

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年 专题编者按

DOI: [10.7498/aps.72.200101](https://doi.org/10.7498/aps.72.200101)

华南师范大学赓续于 1933 年始建的广东省立勸勤大学师范学院, 创校之始即有数理化系, 1940 年成立物理学系, 1951 年合并到华南师范学院物理学系. 历经 90 年的建设与发展, 物理学科培养的学生遍布海内外, 成为各行各业的骨干和中坚, 其中有中国科学院院士, 从事教育、科研、党政机关工作的众多人才和知名企业家等, 特别是培养了粤港澳大湾区物理学基础教育的中坚力量. 2017 年, 华南师范大学物理学科进入“世界一流学科”建设学科, 学校对物理学科的支持力度进入了全新时期, 建立了由 1 位院士、7 位国家杰出青年基金获得者、2 位国家特聘专家和 16 位国家青年人才项目获得者为骨干的高水平师资队伍. 学校凝练了物理学科发展方向, 形成了“3+2”研究方向布局, 即聚焦发展粒子物理与原子核物理、凝聚态物理、光学 3 个传统学科方向和量子科学与技术、光信息物理与技术 2 个交叉学科方向, 形成了与教育学门类学科的交叉融合、基于国际大科学装置和广东省大科学装置的国际合作实验研究特色.

在《物理学报》编辑部的大力支持下, 我们组织了“华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年”专题, 主要围绕粒子物理与原子核物理、凝聚态物理、量子科学与技术、光学和光信息物理与技术等研究方向展示部分成果.

在粒子物理与原子核物理方向, 王恩科、邢宏喜等综述了相对论重离子碰撞中的喷注淬灭效应; 张旦波、邢宏喜等综述了量子计算在求解核子结构和核物质相图等高能核物理问题上的应用; 王倩等在正负电子对撞中完成了对类底夸克偶素的线形研究; 杨帅等综述了相对论重离子碰撞中光子-光子相互作用的研究进展; 梁剑等分析了格点量子色动力学数据的虚部分布, 并提出了一种提升格点计算信噪比的可能方法.

在凝聚态物理方向, 徐小志等综述了原子台阶调控大尺寸二维单晶的研究进展; 周涛等研究了石墨烯类超导体中由磁性杂质诱导的束缚态和超导配对对称性的关系; 秦明辉等研究了正弦微波场驱动亚铁磁畴壁的调控因素及物理机制; 王瑞强等综述了拓扑材料中的线性与非线性平面霍尔效应的研究进展; 高兴森、田国等介绍了利用扫描探针显微技术在探测与调控铁性材料的微观畴结构及其物性的研究进展, 以及在构筑新原理器件的应用; 艾保全、贺亮等建立了利用逆统计问题中回归不确定性自动识别活性粒子系统中物质相的机器学习新方法; 艾保全等研究了受限结构中可变形的活性粒子如何将随机运动转化为定向运动的机制; 郎利君等综述了当前经典电路模拟非厄米格点模型的实验进展.

在量子科学与技术方向, 杜炎雄、颜辉、朱诗亮等实现了基于里德伯原子阵列的量子计算, 封面图片中“1933—2023 SCNU90”中的每个数字和字母都是由 4×4 阵列量子计算机中的单原子构成; 王云飞等分析了近十年量子存储性能的发展现状并对量子存储的典型应用进行了综述; 张丹伟等研究了非厄米系统的量子 Fisher 信息及其在提高参数估计精度的应用; 温永立等介绍了路径积分传播子测量的实验进展及其在最小作用量原理验证中的应用; 邹为等研究了平均场反馈下全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统的可解集体动力学; 薛正远等提出了抑制强驱动场诱导的操作错误的新方法; 梁振涛等综述了基于超导-冷原子复合系统实现两台超导量子计算机光互连的研究进展.

在光学和光信息物理与技术方向, 刘飞龙、周国富等对反射式电子纸显示中彩色化视频化的下

一代技术——电润湿显示所涉及的多个物理方向,特别是润湿与电润湿、两相流体力学、微观与界面物理等进行了系统综述;周国富、叶华朋、袁冬等综述了涡旋光模式解复用技术研究进展和新兴应用;周国富、吴波等综述了非简并双光子吸收前沿进展;陈同生等利用双通道结构光照明实现了超分辨的定量 FRET 成像系统;覃欢等综述了微波热声成像技术研究进展;詹求强、王保举等综述了点扫描高时空分辨荧光显微成像技术的研究进展;杨思华、张振辉等综述了偏振光声成像技术的研究进展,并通过建立单分子矢量吸收数理模型阐明了偏振光声效应的理论基础;周桂耀、夏长明等利用自制的掺铥镧铝硅酸盐玻璃光子晶体光纤实现 2 μm 激光输出;陈溢杭等运用准正则模式和时域耦合模理论研究了全介质超材料的宽带反射形成机理;罗智超、徐文成等综述了纯四次孤子光纤激光器的研究进展.

华南师范大学物理学学科的发展将继续沿用“科学研究重突破、社会服务求贡献、师范教育强特色、学科交叉激动能、国际交流促发展”的策略,始终面向世界科技前沿,服务国家重大战略,集中学科力量聚焦解决物理学重点建设方向的重大科学问题,集中力量培养卓越的物理教师和从事物理学相关研究的科学家.

(客座编辑:王恩科,朱诗亮 华南师范大学)

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Preface to the special topic: The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

DOI: [10.7498/aps.72.200101](https://doi.org/10.7498/aps.72.200101)

华南师范大学建校暨物理学科建立90周年专题编者按

Preface to the special topic: The 90th Anniversary of South China Normal University and Physical Science

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.200101

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.200101>

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

面向类脑计算的物理电子学专题编者按

Preface to the special topic: Physical electronics for brain-inspired computing

物理学报. 2022, 71(14): 140101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.140101>

电介质材料和物理专题编者按

Preface to the special topic: Dielectric materials and physics

物理学报. 2020, 69(12): 120101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.120101>

机器学习与物理专题编者按

Preface to the special topic: Machine learning and physics

物理学报. 2021, 70(14): 140101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.140101>

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>

非厄米物理前沿专题编者按

Preface to the special topic: Frontiers in non-Hermitian Physics

物理学报. 2022, 71(13): 130101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.130101>

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>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

相对论重离子碰撞中的喷注淬火效应*

张善良¹⁾²⁾ 邢宏喜^{1)2)†} 王恩科^{1)2)‡}

1) (华南师范大学量子物质研究院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室,

广东省高等学校物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 广州 510006)

2) (华南师范大学南方核科学计算中心, 粤港量子物质联合实验室, 广东省核物质科学与技术重点实验室, 广州 510006)

(2023 年 6 月 15 日收到; 2023 年 9 月 16 日收到修改稿)

相对论重离子碰撞中产生了高温高密解禁闭的夸克胶子等离子体 (QGP), 研究 QGP 的性质是高能核物理目前最重要的物理目标之一. 其中, 应用喷注淬火作为硬探针研究 QGP 的性质是一个非常重要的手段. 喷注淬火指的是相对论重离子碰撞中产生的高能部分子穿过 QGP 时, 通过强相互作用导致的能量损失效应. 本文主要介绍喷注淬火效应的最新研究进展, 具体包含喷注淬火效应对强子、喷注和喷注子结构的介质影响, 以及目前理论上面临的问题和困难.

关键词: 相对论重离子碰撞, 夸克胶子等离子体, 喷注淬火**PACS:** 03.67.Lx, 14.20.Dh, 25.40.Cm, 71.10.Hf**DOI:** 10.7498/aps.72.20230993

1 引言

高能核物理是在高能量标度和小的时空尺度上探索物质世界的深层次结构及其相互作用规律的基础科学. 根据目前对可见物质深层次结构的探索, 物质构成的最小单元有夸克和轻子, 夸克通过强相互作用结合成强子, 同样强子之间也因为强相互作用构成原子核. 量子色动力学 (QCD) 是描述强相互作用的基本理论. 量子色动力学的非阿贝尔规范对称性导致其有两个显著的特点: 一个是色禁闭, 另一个是渐近自由. 真空中的夸克和胶子由于强相互作用被禁闭在强子中, 因此在自然状态下人们无法观测到自由夸克. 另一方面, 由于渐近自由的性质, 在高温高密的极端条件下强子束缚态会被打破, 真空结构改变而导致相变, 对称性破缺并且出现解禁闭的自由的夸克和胶子, 从而形成一种新

的物质形态, 称为夸克胶子等离子体 (QGP), 研究 QGP 性质是高能核物理目前最重要的物理目标之一. 为了深入研究 QGP 的性质, 1970 年李政道先生提出可以在实验室中通过高能重离子碰撞产生夸克胶子等离子体. 因为高能重离子碰撞可以产生高能量密度的物质, 在足够高的碰撞能量下, 可以达到 QGP 相变的临界条件. 高能重离子碰撞实验始于 20 世纪 80 年代初伯克利的 Bevalac 加速器, 紧接着 80 年代后期, 布鲁克海文国家实验室的 AGS 和欧洲核子中心的 SPS 也相继跟进. 进入 21 世纪后, 布鲁克海文国家实验室的相对论重离子碰撞机 (RHIC) 开始运行, 随后欧洲核子中心更高能量的大型强子对撞机 (LHC) 上的重离子碰撞实验也开始产生数据. 在 AGS 和 SPS 上的实验中观测到了热密物质所表现的一些丰富的现象, 特别是矢量介子的展宽和粲夸克偶素的反常压低等. 最大核-核对撞能量 200 GeV 的 RHIC 开创了

* 国家自然科学基金 (批准号: 12147131, 12035007, 12022512) 和广东省基础与应用基础研究项目 (批准号: 2020B0301030008, 2022A1515010683) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hxing@m.scnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wangek@scnu.edu.cn

极端条件下强相互作用核物质研究的新时代. 在 2010 年开始运行的 LHC 能量更是达到了 TeV 级别, 为 QGP 形成以及研究开创了新机遇. 对 RHIC 和 LHC 的大量数据进行分析确实验证了, 在高能核-核碰撞中产生了高温高密、近似局部平衡的强相互作用物质形态-夸克胶子等离子体^[1-4].

在 RHIC 和 LHC 能区, 两束接近光速的重离子束发生对心碰撞后, 系统温度急剧上升, 达到临界温度后, 形成高温、高密、解禁闭、不同区域有温度涨落但是局部平衡的夸克胶子等离子体. 夸克胶子等离子体系统内部的压强非常大, 因此会迅速膨胀和冷却. 这种新的物质形态显示了近似理想的强耦合流体的性质, 因此可以用流体力学模型来模拟夸克胶子等离子体的演化动力学信息^[5], 例如温度、流速等. 随着时间的演化, 系统温度逐渐降低, 当温度和粒子数密度到达夸克胶子等离子体相向强子气体相转变的临界条件, 部分子之间的相互作用终止, 系统中的夸克胶子迅速结合形成强子^[2,6,7]. 部分子到强子相的转变是一个非微扰的过程, 从 QCD 第一原理计算非常困难, 理论上可以通过有效的, 非严格的 QCD 唯象模型来描述. 随后系统继续膨胀和冷却, 随着化学势的降低和温度的降低, 强子之间的相互作用也发生终止, 强子获得它们的最终能量和动量, 最终达到平衡状态.

在高能重离子碰撞实验中, 根据碰撞系统的不同, 夸克胶子等离子体存活的时间在 0.6—10 fm/ c 以内 (c 为真空中光速), 寿命非常短, 因此我们在实验室中只能看到末态强子的分布, 而不能直接观测到夸克胶子等离子体, 正如无法探测自由的夸克. 但是末态观测到的粒子信息会根据粒子产生机制以及与介质相互作用的时间, 受其中一个阶段或所有阶段的影响, 从而会携带相关阶段的信息. 实验上可以从大量的末态粒子中挑选合适的物理观测量并与相对于基本的质子-质子碰撞中的结果比较来间接地探测 QGP 存在的证据. 对这些观测量更加细致的研究, 可以分析并提取夸克胶子等离子体的性质, 这样的物理量被称为 QGP 信号或者 QGP 探针^[8]. 夸克胶子等离子体系统中的夸克胶子解禁闭, 形成丰富的自由的夸克胶子, 这些夸克胶子携带色荷, 它们之间的相互作用会产生大量的新粒子, 这些粒子在 QGP 中产生, 因此会携带夸克胶子等离子体的信息. 同时, 初始硬碰撞过程中产生的高能部分子经过 QGP 时, 也会与解禁闭的夸克胶子发生相互作用或诱导胶子辐射, 因此这些

高能部分子也会携带夸克胶子等离子体的信息. 将这些信号与基本的质子-质子碰撞中的结果进行比较, 能够提取夸克胶子等离子体的热动力学信息以及输运性质.

硬散射发生在 QGP 形成之前, 大横动量转移的硬散射过程产生的大动量部分子与热密介质的相互作用贯穿整个介质演化过程. 因为部分子携带色荷, 散射产生的高能夸克和胶子穿过夸克胶子等离子体时, 会与夸克胶子等离子体中的部分子发生弹性散射或韧致辐射导致能量损失. 这种高能部分子通过强相互作用导致能量损失的过程叫作喷注淬灭^[9]. 基于强相互作用基本理论, 人们对相对论重离子碰撞的喷注淬灭效应进行了广泛而深入的研究, 并且基于不同的假设提出了不同的能量损失机制, 其中主要有: Baier-Dokshitzer-Mueller-Peigne-Schiff 和 Zakharov 提出的 BDMPS-Z/ASW 框架^[10-16]、高扭度展开理论框架 (HT)^[17-21]、Arnold-Moore-Yaffe 提出的 AMY 框架^[22]、Gyulassy, Levai 和 Vitev 基于光度展开的 GLV 模型^[23,24]. 基于上述能量损失机制, 喷注淬灭效应很好地解释了重离子碰撞实验的大横动量强子和喷注产额的压低、双喷注和光子标记喷注的不对称度的偏移、以及整体喷注内部结构的修正等. 理论学家也基于这些能量损失机制和实验测量结果提取了夸克胶子等离子体的输运性质和动力学性质.

本文主要对近期在相对论重离子碰撞中的喷注淬灭方面的理论和实验进展进行了综述. 在第 2 节, 重点介绍线性玻尔兹曼输运模型, 第 3 节介绍喷注淬灭效应对强子产额的影响, 第 4 节介绍喷注淬灭效应对整体喷注的影响, 第 5 节介绍喷注淬灭效应对喷注子结构的影响. 最后, 第 6 节是对这一系列工作的总结.

2 线性玻尔兹曼输运模型

在硬散射过程中产生的高能喷注部分子在穿过夸克胶子等离子体时, 会与热密介质中的热化部分子交换四维动量和色荷, 从而导致喷注部分子能量损失和热部分子的激发. 基于不同的能量损失机制, 不同理论组建立了不同的模拟能量损失的蒙特卡罗模型, 如: JEWEL^[25], PYQUEN^[26], HYBRID^[27], MARTINI^[28], LIDO^[29], jet-coupled fluid model^[30] 和线性玻尔兹曼输运模型 (LBT)^[31-33], 以及将 LBT 和 MARTINI 组合一起的 JETSCAPE^[34].

本节主要介绍线性玻尔兹曼运输模型^[31–33]模拟这一能量转移过程的基本思想.

高能部分子 i 在夸克胶子等离子体中传播的散射率^[35] 为

$$\Gamma_i(p_1, u(x), T(x)) = \sum_{j(kl)} \Gamma_{ij \rightarrow kl}(p_1, u(x), T(x)), \quad (1)$$

通过对初态碰撞粒子 j ($j = u, d, s, \bar{u}, \bar{d}, \bar{s}, g$) 和所有可能的末态粒子 k 和 l 求和, 这个公式包含了所有的弹性和非弹性 $ij \rightarrow kl$ 过程. 一般情况下, 这个散射率依赖于参考系, 高能部分子的能量 p_1 , 四维流速 $u(x)$ 以及每个时空演化位置 x 的温度 $T(x)$. 忽略泡利压低和玻色加强因子, 散射率可以表达成:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij \rightarrow kl} = & \frac{1}{2E_1} \int \frac{d^3p_2}{(2\pi)^3 2E_2} \int \frac{d^3p_3}{(2\pi)^3 2E_3} \int \frac{d^3p_4}{(2\pi)^3 2E_4} \\ & \times f_j(p_2 \cdot u, T) |M_{ij \rightarrow kl}|^2(s, t, u) S_2(s, t, u) \\ & \times (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4), \quad (2) \end{aligned}$$

其中 $|M_{ij \rightarrow kl}|^2$ 为散射振幅, 依赖于曼德斯通变量 s, t 和 u , $f_j(p_2 \cdot u, T)$ 是动量为 p_2 的热化部分子的分布函数, 在模拟中, 我们总是在流体的局部静止系中计算散射率. 因此 $p_2 \cdot u = E_2$, E_1 是粒子 i 在这个静止系中的能量. 如果忽略部分子质量, 振幅中的 $t, u \rightarrow 0$, 会导致发散. 引入一个类似热化质量的量 $m = s_m g_s T$, 对动量空间进行截断, 即 $u, t \leq -m^2$, 其中 g_s 是强耦合常数, s_m 是一个参量常数. 由于 $s + u + t = 0$, 上述截断等价于 $-s + m^2 \leq t \leq -m^2$, 其中要求 $s \geq 2m^2$. 这个截断是方程 (2) 中的 S_2 , 其定义为

$$S_2(s, t, u) = \theta(s \geq 2m^2) \theta(-s + m^2 \leq t \leq -m^2), \quad (3)$$

方程 (2) 中的散射率可以用散射截面表示.

高能部分子与介质中的热部分子发生弹性散射, 每次弹性散射也都有有一定的概率诱发部分子发生韧致辐射而辐射胶子. 线性玻尔兹曼运输模型中采用高扭度能量损失机制^[17,19,21] 来描述每次散射过程中诱导的胶子辐射过程. 高扭度的能量损失机制的表达式为

$$\begin{aligned} \frac{dN_g}{dx dk_\perp^2 dt} = & \frac{6\alpha_s C_A P(x) \hat{q}}{\pi k_\perp^4} \left(\frac{k_\perp^2}{k_\perp^2 + x^2 M^2} \right)^4 \\ & \times \sin^2 \left(\frac{t - t_i}{2\tau_f} \right), \quad (4) \end{aligned}$$

$P(x)$ 是部分子在介质中的劈裂函数. 其中 x 和

k_\perp 是辐射的胶子占入射部分子的能量份额和横动量. \hat{q} 是输运系数, $\tau_f = 2Ex(1-x)/(k_\perp^2 + x^2 M^2)$ 是胶子的形成时间, 每个辐射出来的胶子经过累计时间超过 τ_f 后才能再次当做独立粒子与介质继续相互作用.

在线性玻尔兹曼模型中, 首先计算部分子在不同温度和不同能量下在局域流体静止系中发生不同反应过程的散射率及其总散射率. 然后假定部分子在 QGP 流体演化中沿着经典轨迹传播, 最小时间间隔为 Δt . 这样就可以通过对以下的泊松分布抽样来得到部分子在时间间隔 Δt 中与介质中的热部分子发生弹性散射的次数 n :

$$\Delta N_a(E, \Delta t) = \Delta t \frac{p \cdot u}{E} \Gamma_a(p \cdot u, T), \quad (5)$$

$$P_a(E, \Delta t) = \frac{[\Delta N_a(E)]^n}{n!} e^{-\Delta N_a(E, \Delta t)}, \quad (6)$$

$$P_{el}(E, \Delta t) = 1 - e^{-\Delta N_a(E, \Delta t)}, \quad (7)$$

同样对于非弹性散射, 有以下概率:

$$\langle N_g \rangle(E, \Delta t) = \Delta t \int dx dk_\perp^2 \frac{dN_g}{dx dk_\perp^2 dt}, \quad (8)$$

$$P_{a,n}(E, \Delta t) = \frac{\langle N_g \rangle^n}{n!} e^{-\langle N_g \rangle}, \quad (9)$$

$$P_{inel}(E, \Delta t) = 1 - e^{-\langle N_g \rangle}, \quad (10)$$

则部分子在介质中发生强相互作用的总散射率为

$$\begin{aligned} P_{total} = & P_{el}(1 - P_{inel}) + P_{inel} \\ = & P_{el} + P_{inel} - P_{el}P_{inel}, \quad (11) \end{aligned}$$

其中 $\Gamma_a(p \cdot u, T)$ 是一个入射能量 $E_a = p \cdot u$ (\mathbf{u} 是局域流体的四速度) 的部分子 a 在局域流体静止系中的散射率 (包括弹性散射和辐射过程). 在确定时间间隔 Δt 中所发生的散射次数后, LBT 假定这些散射过程会在 Δt 连续发生, 并在模拟中保证所有散射过程中的能动量守恒. 如果选取的时间间隔 Δt 远小于入射粒子的平均自由程 $\Delta t \ll 1/\max(\Gamma_g, \Gamma_q)$, 可以假定部分子在时间间隔 Δt 内至少发生一次与热部分子的散射概率近似为

$$P_a(E, \Delta t) = 1 - e^{-\Delta N_a(E, \Delta t)}, \quad (12)$$

对每次部分子-介质散射, 采用概率分数 $\Gamma_{ab \rightarrow cd}/\Gamma_a$ 来决定散射过程具体的反应道和初始热部分子 b 与出射部分子 c 和 d 的种类和味道. 部分子-部分子散射过程中具体的能动量转移通过能量-动量守恒方程来决定. 在线性玻尔兹曼模型中, 所有的部

分子, 包括在每次弹性散射过程和辐射过程中所产生的领头部分子, 辐射胶子和被激发的热部分子都会被记录, 并通过玻尔兹曼输运模拟其在介质中的运动和相互作用, 并在最后喷注重建的时候考虑到. 同时忽略上述粒子之间的相互作用, 这就是称其为线性输运模型的原因. 这个假设适用于在部分子传播所引起的介质激发相对较小的情况. 为了考虑在玻尔兹曼方程 (2) 中所描述的逆反应过程, 同时记录了每次散射过程中初始部分子 b 和它的四动量 p_2 , 在这里将这些部分子定义为负部分子, 并同样模拟其在介质中的运动, 在最后计算末态粒子分布或者喷注引起的介质激发时减去这些负部分子的贡献, 这里将被激发的热部分子和负部分子统一称为喷注激发的介质部分子 (介质响应).

LBT 的模拟结果能很好地定量描述实验测量的大横动量轻味强子和重味强子在铅-铅碰撞中的产额压低, 单喷注和双喷注以及喷注子结构的介质修正, 同时也能很好地描述玻色子标记的喷注关联 [31–33,36–42], 因此 LBT 是描述高能部分子能量损失的一个有效的模型.

3 喷注淬火效应对大横动量强子产生的影响

喷注淬火效应最直观的结果就是高能部分子能量以及产额的减少. 在对喷注淬火效应的定量计算中, 通常将核-核碰撞中的实验可观测量与 pp 碰撞中的相应测量的比值定义为核修正因子:

$$R_{AA} = \frac{\sigma_{NN}}{\langle N_{bin} \rangle} \frac{d^2 N_{AA}/dp_T d\eta}{d^2 \sigma_{pp}/dp_T d\eta}, \quad (13)$$

式中, $\langle N_{bin} \rangle$ 是给定碰撞中心度内的等效核子-核子碰撞数. 喷注与热密介质的相互作用引起的喷注淬火会导致核修正因子 $R_{AA} \neq 1$. RHIC-STAR 实验组在 $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV 的金核-金核对心碰撞中所观测到的强子核修正因子在大横动量区域小于 1 [43,44], 而在氩核-金核对心碰撞中并没有观测到压低效应, 表明 RHIC $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV 的金核-金核对心碰撞中产生了热密夸克物质, 并且高能部分子与热密介质相互作用从而损失能量, 导致末态强子产额压低, 这些带电强子谱的压低首次证实了在重离子碰撞中的喷注淬火效应. 此外, STAR 在金-金碰撞实验中还观测到了双强子背靠背关联的消失 [45], 因为喷注淬火效应使得这种关联被破坏,

该现象也被作为 QGP 存在的信号之一. 随后在 LHC 重离子碰撞实验也观测到了带电强子谱的压低 [46,47], 进一步验证了喷注淬火效应的存在.

高能部分子与介质的相互作用会导致高能部分子横动量展宽, 其中喷注在 QGP 介质中单位路径横动量展宽的平方的平均值被称为 QGP 输运参数 \hat{q} (反映了喷注部分子与介质的相互作用强度). 定量地提取 QGP 输运参数 \hat{q} 是高能核物理研究的一个重要物理目标. 在理论方面, 喷注合作组 (JET Collaboration) [48] 根据不同的喷注淬火理论模型对 RHIC 和 LHC 中的强子谱的核修正因子实验数据进行分析, 提取了 QGP 的输运参数 \hat{q} 与初始温度的依赖关系, 结果如图 1(a) 所示, 在 RHIC $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV 的金核-金核碰撞中, $\hat{q} = (1.2 \pm 0.3)$ GeV²/fm, 在 LHC $\sqrt{s_{NN}} = 2.76$ TeV 的铅核-铅核碰撞中, $\hat{q} = (1.9 \pm 0.7)$ GeV²/fm. 随后多个合作组通过对不同的实验观测量或者参数化形式进一步提取了 \hat{q} 与介质演化温度的依赖关系. 例如 JETSCAPE 合作组 [49] 基于 Matter 和 LBT 能量损失模型以及贝叶斯分析方法提取了喷注的输运参数. 文献 [50] 采用信息场的、不依赖于参数化形式的贝叶斯方法提取了输运参数对介质演化温度的依赖关系, 结果如图 1(b) 所示. 不同理论组提取的 \hat{q} 数值在误差范围内是一致的, 但是对介质演化温度的依赖关系略有不同.

与 QGP 输运参数紧密相关的另一个量是部分子在穿过热密介质中的能量损失分布. 文献 [51] 发现胶子碎裂过程是大横动量 J/ψ 的主要产生机制, 并且基于 LBT 的数值计算也发现胶子的能量损失是重离子碰撞中大横动量 J/ψ 产额压低和产生椭圆流的主要机制. 通过对大横动量 J/ψ 的核修正因子贝叶斯分析发现, 胶子的核修正因子和能量损失分布很好地被限制, 并且与 LBT 的计算结果一致, 如图 2(a) 所示. 文献 [52] 基于 LBT 的数值计算也能同时描述轻味强子、D 介子以及 b 夸克碎裂的 J/ψ 的核修正因子. 随后, 文献 [52] 通过同时对轻味强子、D 介子以及 B 介子衰变的 J/ψ 的核修正因子进行系统的贝叶斯分析, 同时提取了胶子、轻味夸克、c 夸克和 b 夸克的平均能量损失份额和能量损失分布, 并且验证了喷注淬火效应中的味道排序 $\Delta E_g > \Delta E_{u,d,s} \simeq \Delta E_c > \Delta E_b$, 如图 2(b) 所示. 通过上述的结果可以看到, 不同于简单的领头阶微扰 QCD 近似, 胶子的能量损失并不

等于夸克能量损失的 9/4 倍. 这些提取的部分子的能量损失分布能够反过来限制理论模型的不确定

性和限制对味道依赖的能量损失机制, 也为将来提取对味道依赖的输运参数奠定了基础.

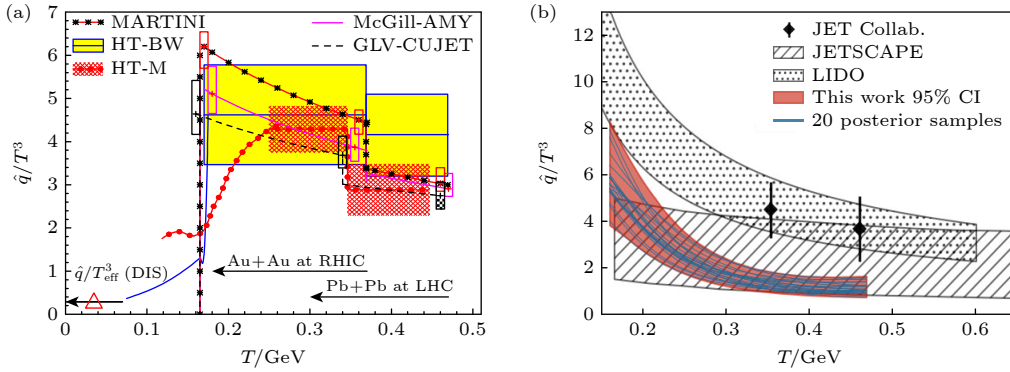


图 1 (a) 根据不同能量损失机制对 RHIC 和 LHC 中强子的核修正因子进行分析提取 QGP 的输运参数 \hat{q} 与初始温度的依赖关系^[48]; (b) 根据不同的模型以及参数化形式提取的输运参数 \hat{q} 对介质演化温度的依赖关系^[49,50]

Fig. 1. (a) The dependence of transport coefficient \hat{q} on the initial temperature T , extracted from the nuclear modification factor of hadrons from RHIC and LHC measurements^[48], based on four different energy loss formalism; (b) the dependence of transport coefficient \hat{q} on the evolution temperature T , extracted with different models and parameterized functions^[49,50].

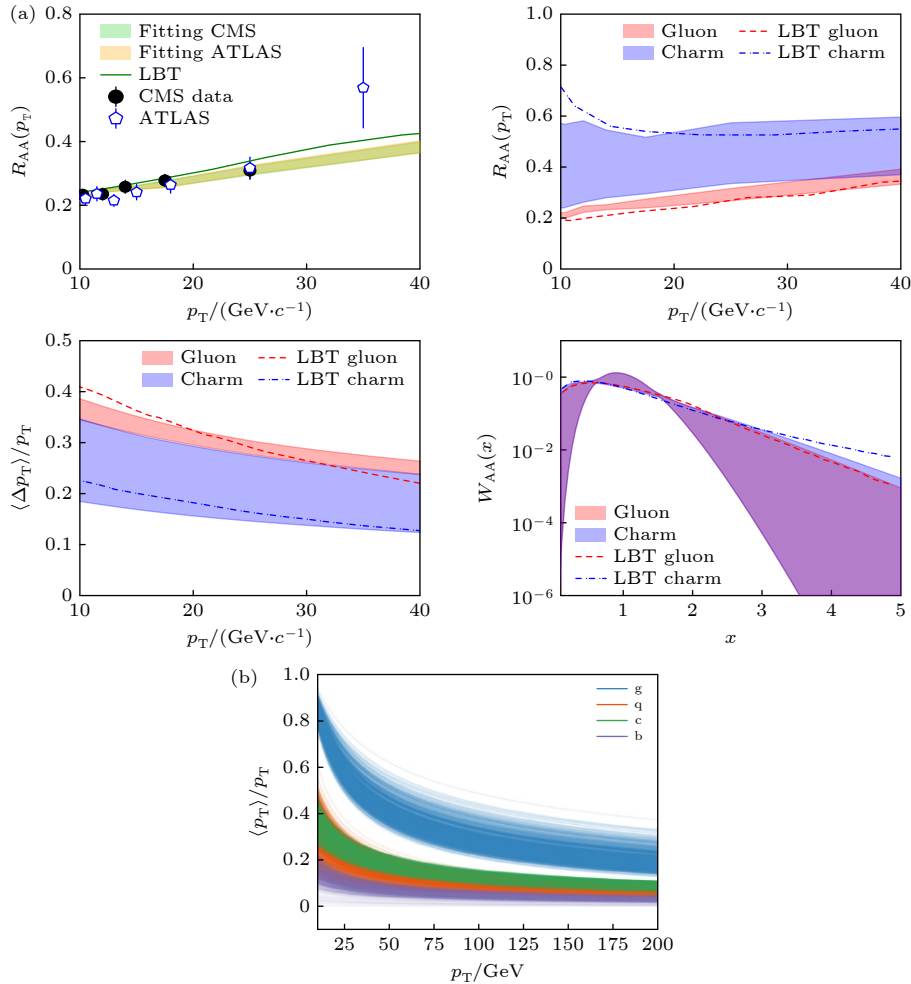


图 2 (a) 通过 J/ψ 的核修正因子贝叶斯分析提取的胶子和粲夸克的能量损失分布^[51]; (b) 同时对轻味强子, D 介子以及 B 介子衰变的 J/ψ 的核修正因子进行系统的贝叶斯分析提取的胶子, 轻味夸克, c 夸克和 b 夸克的平均能量损失份额^[52]

Fig. 2. (a) The final extracted energy loss distributions of charm quark and gluon from Bayesian analysis to experimental data on inclusive J/ψ ^[51]; (b) fractional jet energy loss of gluon, light quarks, charm quarks and bottom quarks from Bayesian analysis to experimental data on the R_{AA} of charged hadrons, D mesons and B-decayed J/ψ ^[52].

