (图 4(a)), 借助沟槽对外部激励场的局域增强作

用, 实现了可见光波段 SHG 信号约 7000 倍的增强; 类似地, 2018 年, Shi 等^[73] 将单层 WS₂ 与亚波长银 (Ag) 纳米槽光栅集成, 通过调谐表面等离激元模式与 WS₂ 的二次谐波频率共振, 实现了单层 WS₂ 中 SHG 约 400 倍的增强; 2018 年, Chen 等^[74] 将生长在蓝宝石衬底上单层 WS₂ 转移至预先制备的 Au 超表面上 (图 4(c)), 实现了可见光波段的有效非线性频率转换; 不同于以前报道的金属光栅结构, 2021 年 Leng 等^[75] 提出了一种单层 MoS₂ 置于悬空的穿孔 Ag 薄膜上的集成结构. 为了避免二维材料转移到金属薄膜上后材料损坏或者污染, 他们还在穿孔的 Ag 薄膜和二维材料界面处设计了 Si₃N₄ 的薄膜结构 (图 4(d)). 当泵浦激光的中心波长与集成体系的表面等离激元模式共振时, 室温条件下该混合结构的 SHG 强度有超过 3 个数量级的增大.

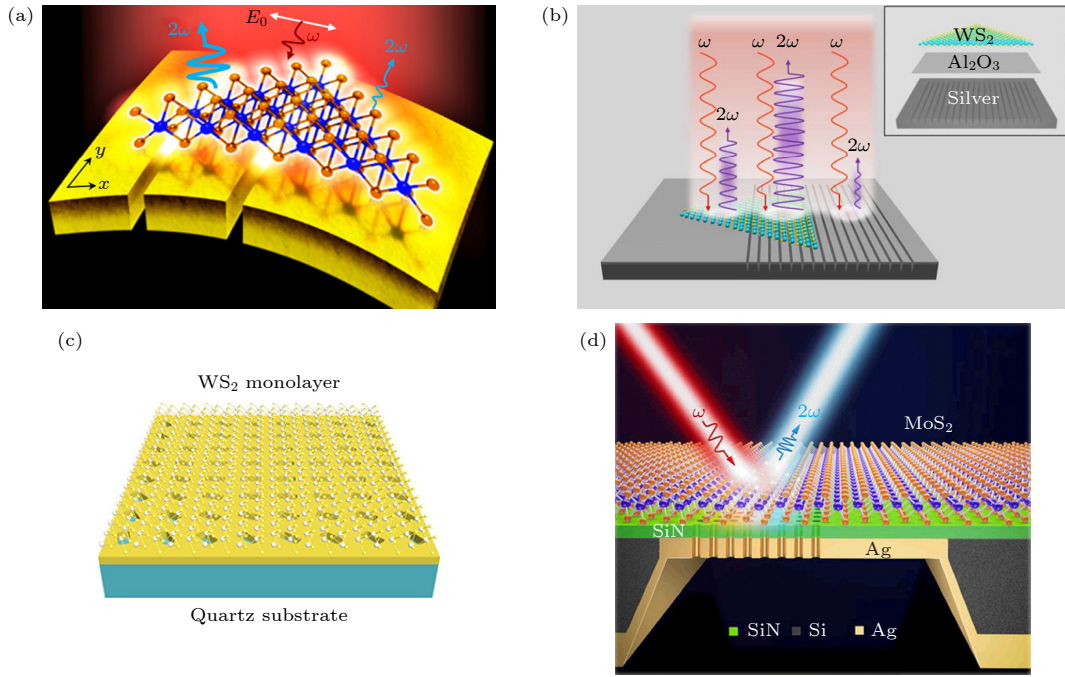


图 4 二维材料中等离激元增强的 SHG 过程研究进展 (a) 柔性衬底上单层 WS₂ 中等离激元增强的 SHG^[72]; (b) 单层 WS₂ 中等离激元增强的光学非线性^[73]; (c) WS₂-Au 纳米孔洞集成超表面在可见光波段实现非线性超透镜^[74]; (d) 单层 MoS₂ 置于悬空的金属纳米结构上通过等离子激元谐振效应实现 SHG 的增强^[75]

Fig. 4. Research progress on plasmonic-enhanced SHG process in 2D materials: (a) Plasmon-enhanced SHG from monolayer WS₂ on flexible substrates^[72]; (b) plasmonic enhancement of optical nonlinearity in monolayer WS₂^[73]; (c) WS₂-Au nanohole hybrid metasurface for nonlinear metalenses in the visible region^[74]; (d) enhanced SHG in monolayer MoS₂ on suspended metallic nanostructures by plasmonic resonances^[75].

3.1.1.3 二维材料中介质超表面增强的 SHG 过程

除了金属表面等离子激元结构, 使用介质超表面结构增强二维材料中的 SHG 过程也有着广泛的研究. 与金属表面等离子激元相比, 介质超表面结构没有欧姆损耗, 有更高的激光损伤阈值, 预期可以实现高转换效率的 SHG 过程以及对非线性过程的灵活控制^[76]. 2018 年, Gan 等^[68]就在二维的 GaSe-Si 光子晶体腔集成系统中实现了低功率连续波激光器泵浦条件下的高效 SHG 过程. 2019 年, 该课题组将二维的 GaSe 纳米片与 Si 超表面集成 (图 5(a)), 实现了高效的频率上转换过程 (SHG 和 SFG)^[77]; 2020 年, Bernhardt 等^[78]设计了一种谐振的面内不对称介电超表面, 该超表面支持一种高 Q 值的光学谐振, 即连续束缚态 (bound states in the continuum, BIC). 将单层 WS₂ 与此超表面集成 (图 5(b)), 研究人员实现了单层 WS₂ 中 SHG 超 3 个数量级的增强; 2020 年, Zhang 等^[79]设计了一种基于 Si₃N₄ 结构的亚波长光栅结构, 将单层 MoS₂ 与该亚波长光栅结构集成 (图 5(c)), 通过调谐激光器的泵浦波长与该集成结构谐振, 实现了单层 MoS₂

中 SHG 约 170 倍的增强; 为了推进二维材料-介电超表面的规模化制备, 2021 年, Löchner 等^[80]将通过化学气相沉积 (chemical vapor deposition, CVD) 生长的单层 MoS₂ 与经过谐振设计优化的 Si 超表面集成 (图 5(d)), 在实验中实现了 SHG 近 40 倍的增强.

3.1.2 光与二维材料相互作用长度增加的集成平台

3.1.1 节中梳理的相关研究是利用谐振结构实现对泵浦光场的局域增强, 进而增强光与二维材料相互作用的强度实现集成平台中二阶非线性过程的增强. 此外, 将二维材料与光纤或片上微纳结构集成, 借助倏逝场与二维材料的相互作用, 可以延长光与二维材料的相互作用长度, 实现二阶非线性过程的增强.

3.1.2.1 二维材料-光纤集成平台中的 SHG 增强

2019 年, Chen 等^[81]利用转移的方法将单层 WS₂ 与微光纤 (microfiber) 集成 (图 6(a)), 借助微光纤中倏逝场与二维 WS₂ 的相互作用, 实现了 WS₂-微光纤集成结构中 SHG 20 倍的增强.

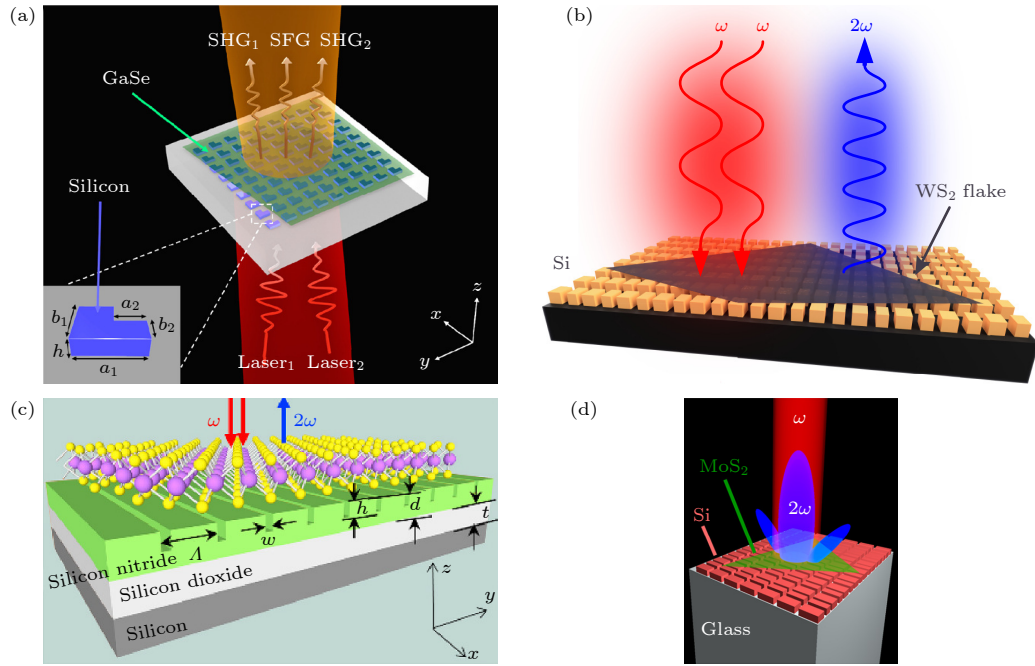


图 5 二维材料中介质超表面增强的 SHG 过程研究进展 (a) Si 超表面与二维 GaSe 集成实现 SHG 和 SFG^[77]; (b) WS₂ 单层中准 BIC 谐振增强的 SHG^[78]; (c) 借助 Si₃N₄ 亚波长光栅结构实现单层 MoS₂ 中 SHG 的增强^[79]; (d) 混合介电超表面上 MoS₂ 单层中 SHG 的增强^[80]

Fig. 5. Research progress on SHG process enhanced by dielectric metasurface in 2D materials: (a) SHG and SFG from a Si metasurface integrated with 2D GaSe^[77]; (b) quasi-BIC resonant enhancement of SHG in WS₂ Monolayers^[78]; (c) enhancement of SHG in monolayer MoS₂ by a Si₃N₄ subwavelength grating^[79]; (d) hybrid dielectric metasurfaces for enhancing SHG in MoS₂ monolayers^[80].

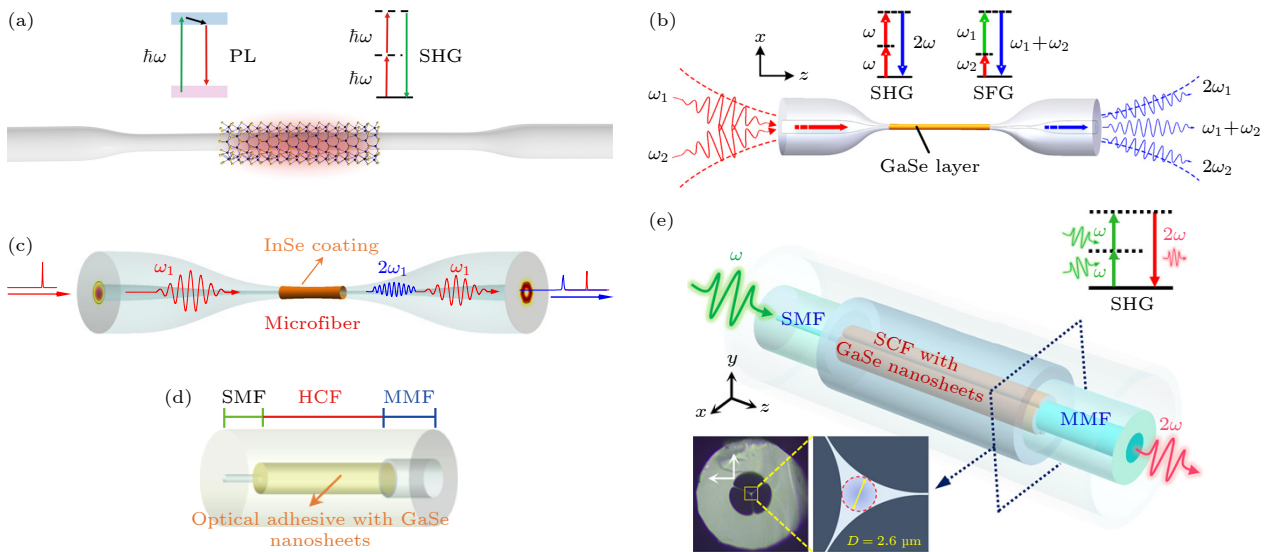


图 6 (a) 基于转移方法制备的单层 WS₂-光纤纳米线混合结构实现 SHG 的增强^[81]. (b)–(e) 基于溶液法制备的二维材料-光纤集成结构实现二阶非线性过程增强的研究进展 (b) 少层 GaSe 辅助光学微光纤实现高效的二阶非线性过程^[82]; (c) 连续波泵浦的 InSe 集成的微光纤中频率上转换^[84]; (d) 填充有 GaSe 纳米片的 HCF 结构示意图^[85]; (e) GaSe 纳米片集成的 SCF 实现 SHG 过程^[86]

Fig. 6. (a) Enhanced SHG in hybrid WS₂-optical-fiber-nanowire structure prepared by transfer method^[81]. (b)–(e) Research progress on enhancement of second-order nonlinear process of 2D material-optical fiber integrated structures prepared by solution methods: (b) High-efficiency second-order nonlinear processes in an optical microfiber assisted by few-layer GaSe^[82]; (c) continuous-wave pumped frequency upconversions in an InSe-integrated microfiber^[84]; (d) schematic of a HCF filled with GaSe nanosheets^[85]; (e) SCF with embedded GaSe nanosheets for SHG^[86].

除了单层 TMDCs 具有优异的二阶非线性光学特性外, 层状的 GaSe 材料在二阶非线性领域也有着广泛的应用. 2020 年, Jiang 等^[82] 利用滴覆技术将少层 GaSe 纳米片与微光纤集成 (图 6(b)), 借助 GaSe 材料超高的二阶非线性实现了集成结构中 SHG 的显著增强; 类似地, 2021 年该课题组利用热光沉积^[83] 的方法将具有高二阶非线性系数的硒化铟 (InSe) 与微光纤集成 (图 6(c)), 在连续波激光器泵浦条件下实现了全光纤结构中的高效二阶非线性过程^[84].

上述 3 个工作中利用的都是微光纤, 但是由于微光纤的结构特性, 集成后二维材料都是直接暴露在空气中, 很容易受到周围环境因素如振动、灰尘以及氧气等影响. 因此需要寻找更加稳定的集成光纤平台. 2022 年该课题组将少层 GaSe 与空芯光纤 (hollow-core fiber, HCF)(图 6(d))^[85] 以及悬芯光纤 (suspended core fiber, SCF)(图 6(e))^[86] 集成, 同样实现了二维材料-光纤集成结构中高效的二阶非线性过程.

3.1.2.2 二维材料-光纤集成平台中的 SHG 增强

将二维材料与片上波导或微环谐振腔集成, 同样

可以增大光与二维材料的相互作用长度, 实现二阶非线性过程的增强. 2017 年, Chen 等^[87] 将单层硒化钼 (MoSe₂) 与 Si 波导集成 (图 7(a)), 借助 Si 平板波导中的倏逝场与二维材料的相互作用, 实现了单层 MoSe₂ 中 SHG 的 5 倍增强; 介电氧化钛 (TiO₂) 纳米线在可见光波段有较高的折射率和较低的损耗, 是片上集成平台中一种较为理想的研究平台. 2019 年, Li 等^[88] 将单层 MoS₂ 与单根 TiO₂ 纳米线集成 (图 7(b)), 实现了 MoS₂/纳米线集成结构中 SHG 强度 2 个数量级的增强; 2022 年, Wang 等^[89] 将少层 GaSe 纳米片与 Si₃N₄ 微环谐振腔集成 (图 7(c)), 借助 GaSe 材料的超高二阶非线性特性以及微环腔中的谐振增强效应, 在连续波激光器泵浦的条件下实现了高效的倍频及和频转换过程; 2023 年哈尔滨工业大学 (深圳) 与香港理工大学合作, 将具有优异二阶非线性特性的层状 SnP₂Se₆ 与 Si₃N₄ 微环谐振腔集成 (图 7(d)), 实现了 SHG 的增强以及 SHG 辅助的通信波段高性能光电探测器^[90].

3.2 三阶非线性过程增强的二维材料集成平台

材料非线性折射率 n_2 是反映材料三阶非线性

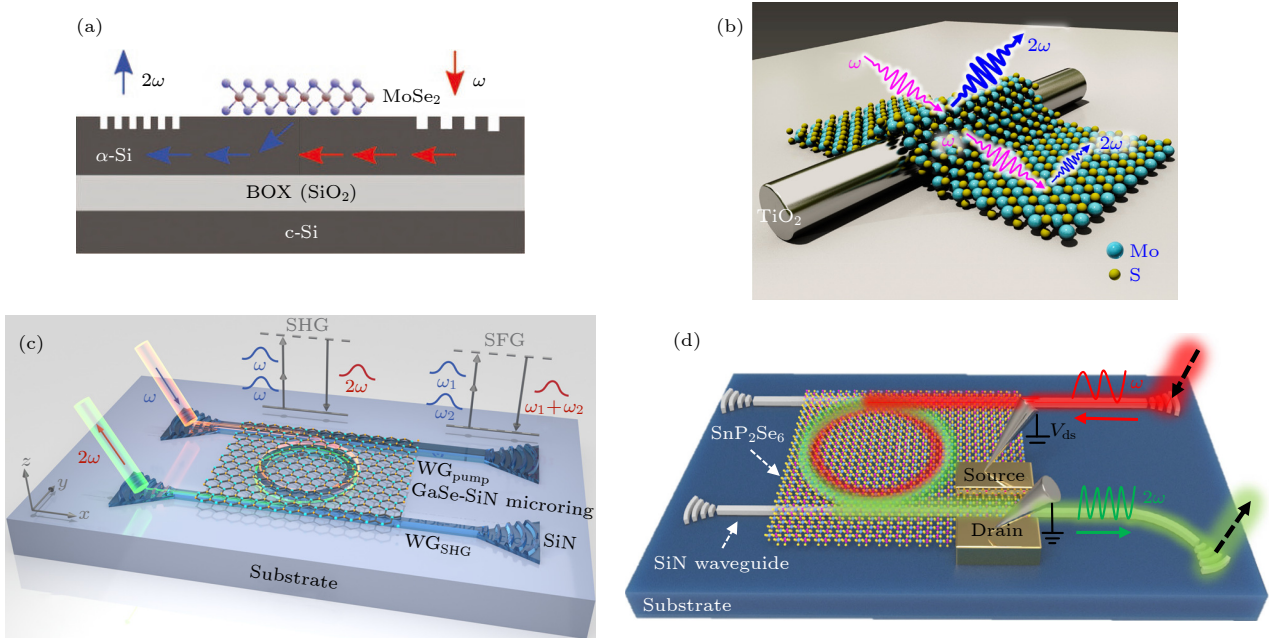


图 7 基于转移方法制备的二维材料-片上集成平台中二阶非线性增强的研究进展 (a) Si 波导上二维 MoSe₂ 中 SHG 的增强^[87]; (b) 单层 MoS₂ 与 TiO₂ 纳米线集成实现 SHG 的增强^[88]; (c) 少层 GaSe 与 Si₃N₄ 微环集成实现高效的 SHG 和 SFG 过程^[89]; (d) SHG 辅助的 SnP₂Se₆ 光电探测器^[90]

Fig. 7. Research progress on enhanced second-order nonlinear process enabled by integrated 2D material - on-chip integrated platforms prepared by transfer methods: (a) Enhanced SHG from two-dimensional MoSe₂ on a Si waveguide^[87]; (b) enhancement of SHG in a TiO₂ nanowire integrated with monolayer MoS₂^[88]; (c) high-efficiency SHG and SFG in a Si₃N₄ microring integrated with few-layer GaSe^[89]; (d) a schematic of the SHG-assisted SnP₂Se₆ photodetector^[90].

的关键参数之一,即在强光条件下,反映光强导致的折射率的改变,也称为光学克尔效应. 非线性折射率 n_2 与三阶电极化率 $\chi^{(3)}$ 直接相关:

$$n_2 = 3\text{Re} \left[\frac{\chi^{(3)}}{4cn_0^2\varepsilon_0} \right], \quad (4)$$

其中, c 为光速, n_0 为线性折射率, ε_0 为真空介电常数.

闭孔 (closed-aperture, CA) Z 扫描 (Z-scan) 是一种用来测量二维材料非线性折射率的典型方法^[9]: 将二维材料置于泵浦脉冲激光器以及光阑-光功率计中间, 移动二维材料的位置 (沿 Z 轴) 得到透射光功率与二维材料所处 z 位置的关系. 然后对得到的曲线进行拟合就可以得到相应二维材料的非线性折射率. 表 1 为近年来基于 Z 扫描方法得到的常见二维材料 (石墨烯、氧化石墨烯、TMDCs、黑磷等) 的非线性折射率. 可以看出即使是同一种二维材料, 在不同的厚度及不同的泵浦波长条件下根据实验结果拟合出的非线性折射率都有一定的不

同. Si, SiO₂ 以及 Si₃N₄ 材料在通信波段的非线性折射率在 10⁻¹⁸—10⁻¹⁹ 量级, 表 1 中列出的不同二维材料的非线性折射率要比上述三种平台高出 2—8 个数量级. 因此, 将层状的二维材料与成熟的光子平台集成, 在不破坏集成平台光学模式分布以及光学传输特性的基础上, 还可以赋予平台更优异的三阶非线性光学特性.