我们还能从末态粒子的快度分布以及横动量分布推论出系统的温度、熵和能量密度, 并可以与格点 QCD 计算进行比较分析^[6]. 此外在重离子碰撞中重子与介子产额比的异常现象也是目前研究 QCD 理论以及 QGP 性质的热门课题, 同时也有研究显示重子异常也会与重离子碰撞的中心度有明显关系^[53].

4 通过喷注研究喷注淬火效应

喷注是一定锥角内的一束粒子簇, 整体喷注包含丰富的物理过程^[54], RHIC 和 LHC 对单喷注、双喷注和各种标记的喷注进行了大量的测量. CMS 对双喷注的方位角关联以及横动量不对称分布的测量首次直观地验证了 LHC 能区整体喷注的喷注淬火效应^[55]. 随后 CMS 测量到单喷注横动量谱的压低^[56], 规范玻色子 (光子和 Z 玻色子) 标记的喷注的关联修正^[57,58], 都进一步验证了整体喷注的淬火效应. 规范玻色子不参与强相互作用, 从而穿过 QGP 保持能量不变, 喷注在介质中会损失能

量导致横动量 p_T^{jet} 减小, 最终导致 $x_{Zj} = p_T^{\text{jet}}/p_T^Z$ 减小, 大量的理论唯象计算都能很好地描述实验结果^[31,38,59–66].

近期 ATLAS 实验组测量的光子标记喷注 (γ +jet)^[67] 和 b 夸克喷注 (b-jet) 的核修正因子 R_{AA} ^[68] 都要大于单举喷注 (inclusive jet)^[69] 的核修正因子. 这些测量结果表明能量损失分布对味道的依赖性, 但是唯象模型不能同时描述这些实验测量结果^[67,68]. 不同味道的喷注在介质中损失的能量大小不同, 从而导致横动量谱的偏移程度不同. 并且横动量谱的相对偏移程度也与质子-质子碰撞中谱线的斜率紧密相关. 而喷注的核修正因子是核-核碰撞中的喷注谱线与 pp 碰撞中的喷注谱线的比值. 因此核修正因子不仅与喷注的夸克胶子的贡献份额相关, 同时也与质子-质子碰撞中谱线的斜率相关. 基于次领头阶矩阵元组合部分子簇射机制的事件生成器 MadGraph+PYTHIA 的模拟结果能很好地描述实验测量的单举喷注、 γ +jet、b-jet 的谱线, 如图 3(a), (b), (c) 所示, 并且发现^[70]: 单举

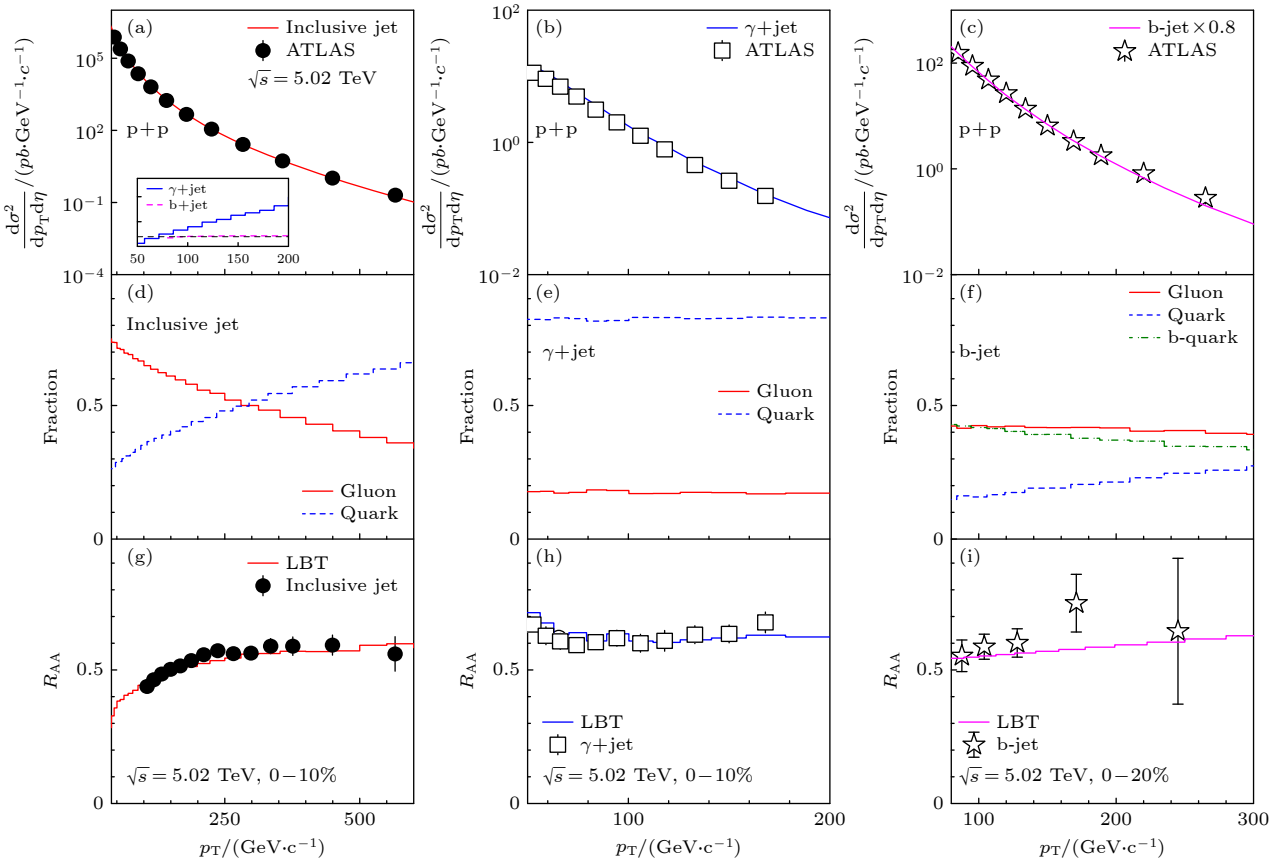


图 3 单举喷注, 光子标记喷注和 b 夸克喷注的微分散射截面, 夸克胶子份额和核修正因子^[70], 并与实验测量结果进行比较
Fig. 3. The differential cross sections of, fraction of quark and gluon in, nuclear modification factor of inclusive jet, γ -tagged jet, and b-jet^[70] as well as the comparison with experimental data^[67–69].

喷注主要是胶子喷注, 光子标记的喷注主要是夸克喷注, 胶子碎裂过程对 b-jet 有 40% 的贡献, 如图 3 (d), (e), (f) 所示. 同时发现光子标记喷注的 p_T 谱斜率要大于单举喷注, 但是 b 夸克喷注的 p_T 谱斜率与单举喷注谱线的斜率一致, 如图 3(a) 中插图所示. 从图 3(g), (h), (i) 可以看到, LBT 模型计算的单举喷注、 γ +jet、b-jet 的核修正因子能很好地描述实验测量结果^[70].

研究喷注淬灭效应的目的之一是要抽取 QGP 的输运性质, 例如输运系数 \hat{q} 或者喷注部分子在 QGP 介质中的能量损失分布. 文献 [40] 通过贝叶斯分析方法提取了味道平均的单喷注和光子标记

喷注的能量损失分布. 文献 [70] 将单举喷注、光子标记喷注和 b 夸克喷注的核修正因子分解成对夸克胶子份额以及夸克胶子核修正因子的权重叠加. 然后通过贝叶斯分析方法^[70] 同时对单举喷注、光子标记喷注和 b 夸克喷注的核修正因子进行系统地分析, 进一步提取了轻味夸克、胶子和 b 夸克喷注的核修正因子以及平均能量损失份额和能量损失分布, 如图 4(a) 所示. 结果发现相对于夸克喷注, 胶子喷注的核修正因子对于横动量和碰撞中心度有更强的依赖性. 由于部分子质量效应, b 夸克损失的能量较小, 但是质量效应会随着 p_T 的增大而减小, 与文献 [52, 71–73] 结论一致. 唯象模型

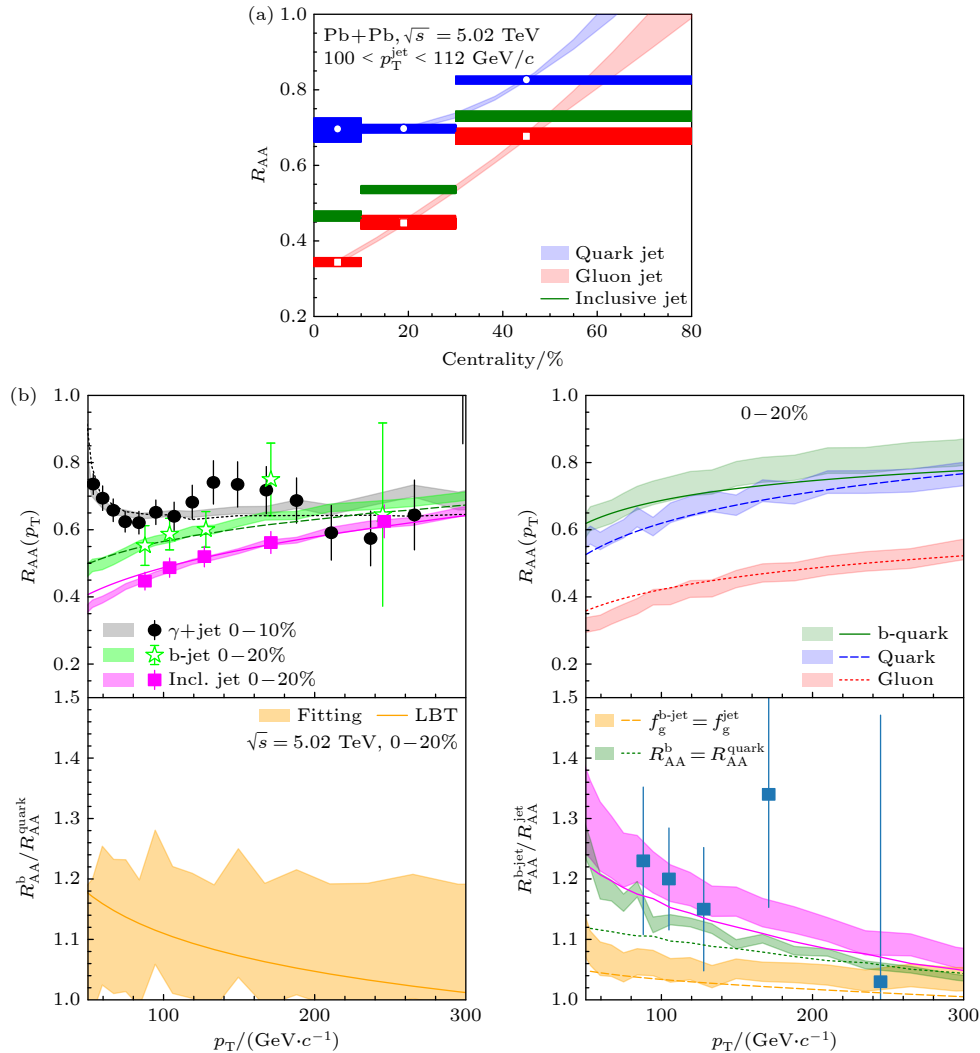


图 4 (a) 5.02 TeV Pb+Pb 碰撞中胶子喷注 (红色)、夸克喷注 (蓝色)、单举喷注 (绿色) 的核修正因子 R_{AA} 的中心度依赖^[70]; (b) 最终拟合的 b-喷注、单举喷注、光子标记喷注的核修正因子 R_{AA} , 以及数据驱动提取出的胶子喷注、轻夸克喷注和 b 夸克喷注的 R_{AA} 和能量损失分布^[70]

Fig. 4. (a) The centrality dependence of final fitted gluon jet (red), quark jet (blue) and inclusive jet (green) R_{AA} in Pb+Pb collisions at 5.02 TeV^[70]; (b) final fitted nuclear modification factor R_{AA} of b-jets, inclusive jet and γ -tagged jet, and the data-driven extracted R_{AA} and energy loss distributions of gluon, light quark, and b-quark initiated jets^[70].

计算 [72,73] 表明质量效应会在 $p_T > 70$ GeV 消失, 然而贝叶斯分析结果发现质量效应在 $p_T = 300$ GeV 依然存在, 与实验数据以及强耦合场理论 [52,71] 结果一致. 文献 [70] 通过定性分析发现, 初始谱线斜率不同是单举喷注和光子标记喷注的核修正因子在小动量区间不同的主要机制, 而夸克胶子份额的不同是导致大横动量区间差异的主要原因. 由于 b-jet 和单举喷注的谱线斜率一致, 因此喷注质量效应和色荷效应是导致 b-喷注和单举喷注的核修正因子不同的主要原因. 为了定量地分析喷注质量效应, 文献 [70] 首先人为假设 b-jet 与单举喷注有相同的胶子份额, 所计算的 b-jet 的核修正因子与单举喷注的核修正因子的比值结果如图 4(b) 右下图中的绿线 (表示为“ $f_g^{b\text{-jet}} = f_g^{b\text{-jet}}$ ”) 所示; 为了分析色荷效应的贡献, 文献 [70] 人为假设 b 夸克喷注与轻味夸克喷注损失相同大小的能量, 所计算得到的 b-jet 的核修正因子与单举喷注的核修正因子的比值结果如图 4(b) 右下图中的黄色线 (表示为“ $R_{AA}^b = R_{AA}^{\text{quark}}$ ”) 所示. 色荷效应对 b-jet 和单举喷注的核修正因子不同的贡献略微大于质量效应的贡献, 但是结果误差比较大. 将来更加精确的实验测量能进一步定量地确定 b 夸克喷注的能量损失分布以及质量效应的大小.

另外一个重要的实验观测量是单举整体喷注的核修正因子对于喷注锥角的依赖分布 [74]. 理论预言, 喷注锥角越大, 辐射到喷注锥角外的胶子越少, 因此损失的能量减少. 但是最近 CMS 测量的结果 [74] 发现核修正因子几乎不依赖于喷注锥角, 目前几个理论模型都还未能对其进行定量地描述和解释, 特别是包含了介质响应的蒙特卡罗模型, 如图 5(a) 所示. 而 ALICE 测量的通过带电强子重建喷注的核修正因子 [75] 对于喷注锥角 R 有明显的依赖, 如图 5(b) 所示, 带电强子重建的喷注的核修正因子随着喷注锥角的增大而减小, 不同的理论模型对该观测量的预言存在明显的差异. 定性上, 带电强子重建喷注与完整喷注呈现不同的喷注锥角依赖性可能与带电喷注的重建过程中不考虑中性粒子以及扣除背景的方法和动力学区间有关.

理论模型计算的核修正因子对喷注锥角的依赖分布对介质响应比较敏感, 如图 5(a) 所示. 并且喷注散射截面与喷注锥角也有比较强的依赖性 [76], 如图 6(a) 所示, 特别是小喷注锥角的散射截面对非微扰过程强子化也比较敏感. 为了降低非微扰强子化以及介质响应对喷注锥角依赖的核修正因子的影响, 文献 [77] 提出了先重建 $R = 0.2$ 的小半径喷注, 然后再将小半径喷注重建成大半径喷注, 再

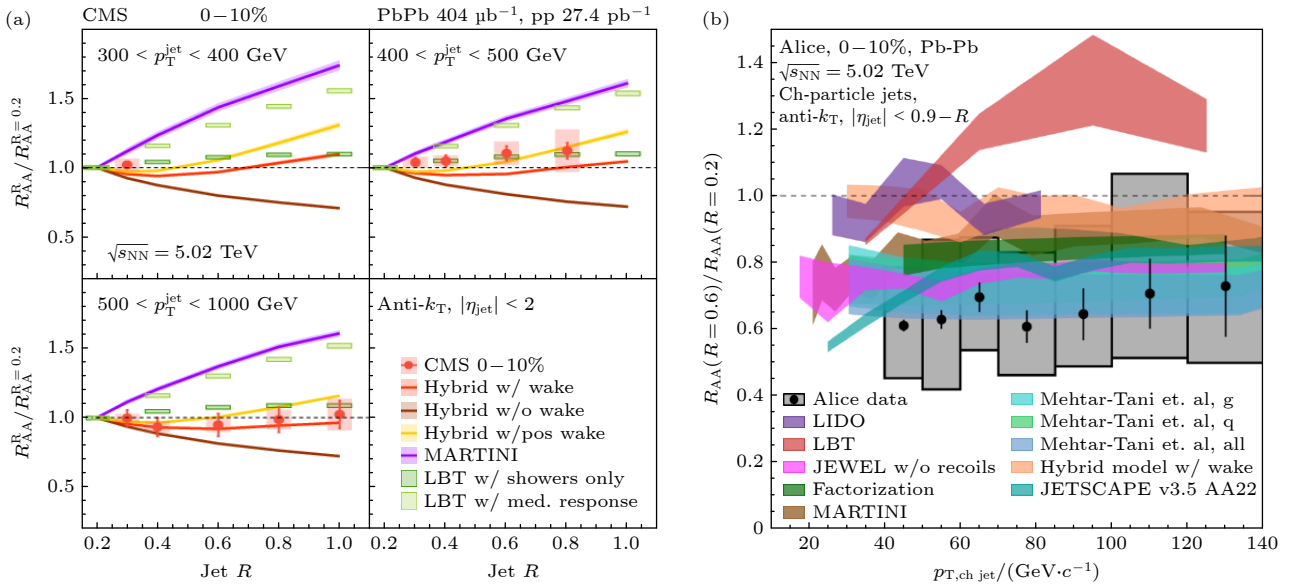


图 5 (a) CMS 测量的在不同横动量区间内喷注锥角为 $R = 0.3-1.0$ 的单举喷注的核修正因子与 $R = 0.2$ 的结果的比值对 R 的分布, 及与理论模型计算结果的比较 [74]; (b) ALICE 测量的 $R = 0.6$ 的带电强子重建喷注的核修正因子与 $R = 0.2$ 的结果的比值, 并与理论模型进行比较 [75]

Fig. 5. (a) The double ratio R_{AA} for inclusive jet, as a function of R , for $R = 0.3-1.0$ with respect to $R = 0.2$ in various p_T^{jet} ranges for the 0-10% centrality class as well as the comparison with model calculations [74]; (b) the ratio of charged jet R_{AA} with $R = 0.6$ to that with $R = 0.2$ measured by ALICE [75] and the comparison with model calculations.

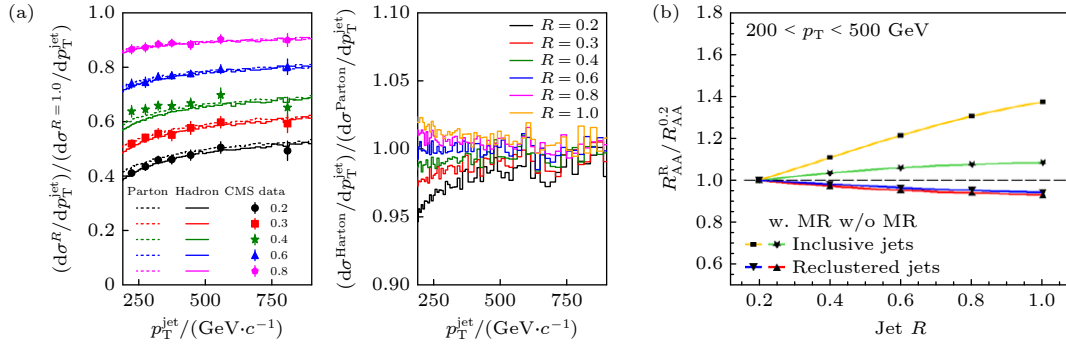


图 6 (a) 部分子层次和强子层次的不同喷注锥角的微分散射截面与 $R = 1.0$ 的微分散射截面的比值并与实验结果的比较 (左图), 强子层次的散射截面与部分子层次的散射截面的比值 (右图); (b) 单喷注以及重建喷注的核修正因子对喷注锥角的依赖分布. 图片来源于文献 [76]

Fig. 6. (a) The ratio of inclusive jet cross section with $R = 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8$ with respect to $R = 1.0$ calculated as parton level and hadron level as well as the comparison with CMS data (left); the ratio of jet cross section at hadron level to parton level with different jet cones (right); (b) jet cone dependent R_{AA} of inclusive jet and reclustered jet. Pictures are taken from Ref [76].

通过逆重建的方法找到喷注内部最硬的劈裂过程. 这种重建方法可以将喷注内软粒子剔除并且对强子化以及介质响应不敏感. 计算结果发现小半径喷注之间距离越宽, 大半径喷注产额的核修正因子越小. 图 6(b) 是基于 LBT 模型计算的半单举喷注以及重建喷注的核修正因子对喷注锥角的依赖分布. 由于重建过程中将辐射到小半径喷注之间的粒子减掉, 计算结果发现重建的大半径喷注的核修正因子会随着喷注锥角增大而减小, 并且对介质响应也不敏感. 这种重建喷注的方法为研究对喷注锥角依赖的核修正因子提供了新思路.

除了上述观测量, 实验上也测量强子-喷注关联、喷注质量 (jet mass)[78]、喷注弥散 (dispersion)[79]、喷注尺寸 (girth)[80,81]、子喷注个数 (subjettiness)[82]、喷注电荷 (jet charge)[83,84]、喷注事件的整体结构 (global event shapes)[85] 等, 这些观测量都从各个方面反映了喷注与热密介质的相互作用机制. 同时也有很多理论组将先进的数据分析方法, 比如贝叶斯分析和人工智能中的深度学习技术应用于高能核物理, 来研究区分夸克胶子喷注, 以及喷注层析等.

喷注部分子与 QGP 中部分子的相互作用不仅会导致喷注能量的减小, 同时也会改变喷注内部的精细结构. 对喷注内部结构的研究能够进一步揭示喷注部分子与 QGP 介质的相互作用机制并提取 QGP 的热动力学性质. CMS 实验测量的单喷注的喷注形状以及劈裂函数发现, 在对心铅-铅碰撞中, 喷注的碎裂函数相对于 pp 碰撞有明显的修正 [86–89], 理论计算表明主要是喷注轴附近的大横

动量的热部分子的大角辐射导致的远离喷注轴的软粒子数增加, 从而导致碎裂函数的修正. 近期 LHC 的 CMS 和 ATLAS 实验组对单喷注、光子标记喷注的内部能量以及粒子数密度分布进行大量的测量 [86–89], 发现单喷注和光子标记喷注的内部结构的介质修正存在明显的差异, 最直观的解释是光子标记的喷注主要是夸克喷注, 夸克胶子喷注与热密介质的相互作用机制不同从而会导致夸克胶子喷注介质修正不同. 文献 [90] 对喷注内部能量的介质修正给出了定性解释, 认为单喷注和光子标记喷注的喷注形状不同主要是由于不同的动力学截断导致的. 但是到目前为止, 还没有理论对不同过程中的喷注内部粒子数密度的介质修正的差异给出明确的解释, 并且喷注的粒子数密度分布对强子化非常敏感 [91], 为理论模型带来了巨大的挑战.

5 喷注淬火效应对喷注子结构的影响

对喷注碎裂函数和喷注形状的研究, 理论上非常依赖于非微扰的强子化机制 [90]. 如图 7 所示, 部分子层次的结果不能描述碎裂函数的谱线, 部分子层次的部分子能量较大, 数量较少, 并且主要集中在喷注轴附近. 为了考虑非微扰强子化对喷注子结构的影响, 文献 [91] 基于线性玻尔兹曼运输模型, 将一套团簇强子化机制 [92–95] 运用到相对论重离子碰撞中, 以此来模拟部分子向强子转化这一非微扰过程. 团簇强子化机制的核心是要求色禁闭, 即末态产生的夸克之间要组成色单态的团簇, 再由色单态团簇级联衰变到末态强子.

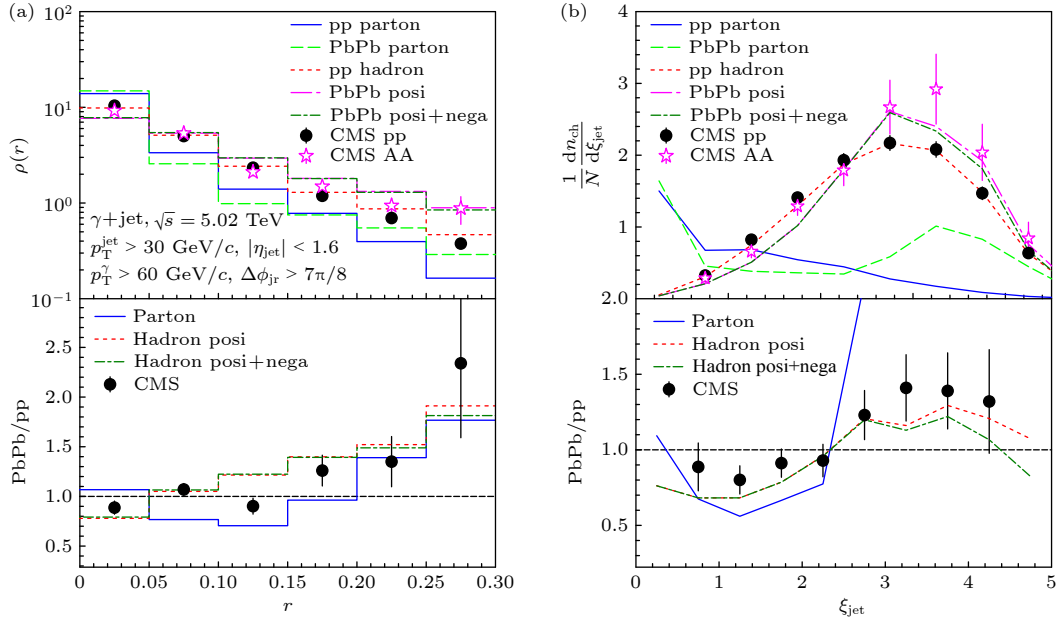


图 7 基于部分子层次和团簇强子模型计算的光子标记喷注的喷注形状 (a) 与光子标记喷注的碎裂函数 (b) 以及它们的介质修正^[91]
 Fig. 7. Distributions of and R_{AA} of jet shape (a) and jet fragmentation function (b) calculated at parton and hadron level^[91].

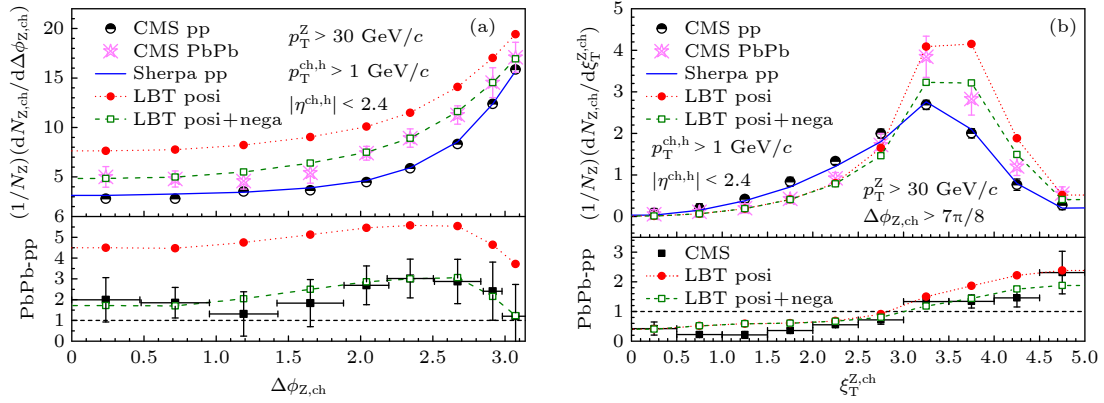


图 8 基于团簇强子化模型计算的质子-质子碰撞和核碰撞中 Z 玻色子与其标记的带电强子的方位角关联 (a) 以及 Z 玻色子标记的带电强子相对于 Z 玻色的碎裂函数 (b)^[91]
 Fig. 8. (a) The azimuthal angle correlation $\Delta\phi_{Z, \text{ch}}$ between charged hadron and the recoiling Z boson; (b) the fragmentation pattern of the charged hadron recoiling from a Z boson^[91].

如图 7, 团簇强子化模型能够很好地描述质子-质子碰撞和核-核碰撞中光子标记喷注的喷注形状和碎裂函数以及介质修正, 以及 Z 玻色子与其标记的带电强子的方位角关联和带电强子的横动量谱以及它们的介质修正 (如图 8). 强子化对喷注子结构分布以及他们在介质中的分布都有比较大的影响, 特别是小横动量区间和喷注轴附近的粒子分布. 同样对喷注锥角依赖的喷注微分散射截面进行分析发现, 强子化对小喷注锥角的喷注产额有 10% 的影响, 如图 6(a) 右图所示. 强子化过程在本质上也是一种劈裂过程或者辐射过程, 在一定程度上对喷注也是一种能量损失. 由于质子-质子碰撞中和核核

碰撞中部分子的相空间不同, 因此强子化对质子-质子碰撞中分布的影响会大于对核核碰撞中分布的影响. 所以在计算喷注淬灭以及提取喷注能量损失分布或者输运参数 \hat{q} 时, 强子化效应是不可忽略的.