3.2.1 二维材料-光纤集成平台中的三阶非线性增强

借助石墨烯在宽光谱范围内的超高三阶非线性, 2015 年 Wu 等^[100] 在石墨烯包覆的微光纤 (graphene-coated microfiber, GCM) 结构中实现了级联的 FWM 过程. 图 8(a) 为 GCM 的结构示意图, 其中微光纤的制备是将标准单模光纤 (single-mode fiber, SMF) 浸泡在氢氟酸中经过化学刻蚀制成; 然后通过湿法转移的手段实现 CVD 生长的石墨烯对微光纤的包覆作用. 当微光纤上没有石墨烯材料时, 在较高的泵浦功率条件下

表 1 基于 Z 扫描法测量出的不同二维材料的非线性折射率 n_2
Table 1. Nonlinear refractive index n_2 of different 2D materials measured by Z-scan method.

二维材料	厚度	泵浦波长/nm	$n_2 / (\text{m}^2 \cdot \text{W}^{-1})$	参考文献	发表年度
气相生长的石墨烯	单层	1550	-10^{-11}	[92]	2012
	5—7层	1150—2400	$-(0.55-2.5) \times 10^{-13}$	[93]	2016
化学合成的氧化石墨烯	2 μm	800	7.5×10^{-13}	[94]	2014
	1 μm	1550	4.5×10^{-14}	[95]	2017
气相生长的硫化钼	25 μm	1064	$(1.88 \pm 0.48) \times 10^{-16}$	[96]	2016
气相生长的硫化钨	0.75 nm	1040	$(1.28 \pm 0.03) \times 10^{-14}$	[97]	2016
气相生长的硒化钨	11.4 nm	1040	$(-1.87 \pm 0.47) \times 10^{-15}$	[97]	2016
机械剥离的黑磷	15 nm	1030	-1.64×10^{-12}	[98]	2018
气相生长的硒化钼	20 层	800	-1.33×10^{-15}	[99]	2020

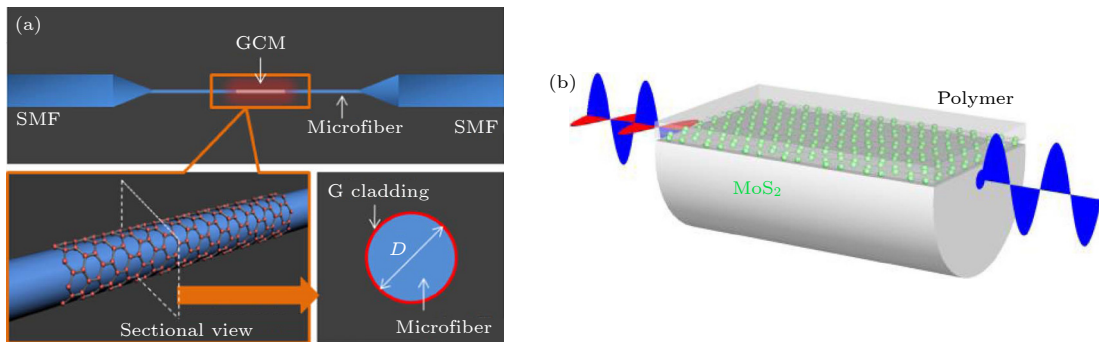


图 8 基于转移方法制备的三阶非线性增强的二维材料-光纤集成平台 (a) GCM 中实现级联四波混频过程^[100]; (b) MoS₂ 覆盖的单模光纤示意图^[101]

Fig. 8. 2D material-optical fiber integrated platforms with enhanced third-order nonlinear process based on transfer methods: (a) Generation of cascaded FWM with GCM^[100]; (b) schematic of a MoS₂-coated SMF^[101].

并未在微光纤中观察到四波混频现象. 但是在相同的泵浦功率条件下, GCM 中就可以在 1546—1558 nm 波段内观察到的级联四波混频现象.

2018 年, Zhang 等^[101]提出了图 8(b) 所示的一种基于少层 MoS₂ 覆盖边侧抛光光纤的三阶非线性增强的集成平台, 其中使用了高折射率的聚合物 (polymer) 用于覆盖二维材料. 聚合物除了能起到提高器件稳定性和耐用性的作用外, 还可以提高二维材料的光学限制因子. 最终借助集成器件中三阶非线性的增强实现了对入射光谱的展宽.

3.2.2 二维材料-片上集成平台中的三阶非线性增强

由于 Si 材料具有较大的克尔非线性系数^[102], 所以在 Si 基集成平台中不引入新的高三阶非线性材料在一定入射光强条件下也可以观察到 THG 等三阶非线性光学效应^[103]. 此外, 通过制备特殊的硅基光子结构, 如光子晶体波导^[104,105], 悬空薄膜波导^[25], 悬空的 Si 微环谐振腔^[106]等, 也可以实现三阶非线性的增强.

石墨烯的克尔系数要比 Si 大 5—6 个数量级^[107], 将单层石墨烯与 Si 波导^[108–110]或微环谐振腔^[111]集成, 可以实现 SPM 或者 FWM 等三阶非线性效应的增强. 早在 2015 年, 笔者所在团队就

基于转移方法实现了石墨烯/Si 波导集成结构中三阶非线性过程的增强^[108]. 图 9(a) 为飞秒激光脉冲在石墨烯/Si 集成波导中传播的示意图. 当 Si 脊形波导上无石墨烯覆盖时 (图 9(b-i)), 尽管 Si 具有较高的克尔非线性, 但在较高泵浦功率条件下并未观察到明显的光谱展宽效果 (图 9(b-ii)); 将单层石墨烯转移到 Si 波导上之后 (图 9(c-i)), 可以从图 9(c-ii) 看出, 在相同泵浦条件下, 由于集成波导三阶非线性的增强, 泵浦脉冲出现明显展宽; 但是由于单层石墨烯的厚度只有 0.34 nm, 将石墨烯转移到 Si 波导的上表面后, 光与二维材料只能通过较弱的倏逝场耦合, 相互作用受限^[112], 石墨烯超高的克尔非线性未得到充分利用; 因此笔者团队提出将石墨烯转移到 Si 波导上后, 再沉积 SiO₂ 和 Si₃N₄ 来提高石墨烯层中的电场强度. 从图 9(d-ii) 中可以看出对于相同功率的类 TM 模, 沉积有 SiO₂ 和 Si₃N₄ 的石墨烯/Si 混合波导中光谱展宽效果进一步提升.

此外, Ji 等^[111]在 2015 年将单层石墨烯与半径为 10 μm 的 Si 微环谐振腔集成 (图 10(a)), 实现了 FWM 转换效率最大 6.8 dB 的增强; 2019 年 Feng 等^[110]将单层石墨烯与 Si 波导集成 (图 10(b)), 实现了石墨烯/Si 集成波导中 SPM 效应的增强.

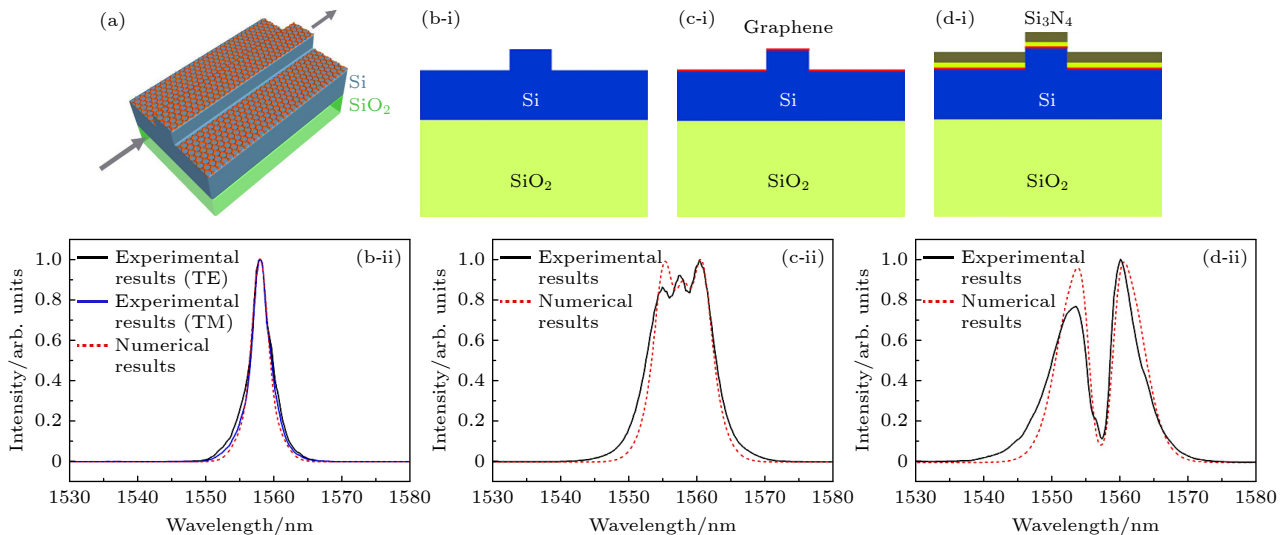


图 9 石墨烯/Si 非线性脊形波导中的超快脉冲传播^[108] (a) 超快脉冲在石墨烯/Si 混合脊形波导中传播的示意图; Si 脊形波导 (b-i), 石墨烯/Si 脊形波导 (c-i) 以及石墨烯/Si 类狭缝波导 (d-i) 的示意图; 飞秒脉冲沿着 Si 脊形波导 (b-ii), 石墨烯/Si 脊形波导 (c-ii) 以及石墨烯/Si 类狭缝波导 (d-ii) 传播后的实验测得的以及数值计算的输出光谱

Fig. 9. Ultra-fast pulse propagation in nonlinear graphene/Si ridge waveguide^[108]: (a) Schematic of ultra-fast pulse propagation along the hybrid graphene/silicon ridge waveguide; schematic of a Si ridge waveguide (b-i), a graphene/Si ridge waveguide (c-i) and a graphene/Si slot-like ridge waveguide (d-i); experimentally measured and numerically calculated output spectra of the femto-second pulses propagating along the Si ridge waveguide (b-ii), the graphene/Si ridge waveguide (c-ii) and the graphene/Si slot-like ridge waveguide (d-ii).

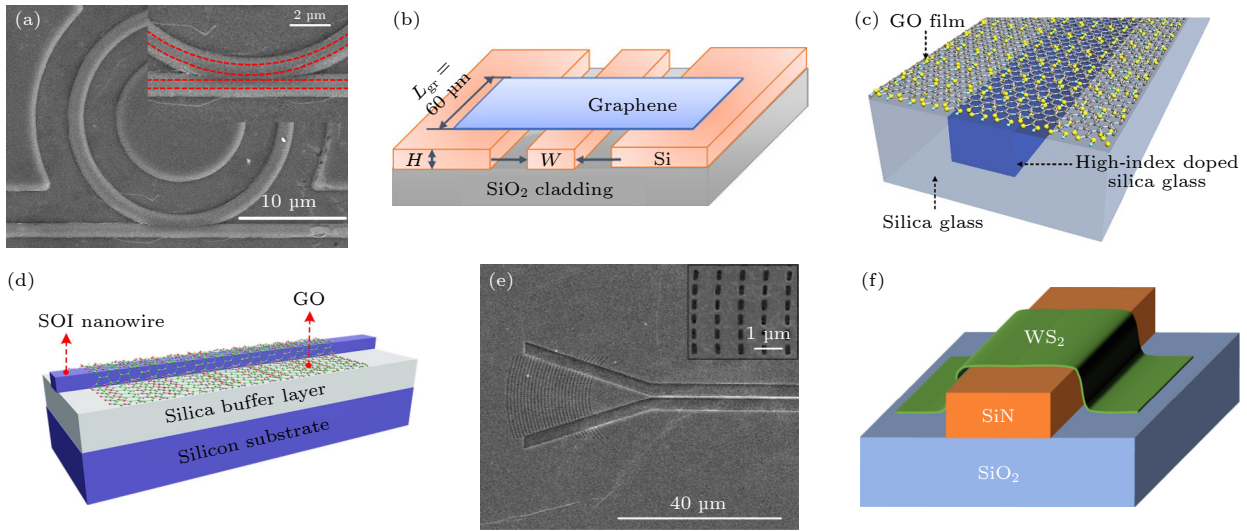


图 10 基于转移方法实现片上集成二维材料三阶非线性增强的研究进展 (a) Si-石墨烯微环谐振腔集成实现 FWM 的增强^[111]; (b) Si/石墨烯混合波导实现 SPM 的增强^[110]; (c) GO/Hydex 混合波导实现 FWM 的增强^[122]; (d) 二维 GO 薄膜与 Si 纳米线集成实现 SPM 的增强^[124]; (e) MoS₂ 置于 Si 上波导实现光学克尔非线性的增强^[130]; (f) 少层 WS₂ 与 Si₃N₄ 波导异质集成实现非线性的增强^[132]

Fig. 10. Research progress on third-order nonlinear enhancement of on-chip integrated 2D materials based on transfer methods: (a) Enhanced FWM in a Si-graphene microring resonator^[111]; (b) enhanced SPM of graphene/Si hybrid waveguide^[110]; (c) enhanced FWM in GO/hydex hybrid waveguide^[122]; (d) enhanced SPM in Si nanowires integrated with 2D GO Films^[124]; (e) enhanced optical Kerr nonlinearity of MoS₂ on Si waveguides^[130]; (f) enhancing Si₃N₄ waveguide nonlinearity with heterogeneous integration of few-layer WS₂^[132].

与石墨烯相比,氧化石墨烯 (graphene oxide, GO)^[113–115] 具有良好的线性和非线性光学特性,且兼具低的吸收损耗、大的可调带隙^[116]、可大规模片上集成^[117]等优势,在集成非线性光子学领域有着广泛的应用^[118–121].近年来, Moss 等^[122–129]研发了一种在集成光子芯片上不需要转移的 GO 薄膜逐层覆盖技术,将 GO 薄膜与高折射率掺杂氧化硅 (hydex)^[122,123] (图 10(c))、Si^[124,125] (图 10(d)) 以及 Si₃N₄^[126–129] 微纳结构集成,显著提高了集成光子芯片的三阶非线性光学特性.

此外,借助 TMDCs^[130–133] (图 10(e), (f))、硫化镓 (GaS)^[134]、有机物^[135]等材料与片上微纳结构的集成,也可以显著提高集成光子芯片的三阶非线性特性.

4 基于直接生长方法制备的集成二维材料非线性光子器件

4.1 二阶非线性过程增强的二维材料集成平台

4.1.1 二维材料-光纤集成平台中的二阶非线性增强

图 6 和图 8 所示为在基于转移方法制备的二维

维材料-光纤集成平台中实现非线性增强的研究进展.但是,在将二维材料转移至光纤的过程中,无法规避二维材料受损、器件制备的可重复性以及可控性差等问题;基于溶液法实现的二维材料与光纤集成过程中也会不可避免地引入杂质,增加光传输过程中的散射和吸收损耗;此外,这种转移的方法无法实现二维材料对光纤内/外壁连续均匀包覆;且转移的方法只适用于实验室的研究,无法实现大规模制备.

针对传统基于转移方法将二维材料与光纤集成存在的上述弊端,研究人员开始提出使用直接生长的方法实现二维材料与光纤的集成. Chen 等^[136]在 2019 年提出在光子晶体光纤 (photonic crystal fibre, PCF) 中直接生长石墨烯.在约 1100 °C 的生长条件下,该课题组实现了在 PCF 内/外壁中约 50 cm 长单层石墨烯的连续均匀生长,实现了光与物质相互作用的显著增强;对于 TMDCs, 2020 年该课题组提出了一种如图 11(a) 所示的两步化学气相沉积法^[137]: 首先借助 HCF 毛细吸附作用在光纤内壁充满含有过渡金属元素的盐溶液作为后续生长的先驱物;然后在高温条件下在光纤内壁生长 TMDCs. 基于上述方法,研究人员在 HCF 中生长了长度约为 25 cm 的均匀连续单层 MoS₂, MoS₂/HCF 集成光纤也表现出二阶非线性的显著增强.

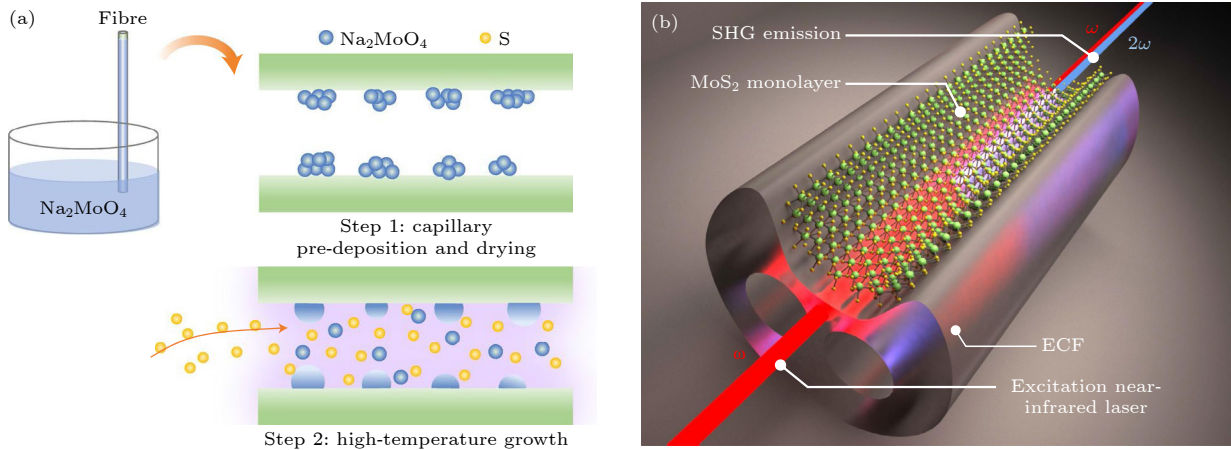


图 11 基于直接生长法制备的二阶非线性增强的二维材料-光纤集成平台 (a) 两步生长方法示意图^[137]; (b) 光纤中嵌入二维材料实现 SHG^[138]

Fig. 11. 2D material-optical fiber integrated platforms with enhanced second-order nonlinear process based on direct growth methods: (a) Schematic of the two-step growth method^[137]; (b) in-fiber SHG with embedded 2D materials^[138].

然而,上述工作中使用的 HCF 光模场面积较大,泵浦光场与二维材料之间的模式重叠受限. 2022 年, Ngo 等^[138] 提出使用如图 11(b) 所示的裸芯光纤 (exposed-core fibre, ECF) 作为集成平台, 利用一种修正的化学气相沉积法^[139] (将硫源置于分区管式炉的低温区 (200 °C), 将金属氧化物 (氧化钼, MoO₃) 置于分区管式炉的高温区 (770 °C), 在氩气环境内实现在裸露的光纤纤芯上直接生长单层 MoS₂), 实现了二维材料-光纤集成结构中的高效 SHG 过程.

4.1.2 二维材料-片上集成平台中的二阶非线性增强

图 7、图 9 和图 10 总结了在基于转移方法制备的二维材料-片上集成平台中实现非线性增强的研究进展. 基于转移方法实现二维材料与片上微纳结构的集成, 主要存在以下问题: a) 转移过程中会不可避免地造成二维材料的损伤, 如引入皱褶、应力、掺杂或造成二维材料断裂, 导致集成器件的性能下降, 工作寿命缩短^[140,141]; b) 转移过程中需要借助一定的介质, 如干法转移通常需要借助 PDMS 等热释放材料, 湿法需要借助溶剂, 转移完成后通常会在二维材料与纳米结构的交界面处引入杂质, 光传播过程中的吸收损耗、散射损耗迅速增大^[142]; c) 转移的二维材料一般只能在贴在纳米结构上表面, 无法在侧壁等位置紧密接触, 集成器件中光与二维材料的相互作用受限^[143]; d) 转移过程中, 通常需要在显微镜下寻找二维材料与纳米结构的精确集成位置; 器件制备过程中一般也需要进行多次

光刻, 器件制备的简易度、可重复性及可控性较差^[144]; e) 转移过程通常使用的是二维材料的碎片^[145], 很难实现大面积二维材料的一次性转移^[146], 这就将转移的方法局限在了实验室的研究层面, 限制了集成二维材料光子器件的规模化制备.