强子化对软粒子的贡献比较大, 并且由于铅-铅碰撞系统的复杂性, 导致软粒子增多, 背景贡献变大. 为了减少软粒子的贡献, 实验上也测量修饰后的喷注的子结构. 修饰的目的是将喷注内的大角的软辐射减除掉而找到喷注内的最大的硬劈裂过程. 修饰方法是指将整体喷注进行逆分解, 如果一个分裂过程的两个子喷注 $p_{T,1}, p_{T,2}$ 满足:

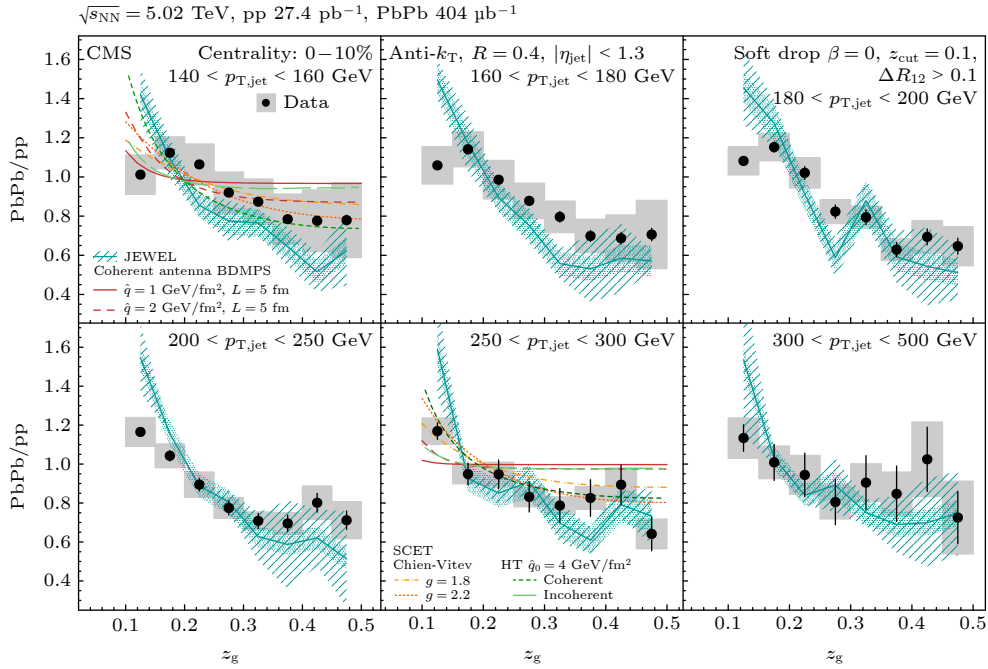


图 9 CMS 测量的单喷注在不同的动量区间内的修饰的碎裂函数 z_g 的介质修正, 并与理论模型的计算结果进行比较^[89]

Fig. 9. Medium modification on groomed fragmentation function z_g of inclusive jet in different p_T intervals measured by CMS and the comparison with model calculations^[89].

$$z_g = \frac{\min(p_{T,1}, p_{T,2})}{p_{T,1} + p_{T,2}} > z_{\text{cut}} \theta^\beta, \quad (14)$$

则这个分裂过程认为是硬劈裂^[89,96]. 其中 θ 是两个子喷注之间的相空间距离, z_{cut} 和 β 是动力学参量. $\beta < 0$ 主要测量小角辐射区域的贡献, $\beta = 0$ 与角度无关. 图 9 给出了 CMS 测量的单喷注在不同的动量区间内的修饰的碎裂函数 z_g 的介质修正, 并与理论模型的计算结果进行比较. 在铅-铅碰撞中, z_g 有明显的修正. CMS 也测量了修饰的喷注质量的介质修正^[89], 并且测量了不同的参量对应不同的相空间的介质修正, 发现喷注的核心不受介质的影响, 但是喷注的边缘对喷注与 QGP 的相互作用比较敏感. ALICE 也测量了 z_g 对 β 的依赖关系^[97], 发现大角辐射区域被压低, 而小角区域被增强.

6 结论

本文对近期在相对论重离子碰撞中的喷注淬火方面的理论和实验进展进行了综述. 我们首先综述了不同理论组基于大横动量强子的核修正因子提取的 QGP 的输运参数 \hat{q} 的数值在误差范围内是一致的, 但是对介质演化温度的依赖关系略有不同; 以及基于各种大横动量强子的核修正因子提取了对味道依赖的部分子能量损失分布并且验证了喷注淬火

效应中味道排序 $\Delta E_g > \Delta E_{u,d,s} \simeq \Delta E_c > \Delta E_b$.

随后重点介绍了近期 LHC 上测量到的对喷注味道以及喷注锥角依赖的核修正因子, 以及理论上的相关进展和遇到的困难. ATLAS 测量的单举喷注、 γ +jet、b-jet 的核修正因子存在明显的差异, 对这些结果系统地分析发现: 初始谱线斜率不同是单举喷注和光子标记喷注的核修正因子在小动量区间不同的主要机制, 夸克胶子份额的不同是导致大横动量单举喷注和光子标记喷注的核修正因子存在区间差异的主要原因, 部分子质量效应和色荷效应对 b 夸克喷注与单举喷注的核修正因子不同有几乎相等的贡献. 与此同时, 不同实验组测量的对喷注锥角依赖的核修正因子存在明显的差异, 不同理论模型预言存在明显的差异并且也不能定量地描述和解释这些结果. 理论研究发现喷注的散射截面对非微扰强子化以及软粒子比较敏感, 因此考虑强子化效应以及通过重建扣除软粒子的方法是将来研究对喷注锥角依赖的核修正因子的新方向.

最后本文总结了喷注子结构的实验和理论进展, 发现喷注子结构分布及其在介质中的修正对强子化和软粒子产生比较敏感, 因此引入了一套团簇强子化机制以及减掉软粒子的修饰的方法来研究喷注子结构.

参考文献

- [1] Adcox K, Adler S S, Afanasiev S, et al. 2005 *Nucl. Phys. A* **757** 184
- [2] Adams J, Aggarwal M M, Ahammed Z, et al. 2005 *Nucl. Phys. A* **757** 102
- [3] Back B B, Baker M D, Ballintijn M, et al. 2005 *Nucl. Phys. A* **757** 28
- [4] Arsene I, Bearden I G, Beavis D, et al. 2005 *Nucl. Phys. A* **757** 1
- [5] Bleicher M, Zabrodin E, Spieles C, et al. 1999 *J. Phys. G* **25** 1859
- [6] Fodor Z, Katz S D 2004 *JHEP* 04 050
- [7] Adam J, et al. 2016 *Phys. Rev. C* **93** 024917
- [8] Qin G Y, Wang X N 2015 *Int. J. Mod. Phys. E* **24** 1530014
- [9] Wang X N, Gyulassy M 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 1480
- [10] Baier R, Dokshitzer Y L, Mueller, et al. 1997 *Nucl. Phys. B* **483** 291
- [11] Baier R, Dokshitzer Y L, et al. 1998 *Phys. Rev. C* **58** 1706
- [12] Baier R, Schiff D, Zakharov B G 2000 *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **50** 37
- [13] Eskola K J, Honkanen H, Salgado C A, Wiedemann U A 2005 *Nucl. Phys. A* **747** 511
- [14] Zakharov B G 1996 *JETP Lett.* **63** 952
- [15] Wiedemann U A 2001 *Nucl. Phys. A* **690** 731
- [16] Armesto N, et al. 2012 *Phys. Rev. C* **86** 064904
- [17] Guo X f, Wang X N 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3591
- [18] Wang X N, Guo X f 2001 *Nucl. Phys. A* **696** 788
- [19] Zhang B W, Wang E, Wang X N 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 072301
- [20] Zhang B W, Wang X N 2003 *Nucl. Phys. A* **720** 429
- [21] Majumder A 2012 *Phys. Rev. D* **85** 014023
- [22] Arnold P B, Moore G D, Yaffe L G 2002 *JHEP* **06** 030
- [23] Gyulassy M, Levai P, Vitev I 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 5535
- [24] Gyulassy M, Levai P, Vitev I 2001 *Nucl. Phys. B* **594** 371
- [25] Zapp K C 2014 *Eur. Phys. J. C* **74** 2762
- [26] Lokhtin I P, Snigirev A M 2006 *Eur. Phys. J. C* **45** 211
- [27] Pablos D 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 052301
- [28] Schenke B, Gale C, Jeon S 2009 *Phys. Rev. C* **80** 054913
- [29] Ke W, Xu Y, Bass S A 2019 *Phys. Rev. C* **100** 064911
- [30] Tachibana Y, Chang N B, Qin G Y 2017 *Phys. Rev. C* **95** 044909
- [31] Wang X N, Zhu Y 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 062301
- [32] He Y, Luo T, Wang X N, Zhu Y 2015 *Phys. Rev. C* **91** 054908 [Erratum: *Phys. Rev. C* **97**, 019902 (2018)]
- [33] Cao S, Luo T, Qin G Y, Wang X N 2016 *Phys. Rev. C* **94** 014909
- [34] Cao S, et al. 2017 *Phys. Rev. C* **96** 024909
- [35] Auvinen J, Eskola K J, Renk T 2010 *Phys. Rev. C* **82** 024906
- [36] Chen W, Cao S, Luo T, et al. 2018 *Phys. Lett. B* **777** 86
- [37] Luo T, Cao S, He Y, Wang X N 2018 *Phys. Lett. B* **782** 707
- [38] Zhang S L, Luo T, Wang X N, Zhang B W 2018 *Phys. Rev. C* **98** 021901
- [39] He Y, Cao S, Chen W, et al. 2019 *Phys. Rev. C* **99** 054911
- [40] He Y, Pang L G, Wang X N 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 252302
- [41] He Y, Pang L G, Wang X N 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 122301
- [42] Chen W, Cao S, Luo T, et al. 2020 *Phys. Lett. B* **810** 135783
- [43] Adler S S, et al. 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 072301
- [44] Adams J, et al. 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 172302
- [45] Adler C, et al. 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 082302
- [46] Aamodt K, et al. 2011 *Phys. Lett. B* **696** 30
- [47] Chatrchyan S, et al. 2012 *Eur. Phys. J. C* **72** 1945
- [48] Burke K M, et al. 2014 *Phys. Rev. C* **90** 014909
- [49] Cao S, et al. 2021 *Phys. Rev. C* **104** 024905
- [50] Xie M, Ke W, Zhang H, Wang X N 2023 *Phys. Rev. C* **108** L011901
- [51] Zhang S L, Liao J, Qin G Y, et al. 2023 *Sci. Bull.* **68** 2003
- [52] Xing W J, Cao S, Qin G Y 2023 arXiv: 2303.12485
- [53] Chen X, Zhang H, Zhang B W, et al. 2010 *J. Phys.* **37** 015004
- [54] Sterman G F, Weinberg S 1977 *Phys. Rev. Lett.* **39** 1436
- [55] Chatrchyan S, et al. 2011 *Phys. Rev. C* **84** 024906
- [56] Aad G, et al. 2013 *Phys. Lett. B* **719** 220
- [57] Sirunyan A M, et al. 2018 *Phys. Lett. B* **785** 14
- [58] Sirunyan A M, et al. 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 082301
- [59] Dai W, Vitev I, Zhang B W 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 142001
- [60] Chen L, Qin G Y, Wang L, et al. 2018 *Nucl. Phys. B* **933** 306
- [61] Neufeld R B, Vitev I, Zhang B W 2011 *Phys. Rev. C* **83** 034902
- [62] Neufeld R B, Vitev I 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 242001
- [63] Casallerrey-Solana J, Gulhan D C, Milhano J G, et al. 2016 *JHEP* **03** 053
- [64] Kunnawalkam Elayavalli R, Zapp K C 2016 *Eur. Phys. J. C* **76** 695
- [65] Kang Z B, Vitev I, Xing H 2017 *Phys. Rev. C* **96** 014912
- [66] Zhang S L, Wang X N, Zhang B W 2022 *Phys. Rev. C* **105** 054902
- [67] Aad G, et al. 2023 *Phys. Lett. B* **846** 138154
- [68] Aad G, et al. 2023 *Eur. Phys. J. C* **83** 438
- [69] Aaboud M, et al. 2019 *Phys. Lett. B* **790** 108
- [70] Zhang S L, Wang E, Xing H, et al. 2023 arXiv: 2303.14881
- [71] Horowitz W A, Gyulassy M 2008 *Phys. Lett. B* **666** 320
- [72] Huang J, Kang Z B, Vitev I 2013 *Phys. Lett. B* **726** 251
- [73] Xing W J, Cao S, Qin G Y, Xing H 2020 *Phys. Lett. B* **805** 135424
- [74] Sirunyan A M, et al. 2021 *JHEP* **05** 284
- [75] ALICE 2023 arXiv: 2303.00592
- [76] Zhang S L, Yang M Q 2023 *In preparation*
- [77] Zhang S L, Yang M Q, Zhang B W 2022 *Eur. Phys. J. C* **82** 414
- [78] Acharya S, et al. 2018 *Phys. Lett. B* **776** 249
- [79] Connors M, Nattrass C, Reed R, Salur S 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 025005
- [80] Cunqueiro L 2016 *Nucl. Phys. A* **956** 593
- [81] Yan J, Chen S Y, Dai W, et al. 2021 *Chin. Phys. C* **45** 024102
- [82] Zardoshti N 2017 *Nucl. Phys. A* **967** 560
- [83] Krohn D, Schwartz M D, Lin T, Waalewijn W J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 212001
- [84] Chen S Y, Zhang B W, Wang E K 2020 *Chin. Phys. C* **44** 024103
- [85] Chen S Y, Dai W, Zhang S L, et al. 2020 *Eur. Phys. J. C* **80** 865
- [86] Sirunyan A M, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 152001
- [87] Sirunyan A M, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 242301
- [88] Aaboud M, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 042001
- [89] Sirunyan A M, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 142302
- [90] Chang N B, Tachibana Y, Qin G Y 2020 *Phys. Lett. B* **801** 135181
- [91] Zhang S L, Xing H, Zhang B W 2022 arXiv: 2209.15336
- [92] Gottschalk T D 1983 *Nucl. Phys. B* **214** 201
- [93] Gottschalk T D 1984 *Nucl. Phys. B* **239** 349
- [94] Gottschalk T D, Morris D A 1987 *Nucl. Phys. B* **288** 729
- [95] Webber B R 1984 *Nucl. Phys. B* **238** 492
- [96] Larkoski A J, Marzani S, Soyez G, et al. 2014 *JHEP* **05** 146
- [97] Acharya S, et al. 2020 *Phys. Lett. B* **802** 135227

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Jet quenching effect in relativistic heavy-ion collisions^{*}

Zhang Shan-Liang¹⁾²⁾ Xing Hong-Xi^{1)2)†} Wang En-Ke^{1)2)‡}

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, Institute of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Guangdong Provincial Key Laboratory of Nuclear Science, Southern Nuclear Science Computing Center, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 15 June 2023; revised manuscript received 16 September 2023)

Abstract

One of the main goals of high-energy nuclear physics is to explore the fundamental properties of quark-gluon plasma (QGP), a new state of quantum chromodynamics (QCD) matter created in relativistic heavy-ion collisions, in which the energetic quarks and gluons, known as fast partons, created prior to the formation of the QGP, traverse the hot-dense medium and experience strong interactions with the constituents of the medium, and eventually lead to the attenuation of jet energy. Such a novel phenomenon, referred to as jet quenching, plays an essential role in probing the transport properties of the QGP. The objective of this paper is to review some of the latest experimental and theoretical progress of jet quenching, such as medium modification on the large p_T hadrons, full jets, and jet substructures in heavy-ion collisions, as well as the challenges in the forefront theoretical investigations.

Keywords: relativistic heavy-ion collisions, quark-gluon-plasma, jet quenching

PACS: 03.67.Lx, 14.20.Dh, 25.40.Cm, 71.10.Hf

DOI: [10.7498/aps.72.20230993](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230993)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12147131, 12035007, 12022512) and the Major Project of Basic and Applied Basic Research of Guangdong Province, China (Grant Nos. 22020B0301030008, 2022A1515010683).

[†] Corresponding author. E-mail: hxing@m.scnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: wangek@scnu.edu.cn

相对论重离子碰撞中的喷注淬火效应

张善良 邢宏喜 王恩科

Jet quenching effect in relativistic heavy-ion collisions

Zhang Shan-Liang Xing Hong-Xi Wang En-Ke

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200304 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230993

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230993>

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

相对论强激光与近临界密度等离子体相互作用的质子成像

Proton imaging of relativistic laser-produced near-critical-density plasma

物理学报. 2019, 68(15): 155201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190610>

相对论皮秒激光在低密度等离子体中直接加速的电子束的横向分布特征研究

Transverse distribution of electron beam produced by relativistic picosecond laser in underdense plasma

物理学报. 2019, 68(19): 195203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191106>

X波段高重频长脉冲高功率多注相对论速调管放大器的设计与实验研究

Design and experiment of X-band high-repetition rate high-power multi-beam relativistic klystron amplifier

物理学报. 2020, 69(21): 218401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201013>

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>

吉瓦级强流相对论多注电子束二极管的优化设计与实验研究

Optimal design and experimental research of several-gigawatt multiple electron beam diode

物理学报. 2021, 70(3): 038401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201336>

基于气体放电等离子体射流源的模拟离子引出实验平台物理特性

Physical characteristics of ion extraction simulation system based on gas discharge plasma jet

物理学报. 2018, 67(18): 182801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180919>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

基于量子计算的高能核物理研究*

李天胤¹⁾²⁾³⁾ 邢宏喜^{1)2)3)4)†} 张旦波^{4)‡}

1) (华南师范大学量子物质研究院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (华南师范大学量子物质研究院, 广东省核物质科学与技术重点实验室, 广州 510006)

3) (华南师范大学南方核科学计算中心, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

4) (华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室,
广东省高等学校物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 广州 510006)

(2023 年 5 月 31 日收到; 2023 年 7 月 4 日收到修改稿)

高能核物理旨在探索和理解物质在夸克与胶子层次的组成及演化的基本规律. 然而, 从量子色动力学第一性原理出发来求解高能核物理, 经典计算却存在本质困难. 近几年来, 量子计算因给模拟高能核物理提供了潜在的根本性解决方案而受到了较大的关注. 本文简要回顾了高能核物理量子模拟的现状, 介绍了态制备及光锥关联函数测量等典型量子算法, 并通过强子散射振幅和有限温有限密物质相结构的研究, 分别展示了量子计算在解决高能核物理中含时问题和符号问题上的优势.

关键词: 高能核物理, 量子算法, 散射振幅, 核物质相结构**PACS:** 03.67.Lx, 14.20.Dh, 11.15.Ha, 25.75.Nq**DOI:** 10.7498/aps.72.20230907

1 引言

高能核物理研究夸克与胶子及其强相互作用形成的物质及其演化, 对理解物质深层次结构乃至宇宙起源均具有重要意义. 高能核物理的底层模型量子色动力学 (QCD) 具有色禁闭的关键特征, 即在低能标时 QCD 处于强耦合区域, 夸克和胶子等被束缚在色中性的强子中, 不能单独存在. 由于夸克禁闭的存在, 高能核物理中的许多重要物理量, 如强子散射振幅, 具有非微扰特性, 导致由第一性原理的 QCD 理论出发来理解高能核物理存在基本困难. 另一方面, 理解核物质在不同温度及密度下的物态特性, 即核物质相图, 是高能核物理的另一个重大挑战. 这是由于在有限密度情形, 格点

QCD 的蒙特卡罗模拟存在符号问题, 从而无法保证精度. 总而言之, 经典计算机在模拟高能核物理中的含时演化问题^[1]及有限密度核物质上^[2], 均存在本质困难.

高能核物理经典模拟存在困难的本质在于它属于强关联量子多体系统. 一个根本性的解决方案是通过可控量子系统来模拟 QCD 及相关的高能核物理, 此即量子计算模拟方案. 量子计算机最先由费曼在 1982 年提出^[3], Jordan, Lee 和 Preskill (JLP)^[4] 最早在 2012 年证明了量子计算机以多项式复杂度模拟标量场中的散射问题. 近年来, 随着量子计算机硬件及量子算法的快速发展, 量子计算与高能核物理的交叉研究逐渐成为研究热点, 其中包括核子结构中部分子分布函数的计算^[5–10]、部分子簇射问题^[11,12]、与环境有相互作用的开放系统

* 国家自然科学基金 (批准号: 12005065, 12022512, 12035007)、广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2023A1515011460, 2021A1515010317) 和广东省重点实验室 (批准号: 2020B1212060066) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hxing@m.scnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: dbzhang@m.scnu.edu.cn

动力学问题^[13–15]、非平衡态热力学问题^[16,17]、高能核物理中散射振幅的计算^[18,19]等含时问题^[20,21]. 另一方面, 量子计算也用于模拟高能核物理中有限温有限密系统, 如有限温有限密系统的手征相变的量子模拟^[22–24]、手征磁效应的量子模拟^[25]、以及如何在量子计算机上通过变分量子算法来模拟高温时夸克的禁闭-退禁闭行为^[26].

本文主要对我们近期基于量子计算模拟高能核物理的工作进行综述^[9,10,19,26]. 第 2 节介绍了在核物理中常用的量子算法; 第 3 节介绍了如何基于第 2 节所提的量子算法计算强子散射振幅; 第 4 节则介绍如何通过量子计算机来研究有限温有限密核物质; 最后第 5 节是对这一系列工作的总结.

2 高能核物理相关量子算法

在量子计算机上模拟高能核物理一般包含两部分: 制备描述强子或核物质的量子态, 以及在该态上进行物理量的测量. 本节基于量子线路模型的数字量子计算机, 介绍相关的典型量子算法.

2.1 强子态制备

如何在量子计算机上模拟一个强子? 最核心的步骤是制备描述强子的量子态. 强子态是给定量子数下的激发态. 从多体波函数的角度出发, 强子态一般极为复杂, 包含夸克及胶子各种构型的叠加, 具有较复杂的量子关联. 对于 NISQ (noisy intermediate-scale quantum era) 量子计算机, 变分子本征值求解器^[27–30]是制备强子态的适用方

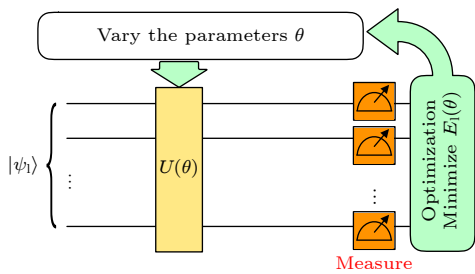


图 1 变分法制备强子态的量子线路图. 其中量子计算机通过拟设 $U(\theta)$ 来生成试探波函数以及测量试探波函数下 $E_l(\theta)$ 的值. 经典计算机负责更新和优化参数 θ

Fig. 1. Variational quantum algorithm for preparation of the hadronic state. The generation of trial state and the measurement of $E_l(\theta)$ are performed on a quantum computer, while the optimization of parameters θ is done with classical computing.

法, 通过采用合适的波函数拟设, 可以满足量子数的要求并精确表达强子态. 该算法的框架如图 1 所示. 首先, 采用量子数保持的拟设, 即试探波函数由保持系统对称性的参数化幺正算符 $U(\theta)$ 作用到给定量子数的参考态 $|\psi_{lk}\rangle_{\text{ref}}$ 上,

$$|\psi_{lk}(\theta)\rangle = U(\theta) |\psi_{lk}\rangle_{\text{ref}}, \quad (1)$$

其中 l 代表系统除能量外的所有量子数, k 代表给定量子数 l 下的第 k 个激发态. 参考态 $|\psi_{lk}\rangle_{\text{ref}}$ 为类 Dicke 态, 其一般的制备方法可在文献^[31]中找到.

保持系统对称性的幺正算符 $U(\theta)$ 可以通过交替算符演化拟设^[32,33]来构造. 为此, 先把哈密顿量分成 n (≥ 2) 份, $H = H_1 + \dots + H_n$, 并满足以下要求: 1) 每一个 H_i 都与哈密顿量 H 具有同样的对称性; 2) $[H_i, H_{i+1}] \neq 0$ 对所有 i 成立; 3) 选取尽量大的 n . $U(\theta)$ 可以通过多层 n 个哈密顿量 H_1, \dots, H_n 的交替演化来构造:

$$U(\theta) \equiv \prod_{i=1}^p \prod_{j=1}^n \exp(i\theta_{ij} H_j), \quad (2)$$

其中 p 是演化的层数.

制备强子态的第二步是最优化目标函数 $E_l(\theta)$ ^[28],

$$E_l(\theta) = \sum_{i=1}^k w_{li} \langle \psi_{li}(\theta) | H | \psi_{li}(\theta) \rangle, \quad (3)$$

其中 w_{li} 满足 $w_{l1} > w_{l2} > \dots > w_{lk} > 0$. 在最优参数 θ^* 得到之后, 量子数为 l 的第 k 激发态强子可通过 $|h\rangle = U(\theta^*) |\psi_{lk}\rangle_{\text{ref}}$ 来制备. 值得强调的是, $E_l(\theta)$ 通过量子-经典混合计算的方式来优化 (如图 1 所示), 其中量子计算机制备试探态并进行测量, 经典计算机收集测量数据并更新参数 θ , 迭代直至收敛.

2.2 有限温度系统的平衡态制备

在 QCD 相图中, 核物质在不同温度、不同密度下呈现不同的物态, 特别地, 在温度非常高时, 夸克出现解禁闭现象, 与胶子构成了夸克-胶子等离子体, 一直以来是高能核物理的研究重点. 然而, 传统的格点色动力学计算方法在模拟有限密度核物质时存在符号问题. 在量子计算上, 可以直接制备有限温度系统的平衡态^[34–38], 亦即热态或吉布斯态, 该方法不基于概率来采样, 对零密度及有限密度均适用, 从而避免了符号难题. 与强子态制备类似, 变分量子算法适用于在 NISQ 量子计算机上模拟有限温系统^[36,39,40]. 然而, 制备热态需最小化

自由能, 过程中熵的测量对量子计算机而言是较大的挑战^[36,39]. 下面介绍一种变分量子算法, 通过特定的拟设避免了熵的测量, 同时对一般系统的热态又有很好的表达力.

该算法的关键在于试探态可由参数化的么正算符 $U(\phi)$ 作用到初始混态生成

$$\rho(\omega) = U(\phi)\rho_0(\theta)U^\dagger(\phi), \quad (4)$$

其中 $\rho_0(\theta) = \bigotimes_{i=0}^{N-1} \rho_i(\theta_i)$ 为直积态, $\omega = (\theta, \phi)$. 由于 $U(\phi)$ 是么正的, 它不会改变熵. 又由于初态具备的直积形式, 系统的熵 $S(\omega)$ 可表达为单比特混态 $\rho_i(\theta_i)$ 上的熵之和. 由此, 系统的变分自由能可写为

$$F(\omega, \beta) = \text{Tr}[\rho(\omega)H] - \beta^{-1}S(\omega), \quad (5)$$

其中 $\beta = 1/T$. 在参数空间中最优化自由能, 即可得到最优参数 ω^* , 则吉布斯态为 $\rho(\omega^*)$. 与强子态制备的变分量子算法类似, 自由能的优化通过量子-经典混合计算的方式进行, 如图 2 所示.

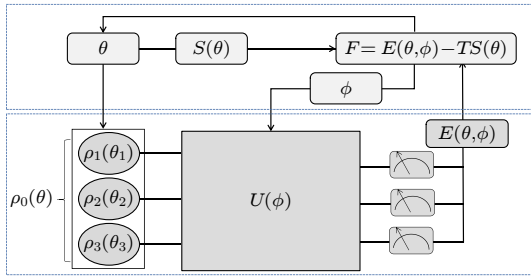


图 2 可同时制备吉布斯态和计算自由能的变分算法量子线路图. 在量子计算机中执行的是初始混态的制备和参数化么正演化 $U(\phi)$, 而参数 (θ, ϕ) 的优化通过经典计算机来执行

Fig. 2. A pictorial representation of the variational quantum algorithm, which can prepare thermal states and compute the corresponding free energy. The preparation of initial mixed state and the evolution $U(\phi)$ are done on a quantum computer, while the optimization of (θ, ϕ) should be done with a classical computer.

2.3 关联函数的测量

在态制备之后, 量子模拟的另一个重要环节是对态进行测量, 得到描述该系统的物理量. 物理量一般通过关联函数来揭示, 它包含静态关联函数及动力学关联函数. 在量子计算机上, 静态关联函数只需对量子比特进行关联测量即可. 动力学关联函数的测量更为复杂, 具体算法可参考文献^[41]. 在核子结构的研究中, 部分子分布函数、碎裂函数等非微扰量的计算依赖于一种特殊的两点动态关联

函数, 即光锥关联函数, 涉及了光锥上两个算符的关联. 此外, 散射振幅也需要通过计算含时的多点关联函数得到. 动力学关联函数涉及了哈密顿量演化, 属于典型的含时演化问题. 相对经典计算机, 量子计算机在求解动力学关联函数上具备天然的优势.

先考虑一般形式的两点关联函数

$$S_{mn}(t) = \langle \psi | e^{iHt} \sigma_m^i e^{-iHt} \sigma_n^j | \psi \rangle, \quad (6)$$

其中 σ_m^i 表示在格点 m 上的泡利矩阵 σ^i , $i = 1, 2, 3$. 如图 3 中量子线路所示, 该量子算法通过辅助量子比特控制算符 σ_m^i 和 σ_n^j 作用到强子态上以及在其中插入时间演化算符 e^{-iHt} 来达到计算两点关联函数的目的. 在算法的输出端只需分别在 σ^1 和 σ^2 表象对辅助量子比特进行测量就可获取动力学关联函数的实部和虚部. 假设多次测量后发现辅助量子比特读出 $|0\rangle$ 态的概率为 $p_{mn}(t)$, 有

$$S_{mn}(t) = p_{mn}(t) - 1/2. \quad (7)$$

上述即为计算两点动力学关联函数的量子算法, 对于多点动力学关联函数, 只需令辅助量子比特分别控制多点关联函数对应的算符并在相邻的两算符间插入对应的时间演化算符即可. 值得注意的是, 哈密顿量演化 e^{-iHt} 需通过 Trotter 分解的方法表示为量子门的组合^[42], 从而适用于在数字量子计算机上运行.

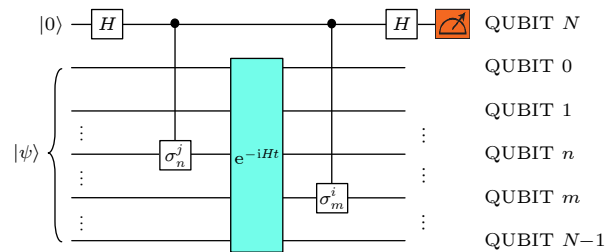


图 3 计算动力学两点关联函数量子线路. 在辅助比特上测量 σ^1 和 σ^2 即可得到关联函数的实部和虚部

Fig. 3. Quantum circuit for calculation of the two point correlation function. The real and imaginary part of the correlation function can be obtained by performing measurements of σ^1 and σ^2 on the auxiliary qubit, respectively.

3 强子散射振幅的量子计算

在核子物理中, 散射截面是联系理论和实验的桥梁, 散射振幅是计算散射截面不可或缺的一部分, 因此具备重要的地位. 强子散射过程是指初态

有强子参与或者末态有强子产生的散射过程. 根据末态探测粒子数目的不同, 可对强子散射过程进行分类. 1) $e + p \rightarrow e' + X$, 在末态只测量一个电子的信息而忽略其他 X 粒子, 该类过程被称为单举过程; $e + p \rightarrow e' + h + X$, 在末态测量电子和一个强子 h 的信息, 该类过程被称为半单举散射过程; $e + \gamma \rightarrow e' + h$, 把末态粒子信息全部测量完的被称为遍举过程. 在 QCD 因子化定理适用范围内, 初态有强子参与的单举过程可被因子化成微扰可计算的硬部分卷积非微扰的部分子分布函数 (parton distribution functions, PDFs^[43,44]); 末态只生成一个强子的遍举过程散射振幅则可被因子化为硬部分卷积的非微扰量, 即光锥分布振幅 (light cone distribution amplitudes, LCDAs^[45,46]). 从物理含义上看, PDFs 反映了强子内部部分子的纵向动量分布, 介子 LCDAs 则描述了一对正反夸克在遍举过程中如何强子化成介子. PDFs 与 LCDAs 均为计算强子散射振幅必要的输入. 格点 QCD 发展了许多方法来尝试计算 PDFs^[47–62] 和 LCDAs^[63–66]. 然而, 由于 PDFs 和 LCDAs 均为含时演化问题, 依赖于光锥关联函数的求解, 对格点 QCD 而言存在经典计算的本质困难. 此外, 在碰撞能量较低时, QCD 散射过程可看作是强子间的弹性散射. 由于 QCD 耦合常数在低能标时较大, 微扰论失效, 散射振幅可通过格点 QCD 间接求解^[67–71], 但缺乏一般性的直接求解方法.

总的来说, 运用格点 QCD 的方法解决上述关于强子散射振幅的非微扰问题存在困难. 本节将介绍如何基于量子计算的方法来求解高能散射紧密关联的三个问题, 包括单举过程对应的 PDFs、遍举过程对应的 LCDAs, 以及低能情形且初末态强子数目较少过程的散射振幅.

3.1 Nambu-Jona-Lasinio 模型

由于近期的量子计算机计算能力有限, 规范场的模拟仍较难在量子计算机上实现. 为了从数值上验证量子算法的有效性, 我们选取 1+1 维 Nambu-Jona-Lasinio (NJL) 模型^[72–74] 作为例子. NJL 模型是一个四费米子自相互作用模型, 可视为 QCD 的低能有效理论, 且具有手征对称性自发破缺与渐近自由等和 QCD 一样的特点. 其拉格朗日量为

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi + g(\bar{\Psi}\Psi)^2, \quad (8)$$

其中 Ψ 是费米子场, m 和 g 分别为裸夸克质量以及 NJL 模型耦合常数.

在量子计算机上模拟 NJL 模型的第一步是对其进行离散化. 采用交错费米子, 离散化之后的费米子场可由单分量场 χ_n 表示. 通过 Jordan-Wigner^[75] 变换, 可将费米子场映射成量子比特形式:

$$\chi_n = \prod_{l=0}^{n-1} \sigma_l^3 \sigma_n^+ \equiv \Xi_n^3 \sigma_n^+. \quad (9)$$

该变换可保持费米子场的反对易关系. 在该离散化机制下, 两个量子比特对应着一个空间格点, 近期约 100 量子比特的量子计算机可模拟约 50 个空间格点. NJL 模型的量子模拟对量子比特数资源需求较小, 有利于在近期量子计算机上开展研究. 在周期边界条件下, NJL 模型的哈密顿量可写成 $H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4$, 其中

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{n=\text{even}}^{N-1} \frac{1}{4} (\sigma_n^1 \sigma_{n+1}^2 - \sigma_n^2 \sigma_{n+1}^1), \\ H_2 &= \sum_{n=\text{even}}^{N-1} \frac{g}{2} \sigma_n^3 \sigma_{n+1}^3, \\ H_3 &= H_1(n = \text{even} \rightarrow n = \text{odd}) \\ &\quad + \frac{1}{4} \Xi_{N-1}^3 (\sigma_{N-1}^2 \sigma_0^1 - \sigma_{N-1}^1 \sigma_0^2), \\ H_4 &= \sum_{n=0}^{N-1} \frac{m}{2} (-1)^n (I - \sigma_n^3) - \frac{g}{2} (I - \sigma_n^3). \end{aligned} \quad (10)$$

3.2 部分子分布函数的量子计算

PDFs 是计算强子初态单举过程散射截面的重要输入量. PDFs 一般被记为 $f_{i/h}(x, \mu)$, 其物理意义是在能标 μ 下, 非极化部分子 i 占据非极化强子 h 的纵向动量份额为 x 的概率密度. 夸克 PDFs 算符定义为

$$\begin{aligned} f_{q/h}(x) &= \int \frac{dz}{4\pi} e^{-ix(\hat{n}\cdot P)z} \langle h(P) | \bar{\Psi}(z\hat{n}) \\ &\quad \times W(z\hat{n}, 0) \gamma^+ \Psi(0) | h(P) \rangle, \end{aligned} \quad (11)$$

其中 $\hat{n} = (1, 0, 0, -1)$ 为光锥上的矢量, $|h(P)\rangle$ 表示四动量为 P 的强子态, γ^μ 为狄拉克 γ 矩阵, $W(z\hat{n}, 0)$ 是威尔逊链, 其定义为

$$W(z\hat{n}, 0) = \mathcal{P} \exp \left[ig \sum_a \int_0^z dz' \hat{n} \cdot \hat{A}^a(z'\hat{n}) \tau^a \right], \quad (12)$$

$\mathcal{P} \exp$ 表示路径顺序指数, τ^a 是盖尔曼矩阵, $\hat{A}^a(z\hat{n})$

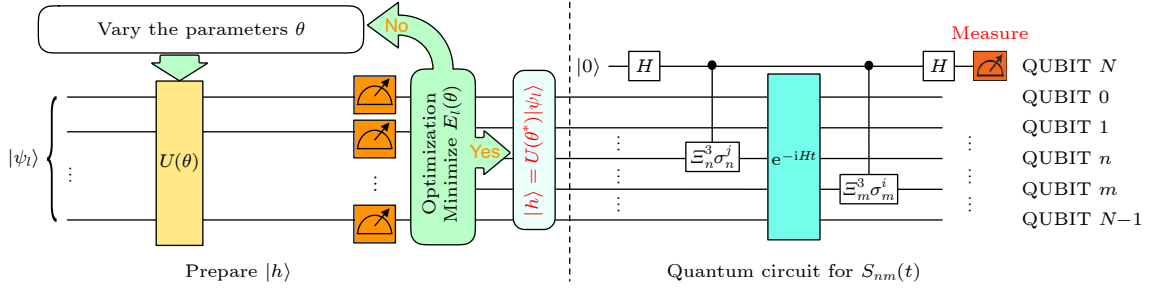


图4 部分子分布计算的量子线路. 其中虚线左边部分为制备强子态的量子线路, 右边部分为测量动力学两点关联函数线路
 Fig. 4. Quantum circuit for calculation of PDFs. The left side of the dashed line of the circuit is for hadronic state preparation, while the right side is for the correlation function.

是SU(3)规范场. 从算符定义可以看出, PDFs的量子计算包含了3个关键步骤: 1) 制备强子态 $|h(P)\rangle$; 2) 构造威尔逊链 $W(z\hat{n}, 0)$; 3) 在量子态 $|h(P)\rangle$ 上测量动力学两点关联函数.

由于NJL模型没有规范场, 我们用NJL模型来具体讨论如何通过步骤1)和步骤3)来实现PDFs的计算, 而对步骤2)的部分仅做一般性的讨论. 在强子参考系下, 光锥关联函数 $D(z)$ 可写为

$$D(z) = \sum_{k,l=0}^1 \langle h | e^{iHz} \chi_{-2z+k}^\dagger e^{-iHz} \chi_l | h \rangle, \quad (13)$$

其中 $|h\rangle$ 表示的是零动量强子态 $|h(\mathbf{p}=0)\rangle$. PDFs可通过 $D(z)$ 的傅里叶变换得到

$$f_{q/h}(x) = \sum_z \frac{1}{4\pi} e^{-ixm_h z} D(z), \quad (14)$$

其中 m_h 为强子的静质量, x 表示部分子的动量份额.

$D(z)$ 的量子计算如图4所示, 包含强子态制备和光锥关联函数的测量, 分别对应图中虚线的左右部分的量子线路. 具体来说, NJL模型的强子态 $|h\rangle$ 是能量最低的一对正反夸克束缚态, 它是与真空具有一样量子数的第一激发态. 由此, 制备 $|h\rangle$ 态需要两个参考态:

$$\begin{aligned} |\psi_{\Omega,1}\rangle_{\text{ref}} &= |010101 \cdots 01\rangle, \\ |\psi_{\Omega,2}\rangle_{\text{ref}} &= \sqrt{2/N} (|1001, \cdots, 01\rangle + |0110, \cdots, 01\rangle \\ &\quad + \cdots + |0101, \cdots, 10\rangle). \end{aligned} \quad (15)$$

在给定参考态后, 试探波函数由(2)式中 $U(\theta)$ 作用到参考态上生成, 为此, 只要将 $U(\theta)$ 中的 H_i 具体化为NJL模型哈密顿量(10)且选取 $p = N/2$. 在最优化目标函数(3)后即可制备出真空态 $|\Omega\rangle = U(\theta^*)|\psi_{\Omega,1}\rangle_{\text{ref}}$ 和强子态 $|h\rangle = U(\theta^*)|\psi_{\Omega,2}\rangle_{\text{ref}}$. 成功制备强子态之后, 只需把强子态作为图4虚线右侧量子线路的输入即可计算出 $D(z)$.

图4所示量子线路的复杂度为 $O(N^3)$ [33,42]. 量子算法复杂度随着量子比特数以多项式标度增长说明了在量子计算机上计算PDFs具有优势. 更进一步的分析表明, 量子优势在更高维度, 如3+1维且含规范场的情况下仍能保持[9].

下面展示1+1维NJL模型夸克PDFs的结果. 我们使用Quspin[76]以及ProjectQ[77]在经典计算机模拟图4中的量子线路. 为了控制有限体积效应和有限格距效应的影响, 要求无量纲的强子质量满足条件 $2\pi/N < m_h a < \pi$. 同时, 考虑到量子计算经典模拟的指数复杂度, 选取格点数9(对应量子比特数 $N = 18$)和无量纲质量 $ma = 0.8$. 图5分别给出了 $D(z)$ 的实部和虚部在 $g = 0.6$ 和 $g = 1.0$ 情况下的结果. 从图5可以看出, $D(z)$ 的实部与虚部相比基本为零, 这意味着 $f_q(x)$ 满足奇函数条件 $f_q(x) = -f_q(-x)$. PDFs在减掉真空图后一定会有 $f_{\bar{q}}(x) = -f_q(-x)$ [78], 结合 $f_q(x)$ 是奇函数, 可得到 $f_q(x) = f_{\bar{q}}(x)$, 这与NJL模型中强子态 $|h\rangle$ 由一对正反夸克组成相自洽.

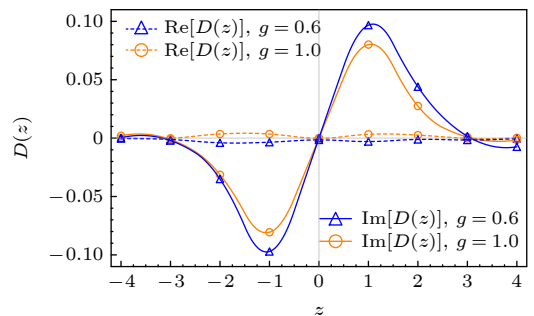


图5 坐标空间夸克场两点关联函数的实部(实线)和虚部(虚线), 其中离散点是格点计算给出的数值, 线由格点数据结果插值得到

Fig. 5. Real (dashed lines) and imaginary parts (solid lines) of the quark correlation function in position space. The discrete points are the lattice data and the lines are obtained by interpolations.

部分子分布函数的结果在图 6 中给出. 由于格点有限体积效应的存在, $f_q(x)$ 在非物理区域 $x > 1$ 有小的非零值, 这一现象同样存在于格点 QCD 的计算当中 [79]. 可预期在增加格点数后, $f_q(x)$ 在区间 $x > 1$ 处的非零值会进一步被压低. 我们在结果中观察到了 $f_q(x)$ 在 $x = 0.5$ 处具有一个峰值, 这一特性行为与二维格点 QCD 的计算结果 [80] 以及 JAM 合作组从实验数据提取出的介子 PDF [81] 相符.

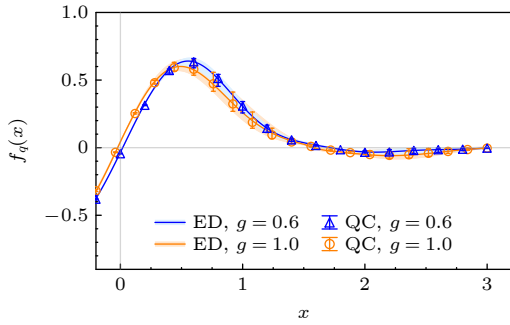


图 6 量子计算经典模拟获得的 PDF(空心点)和格点 NJL 模型精确对角化获得的 PDF(实线), 其中不同插值方法带来的误差由误差棒标记出

Fig. 6. The quark PDF from quantum computing (open markers) and ED (solid lines). The error bars/bands arise from the estimated uncertainties due to different interpolation methods.

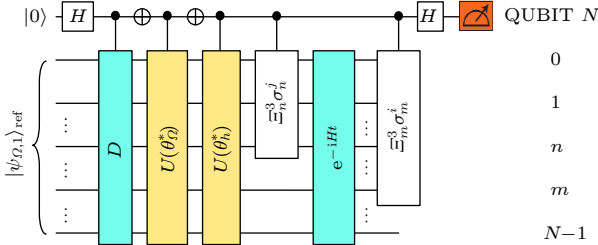


图 7 模拟左矢为真空, 右矢为强子的光锥关联函数 $\langle \Omega | \mathcal{O} | h \rangle$ 的量子线路图

Fig. 7. Quantum circuit for the light-cone correlator $\langle \Omega | \mathcal{O} | h \rangle$.

3.3 基于量子计算方法对 LCDAs 的研究

介子 LCDAs 是计算遍举过程散射振幅的重要非微扰输入量, 其物理意义可看作是一对分别携带强子纵向动量份额为 x 和 $1-x$ 的正反夸克对 $q\bar{q}$ 结合成大动量强子的概率幅. 介子 LCDAs 的算符定义为

$$\phi_h(x) = \frac{1}{f_h} \int dz e^{-i(x-1)n \cdot Pz} \langle \Omega | \bar{\psi}(z\hat{n}) \times W(z\hat{n}, 0) \gamma^+ \psi(0) | h(P) \rangle. \quad (16)$$

在强子参考系下, 1+1 维单味道 NJL 模型的介子 LCDA 可写成

$$\phi_h(x) = \sum_z \frac{1}{4\pi} e^{-i(x-1)m_h z} \tilde{\phi}_h(z), \quad (17)$$

其中 $\tilde{\phi}_h(z)$ 是坐标空间下的 LCDA:

$$\tilde{\phi}_h(z) = \sum_{k,l=0}^1 \langle \Omega | e^{iHz} \chi_{-2z+k}^\dagger e^{-iHz} \chi_l | h \rangle. \quad (18)$$

$\tilde{\phi}_h(z)$ 包含时间演化, 可通过量子计算机来计算. 与 PDFs 不同的是, $\tilde{\phi}_h(z)$ 中左矢是真空态, 右矢为强子态, 二者均可通过变分量子本征值求解器来制备. 由于左矢和右矢不同, 测量动力学关联函数的量子线路需稍作修改, 如图 7 所示. 其中 D 是从真空参考态制备强子 h 参考态的量子门. $U(\theta_\Omega^*)$ 和 $U(\theta_h^*)$ 作用到真空和强子参考态上分别能制备出真空态和强子态.

以下展示数值模拟的结果. 如图 8 所示, 实线 (ED) 代表的是对格点 NJL 模型进行数值精确对角化的结果, 空心点代表的是量子计算经典模拟的结果, 二者的符合体现了量子算法的准确性. 此外, LCDA 在 $x = 1/2$ 处的峰随着 $g \rightarrow 0$ 变得越来越尖锐且趋近于 LCDA 的渐近形式 [45,46,82]. 此外, 由于有限体积效应, LCDA 在 $x > 1$ 以及 $x < 0$ 非物理区间有振荡衰减的非零值. 这一现象也存在于格点 QCD 对 LCDA 的计算当中 [83]. 图 9 还给出了 LCDA 对强子质量 m_h 的依赖关系. 图中分别选择 $m_h = 1.3a^{-1}, 1.5a^{-1}, 1.7a^{-1}$ 和固定 $g = 0.1, N = 14$, 可见随着强子质量的增大, LCDA 在 $x = 1/2$ 处的峰变得越来越尖锐, 这一特性行为与格点 QCD 的结果相符 [83].

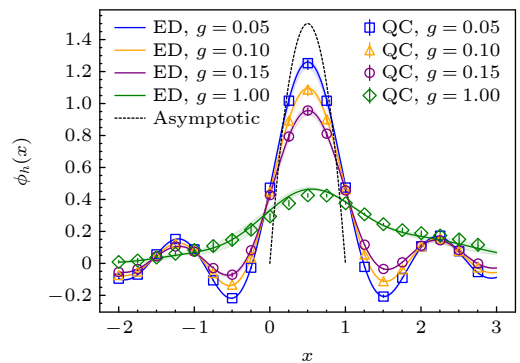


图 8 1+1 维 NJL 模型 LCDA 对耦合常数 g 的依赖, 其中固定 $N = 14, m_h = 1.5a^{-1}$

Fig. 8. LCDA for the 1+1 dimensional NJL model with $N = 14, m_h = 1.5a^{-1}$.

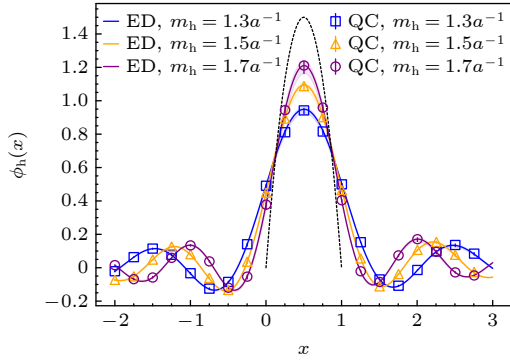


图9 1+1 维 NJL 模型 LCDA 对强子质量 m_h 的依赖, 其中固定 $N = 14$, $g = 0.1$

Fig. 9. Dependence of the LCDA on the hadron mass m_h with fixed bare coupling $g = 0.1$ in the 1+1 dimensional NJL model.

3.4 LSZ 约化公式及散射振幅的量子计算

Jordan, Lee 和 Preskill (JLP)^[4,84,85] 的系列论文证明了量子计算机可通过多项式复杂度计算标量场高能过程散射截面. 然而, JLP 方案需要制备初态波包, 对计算资源要求较高. 另外, JLP 方案里未涉及束缚态粒子, 而 QCD 的散射过程的初态往往会有强子态出现, 因此难以直接使用. 为此, 基于 Lehmann-Symanzik-Zimmermann (LSZ) 约化公式^[86], 我们提出量子计算束缚态粒子的散射振幅的一种新途径. LSZ 公式把散射过程的散射振幅和真空多点关联函数联系在一起. 对于质量为 m , 可被标量场 ϕ 湮灭的粒子 h 参与的散射过程 $h(\mathbf{k}_1) + \dots + h(\mathbf{k}_{n_{\text{in}}}) \rightarrow h(\mathbf{p}_1) + \dots + h(\mathbf{p}_{n_{\text{out}}})$, 其散射截面可表达成

$$i\mathcal{M} = R^{N/2} \lim_{p_i^2, k_j^2 \rightarrow m^2} G(\{p_i\}, \{k_j\}) \times \left(\prod_{r=1}^{N_{\text{out}}} K^{-1}(p_r) \right) \left(\prod_{s=1}^{N_{\text{in}}} K^{-1}(k_s) \right), \quad (19)$$

其中 $N = N_{\text{in}} + N_{\text{out}}$. $G(\{p_i\}, \{k_j\})$ 是动量空间的连通 n 点关联函数:

$$G(\{p_i\}, \{k_j\}) = \left(\prod_{i=1}^{n_{\text{out}}-1} \int d^4 x_i e^{ip_i \cdot x_i} \right) \left(\prod_{j=1}^{n_{\text{in}}} \int d^4 y_j e^{-ik_j \cdot y_j} \right) \times \langle \Omega | T \{ \phi(0) \phi^\dagger(x_1) \dots \phi(x_{n_{\text{out}}-1}) \phi^\dagger(y_1) \dots \phi^\dagger(y_{n_{\text{in}}}) \} | \Omega \rangle_{\text{con}}, \quad (20)$$

其中 T 表示的是时序, 下标“con”表示关联函数的

连通部分, $|\Omega\rangle$ 是真真空态. $K(p)$ 是动量空间的两点关联函数,

$$K(p) = \int d^4 x e^{ip \cdot x} \langle \Omega | T \{ \phi(x) \phi^\dagger(0) \} | \Omega \rangle, \quad (21)$$

其中 R 是场强归一化常数, 它的定义为

$$R = |\langle \Omega | \phi(0) | h \rangle|^2, \quad (22)$$

其中 $|h\rangle$ 表示零动量的单个 h 粒子态, 它可以是强子态. 依据 (19) 式, 散射振幅的计算被分为 3 个部分: 1) 计算连通 N 点关联函数 $G(\{p_i\}, \{k_j\})$; 2) 计算传播子 $K(p)$; 3) 计算场归一化常数 R . 1)、2) 两个步骤都是在计算多点关联函数, 他们可统一通过 2.3 节提到的量子算法来计算. 步骤 3) 中 R 的计算类似于 LCDAs, 只不过算符替换成 $\phi(0)$, 因此 R 可用 LCDAs 的量子算法来计算.

下面来讨论这一量子算法的复杂度, 假设待模拟的格点 QFT 系统共有 M 个空间格点以及 M 个时间格点, 表达一个空间格点上的场自由度需要 n_q 个量子比特, 那么在该系统计算 N 点关联函数的复杂度为 $O(N^2 n_q^3 M^{2N+3})$, 它指数依赖于 N . 因此, 该算法适用于初末态粒子数量较少的散射过程, 如 $2 \rightarrow 2$ 散射过程.

作为一个例子, 我们依然以 1+1 维 NJL 模型这一简单模型为例来具体给出量子算法的运行结果, 并通过这些结果来演示量子算法的合理性. 在下面的模拟中选取量子比特数 $N = 14$, 无量纲裸夸克质量为 $ma = 0.84$, 耦合常数为 $g = 0.4$.

在动量趋于 h 的质壳附近时, 1+1 维单味道 NJL 模型两点函数 K_ψ 有如下发散行为:

$$K_\psi(p) \xrightarrow{p^2 \rightarrow m_h^2} \frac{i}{p^2 - m_h^2 + i\epsilon}. \quad (23)$$

依据 (23) 式可知, 当固定 $p^1 = 0$ 时, $K_\psi(p)$ 作为 p^0 的函数在 $p^0 = \pm m_h$ 处会有奇点结构. 为验证这一奇点结构, 可通过量子计算的经典模拟来实现 3.2 节所提量子算法, 先计算坐标空间两点关联函数, 再通过傅里叶变换得到 $K_\psi(p)$. 图 10 展示了以 p^0 为自变量的两点关联函数 $\text{Tr} K_\psi(p)$ 的实部. 图中在 $p^0 a = \pm 1.18$ 附近处的峰对应着夸克质量峰. 峰位置的准确性已经由精确对角化格点 NJL 模型所给出的强子质量谱所验证. 在连续极限下, 这个峰的高度将变为无限大, 对应着奇点结构; 对于有限格距情况下, 这个峰只能有有限的高度.

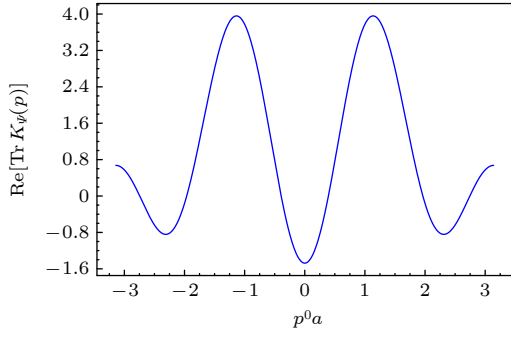


图 10 1+1 维 NJL 模型 $\text{Tr}K_\Psi(p)$ 的实部. 图中以 p^0 为变量, 固定 $p^1 = 0$

Fig. 10. Real part of $\text{Tr}K_\Psi(p)$ for the 1+1-dimensional NJL model as a function of $p^0 a$ with $p^1 = 0$.

若想要得到一对正反夸克到一对正反夸克过程 $q(\mathbf{k}_1)\bar{q}(\mathbf{k}_2) \rightarrow q(\mathbf{p}_1)\bar{q}(\mathbf{p}_2)$ 的散射振幅, 则需计算 (20) 式中的四点关联函数 $G_\Psi^{\alpha\beta\gamma\delta}(p_1, k_1, k_2)$, 过程中只需把 ϕ 场换成 $\bar{\psi}^\alpha(0)\psi^\beta(x_1)\psi^\gamma(y_1)\bar{\psi}^\delta(y_2)$. 与 $\text{Tr}K_\Psi(p)$ 类似, 连通四点关联函数缩并指标 α, β 后的 $G_\Psi^{\alpha\beta\alpha\beta}(p_1, k_1, k_2)$ 当 k_1 趋向于质壳时也有与 $1/(k_1^2 - m_h^2 + i\epsilon)$ 一样的奇点结构. 为了展示四点函数的这一性质, 我们采取了与计算 $K_\Psi(p)$ 类似的方法, 选取外腿动量 $k_1 = (k_1^0, 0)$, $k_2 = (0, \pi/a)$, $p_1 = (0, 0)$, 把 $G_\Psi^{\alpha\beta\alpha\beta}(p_1, k_1, k_2)$ 看作是 k_1^0 的函数. 图 11 给出了四点函数 $G_\Psi^{\alpha\beta\alpha\beta}(p_1, k_1, k_2)$ 的实部作为自变量 k_1^0 的函数. 类似于图 10 中的两点关联函数, 图 11 在 $p_1^0 = \pm 1.18$ 附近处的峰是夸克态贡献的奇点. 这一结果与 LSZ 公式所预期的一致.

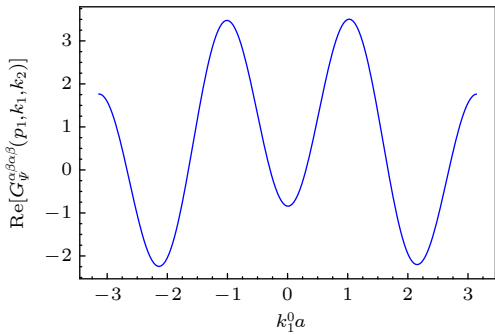


图 11 1+1 维单味道 NJL 模型四点函数 $G_\Psi^{\alpha\beta\alpha\beta}(p_1, k_1, k_2)$ 的实部. 其中外腿动量选定为 $k_1 = (k_1^0, 0)$, $k_2 = (0, \pi/a)$, $p_1 = (0, 0)$

Fig. 11. Real part of $G_\Psi^{\alpha\beta\alpha\beta}(p_1, k_1, k_2)$ in the 1+1-dimensional 1-flavor NJL model as a function of $k_1^0 a$, with $k_1 = (k_1^0, 0)$, $k_2 = (0, \pi/a)$, $p_1 = (0, 0)$.

NJL 模型的这一简单例子表明量子算法成功实现了传播子和 n 点连通关联函数所期望的奇点

结构, 这对 LSZ 约化公式在量子计算机上的实现至关重要.

4 有限温格点施温格模型的量子模拟

核物质相图的确定是高能核物理研究中的一大挑战, 它依赖于对有限温度有限密度 QCD 系统平衡态的精确模拟, 而格点 QCD 方法在有限密度情形存在符号问题的困难. 量子计算机在模拟有限温有限密度平衡态系统上具有天然的优势, 目前已经用于物态结构的探索^[22–26]. 由于近期量子计算机资源的限制, 目前有限温有限密度 QCD 的量子模拟还有待发展. 本节将通过另一个较简单的模型来阐述有限温核物质的模拟, 特别是在高温情形时的夸克解禁闭行为. 该模型为施温格模型, 它描述了 1+1 维量子电动力学, 包含了费米子与 $U(1)$ 规范场的耦合. 与 QCD 类似, 施温格模型存在夸克禁闭^[87,88]、手征对称性自发破缺^[89,90] 等特征. 因此, 施温格模型被广泛用于模拟高能核物理问题.

在选定规范 $A^0 = 0$ 情况下, 施温格模型的哈密顿量可表达为^[91]

$$H = \int dx \left[\Psi^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^1 (-i\partial_1 + g\hat{A}_1(x)) \Psi(x) + m\Psi^\dagger(x) \gamma^0 \Psi(x) + \frac{1}{2} \hat{E}^2(x) \right], \quad (24)$$

其中 $\Psi(x)$ 是费米子场, \hat{A}_1 是电磁矢势的纵向分量, m 是裸费米子质量.

由于局域规范不变性, 电场和电荷密度算符之间存在约束 $\partial_1 E(x) = g\Psi(x)^\dagger \Psi(x)$, 即满足高斯定理. 在 1+1 维时, 电场可以通过费米子来表示. 这是施温格模型的一个重要特点, 即可表示为长程相互作用的费米子模型, 规范场不出现, 从而非常方便用量子比特来模拟. 采用交错费米子^[92], 并通过 Jordan-Wigner 变换^[75], 施温格模型可写为

$$H_\epsilon = \varpi \sum_{j=1}^{N-1} [\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \text{h.c.}] + \frac{m}{2} \sum_{j=1}^N (-1)^j \sigma_j^z + \frac{g^2 a}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left\{ \epsilon + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^j [\sigma_l^z + (-1)^l] \right\}^2, \quad (25)$$

其中 ϵ 是背景电场, $\varpi = 1/2a$. 更进一步, 若要研究有限密度情形, 则需在 (25) 式加一个额外的项 $-\sum_n \mu \phi_n^\dagger \phi_n$ ^[93], 其中 μ 为化学势.

在零温时, 施温格模型中正反夸克间具有与长程 QCD 相似的线性势^[94], 此即夸克禁闭. 可看作

夸克之间由一根弦连接, 弦张力可衡量禁闭强度^[95], 它会随着热涨落的增强而减小. 弦张力定义为系统自由能在零和非零背景电场下的差别^[96]:

$$\sigma_\varepsilon(\beta) = \frac{1}{Nga} (F_\varepsilon(\beta) - F_0(\beta) - f_\varepsilon), \quad (26)$$

其中 $\beta = 1/T$ 是温度的倒数, $F_\varepsilon(\beta)$ 是对应哈密顿量 H_ε 的自由能. 从弦张力的定义可知, 计算弦张力只需计算自由能的差. 计算自由能的量子算法已在 2.2 节中给出. 我们用开源程序包 QuTip^[97] 来进行量子计算的经典模拟. 为了验证量子算法的正确性, 在结果中把量子模拟的结果与精确对角化的结果进行比对. 首先模拟了施温格模型弦张力对温度的依赖关系, 如图 12(a) 所示, 弦张力在小 β 区间会迅速衰减, 这表明弦张力会因热涨落效应变强而减小. 特别地, 弦张力在 $\beta = 0$, 即温度无限高时趋于零, 表明施温格模型的禁闭-退禁闭转变发生在

无穷温度. 图 12(b) 表明弦张力的大小随着温度的增加指数下降, 且 ε 越小下降得越快. 弦张力的指数衰减行为与理论预言相一致^[96].