基于以上思考, 2021 年笔者所在团队^[147] 提出在 Si₃N₄ 波导上直接生长单层 WS₂. 利用物理气相沉积 (physical vapor deposition, PVD) 的方法实现了在 Si₃N₄ 波导上长度约为 400 μm 单层 WS₂ 的连续生长 (图 12(a)), 实现了 WS₂/Si₃N₄ 混合波导中 SHG 的显著增强. 2022 年, Kuppadakkath 等^[148] 提出在 Si 波导上直接生长单层 MoS₂ (图 12(b)), 并在 MoS₂/Si 混合波导中探测到了二次谐波信号. 尽管该工作克服了传统基于转移方法制备二维材料集成器件的各种弊端, 但是并未实现二维材料对波导的连续覆盖; 且由于波导制备工艺的问题, Si 波导表面的粗糙程度超过了 TMDCs 单层的厚度, 高的波导粗糙度会明显增加光的散射损耗; 同时 Si 材料在 405 nm 附近有强烈的吸收效应, 严重限制了器件的实际应用.

4.2 三阶非线性过程增强的二维材料集成平台

4.2.1 二维材料-光纤集成平台中的三阶非线性增强

图 13 为近年来直接在微结构光纤中生长单层二维材料实现集成平台中三阶非线性增强的研究进展. 2020 年, Zuo 等^[137] 提出一种两步生长法

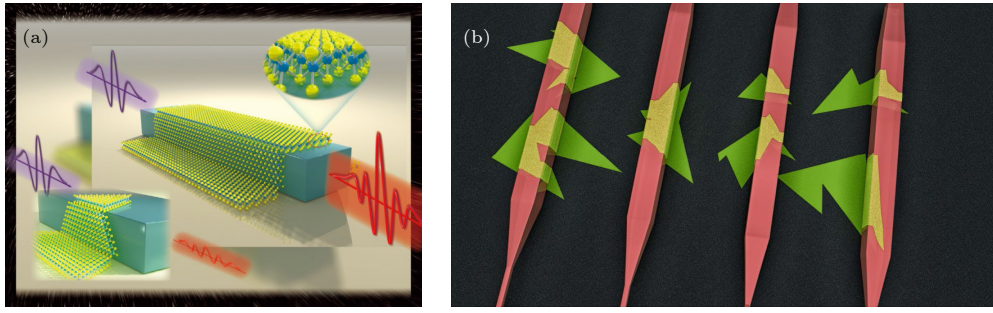


图 12 基于直接生长法制备的二阶非线性增强的二维材料-波导集成平台 (a) Si_3N_4 波导上直接生长 WS_2 实现 SHG 增强的示意图^[147]; (b) Si 波导上直接生长单层 MoS_2 的概念示意图^[148]

Fig. 12. Enhanced second-order nonlinear process in 2D material-waveguides integrated platforms based on direct growth methods: (a) Schematic diagram of SHG enhancement of the Si_3N_4 waveguides with directly grown WS_2 ^[147]; (b) concept schematic of Si waveguides with directly grown monolayer MoS_2 ^[148].

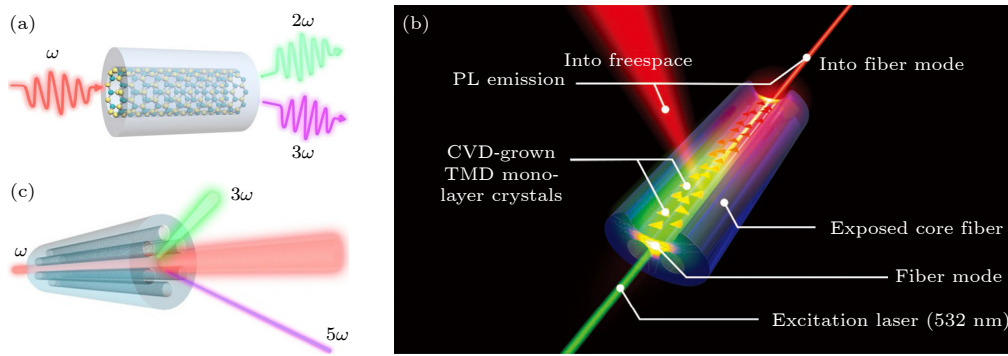


图 13 基于直接生长法制备的三阶非线性的增强二维材料-光纤集成平台 (a) 嵌入 MoS_2 的 HCF 中 SHG 和 THG 的示意图^[137]; (b) 使用原子层厚度的半导体对光纤进行规模化的功能化^[149]; (c) 石墨烯-PCF 中产生谐波的示意图^[150]

Fig. 13. 2D material-fiber integrated platforms with enhanced third-order nonlinear process based on direct growth methods: (a) schematics of SHG and THG in MoS_2 -embedded HCF^[137]; (b) scalable functionalization of optical fibers using atomically thin semiconductors^[149]; (c) schematic of harmonic generations in graphene-PCF^[150].

(图 11(a)) 在 HCF 中生长连续单层 MoS_2 , 在 1800 nm 激光泵浦条件下实现了 SHG 的显著增强. 此外, 在 2100 nm 激光泵浦的条件下, 该 MoS_2 -HCF 集成结构也表现出显著的 THG 增强现象 (图 13(a)).

2020 年, Ngo 等^[149] 利用修正的化学气相沉积法在裸芯光纤上生长了高质量单层 MoS_2 (图 13(b)), 并且进行了 PL 和三阶非线性调控方面的研究; 2022 年, Chen 等^[150] 在 2019 年在 PCF 中生长亚微米量级单层石墨烯的工作基础^[136] 上, 提出了一种压力控制的 CVD 生长方法, 对 PCF 中生长的石墨烯的长度和厚度进行控制. 在权衡了石墨烯的非线性增强以及线性吸收损耗之后, 研究人员最终在 5 cm 长的单层石墨烯-PCF 集成结构中实现了 THG 和五次谐波产生的增强 (图 13(c)).

4.3 小结

本章梳理了近年来直接在光纤和片上集成平

台上生长二维材料进行非线性增强方面的研究.

1) 在微结构光纤方面, 国内的北京大学刘开辉课题组已经率先实现: a) PCF 中亚微米量级石墨烯的均匀连续生长^[136] (2019 年); b) HCF 中 25 cm 长单层 MoS_2 的连续生长, 并实现了二维材料中非线性超百倍的增强^[137] (2020 年); c) 在 PCF 中通过压力控制生长石墨烯的厚度以及长度, 实现了高阶非线性的增强^[150] (2022 年). 国外该领域具有代表性的工作来自德国耶拿大学 Falk Eilenberger 博士课题组: a) 在裸芯光纤上直接生长单层 MoS_2 , 并进行了三阶非线性相关的研究^[149] (2020 年); b) 在裸芯光纤上直接生长单层 MoS_2 , 并在 MoS_2 -ECF 中集成器件中实现了 SHG 显著增强^[138] (2022 年).

2) 在片上波导方面, 笔者课题组已经实现了在 Si_3N_4 波导上约 400 μm 单层 WS_2 的连续生长, 并在 $\text{WS}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ 集成波导中实现了 SHG 的显著增强^[147] (2021 年); 德国耶拿大学的 Falk Eilenberger

博士课题组实现了 Si 波导上非连续单层 MoS₂ 的直接生长,并在集成波导中探测到了二次谐波信号^[148] (2022 年).

相较于传统的转移集成方法,使用直接生长法制备的集成二维材料非线性光子器件主要有以下优势: a) 二维材料直接生长在光子平台表面,不存在转移过程中二维材料受损、褶皱以及材料断裂等问题; b) 不需要借助热释放材料或者溶剂等中间材料,避免了集成器件中杂质的引入; c) 二维材料可以在光纤或者波导表面保形生长,实现对光纤内/外壁以及波导侧壁均匀连续覆盖,增强光与二维材料的相互作用; d) 大大简化器件制备工艺,实验的可控性以及可重复性较好; e) 可以实现集成二维材料非线性光子器件的大规模制备.

直接生长法具有传统转移方法不具备的巨大优势,但是在实际的器件制备过程中,还有以下技术难点: a) 材料生长条件的严格把控. 在生长过程中,二维材料的生长温度、管式炉中惰性气体的流量、生长源与基片之间的距离、生长环境的纯净与否以及是否使用生长前驱体都决定着最终生长晶体的质量; b) 材料生长之前要保证光纤或波导表面亚纳米级别的粗糙度,这样才能保证原子层厚度的二维材料可以在光子平台上均匀连续生长; c) 材料生长之前要保证光纤或者波导平台的洁净. 如果生长前光子平台上有杂质,这些杂质就会成为二维材料生长的形核点,生长出非层状的枝晶纳米线或大的颗粒状晶体. 当光在二维材料集成平台中传输时遇到这些非层状晶体,光的传播损耗将急剧增加,导致器件无法正常使用; d) 二维材料在光子平台上生长位置的精确控制.

5 总结与展望

传统基于 Si, Si₃N₄ 以及 SiO₂ 等材料的光子平台加工工艺成熟,但是上述光学平台可实现的非线性功能受限;二维材料尽管具有优异的非线性光学特性,但只有原子层厚度,其优异的非线性光学特性无法充分发挥. 将二维材料与成熟的光子平台集成,在充分利用光子平台成熟加工工艺的基础上,可以显著提高光与物质的相互作用,充分发挥二维材料在非线性光学领域的潜能,提升集成平台的非线性光学性能.

基于以上思路,本文从非线性光学的基本原理

出发(第 2 节),梳理了传统基于转移方法(第 3 节)和近年来新兴的基于直接生长法(第 4 节)实现的多种集成二维材料非线性光子平台研究进展. 传统基于转移方法实现二维材料与光子平台的集成技术发展较为成熟,可以实现对二维材料与光子平台集成位置的精确控制;但是在二维材料转移过程中存在的杂质引入、材料褶皱破损、工艺繁琐、无法实现二维材料对光子结构的保形覆盖以及规模化制备受限等难以规避的问题;相比之下,近年来新兴的在各种光子平台上直接生长二维材料的方法克服了传统转移方法存在的各种弊端,在二维材料生长质量、工艺简化、保形覆盖以及规模化制备等方面表现出巨大技术优势. 但是由于该研究方向发展时间较短,还有一系列技术难点需要解决,如精确控制二维材料的生长条件,保证均匀连续层状二维材料对各种光子结构的保形覆盖等(详见 4.3 节).

二维材料与多种光子平台集成实现 SHG, THG, FWM 以及 SPM 等非线性光学过程增强的研究已经在二维晶体及其异质结构的对称性表征和晶向研究、宽带光源、全光计算^[151]、量子技术、片内通信^[152]等领域表现出巨大的应用前景. 图 1 中用红色虚线标记出了接下来基于直接生长法可以在集成二维材料非线性光学领域进行的研究: 如可以尝试在各种腔表面直接生长二维材料^[153]进行二阶非线性增强^[154]方面的研究;也可以尝试在片上波导或微环上直接生长二维材料进行三阶非线性增强方面的研究. 总体而言,直接在各种光子结构上直接生长二维材料进行集成非线性光学特性的研究已经引起了该领域研究人员极大的研究兴趣. 随着时间的推移,该领域将会继续取得突破性进展,微纳光子结构上高质量二维材料连续生长以及晶圆级规模化制备等技术问题将会被攻破,进一步提升芯片的集成度、调制速度以及工作带宽等,为光通信、信号处理、光传感及量子技术等领域打下良好基础.