进一步对有限温有限密度情形下的弦张力进行了计算. 图 13(a) 给出的是弦张力对不同化学势的依赖关系, 可发现在相同温度下, 化学势越大对应的弦张力越小. 图 13(b) 给出了弦张力对温度和化学势两个变量的依赖关系. 图中可见随着温度和化学势的升高弦张力都会减小, 这与 QCD 相图的行为类似^[98–101]. 然而, 与 QCD 不同的是, 施温格模型弦张力只有在 $T \rightarrow \infty$ 时才会下降到零, 这表明在有限温情形下施温格模型相图不存在禁闭-退禁闭相变. 尽管如此, 施温格模型相图仍能从定性上看出禁闭-退禁闭相变的一些性质, 并且成功展示出量子计算模拟有限密度区域相结构的可行性.

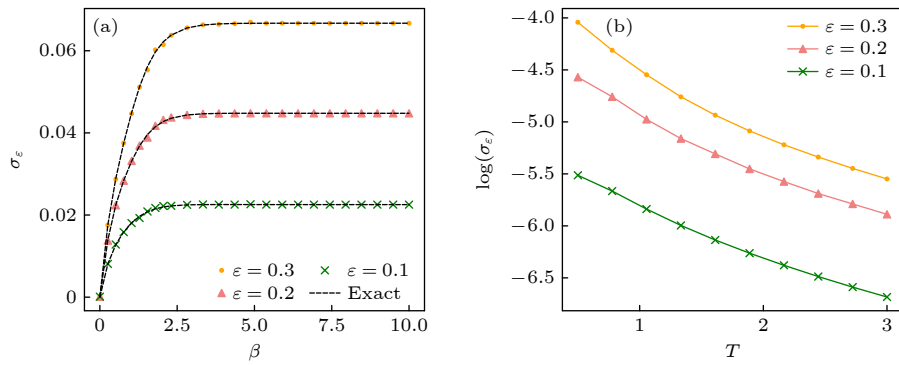


图 12 不同背景电场 ε 下的弦张力. 其中给定 $m = 1, g = 1, \varpi = 1, N = 6$ (a) 弦张力对 β 的依赖; (b) 弦张力的对数对温度 T 的依赖

Fig. 12. String tensions under different ε in the case $m = 1, g = 1, \varpi = 1, N = 6$: (a) The string tension as a function of the inverse temperature β ; (b) logarithm of the string tension as a function of the temperature T .

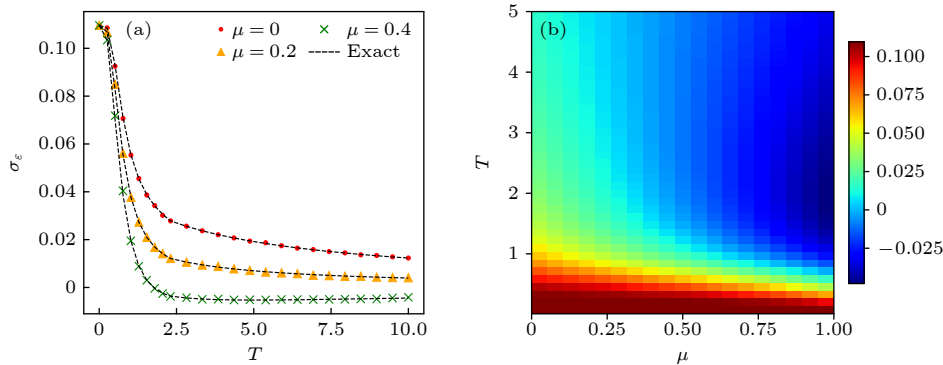


图 13 在给定参数 $\varepsilon = 0.5, m = 1, g = 1, \varpi = 1, N = 6$ 下的弦张力 (a) 不同化学势 μ 下弦张力对温度 T 的依赖; (b) 弦张力对温度 T 和化学势 μ 的依赖

Fig. 13. The string tension in the case $\varepsilon = 0.5, m = 1, g = 1, \varpi = 1, N = 6$: (a) At different μ , the string tension as a function of the temperature T ; (b) the string tension as a function of the temperature T and the chemical potential μ .

5 总 结

本文对我们近期基于量子计算机来模拟高能核物理的系列工作进行了综述. 针对强子散射问题, 系统提出了以多项式复杂度计算 PDFs 和 LCDAs 的量子算法, 其中包括量子数分辨的变分量子本征求解器以及光锥关联函数的测量两大部分, 并通过 NJL 模型的数值模拟, 初步展示了量子计算在定性上已经能给出合理的结果. 此外, 基于 LSZ 约化公式, 提出了强子散射振幅的量子计算新方案, 避免了初态波包制备的困难, 并适用于束缚态粒子的散射问题. 还对有限温有限密度核物质的量子模拟进行了探索. 通过施温格模型, 展示了量子计算机可以模拟夸克在高温情形出现的禁闭-解禁闭行为. 本文的研究初步展示了量子计算在解决高能核物理中含时问题和符号问题的可行性及优势, 有助于进一步探索物质深层次结构及核物质相图. 本文提出的强子态制备及结构探测是普适的量子算法框架, 有望在核物理领域中广泛运用, 如模拟部分子碎裂函数 (parton fragmentation functions, FFs), 模拟核效应的产生机制等. 同时, 针对 1+1 维施温格模型发展的有限温量子热态的量子算法, 有望拓展到 2+1 和 3+1 维下非阿贝尔规范场, 从而模拟有限温有限密度情形的 QCD 相图, 有望揭示 QCD 禁闭相到退禁闭相的转变. 总而言之, 量子计算为未来研究高能核物理中的含时非微扰问题以及有限温有限密相结构问题提供了一个潜在的根本性解决方案.

参考文献

- [1] Alexandru A, Basar G, Bedaque P F, Vartak S, Warrington N C 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 081602
- [2] Troyer M, Wiese U J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 170201
- [3] Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys.* **21** 467
- [4] Jordan S P, Lee K S M, Preskill J 2012 *Science* **336** 1130
- [5] Lamm H, Lawrence S, Yamauchi Y 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013272
- [6] Mueller N, Tarasov A, Venugopalan R 2020 *Phys. Rev. D* **102** 016007
- [7] Echevarria M G, Egusquiza I L, Rico E, Schnell G 2021 *Phys. Rev. D* **104** 014512
- [8] Qian W, Basili R, Pal S, Luecke G, Vary J P 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 043193
- [9] Li T, Guo X, Lai W K, Liu X, Wang E, Xing H, Zhang D B, Zhu S L 2022 *Phys. Rev. D* **10** 5
- [10] Li T, Guo X, Lai W K, Liu X, Wang E, Xing H, Zhang D B, Zhu S L 2023 *Science China Physics, Mechanics & Astronomy* **66** 281011
- [11] Bauer C W, de Jong W A, Nachman B, Provasoli D 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 062001
- [12] Bepari K, Malik S, Spannowsky M, Williams S 2022 *Phys. Rev. D* **106** 056002
- [13] Hu Z, Xia R, Kais S 2020 *Sci. Rep.* **10** 3301
- [14] De Jong W A, Metcalf M, Mulligan J, Płoskoń M, Ringer F, Yao X 2021 *Phys. Rev. D* **104** 051501
- [15] Yao X 2022 arXiv: 2205.07902 [High Energy Physics-Phenomenology]
- [16] Zhou Z Y, Su G X, Halimeh J C, Ott R, Sun H, Hauke P, Yang B, Yuan Z S, Berges J, Pan J W 2022 *Science* **377** abl6277
- [17] de Jong W A, Lee K, Mulligan J, Płoskoń M, Ringer F, Yao X 2022 *Phys. Rev. D* **106** 054508
- [18] Briceño R A, Guerrero J V, Hansen M T, Sturzu A M 2021 *Phys. Rev. D* **103** 014506
- [19] Li T, Lai W K, Wang E, Xing H 2023 arXiv: 2301.04179 [High Energy Physics - Phenomenology]
- [20] Martinez E A, Muschik C A, Schindler M, et al. 2016 *Nature* **534** 516
- [21] Atas Y Y, Haase J F, Zhang J, Wei V, Pfaendler S M L, Lewis R, Muschik C A 2022 arXiv: 2207.03473 [Quantum Physics]
- [22] Czajka A M, Kang Z B, Ma H, Zhao F 2022 *JHEP* **08** 209
- [23] Davoudi Z, Mueller N, Powers C 2022 arXiv: 2208.13112 [High Energy Physics - Lattice]
- [24] Tomiya A 2023 *PoS LATTICE2022* 039
- [25] Czajka A M, Kang Z B, Tee Y, Zhao F 2022 arXiv: 2210.03062 [High Energy Physics - Phenomenology]
- [26] Xie X D, Guo X, Xing H, Xue Z Y, Zhang D B, Zhu S L 2022 *Phys. Rev. D* **106** 054509
- [27] McClean J R, Kimchi-Schwartz M E, Carter J, de Jong W A 2017 *Phys. Rev. A* **95** 042308
- [28] Nakanishi K M, Mitarai K, Fujii K 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 033062
- [29] Higgott O, Wang D, Brierley S 2019 *Quantum* **3** 156
- [30] Zhang D B, Yuan Z H, Yin T 2020 arXiv: 2006.15781 [Quantum Physics]
- [31] Bärtschi A, Eidenbenz S 2019 In Gąsieniec L A, Jansson J, Levcopoulos C, editors, *Fundamentals of Computation Theory* (Cham: Springer International Publishing) pp126–139
- [32] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S 2014 arXiv: 1411.4028 [Quantum Physics]
- [33] Wiersema R, Zhou C, de Sereville Y, Carrasquilla J F, Kim Y B, Yuen H 2020 *PRX Quantum* **1** 020319
- [34] Zhang D B, Zhang G Q, Xue Z Y, Zhu S L, Wang Z 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 020502
- [35] Francis A, Zhu D, Huerta Alderete C, Johri S, Xiao X, Freericks J K, Monroe C, Linke N M, Kemper A F 2021 *Sci. Adv.* **7** eabf2447
- [36] Verdon G, Marks J, Nanda S, Leichenauer S, Hidary J 2019 arXiv: 1910.02071 [Quantum Physics]
- [37] Wu J, Hsieh T H 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 220502
- [38] Zhu D, Johri S, Linke N M, Landsman K, Alderete C H, Nguyen N H, Matsuura A, Hsieh T, Monroe C 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **117** 25402
- [39] Martyn J, Swingle B 2019 *Phys. Rev. A* **100** 032107
- [40] Kliesch M, Gogolin C, Kastoryano M J, Riera A, Eisert J 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031019
- [41] Pedernales J S, Di Candia R, Egusquiza I L, Casanova J, Solano E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 020505

- [42] Nielsen M A, Chuang I L 2010 *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (Cambridge: Cambridge University Press) pp206–208
- [43] Lin H W, Nocera E R, Olness F, et al. 2018 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **100** 107
- [44] Gao J, Harland-Lang L, Rojo J 2018 *Phys. Rep.* **742** 1
- [45] Lepage G P, Brodsky S J 1980 *Phys. Rev. D* **22** 2157
- [46] Efremov A V, Radyushkin A V 1980 *Phys. Lett. B* **94** 245
- [47] Ji X 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 262002
- [48] Ji X 2014 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **57** 1407
- [49] Ma Y Q, Qiu J W 2018 *Phys. Rev. D* **98** 074021
- [50] Ma Y Q, Qiu J W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 022003
- [51] Radyushkin A V 2017 *Phys. Rev. D* **96** 034025
- [52] Orginos K, Radyushkin A, Karpie J, Zafeiropoulos S 2017 *Phys. Rev. D* **96** 094503
- [53] Liang J, Draper T, Liu K F, Rothkopf A, Yang Y B 2020 *Phys. Rev. D* **101** 114503
- [54] Chambers A J, Horsley R, Nakamura Y, Perlt H, Rakow P E L, Schierholz G, Schiller A, Somfleth K, Young R D, Zanotti J M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 242001
- [55] Sufian R S, Karpie J, Egerer C, Orginos K, Qiu J W, Richards D G 2019 *Phys. Rev. D* **99** 074507
- [56] Izubuchi T, Jin L, Kallidonis C, Karthik N, Mukherjee S, Petreczky P, Shugert C, Syritsyn S 2019 *Phys. Rev. D* **100** 034516
- [57] Lin H W, Chen J W, Fan Z, Zhang J H, Zhang R 2021 *Phys. Rev. D* **103** 014516
- [58] Musch B U, Hagler P, Engelhardt M, Negele J W, Schafer A 2012 *Phys. Rev. D* **85** 094510
- [59] Detmold W, Melnitchouk W, Negele J W, Renner D B, Thomas A W 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 172001
- [60] Hagler Ph, Schroers W, Bratt J, et al. 2008 *Phys. Rev. D* **77** 094502
- [61] Alexandrou C, Constantinou M, Dinter S, Drach V, Hadjiyiannakou K, Jansen K, Koutsou G, Vaquero A 2015 *JHEP* **06** 068
- [62] Alexandrou C, Bacchio S, Constantinou M, Finkenrath J, Hadjiyiannakou K, Jansen K, Koutsou G, Panagopoulos H, Spanouides G 2020 *Phys. Rev. D* **101** 094513
- [63] Zhang J H, Chen J W, Ji X, Jin L, Lin H W 2017 *Phys. Rev. D* **95** 094514
- [64] Zhang J H, Jin L, Lin H W, Schäfer A, Sun P, Yang Y B, Zhang R, Zhao Y, Chen J W 2019 *Nucl. Phys. B* **939** 429
- [65] Hua J, Chu M H, Sun P, Wang W, Xu J, Yang Y B, Zhang J H, Zhang Q A 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 062002
- [66] Hua J, Chu M H, He J C, et al. 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 132001
- [67] Luscher M 1986 *Commun. Math. Phys.* **105** 153
- [68] Luscher M 1991 *Nucl. Phys. B* **354** 531
- [69] Briceno R A, Dudek J J, Young R D 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 025001
- [70] Davoudi Z 2018 *PoS LATTICE* **2018** 014
- [71] Hansen M T, Sharpe S R 2019 *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **69** 65
- [72] Nambu Y, Jona-Lasinio G 1961 *Phys. Rev.* **124** 246
- [73] Nambu Y, Jona-Lasinio G 1961 *Phys. Rev.* **122** 345
- [74] Gross D J, Neveu A 1974 *Phys. Rev. D* **10** 3235
- [75] Backens S, Shnirman A, Makhlin Y 2019 *Sci. Rep.* **9** 2
- [76] Weinberg P, Bukov M 2017 *SciPost Phys.* **2** 003
- [77] Steiger D S, Häner T, Troyer M 2018 *Quantum* **2** 49
- [78] Collins J 2013 *Foundations of Perturbative QCD* (Cambridge: Cambridge University Press) pp174–176
- [79] Ishikawa T, Jin L, Lin H W, Schäfer A, Yang Y B, Zhang J H, Zhao Y 2019 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **62** 991021
- [80] Jia Y, Liang S, Xiong X, Yu R 2018 *Phys. Rev. D* **98** 054011
- [81] Barry P C, Ji C R, Sato N, Melnitchouk W 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 232001
- [82] Chernyak V L, Zhitnitsky A R 1984 *Phys. Rep.* **112** 173
- [83] Zhang R, Honkala C, Lin H W, Chen J W 2020 *Phys. Rev. D* **102** 094519
- [84] Jordan S P, Lee K S M, Preskill J 2014 *Quant. Inf. Comput.* **14** 1014
- [85] Jordan S P, Lee K S M, Preskill J 2014 arXiv: 1404.7115 [High Energy Physics-Theory]
- [86] Lehmann H, Symanzik H, Zimmerman W 1955 *Nuovo Cimento* **1** 205
- [87] Abdalla E, Abdalla M C B, Rothe K D 1991 *Non-perturbative Methods in 2D Quantum Field Theory* (Singapore: World Scientific Publishing House)
- [88] Lowenstein J, Swieca J 1971 *Ann. Phys.* **68** 172
- [89] Byrnes T, Sriganesh P, Bursill R, Hamer C 2002 *Phys. Rev. D* **66** 013002
- [90] Buyens B, Montangero S, Haegeman J, Verstraete F, Van Acoleyen K 2017 *Phys. Rev. D* **95** 094509
- [91] Zinn-Justin J 2002 In *New Developments in Quantum Field Theory* (Springer), pp217–232
- [92] Kogut J, Susskind L 1975 *Phys. Rev. D* **11** 395
- [93] Fetter A L, Walecka J D 2012 *Quantum Theory of Many-particle Systems* (New York: Courier Corporation)
- [94] Casher A, Kogut J, Susskind L 1974 *Phys. Rev. D* **10** 732
- [95] Hamer C, Kogut J, Crewther D, Mazzolini M 1982 *Nucl. Phys. B* **208** 413
- [96] Buyens B, Verstraete F, Van Acoleyen K 2016 *Phys. Rev. D* **94** 085018
- [97] Johansson J R, Nation P D, Nori F 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1760
- [98] Pisarski R D, Alvarez O 1982 *Phys. Rev. D* **26** 3735
- [99] Fodor Z, Katz S D 2004 *J. High Energy Phys.* **2004** 050
- [100] D’Elia M, Lombardo M P 2003 *Phys. Rev. D* **67** 014505
- [101] Allton C R, Ejiri S, Hands S J, Kaczmarek O, Karsch F, Laermann E, Schmidt C 2003 *Phys. Rev. D* **68** 014507

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Quantum computing based high-energy nuclear physics^{*}

Li Tian-Yin¹⁾²⁾³⁾ Xing Hong-Xi^{1)2)3)4)†} Zhang Dan-Bo^{4)‡}

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), Institute of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Nuclear Science, Institute of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

3) (*Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Southern Nuclear Science Computing Center, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

4) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 31 May 2023; revised manuscript received 4 July 2023)

Abstract

High-energy nuclear physics aims to explore and understand the physics of matter composed of quarks and gluons. However, it is intrinsically difficult to simulate high-energy nuclear physics from the first principle based quantum chromodynamics by using classical computers. In recent years, quantum computing has received intensive attention because it is expected to provide an ultimate solution for simulating high-energy nuclear physics. In this paper, we firstly review recent advances in quantum simulation of high-energy nuclear physics. Then we introduce some standard quantum algorithms, such as state preparation and measurements of light-cone correlation function. Finally, we demonstrate the advantage of quantum computing for solving the real-time evolution and the sign problems by studying hadronic scattering amplitude and phase structure of finite-temperature and finite-density matter, respectively.

Keywords: high-energy nuclear physics, quantum algorithm, scattering amplitude, phase structure of nuclear matter

PACS: 03.67.Lx, 14.20.Dh, 11.15.Ha, 25.75.Nq

DOI: [10.7498/aps.72.20230907](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230907)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12005065, 12022512, 12035007), the Basic and Applied Basic Research Fund of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2023A1515011460, 2021A1515010317), and the Guangdong Provincial Key Laboratory, China (Grant No. 2020B1212060066).

[†] Corresponding author. E-mail: hxing@m.scnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: dbzhang@m.scnu.edu.cn



基于量子计算的高能核物理研究

李天胤 邢宏喜 张旦波

Quantum computing based high-energy nuclear physics

Li Tian-Yin Xing Hong-Xi Zhang Dan-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200303 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230907

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230907>

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

机器学习辅助绝热量子算法设计

Machine learning assisted quantum adiabatic algorithm design

物理学报. 2021, 70(14): 140306 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210831>

基于量子算法的量子态层析新方案

A novel scheme of quantum state tomography based on quantum algorithms

物理学报. 2019, 68(14): 140301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190157>

基于冗余图态的多人协作量子计算

Collaborative quantum computation with redundant graph state

物理学报. 2019, 68(11): 110302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190142>

集成光量子计算的研究进展

Research progress of integrated optical quantum computing

物理学报. 2022, 71(24): 240302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221782>

强激光驱动高能极化正负电子束与偏振伽马射线的研究进展

Review on laser-driven high-energy polarized electron and positron beams and γ -rays

物理学报. 2021, 70(8): 087901 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210009>

面向量子计算的拓扑超导体材料、物理和器件研究

Research progress of material, physics, and device of topological superconductors for quantum computing

物理学报. 2022, 71(16): 160302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220596>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

正负电子对撞中类底夸克偶素的线形*

叶全兴¹⁾²⁾ 何广朝¹⁾²⁾ 王倩^{1)2)†}

1) (华南师范大学量子物质研究院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广东省高等学校物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 广州 510006)

2) (华南师范大学南方核科学计算中心, 粤港量子物质联合实验室, 广东省核物质科学与技术重点实验室, 广州 510006)

(2023 年 5 月 31 日收到; 2023 年 10 月 15 日收到修改稿)

在重夸克自旋对称性下构造量子数为 $J^{PC} = 1^{--}$ 的 P 波 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 有效相互作用势, 代入李普曼-史温格方程求得 $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的散射振幅, 发现对应的散射截面可以解释现有的实验数据. 研究发现底夸克偶素的质量移动很小, 主要是由于底夸克偶素和 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 道的有效耦合比较小. 因此, $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 截面上的峰结构主要是 $\Upsilon(4S)$, $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$ 和 $\Upsilon(6S)$ 的贡献. 能量在 10.63 GeV 处的窄峰值结构需要实验上进一步细致扫描和理论上拟合公式的优化.

关键词: 重夸克偶素, 奇特介子, 重夸克有效理论

PACS: 14.40. Pq, 14.40. Rt, 12.39. Hg

DOI: 10.7498/aps.72.20230908

1 引言

强相互作用是自然界中四种基本相互作用之一, 是将夸克和胶子形成色单态强子的最主要相互作用. 描述强相互作用的基本理论是量子色动力学, 其低能色禁闭的性质决定实验上能直接观测到的粒子都是色单态的强子, 因此, 研究强子的内部结构和性质是理解强相互作用最重要的手段之一. 1964 年, 盖尔曼^[1] 提出强子是由更基本粒子 (称为夸克 (quark)) 所组成. 同年, 茨威格^[2] 在他的书中也提出相同的概念, 并将这种基本粒子命名为 “aces”. 这些概念的提出也标志着夸克模型的建立.

夸克模型将强子分为介子和重子, 介子由夸克和反夸克构成, 重子由 3 个夸克构成. 另一方面, 量子力学色动力学的色禁闭性质允许除上述两种构型外的其他色单态强子 (即多夸克态) 的存在. 因此, 高能实验物理学家致力于寻找多夸克态. 直至 2003 年, 实验上发现第一个奇特强子态候选者

$X(3872)$ ^[3] 的信号, 打开了实验上研究奇特强子态的大门. 迄今为止, 实验上发现了几十个超出传统夸克模型的奇特强子态候选者, 它们内部结构有多种解释: 强子分子态、三角奇异性带来的运动学效应、紧致多夸克态、混杂态等^[4–14]. 这些奇特强子态的候选者多数都有比较邻近的阈值, 因此, 有可能是强子分子态的候选者^[8], 或者是三角奇异性带来的运动学效应^[12], 例如正负电子对撞中发现的 $Y(4260)$ 与 $D_1\bar{D}$ 的阈值比较接近, 可以作为 $D_1\bar{D}$ 的强子分子态候选者. $Y(4260)$ 的 $D_1\bar{D}$ 的强子分子态图像可以很好地解释相关的实验数据^[15–28], 并且预言新的重夸克自旋对称性伴随态粒子^[29–33]. $D_1\bar{D}$ 阈值在正负电子对撞中有重要贡献, 主要是因为粲夸克系统具有明显的重夸克对称性破坏效应^[17,27]. 这也说明底夸克偶素能区正负电子对撞过程中, $B_1\bar{B}$ 阈值效应没有粲夸克偶素能区中 $D_1\bar{D}$ 阈值作用贡献重要. 另一方面, BelleII 实验组在正负电子对撞的底介子对产生截面中, 在 $B_1\bar{B}$ 阈下没有发现明显的共振态信号^[34]. 与粲偶素能区物理不同,

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 12035007) 和广东省基金 (批准号: 2019QN01X172) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qianwang@m.scnu.edu.cn

底夸克偶素能区重夸克对称性比较好保持. 因此, $B_1\bar{B}$ 阈值在底夸克偶素能区正负电子对撞过程中产额不大, 所对应的阈值效应不重要. 阈值效应是否明显一方面取决于对应道在所研究过程中的产额是否足够大, 另一方面取决于阈值对应的两个或多个强子的总宽度是否足够小. 因此, 研究底夸克偶素能区正负电子对撞过程中的截面, 窄共振态 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的阈值效应起主要作用. 本文主要在重夸克对称性下研究底夸克偶素能区正负电子对撞过程中 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的阈值效应, 以及由于它们之间的相互作用是否可以形成对应的强子分子态.

2 理论框架

重夸克极限下, 量子色动力学拉氏量可以按照重夸克质量的倒数进行展开. 领头阶的拉氏量不依赖于重夸克的自旋和重夸克的质量, 即具有重夸克自旋对称性和重夸克味道对称性. 这两种对称性是研究含有重夸克系统的重要手段. 本文将利用重夸克自旋对称性, 研究底夸克偶素能区正负电子对撞到 B 介子对的产生截面, 以揭示可能的类底夸克偶素态.

2.1 有效势

重夸克自旋对称性下, 重轻介子的动力学性质取决于轻自由度. 因此, S 波的 $b\bar{q}$ (或 $\bar{B}q$) 介子的轻自由度完全由反轻夸克 (轻夸克) 承担, S 波赝标介子 B 和矢量介子 B^* 构成轻自由度 $s_l = 1/2^-$ 的重夸克自旋二重态 (B, B^*). 由于正负电子湮灭为一个虚光子, 具有 $J^{PC} = 1^{--}$ 量子数. 因此, 具有 $J^{PC} = 1^{--}$ 的量子数的 P 波 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 才能在正负电子对撞中产生. 为构造 P 波的有效相互作用势, 首先考虑 P 波 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的重轻分解,

$$|l([s_1 s_{Q_1}]_{j_1} [s_2 s_{Q_2}]_{j_2})_s\rangle_J = \sum_{s_1, s_{Q_1}, s_q} (-1)^{l+s_q+s_Q+J} \hat{s}_q \hat{s}_{Q_1} \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{s}_1 \begin{Bmatrix} s_1 & s_{Q_1} & j_1 \\ s_2 & s_{Q_2} & j_2 \\ s_q & s_Q & s \end{Bmatrix} \times \begin{Bmatrix} l & s_q & s_1 \\ s_Q & J & s \end{Bmatrix} |l([s_1 s_2]_{s_q})_{s_1} [s_{Q_1} s_{Q_2}]_{s_Q}\rangle_J, \quad (1)$$

其中 $|l([s_1 s_{Q_1}]_{j_1} [s_2 s_{Q_2}]_{j_2})_s\rangle_J$ 代表的是强子基. s_{Q_i} 表示的是第 i 个强子中的重夸克自旋, s_{l_i} 代表的是第 i 个强子中的轻自由度, 即轻夸克自旋加上该

强子中夸克反夸克之间的相对轨道角动量. j_i 代表第 i 个强子的总自旋. l 表示的是强子基中两个强子间的相对轨道角动量, 两个强子系统的总角动量则用 J 来表示. s 代表两个强子的总自旋. (1) 式左侧的强子基分解为总的重自由度 s_Q 和总的轻自由度 s_l , 即用右侧的重轻基 $|l([s_1 s_2]_{s_q})_{s_1} [s_{Q_1} s_{Q_2}]_{s_Q}\rangle_J$ 表示. 其中 s_q 是双强子系统中的轻夸克对的总自旋, $s_l = s_q + l$ 是双强子系统中的轻自由度, 即轻夸克对总自旋 s_q 和两强子间相对轨道角动量 l 之和. 由于重夸克极限下, 轻重自由度分别守恒, 重轻基 $|l([s_1 s_2]_{s_q})_{s_1} [s_{Q_1} s_{Q_2}]_{s_Q}\rangle_J$ 可以化简为 $|s_Q \otimes s_l\rangle_J$ [35]. 针对本文所要研究的正负电子对撞过程, 相对轨道角动量 $l = 1$, 因此, 量子数 $J^{PC} = 1^{--}$ 的 P 波 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 重轻分解为

$$\begin{aligned} |B\bar{B}\rangle_{1^{--}} &= \frac{1}{2}|0 \otimes 1\rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}}|1 \otimes 0\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2}|1 \otimes 1\rangle + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}|1 \otimes 2\rangle, \\ |B\bar{B}^* + \text{c.c.}\rangle_{1^{--}} &= -\frac{1}{\sqrt{3}}|1 \otimes 0\rangle + \frac{1}{2}|1 \otimes 1\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}|1 \otimes 2\rangle, \\ |B^*\bar{B}^*\rangle_{1^{--}}^{s=0} &= \frac{1}{2}\sqrt{3}|0 \otimes 1\rangle - \frac{1}{6}|1 \otimes 0\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2\sqrt{3}}|1 \otimes 1\rangle - \frac{\sqrt{5}}{6}|1 \otimes 2\rangle, \\ |B^*\bar{B}^*\rangle_{1^{--}}^{s=2} &= \frac{\sqrt{5}}{3}|1 \otimes 0\rangle + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}|1 \otimes 1\rangle + \frac{1}{6}|1 \otimes 2\rangle. \end{aligned}$$

为了简化式子, 上面等式右面省略了下角标 1^{--} . 由于重轻分解的变换是么正变换, 因此这些波函数是正交归一的 [36]. 下标 1^{--} 表示正负电子对撞中产生的 B 介子对的量子数 J^{PC} . 上标 $s = 0, s = 2$ 表示两强子系统的总自旋. 这四个道分别用拉丁指标 $i, j = 1, 2, 3, 4$ 表示.

重夸克极限下, 重夸克有效哈密顿量 \hat{H} 保证重轻自由度分别守恒, 且相互作用形式只取决于轻自由度, 即

$$\langle s_Q \otimes s_l | \hat{H} | s_{Q'} s_{l'} \rangle = \delta_{s_{Q'} s_Q} \delta_{s_{l'} s_l} C_{s_1}, \quad (2)$$

其中 C_{s_1} 是接触势, 只依赖于轻自由度 s_l . 因此, 可以定义接触势:

$$\begin{aligned} C_1 &\equiv \langle 0 \otimes 1 | \hat{H} | 0 \otimes 1 \rangle = \langle 1 \otimes 1 | \hat{H} | 1 \otimes 1 \rangle, \\ C_0 &\equiv \langle 1 \otimes 0 | \hat{H} | 1 \otimes 0 \rangle, \quad C_2 \equiv \langle 1 \otimes 2 | \hat{H} | 1 \otimes 2 \rangle. \end{aligned}$$

低能情况下, C_0, C_1, C_2 视为常数. 根据上述定义, 双 B 介子系统在量子数为 1^{--} 的接触势为

$$\begin{aligned} V_{11}^0 &= \frac{1}{12}C_0 + \frac{1}{2}C_1 + \frac{5}{12}C_2, \\ V_{12}^0 &= -\frac{1}{6}C_0 - \frac{1}{4}C_1 + \frac{5}{12}C_2, \\ V_{13}^0 &= -\frac{1}{12\sqrt{3}}C_0 + \frac{\sqrt{3}}{6}C_1 - \frac{5\sqrt{3}}{36}C_2, \\ V_{14}^0 &= \frac{1}{6}\sqrt{\frac{5}{3}}C_0 - \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{3}}C_1 + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{5}{3}}C_2, \\ V_{22}^0 &= \frac{1}{3}C_0 + \frac{1}{4}C_1 + \frac{5}{12}C_2, \\ V_{23}^0 &= \frac{1}{6\sqrt{3}}C_0 + \frac{1}{4\sqrt{3}}C_1 - \frac{5}{12\sqrt{3}}C_2, \\ V_{24}^0 &= -\frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{3}}C_0 + \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{3}}C_1 + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{5}{3}}C_2, \\ V_{33}^0 &= \frac{C_0}{36} + \frac{5}{6}C_1 + \frac{5}{36}C_2, \\ V_{34}^0 &= -\frac{\sqrt{5}}{18}C_0 + \frac{\sqrt{5}}{12}C_1 - \frac{\sqrt{5}}{36}C_2, \\ V_{44}^0 &= \frac{5}{9}C_0 + \frac{5}{12}C_1 + \frac{1}{36}C_2. \end{aligned}$$

因为 4×4 的接触势是对称矩阵, 所以此处只给出上半对角的矩阵元. 原则上, 在能量区间比较大的情况下, 即动力学道对应的三动量可以和 π 介子质量相比时, 需要引入单 π 交换势. 但是文献 [37–40] 中对强子分子态的研究表明, 引入单 π 交换势时的

物理性质与只考虑接触势时的物理性质基本一致, 因此, 本文计算只考虑接触势的贡献.

实验上测量的质心系能量在 [10.55, 11.03] GeV 之间, 夸克模型的计算表明此能量区间可能存在 4 个裸态^[41], 分别是 $\Upsilon(10580)$, $\Upsilon(10753)$, $\Upsilon(10860)$, $\Upsilon(11020)$. 目前这 4 个态的性质是 $\Upsilon(10580)$ 为 $\Upsilon(4S)$, $\Upsilon(10753)$ 看作 $\Upsilon(3D)$ 与 $\Upsilon(4S, 5S)$ 的混合^[42], $\Upsilon(10860)$ 和 $\Upsilon(11020)$ 则分别看作是 $\Upsilon(5S)$ 和 $\Upsilon(6S)$ ^[41,42]. 因此, 4 个裸态在本文中分别为 $\Upsilon(4S)$, $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$, $\Upsilon(6S)$. 并用希腊指标 $\alpha, \beta=1, 2, 3, 4$ 来表示. 重夸克极限下 S 和 D 波的底夸克偶素分别耦合到 $|1 \otimes 0\rangle$, $|1 \otimes 2\rangle$ 的重轻基, 耦合强度分别定义为

$$\begin{aligned} g_{4S} &\equiv \langle 1 \otimes 0 | \hat{H}' | 1 \otimes 0 \rangle_{4S}, \\ g_{3D} &\equiv \langle 1 \otimes 2 | \hat{H}' | 1 \otimes 2 \rangle_{3D}, \\ g_{5S} &\equiv \langle 1 \otimes 0 | \hat{H}' | 1 \otimes 0 \rangle_{5S}, \\ g_{6S} &\equiv \langle 1 \otimes 0 | \hat{H}' | 1 \otimes 0 \rangle_{6S}. \end{aligned}$$

相应的势能矩阵元可以表示为 $v_{i\alpha} = \langle i | \hat{H}' | \alpha \rangle$, 其中 $|i\rangle$ 对应强子态 $|B^{(*)}\bar{B}^{(*)}\rangle_{1^{--}}$, 强子态 $|B\bar{B}\rangle_{1^{--}}$, $|B\bar{B}^* + B^*\bar{B}\rangle_{1^{--}}$, $|B^*\bar{B}^*\rangle_{1^{--}}^{S=0}$, $|B^*\bar{B}^*\rangle_{1^{--}}^{S=2}$ 分别对应 $i=1, 2, 3, 4$ 的情况; $|\alpha\rangle$ 对应裸态波函数, $\alpha=1, 2, 3, 4$ 分别对应 $|1 \otimes 0\rangle_{4S}$, $|1 \otimes 2\rangle_{3D}$, $|1 \otimes 0\rangle_{5S}$, $|1 \otimes 0\rangle_{6S}$, 将相应的波函数一一代入 $v_{i\alpha} = \langle i | \hat{H}' | \alpha \rangle$, 即可得出裸态与 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的耦合矩阵 $\mathbf{V}_{\text{open-bare}}$ (以下用 \mathbf{V}^{ob} 来表示):

$$\mathbf{V}^{\text{ob}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{3}}g_{4S} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}g_{3D} & \frac{1}{2\sqrt{3}}g_{5S} & \frac{1}{2\sqrt{3}}g_{6S} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}g_{4S} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}g_{3D} & -\frac{1}{\sqrt{3}}g_{5S} & -\frac{1}{\sqrt{3}}g_{6S} \\ -\frac{1}{6}g_{4S} & -\frac{\sqrt{5}}{6}g_{3D} & -\frac{1}{6}g_{5S} & -\frac{1}{6}g_{6S} \\ \frac{\sqrt{5}}{3}g_{4S} & \frac{1}{6}g_{3D} & \frac{\sqrt{5}}{3}g_{5S} & \frac{\sqrt{5}}{3}g_{6S} \end{pmatrix}.$$

综上所述, 以上 8 个衰变道的势能矩阵可以写成如下形式:

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}^0 & \mathbf{V}^{\text{ob}} \\ \mathbf{V}^{\text{bo}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{V}^0 是 4 个开放道对应的势能矩阵, \mathbf{V}^{ob} 是裸态与 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的耦合矩阵, \mathbf{V}^{bo} 矩阵是 \mathbf{V}^{ob} 矩阵的

转置.

2.2 李普曼-史温格方程

由于本文所考虑的有效势是常数, 因此李普曼-史温格方程可化简为矩阵形式的代数方程:

$$\mathbf{T} = \mathbf{V} - \mathbf{V}\mathbf{G}\mathbf{T}. \quad (4)$$

由于存在 8 个衰变道, 因此 T , V , G 均为 8×8 的矩阵, 不妨将 T 矩阵改写成四块 4×4 的矩阵, 表示为

$$T = \begin{pmatrix} T^o & T^{ob} \\ T^{bo} & T^{bb} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

类似地, G 矩阵可以改写为两块对角矩阵:

$$G = \begin{pmatrix} G_p & \\ & S \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中 $G_p = \text{diag}(G_1, G_2, G_3, G_4)$, $S = \text{diag}(S_1, S_2, S_3, S_4)$. 两体传播子

$$\begin{aligned} G_i(E) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{q^2 f_\Lambda(q^2)}{E - m_{i1} - m_{i2} - q^2/(2\mu)} \\ &= -\frac{\mu\Lambda}{(2\pi)^{3/2}} \left(k^2 + \frac{\Lambda^2}{4} \right) \\ &\quad + \frac{\mu k^3}{2\pi} e^{-2k^2/\Lambda^2} \left[\text{erfi}\left(\frac{\sqrt{2}k}{\Lambda}\right) - i \right], \end{aligned} \quad (7)$$

式中, $k = \sqrt{2\mu_i(E - m_{i1} - m_{i2} + i\varepsilon)}$, 其中 m_{i1} , m_{i2} 是第 i 道中两个粒子的质量; μ_i 是第 i 道的约化质量. $f_\Lambda(q^2) = \exp(-2q^2/\Lambda^2)$ 是每个顶点的形状因子^①, 虚误差函数 $\text{erfi}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt$; Λ 是适用能标, 在此处可以理解为一个待拟合参数. 4 个裸态的传播子为

$$S_\alpha = 1/(m_\alpha^2 - s - m_\alpha \Gamma_\alpha i), \quad (8)$$

其中 m_α 为第 α 个裸态的质量.

由于裸态间的跃迁势为零, 李普曼-史温格方程可以写为两组 4×4 维的方程组,

$$T^o = V^o - V^o G_p T^o - V^{ob} S T^{bo} \quad (9)$$

$$T^{bo} = V^{bo} - V^{bo} G_p T^o, \quad (10)$$

第二部分为

$$T^{ob} = V^{ob} - V^o G_p T^{ob} - V^{ob} S T^{bb}, \quad (11)$$

$$T^{bb} = -V^{bo} G_p T^{ob}. \quad (12)$$

将 (10) 式代入 (9) 式得:

$$T^o = V^o - V^{ob} S V^{bo} - (V^o - V^{ob} S V^{bo}) G_p T^o. \quad (13)$$

定义有效作用势为

$$\hat{V}^o = V^o - V^{ob} S V^{bo}, \quad (14)$$

则

$$T^o = \hat{V}^o - \hat{V}^o G_p T^o. \quad (15)$$

类似地, 可以得到其他的散射矩阵元.

2.3 物理产生振幅及散射截面

相关的 8 个道的裸顶点产生振幅定义为

$$\mathcal{F} = (F_1, F_2, F_3, F_4, f_1, f_2, f_3, f_4)^T, \quad (16)$$

其中 f_α ($\alpha = 1, 2, 3, 4$) 是虚光子和相应的底夸克偶素之间的耦合常数, 可以通过以下公式进行计算^[43]:

$$\frac{e}{f_V} = \left[\frac{3\Gamma_{V \rightarrow e^+e^-}}{2\alpha_e |\mathbf{p}_e|} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (17)$$

f_α 即为 (17) 式中的 e/f_V , $\alpha_e = 1/137$ 是精细结构常数, $\Gamma_{V \rightarrow e^+e^-}$ 是矢量介子衰变到 e^+e^- 的衰变宽度, \mathbf{p}_e 是末态电子的三动量. F_i 是虚光子和第 i 个开放道的耦合常数, 可以参数化为

$$F_i \equiv g_{i2}^{1--} f_S^0 + g_{i4}^{1--} f_D^0, \quad (18)$$

其中 f_S^0 和 f_D^0 分别为虚光子和重轻基 $|1 \otimes 0\rangle$ 和 $|1 \otimes 2\rangle$ 的耦合强度:

$$f_S^0 \equiv \langle 1 \otimes 0 | H_{EM} | \gamma^* \rangle, \quad (19)$$

$$f_D^0 \equiv \langle 1 \otimes 2 | H_{EM} | \gamma^* \rangle. \quad (20)$$

g_{i2}^{1--} 和 g_{i4}^{1--} 分别是 $|1 \otimes 0\rangle$ 和 $|1 \otimes 2\rangle$ 基在第 i 个动力学道中的占比. 它们的具体数值可以从 $|\mathbf{B}^{(*)}$ $\bar{\mathbf{B}}^{(*)}$ 重轻分解后的系数矩阵:

$$g^{1--} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{\sqrt{5}}{6} \\ 0 & \frac{\sqrt{5}}{3} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \quad (21)$$

中读出, 即 g_{i2}^{1--} 和 g_{i4}^{1--} 分别是矩阵 g^{1--} 的第 2 列

^① 形状因子用来描述非点粒子的内部结构, 常用的形状因子除了指数形状因子外, 还有单极形状因子、偶极形状因子等. 这些形状因子在阈值附近的行为一致. 本文所用公式是在重夸克极限下推导的, 也适用于阈值附近, 为了最大程度压低远离阈值处的贡献, 我们采用指数形状因子.

和第 4 列.

物理产生振幅可以通过求解矩阵方程:

$$\mathbf{U} = \mathcal{F} - \mathbf{V}\mathbf{G}\mathbf{U} \quad (22)$$

获得. 将列矩阵 \mathcal{F} 进行分块, 表示为

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}^o \\ \mathbf{F}^b \end{pmatrix}. \quad (23)$$

相应地, 将列矩阵 \mathbf{U} 进行分块, 表示为

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}^o \\ \mathbf{U}^b \end{pmatrix}. \quad (24)$$

求解上述方程可获得:

$$\mathbf{U}^o = \hat{\mathbf{F}}^o - \hat{\mathbf{V}}^o \mathbf{G}_p \mathbf{U}^o, \quad (25)$$

式中的 $\hat{\mathbf{F}}^o$ 称为有效裸产生振幅:

$$\hat{\mathbf{F}}^o = \mathbf{F}^o - \mathbf{V}^{ob} \mathbf{S} \mathbf{f}^b. \quad (26)$$

将 (25) 式移项化简得:

$$\mathbf{U}^o = (\mathbb{I} + \hat{\mathbf{V}}^o \mathbf{G}_p)^{-1} \hat{\mathbf{F}}^o, \quad (27)$$

其中, \mathbb{I} 为 4×4 的单位矩阵. 从 (27) 式可知, 只要知道有效作用势 $\hat{\mathbf{V}}^o$ 矩阵, 两体传播子 \mathbf{G}_p 矩阵以及有效裸产生振幅 $\hat{\mathbf{F}}^o$, 就可以求解开放道 $\mathbf{B}\bar{\mathbf{B}}$, $\mathbf{B}\bar{\mathbf{B}}^*$, $\mathbf{B}^* \bar{\mathbf{B}}^* (S=0)$, $\mathbf{B}^* \bar{\mathbf{B}}^* (S=2)$ 的物理产生振幅.

因此, $e^+e^- \rightarrow \mathbf{B}^{(*)} \bar{\mathbf{B}}^{(*)}$ 过程中 4 个开放道的散射振幅为

$$\mathcal{M} = \bar{v}(\mathbf{p}^+) (-ie\gamma_\mu) u(\mathbf{p}^-) \frac{iP_\gamma^{\mu\nu}(\mathbf{p})}{s} \mathcal{T}_\nu, \quad (28)$$

其中 \mathbf{p}^- (\mathbf{p}^+) 代表的是电子 (正电子) 的四动量, 而 \mathbf{p} 是两者之和. $P_\gamma^{\mu\nu}(\mathbf{p}) = -g^{\mu\nu}$ 是光子传播子的分子. \mathcal{T}_ν 是从李普曼-史温格方程中得到的产生振幅. $e^+e^- \rightarrow \mathbf{B}^{(*)} \bar{\mathbf{B}}^{(*)}$ 这 4 个开放道的产生振幅为

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1^i &= \mathcal{U}_1 (p_{\mathbf{B}}^i - p_{\bar{\mathbf{B}}}^i), \\ \mathcal{T}_2^i &= \mathcal{U}_2 \varepsilon^{ijk} (p_{\mathbf{B}}^j - p_{\bar{\mathbf{B}}}^j) \varepsilon^{*k}, \\ \mathcal{T}_3^i &= \mathcal{U}_3 \frac{1}{\sqrt{3}} (p_{\mathbf{B}^*}^i - p_{\bar{\mathbf{B}}^*}^i) \varepsilon_{\mathbf{B}^*}^* \cdot \varepsilon_{\bar{\mathbf{B}}^*}^*, \\ \mathcal{T}_4^i &= \mathcal{U}_4 P_2^{ij,mn} \varepsilon_{\mathbf{B}^*}^{*m} \varepsilon_{\bar{\mathbf{B}}^*}^{*n} (p_{\mathbf{B}^*}^j - p_{\bar{\mathbf{B}}^*}^j). \end{aligned}$$

其中 \mathcal{U}_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 是 4 个动力学道的裸产生强度, $p_{\mathbf{B}^{(*)}}$ 和 $p_{\bar{\mathbf{B}}^{(*)}}$ 是 $\mathbf{B}^{(*)}$, $\bar{\mathbf{B}}^{(*)}$ 介子质心系下的三动量, $\varepsilon_{\mathbf{B}^*}$, $\varepsilon_{\bar{\mathbf{B}}^*}$ 是 \mathbf{B}^* , $\bar{\mathbf{B}}^*$ 介子的极化矢量. $P_2^{ij,mn}$ 是自旋为 2 的投影算符, 其表达式为

$$P_2^{ij,mn} = \sqrt{\frac{3}{5}} \left(\frac{1}{2} \delta^{im} \delta^{jn} + \frac{1}{2} \delta^{in} \delta^{jm} - \frac{1}{3} \delta^{ij} \delta^{mn} \right),$$

相应的散射振幅的模方为

$$|\mathcal{M}_1|^2 = \mathcal{U}_1^2 \frac{32\pi\alpha_e}{s} |\mathbf{p}_{\mathbf{B}}|^2 (1 - \cos^2 \theta), \quad (29)$$

$$|\mathcal{M}_2|^2 = \mathcal{U}_2^2 \frac{32\pi\alpha_e}{s} |\mathbf{p}_{\mathbf{B}}|^2 (1 + \cos^2 \theta), \quad (30)$$

$$|\mathcal{M}_3|^2 = \mathcal{U}_3^2 \frac{32\pi\alpha_e}{s} |\mathbf{p}_{\mathbf{B}^*}|^2 (1 - \cos^2 \theta), \quad (31)$$

$$|\mathcal{M}_4|^2 = \mathcal{U}_4^2 \frac{112\pi\alpha_e}{5s} |\mathbf{p}_{\mathbf{B}^*}|^2 \left(1 - \frac{1}{7} \cos^2 \theta \right). \quad (32)$$

(29)–(32) 式中角度的贡献在文献 [36] 中有较为详细的讨论. 第 i 个开放道的微分散射截面为

$$\frac{d\sigma_i}{d\cos\theta} = \frac{|\mathbf{p}_{\mathbf{B}^{(*)}}|}{64\pi s^{3/2}} |\mathcal{M}_i|^2. \quad (33)$$

将 (29)–(32) 式代入 (33) 式, 对 θ 从 0 到 π 积分, 即可得到相应开放道的散射截面:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \int_{-1}^{+1} \frac{|\mathbf{p}_{\mathbf{B}}|^3 \alpha_e}{2s^{5/2}} |\mathcal{U}_1|^2 (1 - \cos^2 \theta) d\cos\theta \\ &= \frac{2|\mathbf{p}_{\mathbf{B}}|^3 \alpha_e}{3s^{5/2}} |\mathcal{U}_1|^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= \int_{-1}^{+1} \frac{|\mathbf{p}_{\mathbf{B}}|^3 \alpha_e}{2s^{5/2}} |\mathcal{U}_2|^2 (1 + \cos^2 \theta) d\cos\theta \\ &= \frac{4|\mathbf{p}_{\mathbf{B}}|^3 \alpha_e}{3s^{5/2}} |\mathcal{U}_2|^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_3 &= \int_{-1}^{+1} \frac{|\mathbf{p}_{\mathbf{B}^*}|^3 \alpha_e}{2s^{5/2}} |\mathcal{U}_3|^2 (1 - \cos^2 \theta) d\cos\theta \\ &= \frac{2|\mathbf{p}_{\mathbf{B}^*}|^3 \alpha_e}{3s^{5/2}} |\mathcal{U}_3|^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_4 &= \int_{-1}^{+1} \frac{7|\mathbf{p}_{\mathbf{B}^*}|^3 \alpha_e}{20s^{5/2}} |\mathcal{U}_4|^2 \left(1 - \frac{1}{7} \cos^2 \theta \right) d\cos\theta \\ &= \frac{2|\mathbf{p}_{\mathbf{B}^*}|^3 \alpha_e}{3s^{5/2}} |\mathcal{U}_4|^2. \end{aligned}$$

通过拟合实验上 $e^+e^- \rightarrow \mathbf{B}^{(*)} \bar{\mathbf{B}}^{(*)}$ 过程中的反应截面提取模型中的参数, 并进一步提取感兴趣的物理信息.

3 数值结果与讨论

具体的数值计算结果表明, 上一节的截面公式可以很好地解释 BelleII 合作组最新的截面数据 [34], 如图 1 所示. 理论计算结果 (图 1 中蓝色实线) 穿过大部分实验数据点, 证明此图像可以很好地解释实验数据. 拟合得到的模型参数如表 1 所列.

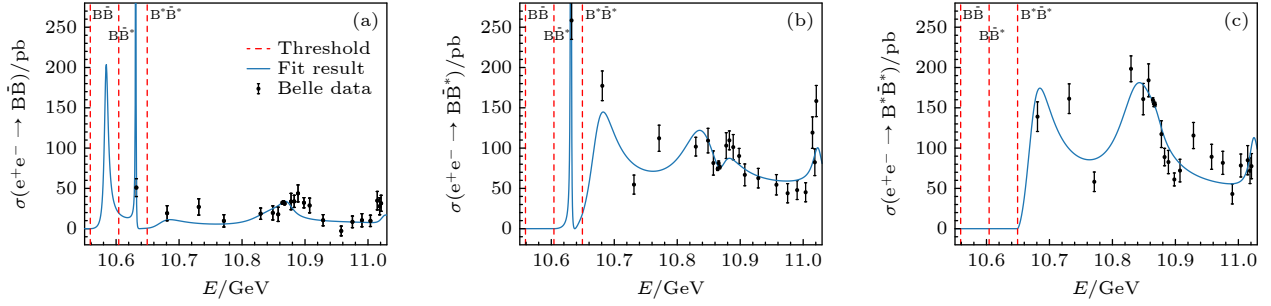


图 1 质心能量在 $[10.55, 11.03]$ GeV 之间 $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的散射截面. 实验数据点来自 BelleII 合作组 [34]. 蓝色实线是理论计算的截面. 3 条垂直的红色虚线从低到高分别是 $B\bar{B}$, $B\bar{B}^*$, $B^*\bar{B}^*$ 的阈值. 其中 $e^+e^- \rightarrow B^*\bar{B}^*$ 过程的截面是第 3 个道和第 4 个道贡献的总和

Fig. 1. The cross sections of the $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ in the center of mass energy region $[10.55, 11.03]$ GeV. The blue solid curves are the theoretical results. The vertical red dashed lines are the $B\bar{B}$, $B\bar{B}^*$, $B^*\bar{B}^*$ thresholds. The cross section of the $e^+e^- \rightarrow B^*\bar{B}^*$ process is the sum of that of the third and fourth channels.

表 1 拟合参数和约化卡方

Table 1. Fitted parameters and the corresponding reduced χ^2 .

参数名	参数值	单位
C_0	0.160 ± 0.149	GeV^{-2}
C_1	1.669 ± 0.003	GeV^{-2}
C_2	-1.785 ± 2.677	GeV^{-2}
g_{4S}	-2.377 ± 0.180	GeV^0
g_{3D}	0.966 ± 0.430	GeV^0
g_{5S}	-0.571 ± 0.073	GeV^0
g_{6S}	0.252 ± 0.102	GeV^0
f_S^0	1.040 ± 0.097	GeV^0
f_D^0	-1.543 ± 1.535	GeV^0
m_{4S}	10.468 ± 0.043	GeV
m_{3D}	10.856 ± 0.004	GeV
m_{5S}	10.830 ± 0.011	GeV
m_{6S}	11.024 ± 0.008	GeV
Λ	2.448 ± 0.001	GeV
Γ_1	0.029 ± 0.017	GeV
Γ_2	0.033 ± 0.010	GeV
Γ_3	0.139 ± 0.025	GeV
Γ_4	0.027 ± 0.015	GeV
$\frac{\chi^2}{\text{d.o.f}}$	3.37	—

具体拟合过程中发现参数 C_0 与参数 g_{4S} , g_{5S} , g_{6S} , f_S^0 的关联性比较强. 这是由于上述参数都与重轻自由度 $|1 \otimes 0\rangle$ 耦合, 因此, 其中一个参数的变化可以被其他参数吸收. 同理, 由于参数 C_2 与参数 g_{3D} , f_D^0 都可以耦合到 $|1 \otimes 2\rangle$ 重轻自由度, 因此, 它们的关联性也比较强.

其中低能有效耦合常数 C_0 , C_1 , C_2 的数值大小处于同一个量级, 满足有效场论对同一阶参数的

要求. 4 个底夸克偶素的裸质量位置与截面上峰值的位置偏移较小, 他们的偏移是由耦合道效应导致的, 由于其耦合强度较小 (如表 2 所列), 导致偏移较小, 即 $\Upsilon(4S)$, $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$, $\Upsilon(6S)$ 的裸质量分别是 (10.468 ± 0.043) GeV, (10.856 ± 0.004) GeV, (10.830 ± 0.011) GeV, (11.024 ± 0.008) GeV. 这 4 个裸态在图 1 的 3 个反应道的截面上都有所反应, 即在图 1(a) 中, 分别对应质心系能量在 10.58, 10.87 和 11.03 GeV 处的峰值. 其中 10.87 GeV 处的峰值是由 $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$ 共同效应导致的结构. 由于运动学相空间效应, 质心能量在 10.63 GeV 处的尖峰只在 $e^+e^- \rightarrow B\bar{B}$, $e^+e^- \rightarrow B\bar{B}^*$ 过程的截面中有

表 2 物理黎曼面 R_{+++} , 离物理黎曼面近的黎曼面 R_{-++} , R_{-+} , R_{---} 上的极点 (第 2 列) 和主要耦合道及其有效耦合常数 (第 3 列)

Table 2. Poles on the physical sheet R_{+++} , those R_{-++} , R_{-+} , R_{---} close to the physical one (the second column), the dominant channel with the corresponding effective coupling (the third column).

黎曼面	极点/GeV	D.C. ($g^{\text{eff}} / \text{MeV}^{-1/2}$)
R_{+++}	$10.638 - 0.000i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=0}$ [0.52]
	$10.871 - 0.014i$	$B\bar{B}^*$ [0.05]
	$11.024 - 0.009i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=2}$ [0.06]
R_{-++}	$10.876 - 0.016i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=2}$ [0.03]
	$11.024 - 0.008i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=2}$ [0.05]
R_{-+-}	$10.873 - 0.021i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=2}$ [0.01]
	$11.018 - 0.008i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=0}$ [0.00]
R_{---}	$10.587 - 0.00i$	$B\bar{B}^*$ [0.01]
	$10.635 - 0.033i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=2}$ [0.01]
	$10.846 - 0.090i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=0}$ [0.00]
	$10.871 - 0.020i$	$(B^*\bar{B}^*)^{s=2}$ [0.01]

所体现. 此尖峰结构主要由这两个反应过程中 10.63 GeV 附近两个实验数据点决定, 统计显著性不高. 当进一步考虑实验分辨率的效应, 上述尖峰将变得平滑. $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$, $\Upsilon(6S)$ 在 $e^+e^- \rightarrow B\bar{B}^*$ 和 $e^+e^- \rightarrow B^*\bar{B}^*$ 反应过程中均有所体现, 即对应 10.85 和 11.02 GeV 附近的峰. 拟合对应的极点位置和主要耦合道及其耦合强度列在表 2 中. 从表中可以看出, 所有极点与 B 介子对的耦合强度比较小, 截面上的峰值结果均是由重夸克偶素导致的.

4 总结与展望

BelleII 国际合作组测量了 $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 的散射截面实验数据, 并且通过高阶切比雪夫多项式对实验数据进行了拟合. 本文在重夸克自旋对称性下, 构造量子数为 $J^{PC} = 1^{--}$ 的 P 波 $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 散射势, 代入李普曼-史温格方程, 并通过代数求解李普曼-史温格方程得到物理散射振幅, 进而求出 $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ 过程的散射截面. 通过拟合 BelleII 的实验数据发现, 底夸克偶素 $\Upsilon(4S)$, $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$ 和 $\Upsilon(6S)$ 在随质心能量依赖的线形中体现为 10.58, 10.87 和 11.03 GeV 处的峰值. 其中 10.87 GeV 峰值是由 $\Upsilon(3D)$ 和 $\Upsilon(5S)$ 两个底夸克偶素共同作用的结果. 质心能量在 10.63 GeV 处的峰值附近只有两个能量点, 此处峰值的性质一方面需要实验上进一步细致扫描, 另一方面需要理论公式中考虑实验上的分辨率并且做 Bin-by-Bin 拟合. 因此, 为进一步确定 10.63 GeV 附近底夸克偶素的性质, 需要实验上在此能区内做进一步细致扫描.

感谢电子科技大学杜孟林教授的早期工作和讨论.