参考文献

- [1] Atabaki A H, Moazeni S, Pavanello F, Gevorgyan H, Notaros J, Alloatti L, Wade M T, Sun C, Kruger S A, Meng H, Al Qubaisi K, Wang I, Zhang B, Khilo A, Baiocco C V, Popović M A, Stojanović V M, Ram R J 2018 *Nature* **556** 349
- [2] Ren T H, Loh K P 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 230901
- [3] Thomson D, Zilkie A, Bowers J E, Komljenovic T, Reed G

- T, Vivien L, Marris-Morini D, Cassan E, Virot L, Fédéli J M, Hartmann J M, Schmid J H, Xu D X, Boeuf F, O'Brien P, Mashanovich G Z, Nedeljkovic M 2016 *J. Opt.* **18** 073003
- [4] Cheng Q, Bahadori M, Glick M, Rumley S, Bergman K 2018 *Optica* **5** 1354
- [5] Wang H M, Chai H Y, Lv Z R, Zhang Z K, Meng L, Yang X G, Yang T 2020 *J. Semicond.* **41** 101301
- [6] Sharma T, Wang J Q, Kaushik B K, Cheng Z Z, Kumar R, Wei Z, Li X J 2020 *IEEE Access* **8** 195436
- [7] Moss D J, Morandotti R, Gaeta A L, Lipson M 2013 *Nat. Photon.* **7** 597
- [8] Feldmann J, Youngblood N, Karpov M, Gehring H, Li X, Stappers M, Le Gallo M, Fu X, Lukashchuk A, Raja A S, Liu J, Wright C D, Sebastian A, Kippenberg T J, Pernice W H P, Bhaskaran H 2021 *Nature* **589** 52
- [9] Yuan S, Wu Y K, Dang Z Z, Zeng C, Qi X Z, Guo G C, Ren X F, Xia J S 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 153901
- [10] Yang S, Liu D C, Tan Z L, Liu K, Zhu Z H, Qin S Q 2018 *ACS Photonics* **5** 342
- [11] Wang C L, Li J, Yi A L, Fang Z W, Zhou L P, Wang Z, Niu R, Chen Y, Zhang J X, Cheng Y, Liu J Q, Dong C H, Ou X 2022 *Light Sci. Appl.* **11** 341
- [12] Markov I L 2014 *Nature* **512** 147
- [13] Gaeta A L, Lipson M, Kippenberg T J 2019 *Nat. Photon.* **13** 158
- [14] Lin G P, Coillet A, Chembo Y K 2017 *Adv. Opt. Photon.* **9** 828
- [15] Rahim A, Spuesens T, Baets R, Bogaerts W 2018 *Proc. IEEE* **106** 2313
- [16] Kippenberg T J, Gaeta A L, Lipson M, Gorodetsky M L 2018 *Science* **361** eaan8083
- [17] Bogaerts W, De Heyn P, Van Vaerenbergh T, De Vos K, Selvaraja S K, Claes T, Dumon P, Bienstman P, Van Thourhout D, Baets R 2012 *Laser Photon. Rev.* **6** 47
- [18] Tsang H K, Wong C S, Liang T K, Day I E, Roberts S W, Harpin A, Drake J, Asghari M 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 416
- [19] Jalali B 2010 *Nat. Photon.* **4** 506
- [20] Marpaung D, Yao J, Capmany J 2019 *Nat. Photon.* **13** 80
- [21] Luke K, Dutt A, Poitras C B, Lipson M 2013 *Opt. Express* **21** 22829
- [22] Pfeiffer M H P, Liu J, Raja A S, Morais T, Ghadiani B, Kippenberg T J 2018 *Optica* **5** 884
- [23] Liu J, Huang G, Wang R N, He J, Raja A S, Liu T, Engelsen N J, Kippenberg T J 2021 *Nat. Commun.* **12** 2236
- [24] Ye Z, Jia H, Huang Z, Shen C, Long J, Shi B, Luo Y H, Gao L, Sun W, Guo H, He J, Liu J 2023 *Photon. Res.* **11** 558
- [25] Zhang Y, Cheng Z, Liu L, Zhu B, Wang J, Zhou W, Wu X, Tsang H K 2016 *J. Opt.* **18** 055503
- [26] Li M, Zhang L, Tong L M, Dai D X 2018 *Photon. Res.* **6** B13
- [27] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [28] Loh K P, Bao Q, Eda G, Chhowalla M 2010 *Nat. Chem.* **2** 1015
- [29] Zhou J, Lin J, Huang X, Zhou Y, Chen Y, Xia J S, Wang H, Xie Y, Yu H, Lei J, Wu D, Liu F, Fu Q, Zeng Q, Hsu C H, Yang C, Lu L, Yu T, Shen Z, Lin H, Yakobson B I, Liu Q, Suenaga K, Liu G, Liu Z 2018 *Nature* **556** 355
- [30] Liu H, Neal A T, Zhu Z H, Luo Z, Xu X, Tománek D, Ye P D 2014 *ACS Nano* **8** 4033
- [31] Ma H, Liang J, Hong H, Liu K H, Zou D X, Wu M H, Liu K H 2020 *Nanoscale* **12** 22891
- [32] Wen X L, Gong Z B, Li D H 2019 *Infomat* **1** 317
- [33] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [34] Xia F, Wang H, Xiao D, Dubey M, Ramasubramanian A 2014 *Nat. Photon.* **8** 899
- [35] Sun Z, Martinez A, Wang F 2016 *Nat. Photon.* **10** 227
- [36] Liu C S, Chen H W, Wang S Y, Liu Q, Jiang Y G, Zhang D W, Liu M, Zhou P 2020 *Nat. Nanotechnol.* **15** 545
- [37] Bai R X, Yang J H, Wei D H, Wei Z M 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 186202 (in Chinese) [白瑞雪, 杨珏晗, 魏大海, 魏钟鸣 2021 物理学报 **70** 186202]
- [38] Wang S Y, Liu X X, Xu M S, Liu L W, Yang D R, Zhou P 2022 *Nat. Mater.* **21** 1225
- [39] Paras, Yadav K, Kumar P, Teja D R, Chakraborty S, Chakraborty M, Mohapatra S S, Sahoo A, Chou M M C, Liang C T, Hang D R 2023 *Nanomaterials* **13** 160
- [40] Healey A J, Scholten S C, Yang T, Scott J A, Abrahams G J, Robertson I O, Hou X F, Guo Y F, Rahman S, Lu Y Q, Kianinia M, Aharonovich I, Tetienne J P 2023 *Nat. Phys.* **19** 87
- [41] Du L, Molas M R, Huang Z, Zhang G, Wang F, Sun Z 2023 *Science* **379** eadg0014
- [42] Dogadov O, Trovattello C, Yao B C, Soavi G, Cerullo G 2022 *Laser Photon. Rev.* **16** 2100726
- [43] An J, Zhao X, Zhang Y, Liu M, Yuan J, Sun X, Zhang Z, Wang B, Li S, Li D 2022 *Adv. Funct. Mater.* **32** 2110119
- [44] Liu J, Bo F, Chang L, Dong C H, Ou X, Regan B, Shen X, Song Q, Yao B, Zhang W, Zou C L, Xiao Y F 2022 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **65** 104201
- [45] Cheng Z, Cao R, Wei K, Yao Y, Liu X, Kang J, Dong J, Shi Z, Zhang H, Zhang X 2021 *Adv. Sci.* **8** 2003834
- [46] Li J, Liu C, Chen H, Guo J, Zhang M, Dai D 2020 *Nanophotonics* **9** 2295
- [47] Ma Q, Ren G, Mitchell A, Ou J Z 2020 *Nanophotonics* **9** 2191
- [48] Chen H T, Wang C, Ouyang H, Song Y F, Jiang T 2020 *Nanophotonics* **9** 2107
- [49] Wei G H, Stanev T K, Czaplewski D A, Jung I W, Stern N P 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 091112
- [50] Zhou R, Krasnok A, Hussain N, Yang S, Ullah K 2022 *Nanophotonics* **11** 3007
- [51] Franken P A, Hill A E, Peters C W, Weinreich G 1961 *Phys. Rev. Lett.* **7** 118
- [52] Zhang J, Zhao W, Yu P, Yang G, Liu Z 2020 *2 D Mater.* **7** 042002
- [53] Leuthold J, Koos C, Freude W 2010 *Nat. Photon.* **4** 535
- [54] Ji J R, Feng Y, 2008 *Advanced Optics Course: Nonlinear Optics and Guided-Wave Optics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [季家镛, 冯莹 2008 高等光学教程: 非线性光学与导波光学 (北京: 科学出版社)]
- [55] Zhang X, Cao Q T, Wang Z, Liu Y X, Qiu C W, Yang L, Gong Q, Xiao Y F 2019 *Nat. Photon.* **13** 21
- [56] Hao Z, Jiang B, Ma Y, Yi R, Jin H, Huang L, Gan X T, Zhao J 2023 *Phys. Rev. Appl.* **19** L031002
- [57] Chen J H, Xiong Y F, Xu F, Lu Y Q 2021 *Light Sci. Appl.* **10** 78
- [58] Xiao J, Zhao M, Wang Y, Zhang X 2017 *Nanophotonics* **6** 1309
- [59] Autere A, Jussila H, Marini A, Saavedra J R M, Dai Y, Säynätjoki A, Karvonen L, Yang H, Amirsolaimani B, Norwood R A, Peyghambarian N, Lipsanen H, Kieu K, de Abajo F J G, Sun Z 2018 *Phys. Rev. B* **98** 115426
- [60] Tang B, Che B, Xu M, Ang Z P, Di J, Gao H J, Yang H,