参考文献

[1] Gell-Mann M 1964 *Phys. Lett.* **8** 214
 [2] Zweig G 1964 *An $SU(3)$ model for strong interaction symmetry and its breaking* CM-P0004288
 [3] Choi S K, Olsen S L, Abe K, et al. 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 262001
 [4] Chen H X, Chen W, Liu X, Zhu S L 2016 *Phys. Rep.* **639** 1
 [5] Chen H X, Chen W, Liu X, Liu Y R, Zhu S L 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 076201
 [6] Dong Y, Faessler A, Lyubovitskij V E 2017 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **94** 282

[7] Lebed R F, Mitchell R E, Swanson E S 2017 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **93** 143
 [8] Guo F K, Hanhart C, Meißner U G, Wang Q, Zhao Q, Zou B S 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015004
 [9] Liu Y R, Chen H X, Chen W, Liu X, Zhu S L 2019 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **107** 237
 [10] Albuquerque R M, Dias J M, Khemchandani K P, Torres A M, Navarra F S, Nielsen M, Zanetti C M 2019 *J. Phys. G* **46** 093002
 [11] Yamaguchi Y, Hosaka A, Takeuchi S, Takizawa M 2020 *J. Phys. G* **47** 053001
 [12] Guo F K, Liu X H, Sakai S 2020 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **112** 103757
 [13] Brambilla N, Eidelman S, Hanhart C, Nefediev A, Shen C P, Thomas C E, Vairo A, Yuan C Z 2020 *Phys. Rep.* **873** 1
 [14] Zou B S 2021 *Sci. Bull.* **66** 1258
 [15] Wang Q, Hanhart C, Zhao Q 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 132003
 [16] Guo F K, Hanhart C, Meißner U G, Wang Q, Zhao Q 2013 *Phys. Lett. B* **725** 127
 [17] Cleven M, Wang Q, Guo F K, Hanhart C, Meißner U G, Zhao Q 2014 *Phys. Rev. D* **90** 074039
 [18] Wang Q, Cleven M, Guo F K, Hanhart C, Meißner U G, Wu X G, Zhao Q 2014 *Phys. Rev. D* **89** 034001
 [19] Wu X G, Hanhart C, Wang Q, Zhao Q 2014 *Phys. Rev. D* **89** 054038
 [20] Chen Y H, Dai L Y, Guo F K, Kubis B 2019 *Phys. Rev. D* **99** 074016
 [21] Xue S R, Jing H J, Guo F K, Zhao Q 2018 *Phys. Lett. B* **779** 402
 [22] Lu Y, Anwar M N, Zou B S 2017 *Phys. Rev. D* **96** 114022
 [23] Qin W, Xue S R, Zhao Q 2017 *JPS Conf. Proc.* **13** 020022
 [24] Cleven M, Zhao Q 2017 *Phys. Lett. B* **768** 52
 [25] Qin W, Xue S R, Zhao Q 2016 *Phys. Rev. D* **94** 054035
 [26] Li G, An C S, Li P Y, Liu D, Zhang X, Zhou Z 2015 *Chin. Phys. C* **39** 063102
 [27] Li G, Liu X H 2013 *Phys. Rev. D* **88** 094008
 [28] Li X, Voloshin M B 2013 *Phys. Rev. D* **88** 034012
 [29] Dong X K, Lin Y H, Zou B S 2020 *Phys. Rev. D* **101** 076003
 [30] Cao Z, Zhao Q 2019 *Phys. Rev. D* **99** 014016
 [31] Sanchez M, Geng L S, Lu J X, Hyodo T, Valderrama M P 2018 *Phys. Rev. D* **98** 054001
 [32] Wang Q 2014 *Phys. Rev. D* **89** 114013
 [33] Ji T, Dong X K, Guo F K, Zou B S 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 102002
 [34] Mizuk R, Bondar A, Adachi I, et al. 2021 *JHEP* **06** 137
 [35] Du M L, Meißner U G, Wang Q 2016 *Phys. Rev. D* **94** 096006
 [36] Voloshin M B 2012 *Phys. Rev. D* **85** 034024
 [37] Du M L, Baru V, Guo F K, Hanhart C, Meißner U G, Oller J A, Wang Q 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 072001
 [38] Du M L, Baru V, Guo F K, Hanhart C, Meißner U G, Oller J A, Wang Q 2021 *JHEP* **08** 157
 [39] Baru V, Epelbaum E, Filin A A, Hanhart C, Nefediev A V, Wang Q 2019 *Phys. Rev. D* **99** 094013
 [40] Wang Q, Baru V, Filin A A, Hanhart C, Nefediev A V, Wynen J L 2018 *Phys. Rev. D* **98** 074023
 [41] Workman R L, Burkert V D, Crede V, et al. 2022 *PTEP* **2022** 083C
 [42] Mizuk R, Bondar A, Adachi I, et al. 2019 *JHEP* **10** 220
 [43] Wang Q, Liu X H, Zhao Q 2011 *Phys. Rev. D* **84** 014007

Bottomonium-like states in e^+e^- annihilation*

Ye Quan-Xing¹⁾²⁾ He Guang-Zhao¹⁾²⁾ Wang Qian^{1)2)†}

1) (*Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), Institute of Quantum Matter, South China Normal*

University, Guangzhou 510006, China)

2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Nuclear Science, Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Southern Nuclear Science Computing Center, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 31 May 2023; revised manuscript received 15 October 2023)

Abstract

In the conventional quark model, meson is made of one quark and one antiquark, and baryon is made of three quarks. Since the observation of the X(3872) in 2003 by Belle collaboration, numerous exotic candidates beyond the conventional quark model have been observed. Most of them are located in heavy quarkonium energy region. Several interpretations, e.g. compact multiquarks, hadronic molecules, hybrids, etc, are proposed to understand their internal structures. Hadronic molecules are based on the fact that most of exotic candidates have nearby thresholds, which makes them analogies of deuteron made of one proton and one neutron. Whether two or more hadrons can be form a hadronic molecule or not depends on their interactions. In this work, we study the P-wave $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ interactions based on the $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ cross sections from Belle-II experiment to study whether their interaction can form vector bottomonium-like states or not. As $B^{(*)}$ and $\bar{B}^{(*)}$ mesons have bottom and antibottom quark, respectively, we work in the heavy quark limit, which respects both heavy quark spin symmetry and heavy quark flavor symmetry. In this framework, we construct effective contact potentials for $J^{PC} = 1^{--}$ P-wave $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ interactions, by decomposing the $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ dynamic channels into heavy-light basis. That, in the heavy quark limit, heavy and light degrees of freedoms are conserved individually makes the contact potentials in a very simple form. After solving the corresponding Lippmann-Schwinger equation, one can obtain the $e^+e^- \rightarrow B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ scattering amplitudes. With these scattering amplitudes, we can deduce the corresponding cross sections, which can be compared with the experimental data directly. By fitting to the data, we find that the mass shifts of the considered bottomonia are small due to their small couplings to the $B^{(*)}\bar{B}^{(*)}$ continuum channels. As the result, the $\Upsilon(4S)$, $\Upsilon(3D)$, $\Upsilon(5S)$ and $\Upsilon(6S)$ vector bottomonia express themselves as peaks at 10.58 GeV, 10.87 GeV, 11.03 GeV. The peak at 10.87 GeV is the interference between $\Upsilon(3D)$ and $\Upsilon(5S)$. As there are only two data points around 10.63 GeV, we cannot obtain a very clear conclusion about the peak around this energy point. To further explore its nature, both detailed scan around this energy region in experiment and improved formula in theory are needed.

Keywords: heavy quarkonia, exotic mesons, heavy quark effective theory

PACS: 14.40. Pq, 14.40. Rt, 12.39. Hg

DOI: 10.7498/aps.72.20230908

* Project supported by the Key Program of the Natural Science Foundation of China (Grant No. 12035007) and the Guangdong Provincial Funding, China (Grant No. 2019QN01X172).

† Corresponding author. E-mail: qianwang@m.scnu.edu.cn

正负电子对撞中类底夸克偶素的线形

叶全兴 何广朝 王倩

Bottomonium-like states in e^+e^- annihilation

Ye Quan-Xing He Guang-Zhao Wang Qian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 201401 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230908

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230908>

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

坐标空间中构造的Breit夸克势与介子和夸克偶素的质量劈裂

Construction of Breit quark potential in coordinate space and mass splits of meson and quarkonium

物理学报. 2018, 67(9): 091201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172155>

频率啁啾对强场下真空正负电子对产生的增强效应

Enhancement effect of frequency chirp on vacuum electron-positron pair production in strong field

物理学报. 2022, 71(13): 131201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220148>

正负电子对产生过程中不同外场宽度下的多光子跃迁效应

Multi-photon transition effects under different external field widths in electron-positron-pair creation process

物理学报. 2021, 70(23): 231202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202101>

夸克介子模型的相图和表面张力

Phase structure and surface tension in quark meson model

物理学报. 2019, 68(18): 181101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190798>

外磁场中的粲偶素

Charmonia in an external magnetic field

物理学报. 2021, 70(17): 170302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210262>

赝局域有效介质理论

Pseudo-local effect medium theory

物理学报. 2020, 69(15): 154203 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200196>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

相对论重离子碰撞中光子-光子相互作用的碰撞参数依赖性*

杨帅^{1)†} 唐泽波^{2)‡} 杨驰^{3)††} 查王妹^{2)‡‡}

1) (华南师范大学量子物质研究院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (中国科学技术大学, 核探测与核电子学国家重点实验室, 合肥 230026)

3) (山东大学前沿交叉科学青岛研究院, 粒子物理与粒子辐照教育部重点实验室, 青岛 266237)

(2023 年 6 月 6 日收到; 2023 年 8 月 11 日收到修改稿)

在相对论重离子碰撞中, 接近光速的重离子产生的超强电磁场, 由于洛伦兹收缩效应可等效为线性极化的准实光子, 进而诱发光子-光子相互作用产生正负轻子对. 相对论重离子对撞机 RHIC 和大型强子对撞机 LHC 上的国际合作实验在非超周边重离子碰撞中观测到相干光致产生过程, 发现正负轻子对的横动量分布相比于其在超周边碰撞发生显著的展宽, 为研究解禁闭物质——夸克胶子等离子体的电磁性质提供了新途径. 本文主要回顾相对论重离子碰撞中光子-光子相互作用对碰撞参数依赖的实验研究, 并讨论其在探测夸克胶子等离子体电磁性质方面的重要意义.

关键词: 相对论重离子碰撞, 夸克胶子等离子体, 光子-光子相互作用, 前向中子标定, 双轻子**PACS:** 12.38.Mh, 25.75.Cj**DOI:** 10.7498/aps.72.20230948

1 引言

量子色动力学的一个基本特征是夸克禁闭, 即构成物质的基本单元——夸克与胶子在通常情况下被束缚在色中性的强子中. 然而, 格点量子色动力学预言, 在极端高温高密的环境下, 夸克与胶子将摆脱束缚, 形成一种由“自由”夸克与胶子组成的新物质形态——夸克胶子等离子体 (quark gluon plasma, QGP). 相对论重离子碰撞的一个主要物理目标就是产生 QGP 并研究其性质. 此外, 接近光速运动的原子核激发出超强电磁场, 由于洛伦兹

收缩效应, 该电磁场被压缩到垂直于原子核运动方向的平面上, 电场和磁场相互垂直且大小相等, 与光子的电磁场十分相似. 费米^[1]在 1924 年首先提出用准实光子通量表征该电磁场. 随后, Williams^[2]和 Weizsäcker^[3]分别独立地拓展了费米的观点, 即等效光子近似模型 (equivalent photon approximation, EPA), 其强度正比于原子核所带电荷的平方. 因此, 当两个原子核之间的碰撞参数 (b) 大于两倍原子核半径 (R_A) 时 (原子核之间没有物理接触), 即超周边碰撞 (ultra-peripheral collision, UPC), 它们依然可以通过光致产生 (光子-光子相互作用、光子-原子核相互作用) 发生反应^[4–8], 如图 1 所示.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11890713, 12005220, 12075139, 12175223, 12275091) 和广东省基础与应用基础研究基金自然科学基金 (批准号: 2020B0301030008, 2023A1515010416) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: syang@scnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zbtang@ustc.edu.cn

†† 通信作者. E-mail: chiyang@sdu.edu.cn

‡‡ 通信作者. E-mail: first@ustc.edu.cn

光子-光子相互作用可以产生正反粒子对或者双光子, 用来研究量子真空结构以及寻找超出标准模型物理 [9–17]. 光子-原子核相互作用产生的矢量介子和喷注等, 对核内胶子在动量空间和位置空间的分布敏感, 用来研究原子核内胶子的结构 [18–29].

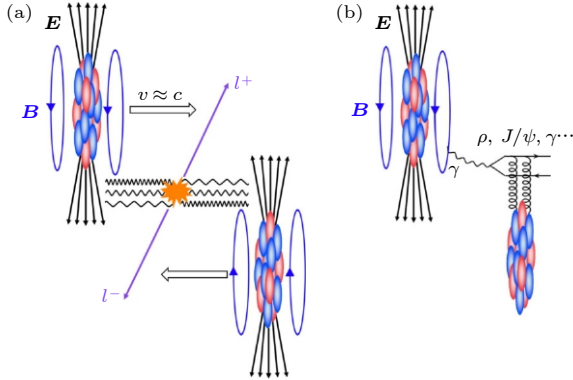


图 1 超周边重离子碰撞中光子-光子相互作用 (a) 和光子-原子核相互作用 (b) 示意图
Fig. 1. Schematic plot of photon-photon (a) and photon-nuclear (b) interactions in ultra-peripheral heavy-ion collisions.

相对论重离子激发光子的一个显著特征是其动量一般沿着束流运动方向, 其横动量 (p_T) 通常小于 $30 \text{ MeV}/c$ [5–7]. 因此, 相对论重离子碰撞中相干 (领头阶) 光子-光子相互作用产生的正负轻子对 ($\gamma\gamma \rightarrow l^+l^-$) 和相干光子-原子核相互作用产生的矢量介子集中在极低横动量区间 ($p_T < 150 \text{ MeV}/c$), 其末态的正负轻子对在束流方向垂直的横平面上背靠背分布. 长期以来人们认为当碰撞参数小于两倍原子核半径时, 原子核破碎, 无法满足相干条件. 因此, 相干光致产生过程只能在超周边碰撞中进行研究. 然而, ALICE [30], ATLAS [31,32] 和 STAR [33,34] 国际合作组在非超周边重离子碰撞 (non-UPC, $b < 2R_A$) 中观测到极低横动量的 J/ψ 和正负轻子对产额的反常增强. 进一步研究表明, 非超周边重离子碰撞中极低横动量 J/ψ 和正负轻子对产额的反常增强来自相干光致产生, 这极大地挑战原有相干光致产生的物理图像. 与此同时, 非超周边重离子碰撞中可以产生解禁闭的热密物质 QGP, 因此, 相干光致产生过程可能为研究 QGP 性质提供了新途径.

近年来, 相对论重离子碰撞中相干光致产生过程在实验测量 [30–36] 和理论计算 [37–45] 方面都取得了重要进展, 本文主要介绍相对论重离子碰撞中光

子-光子相互作用对碰撞参数依赖的研究进展, 及其在侦测 QGP 电磁性质方面的影响.

2 非超周边重离子碰撞中光子-光子相互作用的研究进展

相对论重离子对撞机 (RHIC) 上的 STAR 实验 [33] 和大型强子对撞机上的 ATLAS 实验 [31,32] 分别在 200 GeV 金核-金核、193 GeV 铀核-铀核和 5.02 TeV 铅核-铅核非超周边碰撞中不同碰撞中心度下测量了正负轻子对的产生.

图 2 为 STAR 在 60%–80% 金核-金核和铀核-铀核碰撞中心度下测量的不同质量区间 ($0.4\text{--}0.76, 0.76\text{--}1.2$ 和 $1.2\text{--}2.6 \text{ GeV}/c^2$) 的正负电子对的横动量 (p_T) 分布, 并将实验测量结果与预期源自强子衰变的正负电子对的贡献 (hadronic cocktail) 进行比较. 其中, 强子衰变的贡献来源于 $\pi^0, \eta, \eta', \omega, \phi, J/\psi, \psi', c\bar{c}, b\bar{b}$ 和 Drell-Yan 的衰变. 当正负电子对的 $p_T < 0.15 \text{ GeV}/c$ 时, 正负电子对的产额相对于已知强子衰变的贡献出现显著增强, 而强子衰变贡献在 $p_T > 0.15 \text{ GeV}/c$ 时可以很好地描述实验数据.

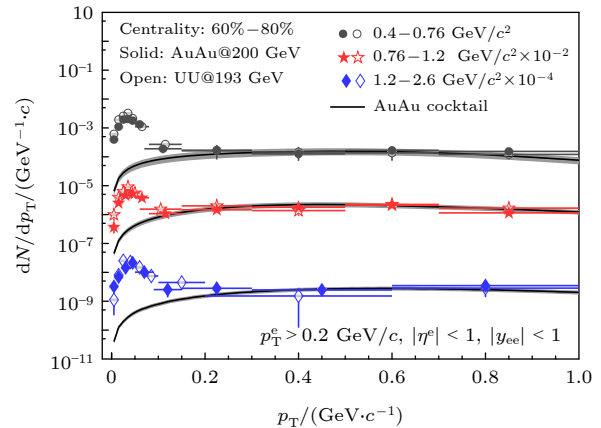


图 2 60%–80% 金核-金核和铀核-铀核碰撞中心度事例中不同质量区间正负电子对的横动量分布 [33]
Fig. 2. The e^+e^- pair p_T distributions for different mass regions in 60%–80% Au + Au and U + U collisions compared to cocktails [33].

为探索正负电子对在 $p_T < 0.15 \text{ GeV}/c$ 反常增强的物理原因, STAR 扣除了源自强子衰变的正负电子对贡献, 在 60%–80% 和 40%–60% 金核-金核和铀核-铀核碰撞中心度下测量了正负电子对的不变质量增强谱, 如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 图 3(c)

给出了正负电子对在上述 3 个质量区间的增强产额随碰撞中心度的变化. 可以明显看到增强产额没有明显的碰撞中心度依赖, 而源自强子衰变的贡献则有强烈的碰撞中心度依赖. 这个现象说明正负电子对在极低横动量区间的反常增强不太可能来自于强子相互作用的贡献. STAR 合作组进一步将正负电子对的质量增强谱与包含热密物质中 ρ 介子展宽与 QGP 热辐射贡献的理论计算^[46], 和相干光子-光子、光子-原子核相互作用的理论计算^[47,48] 进行比较, 如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 可以看出, 极低横动量正负电子对的反常增强亦不能被热密物质中 ρ 介子展宽与 QGP 热辐射和光子-原子核相互作用的贡献所解释, 但是能被光子-光子相互作用的贡献所描述.

ATLAS 合作组亦在 5.02 TeV 非超周边铅核-铅核碰撞中观测到了 $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ 过程^[31,32]. ATLAS 在测量中要求每个缪子的横动量大于 4 GeV/c, 而相干光致产生的缪子对的横动量通常小于 150 MeV/c. 受限于动量分辨的影响, ATLAS 利用正负缪子对的非共面参数 α (acoplanarity) 而不是横动量去研究相干光子-光子相互作用. 非

共面参数 α 的定义为

$$\alpha = 1 - \frac{|\phi^+ - \phi^-|}{\pi},$$

其中, ϕ^\pm 为正负缪子在横平面上的方位角. 相干光致过程产生正负缪子对的 α 越小 (在横平面上的背靠背关联越强), 其横动量越小; α 越大 (在横平面上的背靠背关联越弱), 其横动量越大.

图 4 为 ATLAS 在 5.02 TeV 铅核-铅核碰撞中不同碰撞中心度下相干光致产生的正负缪子对的 α 分布, 每个中心度下的 α 分布在其测量范围内进行了归一处理. 可以明显地看到正负缪子对的 α 分布具有极强的碰撞中心度依赖 (>80% 为超周边和极度偏心碰撞, 0—10% 为极度对心碰撞). 随着重离子间的碰撞参数减小 (越对心), α 分布变得越来越宽. STAR 也观测到了类似现象, 相比于超周边碰撞, 非超周边重离子碰撞中相干光致产生正负电子对的 $\sqrt{\langle p_T^2 \rangle}$ 亦发生了展宽. 由于非超周边重离子碰撞中会产生 QGP, STAR 和 ATLAS 认为相干光致产生正负轻子对横动量 (或者 α) 的展宽可能来自于轻子与 QGP 发生的电磁相互作用. 其中, STAR 认为相干光致产生正负电子对

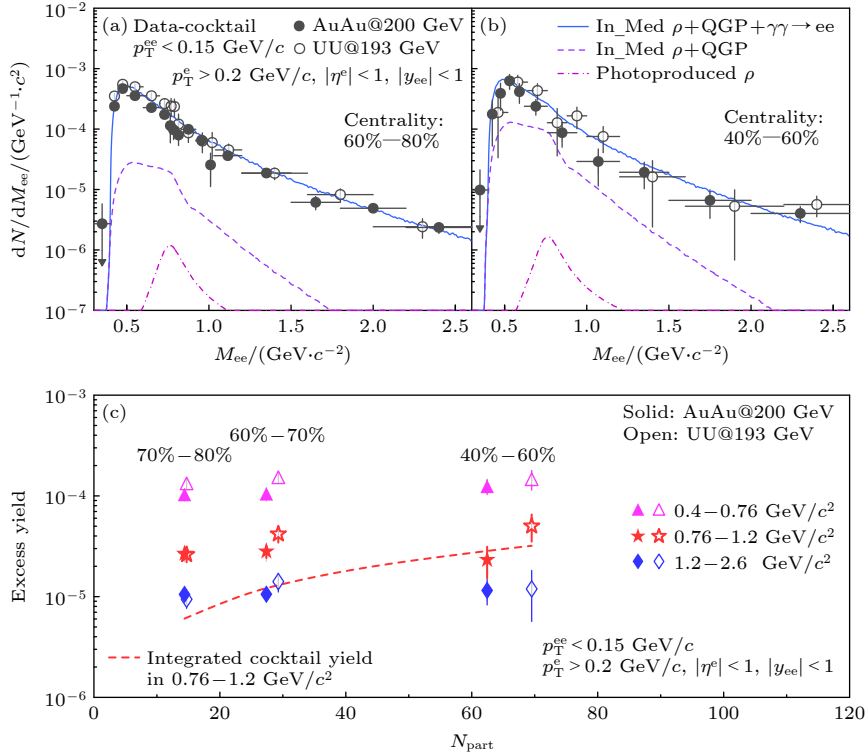


图 3 60%—80% (a) 和 40%—60% (b) 金核-金核和铀核-铀核碰撞中心度事例中低横动量 ($p_T < 0.15$ GeV/c) 正负电子对的不变量增强谱; (c) 金核-金核和铀核-铀核碰撞中不同质量区间增强产额对碰撞中心度的依赖^[33]

Fig. 3. The low- p_T ($p_T < 0.15$ GeV/c) e^+e^- excess mass spectra in 60%–80% (a) and 40%–60% (b) Au + Au and U + U collisions; (c) centrality dependence of integrated excess yields in three different mass regions in Au + Au and U + U collisions^[33].

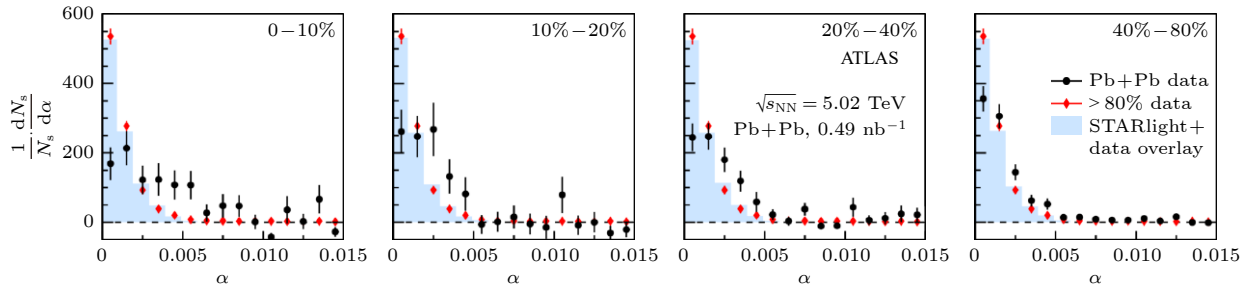


图 4 铅核-铅核碰撞中不同中心度下光子-光子相互作用产生正负缪子对的 α 分布, 每个分布在其测量范围内进行归一化处理^[31]
 Fig. 4. The centrality dependence of α distributions from $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ in Pb + Pb collisions. The α distributions are normalized to unity over their measured ranges^[31].

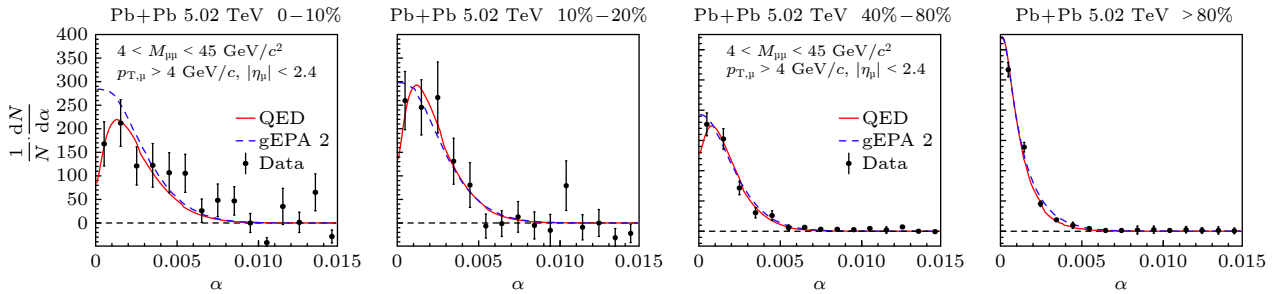


图 5 gEPA 和 QED 方法计算的 5.02 TeV 铅核-铅核碰撞中不同中心度下源自光子-光子相互作用的正负缪子对的 α 分布^[37]
 Fig. 5. The α distributions calculated by gEPA and QED approaches for $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ in Pb + Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ TeV for different centrality classes^[37].

的横动量展宽可能是因为电子在 QGP 残余磁场 (magnetic field trapped in QGP) 中运动发生偏转所导致^[33]. ATLAS 认为光致产生正负缪子对的非共面参数 α 的展宽可能是因为缪子在穿过 QGP 时与里面的部分子发生库仑散射所导致^[31]. 因此, 非超周边碰撞中相干光致产生正负轻子对可能为侦测 QGP 的电磁性质提供一种新途径.

需要特别指出的是, STAR 和 ATLAS 在测量相干光致产生正负轻子对的横动量或者 α 展宽时, 都假定相干光致产生正负轻子对的横动量没有碰撞参数的依赖性. 与此同时, 人们采用的传统等效光子近似的方法^[2,3], 在计算光子运动学分布的时候对整个空间 (横向距离) 进行积分, 亦会丢失光子横动量与碰撞参数关系的信息. 近年来, 人们进行了一系列的新探索, 如利用广义等效光子近似方法 (generalized equivalent photon approximation, gEPA)^[37]、基于量子色动力学因子化方案^[39-42] 或原子核波包假设下的 QED^[43,44] 计算 $\gamma\gamma \rightarrow l^+l^-$ 截面等, 以研究光子横动量对碰撞参数的依赖. 文献^[37] 使用 QED 和 gEPA 方法计算了 5.02 TeV 铅核-铅核碰撞中 $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ 在不同碰撞中心度下正负缪子对的 α 分布, 计算结果与 ATLAS 实验数

据的对比展示在图 5 中. 可以清楚地看到, QED 和 gEPA 方法的计算结果可以系统地描述实验测量结果. QED 和 gEPA 的计算结果表明, STAR 和 ATLAS 观测到的相干光致过程产生正负轻子对的横动量或非共面参数 α 在非超周边碰撞中的展宽主要来自于 $\gamma\gamma \rightarrow l^+l^-$ 对碰撞参数的依赖, 而不是轻子与末态 QGP 的电磁相互作用.

上述实验测量和理论计算对非超周边碰撞中相干光致产生正负轻子对横动量或者 α 分布展宽的不同解释在领域内引起了讨论. 为了研究初态和末态 QGP 效应在非超周边重离子碰撞中相干光致产生正负轻子对横动量或者非共面参数 α 展宽的贡献, 人们需要利用控制变量法在实验测量中分离初态和末态效应. 例如, 在超周边碰撞中研究相干光致产生正负轻子对的碰撞参数依赖性. 因此, 用实验手段控制超周边碰撞的碰撞参数范围必不可少.

3 超周边重离子碰撞中光子-光子相互作用的研究进展

铅核 ($Z_{\text{Pb}} = 82$) 和金核 ($Z_{\text{Au}} = 79$) 带电荷比较多, $Z\alpha_{\text{em}} \approx 0.6$, 其产生的光子通量足够大. 因

此,在一次超周边碰撞中,除了发生相干光致 $\gamma\gamma \rightarrow l^+l^-$ 过程,参与碰撞的原子核还可能会吸收低能光子(金核和铅核吸收光子能量约为 14 MeV),进而被激发到巨偶极共振或者更高激发态^[49].处于激发态的原子核随后会发射一个或者多个中子.中子几乎保持束流的能量和运动方向.原子核激发的概率与碰撞参数的平方成反比 ($P_{\text{excite}} \propto 1/b^2$),即碰撞参数越小,发射中子的概率越大,数目越多.因此利用前向中子多重数可以控制超周边重离子碰撞的碰撞参数范围.图 6 是 STARlight^[50] 计算的 5.02 TeV 铅核-铅核碰撞中 3 种前向中子多重数 0n0n, 0nYn, YnYn ($Y \geq 1$) 对应的碰撞参数范围^[8,50],可以明显得出 $\langle b_{YnYn} \rangle < \langle b_{0nYn} \rangle < \langle b_{0n0n} \rangle$.其中,0n0n 代表超周边碰撞中的两个原子核都不发射中子;0nYn 代表有一个原子核至少发射一个中子;YnYn 代表两个原子核都至少发射一个中子.

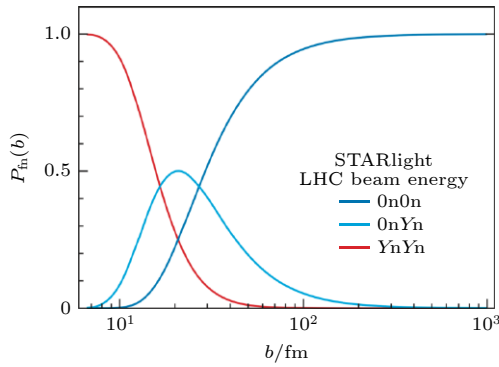


图 6 0n0n, 0nYn, YnYn, (其中 $Y \geq 1$) 对应的碰撞参数范围^[8]

Fig. 6. The impact parameter dependence of the 0n0n, Yn0n, YnYn ($Y \geq 1$) neutron emission scenarios from the STARlight model^[8].

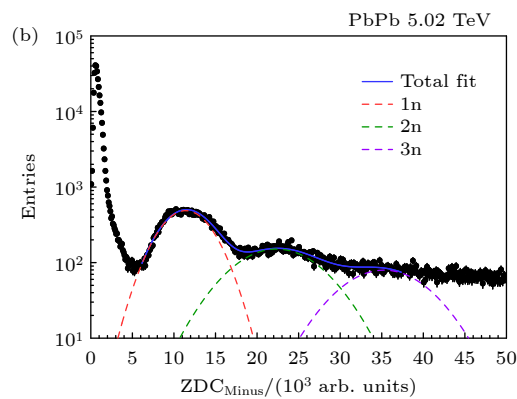
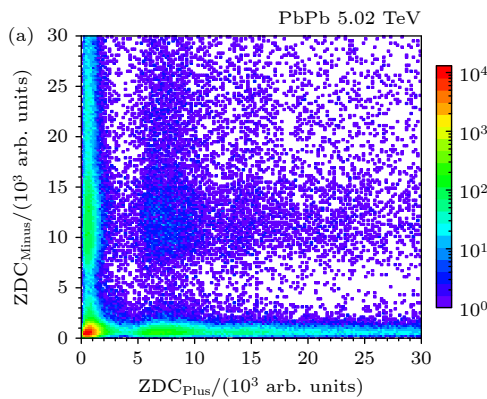


图 7 位于 CMS 两边零度角量器的能量谱关联 (a) 和位于负快度方向零度角量器的能量谱分布 (b)^[35]

Fig. 7. The left panel shows the correlation between energy distributions of the Minus and Plus ZDC detectors, while the right panel shows a multi-Gaussian function fit to the Minus ZDC energy distribution^[35].

CMS 合作组在 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中测量了 $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ 正负缪子对的 α 分布对前向中子多重数的依赖.前向中子由 CMS 的零度角量能器 (ZDC) 测量, CMS ZDC 对单个中子的能量分辨可达到 22%—26%,同时探测效率接近 100%.根据 ZDC 测量的能量分布,如图 7 所示, CMS 将每边的中子数分成 3 类,即 0n, 1n, Xn ($X \geq 2$).随后 CMS 将超周边碰撞事例分配到 0n0n, 0n1n, 0nXn, 1n1n, 1nXn 和 XnXn 6 个前向中子多重数类别里面.