- Zhou J, Liu Z 2021 *Small Struct.* **2** 2170012
- [61] Seyler K L, Schaibley J R, Gong P, Rivera P, Jones A M, Wu S, Yan J, Mandrus D G, Yao W, Xu X 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 407
- [62] Fryett T, Zhan A, Majumdar A 2018 *Nanophotonics* **7** 355
- [63] Zhang M, Han N, Zhang J, Wang J, Chen X, Zhao J, Gan X T 2023 *Sci. Adv.* **9** eadf4571
- [64] Yi F, Ren M, Reed J C, Zhu H, Hou J, Naylor C H, Johnson A T C, Agarwal R, Cubukcu E 2016 *Nano Lett.* **16** 1631
- [65] Day J K, Chung M H, Lee Y H, Menon V M 2016 *Opt. Mater. Express* **6** 2360
- [66] Fryett T K, Seyler K L, Zheng J, Liu C H, Xu X, Majumdar A 2017 *2 D Mater.* **4** 015031
- [67] Jie W, Chen X, Li D, Xie L, Hui Y Y, Lau S P, Cui X, Hao J 2015 *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** 1185
- [68] Gan X T, Zhao C Y, Hu S Q, Wang T, Song Y, Li J, Zhao Q H, Jie W Q, Zhao J L 2018 *Light Sci. Appl.* **7** 17126
- [69] Han X, Wang K, Persaud P D, Xing X, Liu W, Long H, Li F, Wang B, Singh M R, Lu P X 2020 *ACS Photonics* **7** 562
- [70] Shi J, Wu X, Wu K, Zhang S, Sui X, Du W, Yue S, Liang Y, Jiang C, Wang Z, Wang W, Liu L, Wu B, Zhang Q, Huang Y, Qiu C W, Liu X 2022 *ACS Nano* **16** 13933
- [71] Du J, Shi J, Li C, Shang Q, Liu X, Huang Y, Zhang Q 2023 *Nano Res.* **16** 4061
- [72] Wang Z, Dong Z, Zhu H, Jin L, Chiu M H, Li L J, Xu Q H, Eda G, Maier S A, Wee A T S, Qiu C W, Yang J K W 2018 *ACS Nano* **12** 1859
- [73] Shi J, Liang W Y, Raja S S, Sang Y, Zhang X Q, Chen C A, Wang Y, Yang X, Lee Y H, Ahn H, Gwo S 2018 *Laser Photon. Rev.* **12** 1800188
- [74] Chen J, Wang K, Long H, Han X, Hu H, Liu W, Wang B, Lu P X 2018 *Nano Lett.* **18** 1344
- [75] Leng Q, Su H, Liu J, Zhou L, Qin K, Wang Q, Fu J, Wu S, Zhang X 2021 *Nanophotonics* **10** 1871
- [76] Liu T, Xiao S, Li B, Gu M, Luan H, Fang X 2022 *Front. Nanotechnol.* **4** 891892
- [77] Yuan Q, Fang L, Fang H, Li J, Wang T, Jie W, Zhao J, Gan X T 2019 *ACS Photonics* **6** 2252
- [78] Bernhardt N, Koshelev K, White S J U, Meng K W C, Frösch J E, Kim S, Tran T T, Choi D-Y, Kivshar Y, Solntsev A S 2020 *Nano Lett.* **20** 5309
- [79] Zhang Z, Zhang L, Gogna R, Chen Z, Deng H 2020 *Solid State Commun.* **322** 114043
- [80] Löchner F J F, George A, Koshelev K, Bucher T, Najafidehaghani E, Fedotova A, Choi D-Y, Pertsch T, Staude I, Kivshar Y, Turchanin A, Setzpfandt F 2021 *ACS Photonics* **8** 218
- [81] Chen J H, Tan J, Wu G X, Zhang X J, Xu F, Lu Y Q 2019 *Light Sci. Appl.* **8** 8
- [82] Jiang B, Hao Z, Ji Y, Hou Y, Yi R, Mao D, Gan X T, Zhao J 2020 *Light Sci. Appl.* **9** 63
- [83] Luo Z, Liu M, Liu H, Zheng X, Luo A, Zhao C, Zhang H, Wen S, Xu W 2013 *Opt. Lett.* **38** 5212
- [84] Hao Z, Jiang B, Hou Y, Li C, Yi R, Ji Y, Li J, Li A, Gan X T, Zhao J 2021 *Opt. Lett.* **46** 733
- [85] Hao Z, Ma Y, Jiang B, Hou Y, Li A, Yi R, Gan X T, Zhao J 2022 *Sci. China Inf. Sci.* **65** 162403
- [86] Ma Y, Jiang B, Guo Y, Zhang P, Cheng T, Gan X T, Zhao J 2022 *Opt. Express* **30** 32438
- [87] Chen H T, Corbolio V, Solntsev A S, Choi D Y, Vincenti M A, de Ceglia D, de Angelis C, Lu Y Q, Neshev D N 2017 *Light Sci. Appl.* **6** e17060
- [88] Li D, Wei C, Song J, Huang X, Wang F, Liu K, Xiong W, Hong X, Cui B, Feng A, Jiang L, Lu Y Q 2019 *Nano Lett.* **19** 4195
- [89] Wang B B, Ji Y F, Gu L P, Fang L, Gan X T, Zhao J L 2022 *ACS Photonics* **9** 1671
- [90] Zhu C Y, Zhang Z, Qin J K, Wang Z, Wang C, Miao P, Liu Y, Huang P Y, Zhang Y, Xu K, Zhen L, Chai Y, Xu C Y 2023 *Nat. Commun.* **14** 2521
- [91] Sheik-Bahae M, Said A A, Wei T H, Hagan D J, Stryland E W V 1990 *IEEE J. Quantum Electron.* **26** 760
- [92] Zhang H, Virally S, Bao Q, Kian Ping L, Massar S, Godbout N, Kockaert P 2012 *Opt. Lett.* **37** 1856
- [93] Demetriou G, Bookey H T, Biancalana F, Abraham E, Wang Y, Ji W, Kar A K 2016 *Opt. Express* **24** 13033
- [94] Zheng X, Jia B, Chen X, Gu M 2014 *Adv. Mater.* **26** 2699
- [95] Xu X, Zheng X, He F, Wang Z, Subbaraman H, Wang Y, Jia B, Chen R T 2017 *Sci. Rep.* **7** 9646
- [96] Bikorimana S, Lama P, Walser A, Dorsinville R, Anghel S, Mitioglu A, Micu A, Kulyuk L 2016 *Opt. Express* **24** 20685
- [97] Dong N, Li Y, Zhang S, McEvoy N, Zhang X, Cui Y, Zhang L, Duesberg G, Wang J 2016 *Opt. Lett.* **41** 3936
- [98] Yang T, Abdelwahab I, Lin H, Bao Y, Rong Tan S J, Fraser S, Loh K P, Jia B 2018 *ACS Photonics* **5** 4969
- [99] Jia L, Wu J, Yang T, Jia B, Moss D J 2020 *ACS Appl. Nano Mater.* **3** 6876
- [100] Wu Y, Yao B C, Feng Q Y, Cao X L, Zhou X Y, Rao Y J, Gong Y, Zhang W L, Wang Z G, Chen Y F, Chiang K S 2015 *Photon. Res.* **3** A64
- [101] Zhang H, Healy N, Runge A F J, Huang C C, Hewak D W, Peacock A C 2018 *Opt. Lett.* **43** 3100
- [102] Dinu M, Quochi F, Garcia H 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 2954
- [103] Corcoran B, Monat C, Grillet C, Moss D J, Eggleton B J, White T P, O'Faolain L, Krauss T F 2009 *Nat. Photon.* **3** 206
- [104] Baba T 2008 *Nat. Photon.* **2** 465
- [105] Matsuda N, Kato T, Harada K-i, Takesue H, Kuramochi E, Taniyama H, Notomi M 2011 *Opt. Express* **19** 19861
- [106] Zhang Y J, Wang L, Cheng Z Z, Tsang H K 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 041104
- [107] Hendry E, Hale P J, Moger J, Savchenko A K, Mikhailov S A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 097401
- [108] Liu K, Zhang J F, Xu W, Zhu Z H, Guo C C, Li X J, Qin S Q 2015 *Sci. Rep.* **5** 16734
- [109] Ishizawa A, Kou R, Goto T, Tsuchizawa T, Matsuda N, Hitachi K, Nishikawa T, Yamada K, Sogawa T, Gotoh H 2017 *Sci. Rep.* **7** 45520
- [110] Feng Q, Cong H, Zhang B, Wei W Q, Liang Y Y, Fang S B, Wang T, Zhang J J 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 071104
- [111] Ji M X, Cai H, Deng L K, Huang Y, Huang Q Z, Xia J S, Li Z Y, Yu J Z, Wang Y 2015 *Opt. Express* **23** 18679
- [112] Lin H T, Song Y, Huang Y Z, Kita D, Deckoff-Jones S, Wang K Q, Li L, Li J Y, Zheng H Y, Luo Z Q, Wang H Z, Novak S, Yadav A, Huang C C, Shiue R J, Englund D, Gu T, Hewak D, Richardson K, Kong J, Hu J J 2017 *Nat. Photon.* **11** 798
- [113] Compton O C, Nguyen S T 2010 *Small* **6** 711
- [114] Dreyer D R, Park S, Bielawski C W, Ruoff R S 2010 *Chem. Soc. Rev.* **39** 228
- [115] Dreyer D R, Todd A D, Bielawski C W 2014 *Chem. Soc. Rev.* **43** 5288
- [116] Yang Y, Lin H, Zhang B Y, Zhang Y, Zheng X, Yu A, Hong M, Jia B 2019 *ACS Photonics* **6** 1033
- [117] Wu J, Yang Y, Qu Y, Xu X, Liang Y, Chu S T, Little B E, Morandotti R, Jia B, Moss D J 2019 *Laser Photon. Rev.* **13**

- 1900056
- [118] Wu J, Jia L, Zhang Y, Qu Y, Jia B, Moss D J 2021 *Adv. Mater.* **33** 2006415
- [119] Jia L, Wu J, Zhang Y, Qu Y, Jia B, Moss D J 2023 *Micromachines* **14** 307
- [120] Zhang Y, Wu J, Jia L, Qu Y, Yang Y, Jia B, Moss D J 2023 *Laser Photon. Rev.* **17** 2200512
- [121] Wu J, Lin H, Moss D J, Loh K P, Jia B 2023 *Nat. Rev. Chem.* **7** 162
- [122] Yang Y, Wu J, Xu X, Liang Y, Chu S T, Little B E, Morandotti R, Jia B, Moss D J 2018 *APL Photonics* **3** 120803
- [123] Wu J, Yang Y, Qu Y, Jia L, Zhang Y, Xu X, Chu S T, Little B E, Morandotti R, Jia B, Moss D J 2020 *Small* **16** 1906563
- [124] Zhang Y N, Wu J Y, Yang Y Y, Qu Y, Jia L N, Moein T, Jia B H, Moss D J 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 33094
- [125] Zhang Y N, Wu J Y, Yang Y Y, Qu Y, Jia L N, Jia B H, Moss D J 2022 *Micromachines* **13** 756
- [126] Qu Y, Wu J, Zhang Y, Jia L, Liang Y, Jia B, Moss D J 2021 *J. Lightwave Technol.* **39** 2902
- [127] Qu Y, Wu J Y, Yang Y Y, Zhang Y N, Liang Y, El Dirani H, Crochemore R, Demongodin P, Sciancalepore C, Grillet C, Monat C, Jia B H, Moss D J 2020 *Adv. Opt. Mater.* **8** 2001048
- [128] Zhang Y, Wu J, Yang Y, Qu Y, Dirani H E, Crochemore R, Sciancalepore C, Demongodin P, Grillet C, Monat C, Jia B, Moss D J 2023 *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **29** 1
- [129] Zhang Y, Wu J, Yang Y, Qu Y, Jia L, Dirani H E, Kerdiles S, Sciancalepore C, Demongodin P, Grillet C, Monat C, Jia B, Moss D J 2023 *Adv. Mater. Technol.* **8** 2201796
- [130] Liu L H, Xu K, Wan X, Xu J B, Wong C Y, Tsang H K 2015 *Photon. Res.* **3** 206
- [131] Zhang Y J, Tao L, Yi D, Xu J B, Tsang H K 2020 *J. Opt.* **22** 025503
- [132] Wang Y, Pelgrin V, Gyger S, Uddin G M, Bai X, Lafforgue C, Vivien L, Jöns K D, Cassan E, Sun Z 2021 *ACS Photonics* **8** 2713
- [133] He J, Paradisanos I, Liu T, Cadore A R, Liu J, Churaev M, Wang R N, Raja A S, Javerzac-Galy C, Roelli P, Fazio D D, Rosa B L T, Tongay S, Soavi G, Ferrari A C, Kippenberg T J 2021 *Nano Lett.* **21** 2709
- [134] Deckoff-Jones S, Pelgrin V, Zhang J, Lafforgue C, Deniel L, Guerber S, Ribeiro-Palau R, Boeuf F, Alonso-Ramos C, Vivien L, Hu J, Serna S 2021 *J. Opt.* **23** 025802
- [135] Wang Y H, He S, Gao X Y, Ye P P, Lei L, Dong W C, Zhang X L, Xu P 2022 *Photon. Res.* **10** 50
- [136] Chen K, Zhou X, Cheng X, Qiao R, Cheng Y, Liu C, Xie Y, Yu W, Yao F, Sun Z, Wang F, Liu K H, Liu Z 2019 *Nat. Photon.* **13** 754
- [137] Zuo Y, Yu W, Liu C, Cheng X, Qiao R, Liang J, Zhou X, Wang J, Wu M, Zhao Y, Gao P, Wu S, Sun Z, Liu K H, Bai X, Liu Z 2020 *Nat. Nanotechnol.* **15** 987
- [138] Ngo G Q, Najafidehaghani E, Gan Z, Khazaei S, Siems M P, George A, Schartner E P, Nolte S, Ebendorff-Heidepriem H, Pertsch T, Tuniz A, Schmidt M A, Peschel U, Turchanin A, Eilenberger F 2022 *Nat. Photon.* **16** 769
- [139] George A, Neumann C, Kaiser D, Mupparapu R, Lehnert T, Hübner U, Tang Z, Winter A, Kaiser U, Staude I, Turchanin A 2019 *J. Phys. Mater.* **2** 016001
- [140] Chen H, Guo K, Yin J, He S, Qiu G, Zhang M, Xu Z, Zhu G, Yang J, Yan P 2021 *Laser Photon. Rev.* **15** 2000459
- [141] Wu J, Ma H, Yin P, Ge Y, Zhang Y, Li L, Zhang H, Lin H 2021 *Small Sci.* **1** 2000053
- [142] Wu S, Buckley S, Schaibley J R, Feng L, Yan J, Mandrus D G, Hatami F, Yao W, Vučković J, Majumdar A, Xu X 2015 *Nature* **520** 69
- [143] Ye Y, Wong Z J, Lu X, Ni X, Zhu H, Chen X, Wang Y, Zhang X 2015 *Nat. Photon.* **9** 733
- [144] Zhao L, Shang Q, Gao Y, Shi J, Liu Z, Chen J, Mi Y, Yang P, Zhang Z, Du W, Hong M, Liang Y, Xie J, Hu X, Peng B, Leng J, Liu X, Zhao Y, Zhang Y, Zhang Q 2018 *ACS Nano* **12** 9390
- [145] Feng J, Li Y, Zhang J, Tang Y, Sun H, Gan L, Ning C-Z 2022 *Sci. Adv.* **8** eabl5134
- [146] Ma R, Sutherland D S, Shi Y 2021 *Mater. Today* **50** 570
- [147] Liu N, Yang X, Zhu Z H, Chen F, Zhou Y B, Xu J P, Liu K 2022 *Nanoscale* **14** 49
- [148] Kuppadakkath A, Najafidehaghani E, Gan Z, Tuniz A, Ngo G Q, Knopf H, Löchner F J F, Abtahi F, Bucher T, Shradha S, Käsebier T, Palomba S, Felde N, Paul P, Ullsperger T, Schröder S, Szeghalmi A, Pertsch T, Staude I, Zeitner U, George A, Turchanin A, Eilenberger F 2022 *Nanophotonics* **11** 4397
- [149] Ngo G Q, George A, Schock R T K, Tuniz A, Najafidehaghani E, Gan Z, Geib N C, Bucher T, Knopf H, Saravi S, Neumann C, Lühder T, Schartner E P, Warren-Smith S C, Ebendorff-Heidepriem H, Pertsch T, Schmidt M A, Turchanin A, Eilenberger F 2020 *Adv. Mater.* **32** 2003826
- [150] Cheng Y, Yu W, Xie J, Wang R, Cui G, Cheng X, Li M, Wang K, Li J, Sun Z, Chen K, Liu K, Liu Z 2022 *ACS Photonics* **9** 961
- [151] Pelgrin V, Yoon H H, Cassan E, Sun Z 2023 *LAM* **4** 14
- [152] de Matos C J S, Rosa H G, Zapata J D, Steinberg D, Maldonado M, Thoroh de Souza E A, de Paula A M, Malard L M, Gomes A S L 2023 *J. Opt. Soc. Am. B* **40** C111
- [153] Liu N, Yang X, Zhang J, Zhu Z H, Liu K 2023 *ACS Photonics* **10** 283
- [154] Hu G, Hong X, Wang K, Wu J, Xu H X, Zhao W, Liu W, Zhang S, Garcia-Vidal F, Wang B, Lu P X, Qiu C W 2019 *Nat. Photon.* **13** 467

REVIEW

Research progress of nonlinear optical properties of integrated two-dimensional materials

Liu Ning¹⁾²⁾³⁾ Liu Ken^{1)2)3)†} Zhu Zhi-Hong^{1)2)3)‡}

1) (*College of Advanced Interdisciplinary Studies, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Hunan Provincial Key Laboratory of Novel Nano-Optoelectronic Information Materials and Devices, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

3) (*Nanhu Laser Laboratory, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 5 May 2023; revised manuscript received 11 June 2023)

Abstract

Photonic platforms with excellent nonlinear optical characteristics are very important to improve the devices' performance parameters such as integration, modulation speeds and working bandwidths for all-optical signal processing. The traditional processing technology of photonic platforms based on silicon, silicon nitride and silicon oxide is mature, but the nonlinear function of these optical platforms is limited due to the characteristics of materials; Although two-dimensional (2D) materials possess excellent nonlinear optical properties, their nonlinear potentials cannot be fully utilized because of their atomic layer thickness. Integrating 2D materials with mature photonic platforms can significantly improve the interaction between light and matter, give full play to the potentials of 2D materials in the field of nonlinear optics, and improve the nonlinear optical performances of the integrated platforms on the basis of fully utilizing the mature processing technology of the photonic platforms. Based on the above ideas, starting from the basic principle of nonlinear optics (Section 2), this review combs the research progress of various nonlinear photonic platforms (resonators, metasurfaces, optical fibers, on-chip waveguides, etc.) heterogeneously integrated with 2D materials, realized by traditional transfer methods (Section 3) and emerging direct-growth methods (Section 4) in recent years, and the introduction is divided into second-order and third-order nonlinearity. Comparing with the transfer methods, the advantages of using direct-growth methods to realize the heterogeneous integration of 2D materials and photonic platforms for the study of nonlinear optics are expounded, and the technical difficulties to be overcome in preparing the actual devices are also pointed. In the future, we can try to grow 2D materials directly onto the surfaces of various cavities to study the enhancement of second-order nonlinearity; we can also try to grow 2D materials directly onto the on-chip waveguides or microrings to study the enhancement of third-order nonlinearity. Generally speaking, the research on integrated nonlinearity by directly growing 2D materials onto various photonic structures has aroused great interest of researchers in this field. As time goes on, breakthrough progress will be made in this field, and technical problems such as continuous growth of high-quality 2D materials onto photonic structures and wafer-level large-scale preparation will be broken through, further improving the performance parameters of chips and laying a good foundation for optical communication, signal processing, optical sensing, all-optical computing, quantum technology and so on.

Keywords: silicon/silicon nitride photonic platforms, two-dimensional materials, photonic integration, nonlinearity enhancement, growth of material

PACS: 42.65.-k, 42.65.Ky, 78.67.-n, 81.07.-b

DOI: 10.7498/aps.72.20230729

† Corresponding author. E-mail: liukener@163.com

‡ Corresponding author. E-mail: zzhwcx@163.com



集成二维材料非线性光学特性研究进展

刘宁 刘肯 朱志宏

Research progress of nonlinear optical properties of integrated two-dimensional materials

Liu Ning Liu Ken Zhu Zhi-Hong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 174202 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230729

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230729>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

二维材料热传导研究进展

Recent progresses of thermal conduction in two-dimensional materials

物理学报. 2020, 69(19): 196602 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200709>

二维材料/铁电异质结构的研究进展

Research progress and device applications of multifunctional materials based on two-dimensional film/ferroelectrics heterostructures

物理学报. 2020, 69(1): 017301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191486>

基于二维材料的自旋-轨道矩研究进展

Research progress of spin-orbit torques based on two-dimensional materials

物理学报. 2021, 70(12): 127501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210004>

二维过渡金属硫化物二次谐波: 材料表征、信号调控及增强

Second harmonic generation of two-dimensional layered materials: characterization, signal modulation and enhancement

物理学报. 2020, 69(18): 184210 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200452>

二维材料解理技术新进展及展望

New progress and prospects of mechanical exfoliation technology of two-dimensional materials

物理学报. 2022, 71(10): 108201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220030>

二维材料的转移方法

Methods of transferring two-dimensional materials

物理学报. 2021, 70(2): 028201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201425>