图 8 给出了 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中 $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ 正负缪子对的 α 分布对前向中子多重数的依赖,其中,每个 α 分布在其测量范围内进行归一处理.每个 α 分布都是由一个靠近零的核心 (core) 和一个长长的尾巴 (tail) 组成,核心部分来自于领头阶光子-光子相互作用的贡献,而尾巴部分来自于高阶光子-光子相互作用的贡献,包括末态轻子光子辐射、非相干光子-光子相互作用(至少一个光子来自于原子核内部的质子)、多光子相互作用等^[9].为了研究初态光子横动量对碰撞参数的依赖, CMS 利用经验公式 (1) 把领头阶和高阶光子-光子相互作用对 α 分布的贡献区分开来,如图 8 所示.随后,利用对应的经验公式计算领头阶光致产生正负缪子对的 α 分布的平均值 ($\langle \alpha^{\text{core}} \rangle$).

$$\text{core} : c_1 e^{-\alpha/c_2 + c_3 \alpha^{0.25}},$$

$$\text{tail} : t_1 [1 + (t_2/t_3)\alpha]^{-t_3}, \quad (1)$$

图 9 给出了 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中相干光致产生正负缪子对的 $\langle \alpha^{\text{core}} \rangle$ 对前向中子多重数的依赖,人们可以清楚地看到 $\langle \alpha^{\text{core}} \rangle$ 随着前

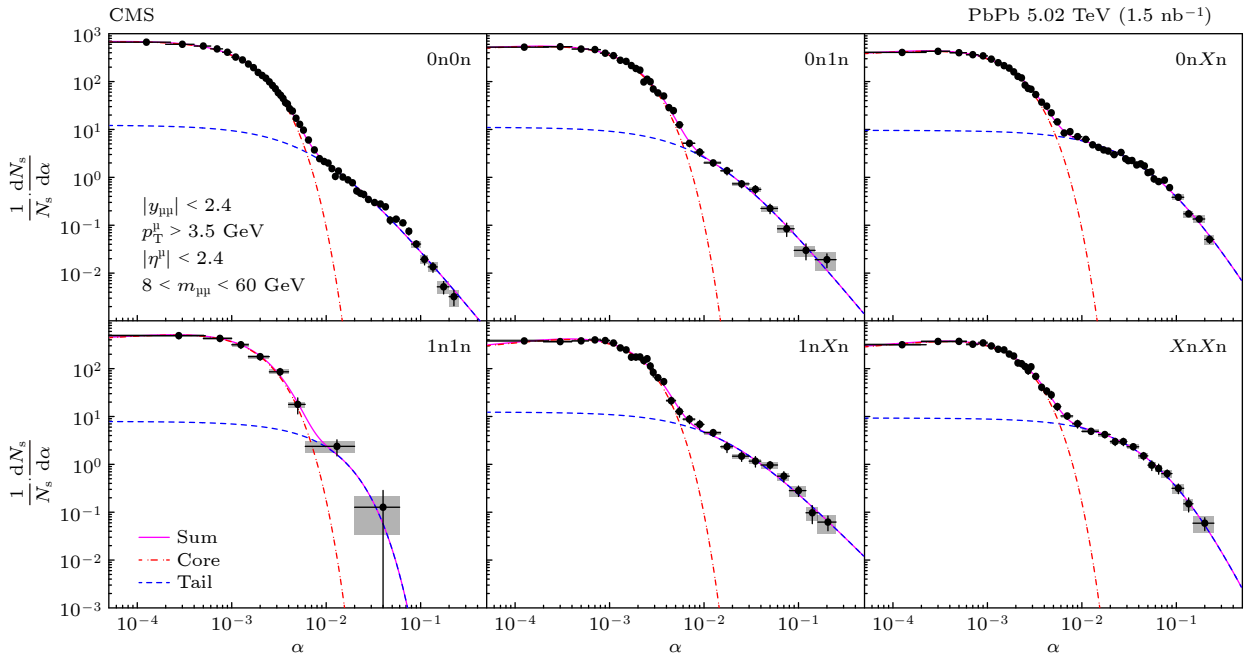

 图 8 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中不同前向中子多重数下正负缪子对的 α 分布 [35]

Fig. 8. Neutron multiplicity dependence of α distributions from $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ in ultraperipheral Pb-Pb collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 5.02$ TeV. The α distributions are normalized to unity integral over their measured ranges [35].

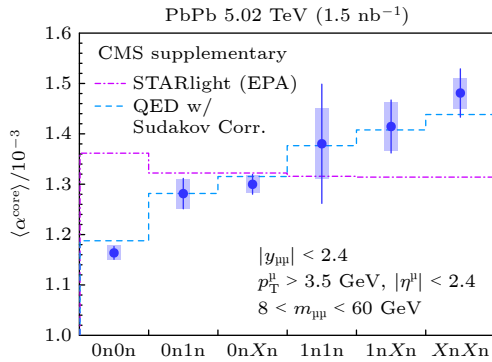

 图 9 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中正负缪子对的 $\langle \alpha^{core} \rangle$ 对前向中子多重数的依赖 [35]

Fig. 9. Neutron multiplicity dependence of $\langle \alpha^{core} \rangle$ of $\mu^+\mu^-$ in ultra-peripheral Pb + Pb collisions [35].

向中子多重数的增加而变大. 此结果证明了光子的横动量随着碰撞参数的减小而变大, 因此, 相干光致产生的正负轻子对的横动量或者非共面参数 α 分布会随着碰撞参数的减小而发生展宽. 上述 CMS 的测量结果表明, 在非超周边重离子碰撞中利用相干光致产生的正负轻子对探测 QGP 电磁性质时, 需要考虑相干光致产生过程对碰撞参数的依赖. CMS 还将其 $\langle \alpha^{core} \rangle$ 的测量结果与 STARlight [50] 和领头阶 QED [51] 理论计算进行对比. 领头阶 QED 计算考虑了等效光子横动量对碰撞参数的依赖, 并修正了末态缪子辐射出低能光子带来的影响, 可

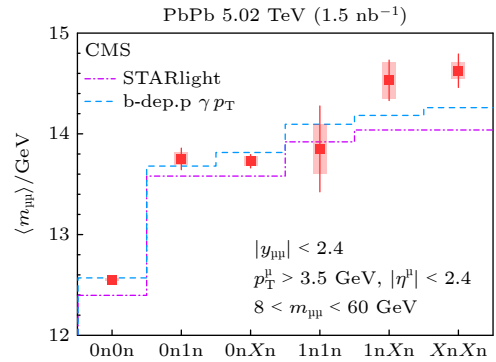

 图 10 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中正负缪子对的 $\langle m_{\mu\mu} \rangle$ 对前向中子多重数的依赖 [35]

Fig. 10. Neutron multiplicity dependence of $\langle m_{\mu\mu} \rangle$ of $\mu^+\mu^-$ in ultra-peripheral Pb + Pb collisions [35].

以很好地描述 $\langle \alpha^{core} \rangle$ 对前向中子多重数的依赖. STARlight 采用传统的等效近似方法对相干光致产生过程进行计算, 不能描述 CMS 的实验测量结果, 因为传统的等效光子近似的方法缺失光子动量与碰撞参数之间的关联.

图 10 给出了 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中光致产生正负缪子对的 $\langle m_{\mu\mu} \rangle$ 对前向中子多重数的依赖. 可以明显看到 $\langle \alpha^{core} \rangle$ 随着前向中子多重数的增加而变大, 且上升的趋势可以被 STARlight [50] 和领头阶 QED [51] 理论计算描述. 正负缪子对的不变质量主要受等效光子的能量影响,

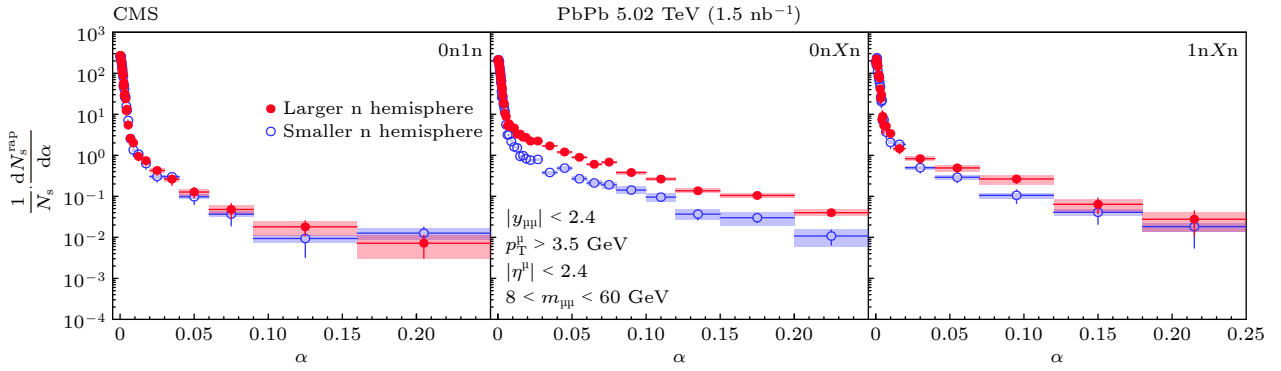

 图 11 3 个具有不对称中子数的前向中子多重事例中光致产生的正负缪子对的 α 分布^[35]

Fig. 11. Acoplanarity distributions of $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ events for three different neutron multiplicity classes with asymmetric neutron numbers^[35].

因此, 该测量结果证明等效光子的能量随着碰撞参数的减小而增大.

此外, ATLAS 和 CMS 还在具有不对称中子数的前向中子多重事例 (如 $0nXn$) 事例中研究了 $\gamma\gamma \rightarrow \mu^+\mu^-$ 正负缪子对的 α 分布对快度的依赖^[35,36]. 图 11 给出了 5.02 TeV 铅核-铅核超周边碰撞中光致产生正负缪子对在 $0n1n$, $0nXn$, $1nXn$ 3 个前向中子多重事例中对快度的依赖. ATLAS 和 CMS 在 $0nXn$ 前向中子多重事例中, 都观测到高阶光子-光子相互作用的贡献在靠近 Xn 比靠近 $0n$ 的快度区间贡献大. 该实验结果说明除了末态轻子光子辐射 (不依赖中子发射) 这个高阶效应, 还应有与前向中子多重数关联的高阶光致产生过程的贡献, 例如非相干光致产生, 即至少有一个光子由原子核内的质子发射.

4 总结和展望

在非超周边重离子碰撞中观测到光子-光子相互作用, 为研究解禁闭物质 QGP 的电磁性质提供了一种新的途径. 通过超周边碰撞中相干光致过程对前向中子多重数依赖的实验测量以及相关理论计算的发展表明, 非超周边重离子碰撞中相干光致产生的正负轻子对横动量或者 α 分布的展宽主要来自于初态光子横动量对碰撞参数的依赖, 对 QGP 电磁性质的探测需要考虑此效应. 结合 RHIC 和 LHC 上实验在未来几年数据采集计划和理论计算的 QED 基准线, 通过精确测量相干光致产生正负轻子对的横动量或者 α 分布对碰撞中心度和事例平面依赖, 有望揭示末态轻子是否受到 QGP 电磁相互作用的影响. 图 12 给出了 STAR 基于 2023

至 2025 年采集的最小无偏金核-金核碰撞数据测量相干光致过程所能达到的实验精度^[38]. 综上, 关于相对论重离子碰撞中相干光致过程对碰撞参数依赖的研究有望推进强场 QED 的研究, 为超强电磁场 QCD 涌现现象的研究提供新的实验和理论支撑.

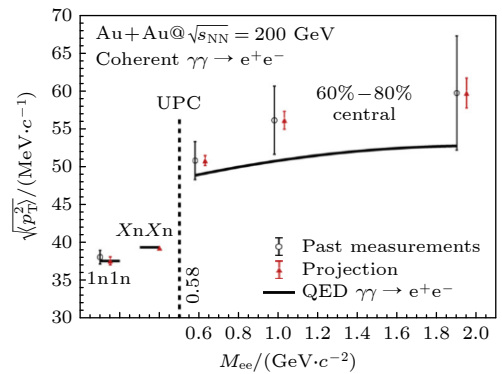


图 12 预计 STAR 于 2023 至 2025 年在 200 GeV 金核-金核偏心 and 超周边碰撞中测量 $\gamma\gamma \rightarrow e^+e^-$ 物理过程可达到的精度^[38]

Fig. 12. Projection for measurements of the $\gamma\gamma \rightarrow e^+e^-$ process in peripheral and ultra-peripheral Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV^[38].

参考文献

- [1] Fermi E 1924 *Z. Phys.* **29** 315
- [2] Williams E J 1934 *Phys. Rev.* **45** 729
- [3] Weizsacker C F von 1934 *Z. Phys.* **88** 612
- [4] Bertulani C A, Baur G 1988 *Phys. Rep.* **163** 299
- [5] Baur G, Hencken K, Trautmann D, Sadovskiy S, Kharlov Y 2002 *Phys. Rep.* **364** 359
- [6] Bertulani C A, Klein S R, Nystrand J 2005 *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **55** 271
- [7] Baltz A J, Baur G, d'Enterria D, Frankfurt L, Gelis F, Guzey V, Hencken K, Kharlov Y, Klasen M, Klein S R, Nikulin V, Nystrand J, Pshenichnov I A, Sadovskiy S, Scapparone E,

- Seger J, Strikman M, Tverskoy M, Vogt R, White S N, Wiedemann U A, Yepes P, Zhalov M 2008 *Phys. Rep.* **458** 1
- [8] Klein S R, Steinberg P 2020 *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **70** 323
- [9] Baur G, Hencken K, Trautmann D 2007 *Phys. Rep.* **453** 1
- [10] STAR Collaboration 2004 *Phys. Rev. C* **70** 031902
- [11] STAR Collaboration 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 052302
- [12] PHENIX Collaboration 2009 *Phys. Lett. B* **679** 321
- [13] ALICE Collaboration 2013 *Eur. Phys. J. C* **73** 2617
- [14] CMS Collaboration 2019 *Phys. Lett. B* **797** 134826
- [15] ATLAS Collaboration 2017 *Nat. Phys.* **13** 852
- [16] ATLAS Collaboration 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 052001
- [17] Bruce R, d'Enterria D, d'Roeck A, Drewes M, Farrar G R, Giammanco A, Gould O, Hajer J, Harland-Lang L, Heisig J, Jowett J M, Kabana S, Krintiras G K, Korsmeier M, Lucente M, Milhano G, Mukherjee S, Niedziela J, Okorokov V A, Rajantie A, Schaumann M 2020 *J. Phys. G* **47** 060501
- [18] STAR Collaboration 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 272302
- [19] CMS Collaboration 2019 *Eur. Phys. J. C* **79** 277
- [20] CMS Collaboration 2023 arXiv: 2303.16984 [nucl-ex]
- [21] CMS Collaboration 2023 *Phys. Rev. Lett.* **131** 051901
- [22] STAR Collaboration 2017 *Phys. Rev. C* **96** 054904
- [23] STAR Collaboration 2023 *Sci. Adv.* **9** eabq3903
- [24] ALICE Collaboration 2013 *Phys. Lett. B* **718** 1273
- [25] ALICE Collaboration 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 232504
- [26] ALICE Collaboration 2019 *Phys. Lett. B* **798** 134926
- [27] ALICE Collaboration 2021 *Phys. Lett. B* **817** 136280
- [28] ALICE Collaboration 2023 arXiv: 2305.06169 [nucl-ex]
- [29] CMS Collaboration 2017 *Phys. Lett. B* **772** 489
- [30] ALICE Collaboration 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 222301
- [31] ATLAS Collaboration 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 212301
- [32] ATLAS Collaboration 2023 *Phys. Rev. C* **107** 054907
- [33] STAR Collaboration 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 132301
- [34] STAR Collaboration 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 132302
- [35] CMS Collaboration 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 122001
- [36] ATLAS Collaboration 2021 *Phys. Rev. C* **104** 024906
- [37] Zha W, Brandenburg J D, Tang Z, Xu Z 2020 *Phys. Lett. B* **800** 135089
- [38] Brandenburg J D, Zha W, Xu Z 2021 *Eur. Phys. J. A* **57** 299
- [39] Li C, Zhou J, Zhou Y 2019 *Phys. Lett. B* **795** 576
- [40] Li C, Zhou J, Zhou Y 2020 *Phys. Rev. D* **101** 034015
- [41] Klein S, Mueller A H, Xiao B, Yuan F 2020 *Phys. Rev. D* **102** 094013
- [42] Xiao B, Yuan F, Zhou J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 232301
- [43] Wang R, Pu S, Wang Q 2021 *Phys. Rev. D* **104** 056011
- [44] Wang R, Lin S, Pu S, Zhang Y, Wang Q 2022 *Phys. Rev. D* **106** 034025
- [45] PU S, Xiao B, Zhou J, Zhou Y 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 072503 (in Chinese) [浦实, 肖博文, 周剑, 周雅瑾 2023 物理学报 **72** 072503]
- [46] Rapp R 2013 *Adv. High Energy Phys.* **2013** 148253
- [47] Zha W, Ruan L, Tang Z, Xu Z, Yang S 2018 *Phys. Lett. B* **781** 182
- [48] Klein S R 2018 *Phys. Rev. C* **97** 054903
- [49] Berman B L, Fultz S C 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** 713
- [50] Klein S R, Nystrand J, Seger J, Gorbunov Y, Butterworth J 2017 *Comput. Phys. Commun.* **212** 258
- [51] Brandenburg J D, Li W, Ruan L, Tang Z, Xu Z, Yang S, Zha W 2020 arXiv: 2006.07365 [hep-ph]

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Impact parameter dependence of photon-photon interactions in relativistic heavy-ion collisions*

Yang Shuai^{1)†} Tang Ze-Bo^{2)‡} Yang Chi^{3)††} Zha Wang-Mei^{2)‡‡}

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education),
Institute of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*State Key Laboratory of Particle Detection and Electronics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

3) (*Key Laboratory of Particle Physics and Particle Irradiation, Ministry of Education, Institute of Frontier and
Interdisciplinary Science, Shandong University, Qingdao 266237, China*)

(Received 6 June 2023; revised manuscript received 11 August 2023)

Abstract

The Lorentz-boosted electromagnetic fields surrounding relativistic heavy ions with large charges can be treated as a flux of linearly polarized quasireal photons, which can interact via the photon-photon scattering to produce lepton antilepton pairs. Those photon-photon interactions can happen even in heavy-ion collisions with hadronic overlap, making an opportunity to probe the electromagnetic properties of the produced deconfined quark-gluon plasma. In this paper, we review the recent experimental progress of the impact parameter dependent photon-photon interactions in heavy-ion collisions, and discuss their essential role in probing the possible electromagnetic properties of quark-gluon plasma produced in hadronic heavy-ion collisions.

Keywords: relativistic heavy-ion collisions, quark gluon plasma, photon-photon interactions, forward neutron tagging, dilepton

PACS: 12.38.Mh, 25.75.Cj

DOI: [10.7498/aps.72.20230948](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230948)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11890713, 12005220, 12075139, 12175223, 12275091) and the Major Project of Basic and Applied Basic Research of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2020B0301030008, 2023A1515010416).

† Corresponding author. E-mail: syang@scnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zbtang@ustc.edu.cn

†† Corresponding author. E-mail: chiyang@sdu.edu.cn

‡‡ Corresponding author. E-mail: first@ustc.edu.cn

相对论重离子碰撞中光子-光子相互作用的碰撞参数依赖性

杨帅 唐泽波 杨驰 查王妹

Impact parameter dependence of photon-photon interactions in relativistic heavy-ion collisions

Yang Shuai Tang Ze-Bo Yang Chi Zha Wang-Mei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 201201 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230948

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230948>

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

相对论强激光与近临界密度等离子体相互作用的质子成像

Proton imaging of relativistic laser-produced near-critical-density plasma

物理学报. 2019, 68(15): 155201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190610>

光子与相对论麦克斯韦分布电子散射的能谱角度谱研究

Photon spectrum and angle distribution for photon scattering with relativistic Maxwellian electrons

物理学报. 2019, 68(1): 015201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181796>

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>

光子与相对论麦克斯韦分布电子散射截面的蒙特卡罗计算方法

Monte Carlo method for computing relativistic photon-Maxwellian electron scattering cross sections

物理学报. 2018, 67(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180932>

微纳光子结构中光子和激子相互作用

Interactions between photons and excitons in micro-nano photonic structures

物理学报. 2019, 68(14): 144201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190269>

相对论皮秒激光在低密度等离子体中直接加速的电子束的横向分布特征研究

Transverse distribution of electron beam produced by relativistic picosecond laser in underdense plasma

物理学报. 2019, 68(19): 195203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191106>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

格点量子色动力学数据的虚部分布与信号改进*

洪浩艺¹⁾²⁾³⁾ 高美琪¹⁾²⁾³⁾ 桂龙成^{4)†} 华俊¹⁾²⁾³⁾梁剑^{1)2)3)‡} 史君^{1)2)3)††} 邹锦涛⁴⁾

1) (华南师范大学, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (华南师范大学量子物质研究院, 广东省核物质科学与技术重点实验室, 广州 510006)

3) (华南师范大学南方核科学计算中心, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

4) (湖南师范大学物理与电子科学学院, 长沙 410000)

(2023 年 5 月 27 日收到; 2023 年 6 月 30 日收到修改稿)

通过分析淬火近似下高统计量格点两点关联函数实部与虚部对规范场采样的分布, 给出了一种可能的实、虚部分布间的定量关系, 并通过计算实部与虚部的非平庸统计相关性对该关系加以验证. 利用该实、虚部的统计相关性, 格点关联函数的方差可以得到约 40% 的改进. 这些结果为进一步理解格点计算中统计误差的物理来源以及发展信号改进方案提供了全新的思路.

关键词: 格点量子色动力学, 样本分布, 分布叠加, 信噪比**PACS:** 11.15.Ha, 12.38.Gc**DOI:** 10.7498/aps.72.20230869

1 引言

在标准模型框架下, 量子色动力学 (QCD) 是描述强相互作用的基本理论. 然而, QCD 在强子能区具有非微扰特性, 传统量子场论中的微扰解法失效, 需要非微扰求解方案. 格点 QCD 是目前最重要的、从第一性原理出发非微扰求解强相互作用的理论方法, 通过将连续的闵氏时空转换到离散的欧氏时空, 使强相互作用问题可以通过大规模数值模拟求解. 目前, 在核物理与强子物理领域, 格点 QCD 计算已逐步成为除实验、理论之外的第三种不可或缺的研究手段^[1], 取得了一系列重要的

研究成果, 如文献 [2–4] 中的工作等. 随着格点 QCD 计算精度的不断提升, 其所需计算资源也快速增长, 大型的格点研究项目所需算力超过千万 CPU 小时, 使得格点 QCD 成为基础研究中消耗计算资源最大的研究方向之一. 这促使格点研究一直积极采用如并行计算、GPU 加速、量子计算等新的硬件技术^[5]; 同时, 格点 QCD 也在不断地探索新的数值算法及数据分析方案, 从算法和理论角度改进计算效率和信噪比. 如近年来 χ QCD 合作组通过分析算符间有限关联长度对格点数值结果信噪比的影响, 提出了集团展开噪声减除方案 (CDER)^[6], 解决了格点计算非连通关联函数的困难, 获得了广泛的应用^[7–9].

* 国家自然科学基金优秀青年科学基金 (批准号: 12222503)、国家自然科学基金 (批准号: 12175073, 12175063)、国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 12105108, 12205106)、广东省基础与应用基础研究基金自然科学基金 (批准号: 2020B0301030008) 和湖南省自然科学基金 (批准号: 2023JJ30380) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: guilongcheng@hnnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: jianliang@scnu.edu.cn

†† 通信作者. E-mail: jun.shi@scnu.edu.cn

格点计算的统计误差本质上来自于对 $SU(3)$ 规范场的有限采样, 反映了物理可观测量对规范场的依赖, 不同可观测量在同一组态样本上的涨落区别很大. 理解格点计算结果在组态采样上的分布, 并进而发展提升信噪比的格点新方法, 是格点研究的基本需求. 此外, 由于格点 QCD 定义于欧氏时空, 在使用格点方法研究有限化学势下的物理问题或者重核问题时, 会遇到著名的“符号问题”. 符号问题的本质也是信噪比问题^①. 对格点误差的研究, 是理解格点计算中符号问题物理根源的重要途径.

格点研究中最常见的计算量为场算符的欧氏时间多点关联函数. 由于 QCD 中的夸克场和胶子场均为复数场, 因而得到的直接计算结果同样为复数, 具有实部和虚部两部分. 容易证明, 若所计算的关联函数在 CH 变换下^[11] 的因子为正, 则计算结果的信号只存在于实部中, 虚部完全为噪声, 在无穷大统计量极限下虚部为零^①, 所以在大部分格点计算中, 数据的虚部被直接丢弃. 然而, 近年来有研究发现, 在有限统计下, 虚部对规范场采样的分布与实部 (信号) 的误差分布相关. 文献 [10,12] 强调了格点关联函数的分布是对数正态 (log-normal) 的, 并以此为出发点, 提出了一种全新的抽取基态能量的统计方法, 并使用玩具模型以及真实格点 QCD 数据对该方法进行了初步验证. 之后, 美国华盛顿大学的格点合作组发展了这一想法^[13,14], 开始同时关注格点数据的虚部与实部分布, 并指出相应的复相位对规范场组态采样的分布与格点计算的误差密切相关. 在此基础上, 提出了在格点关联函数的分析中使用相位重加权的思路提高信噪比.

实际上, 虚部分布与实部分布的相关性是可以理解的, 这是因为它们共同来自于对复值规范场的随机采样. 这样的相关性可以帮助理解信号误差的物理来源, 进而帮助改进计算结果的信噪比. 但是, 已有研究尚未能给出相关性的确切形式以及完整有效的信号改进方案. 本文通过分析具有非零动量的格点两点关联函数实部和虚部对组态采样的分布, 针对实、虚部分布的关系, 给出了一种可以合理解释格点数据的数学描述, 并由此给出了自洽的信噪比改进方案.

2 两点函数的实部与虚部

在格点研究中, 介子两点关联函数是最基本的计算量之一, 形式上可以表达为

$$C_2(t, \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \langle O(x, t) O^\dagger(0, 0) \rangle = \sum_n |A_n|^2 e^{-E_n t}, \quad (1)$$

其中 $O^\dagger(0)$ 代表粒子的产生算符, O 代表粒子的湮灭算符, 等式最右边是关联函数的谱分解形式, 求和范围是所有与算符 O 具有相同量子数的哈密顿量的本征态. 为精确抽取实、虚部的分布, 本文使用由 4000 个纯规范组态构成的统计系综, 格点大小为 $16^3 \times 192$. 价夸克作用量为 clover 类型^[15], 有效夸克质量取作奇异夸克质量. 为更好地确定采样上的分布随虚时 t 的变换, 在计算中使用了非对称的格子^[16], 空间方向格距约为 0.138 fm, 时间方向格距为空间格距的 1/5, 图 1 中横坐标 t/a_t 对应格点间距.

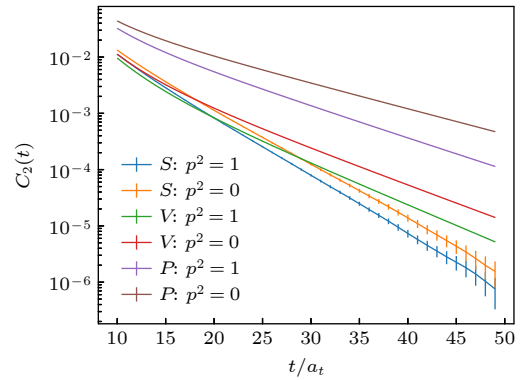


图 1 纵坐标为对数坐标情况下, 不同量子数和不同动量的两点关联函数

Fig. 1. Two-point correlations function with different quantum numbers and momenta when the vertical axis is in log scale.

本文主要关心标量 S , 赝标 P 以及矢量 V 三种量子数. 容易证明, 产生、湮灭算符相同的两点函数的 CH 宇称恒为正, 信号在实部上, 两点函数实部的具体行为如图 1 所示. 可以看到, 标量道的值衰减最快, 对应质量 (能量) 最高, 赝标道的衰减最慢, 对应质量 (能量) 最低. 同时, 带一个单位动

① 若 CH 宇称为负, 则结果在虚部中; 若关联函数不是 CH 变换的本征态, 则实部虚部均有信号. 本文只考虑 CH 为正的情况, 这包括了绝大部分的实际格点计算.

量 ($2\pi/L$, L 为格子空间长度) 的情况比零动量情况衰减更快. 这些都是符合物理实际的.

从图 1 还可以看到, 对于标量情况, 实部的相对误差随时间增大而变大. 尽管图中其他两种量子数的误差由于绝对值太小而不可见, 但可以证明 (Lepage 规则 [17,18]), 除了零动量的赝标道之外, 其他量子数或动量的两点函数的误差都是随时间指数增大的 [6]. 这是一个重要的事实, 一方面给实际格点计算带来了极大的障碍, 但另一方面也给理解误差提供了线索, 这一点之后会讨论. 现在, 同时考虑虚部, 重点关注在不同 t 下 $p^2 = 1$ 的赝标两点函数其实部虚部在规范组态上的分布 (图 2). 通过观察这些分布, 可以总结出如下规律.

i) 实部的分布在小 t , 尤其是在中间 t 时是不对称的, 类似于对数正态分布. 这一点可以通过 (1) 式给出解释: 在信号主导关联函数的情况下, 由于关联函数恒正, 其分布是以零为下限的. 小 t 时两点函数数值较大, 下限对分布形状影响不显著; 中间 t 时两点函数数值接近零, 下限显著影响了分布函数的形状.

ii) 实部的分布在大 t 时趋向于对称的正态分布, 且其统计涨落已经包含了负值. 这说明, 由于相对误差在不断增加, 此时的两点函数已经不再是信号占主导地位了.

iii) 虚部的分布一直都接近对称的、以零为中心的的正态分布. 这符合信号在实部上、虚部在无穷

大统计量极限下为零的理论要求.

iv) 实部和虚部的分布随时间增大都在变窄 (绝对误差在变小). 但虚部分布变窄的速度比实部慢. 具体而言, 在 $t = 0$ 处, 实部分布的宽度近似为 0.1, 而虚部分布的宽度小于 0.01, 相比之下虚部宽度可忽略不计. 而在 $t = 90$ 处, 实部分布与虚部分布的宽度均近似为 1×10^{-6} , 二者可比拟.

上述是针对单位动量赝标情形总结的规律, 实际上, 对其他量子数也同样适用. 为了解释以上关于实部、虚部在组态采样上的分布行为, 本文提出如下的理论假设:

$$R(x) = \int dy S(y-x) [I(y)K(U_y)], \quad (2)$$

即实部分布函数 $R(x)$ 是虚部分布 $I(x)$ 与真实物理信号分布 $S(x)$ 的卷积, 其中 x 和 y 代表规范组态采样, $K(U_x)$ 是一个与规范场 U_x 相关的核函数. 虽然是理论假设, 但由于没有限定核函数的性质, (2) 式具有理论意义上的普适性. 考虑到所有的分布函数均起源于规范组态的采样, 理论上分布之间的关系可以通过具体考虑规范场采样得到. 为虚部分布增加与规范组态直接相关的核函数修正 $K(U_x)$, 相当于把规范场采样的涨落显式包含在公式中.

如果进而假设核函数是平庸的, 则有

$$R(x) = S(x) \otimes I(x), \quad (3)$$

其中 \otimes 表示卷积, 即实部分布是信号分布与虚部分

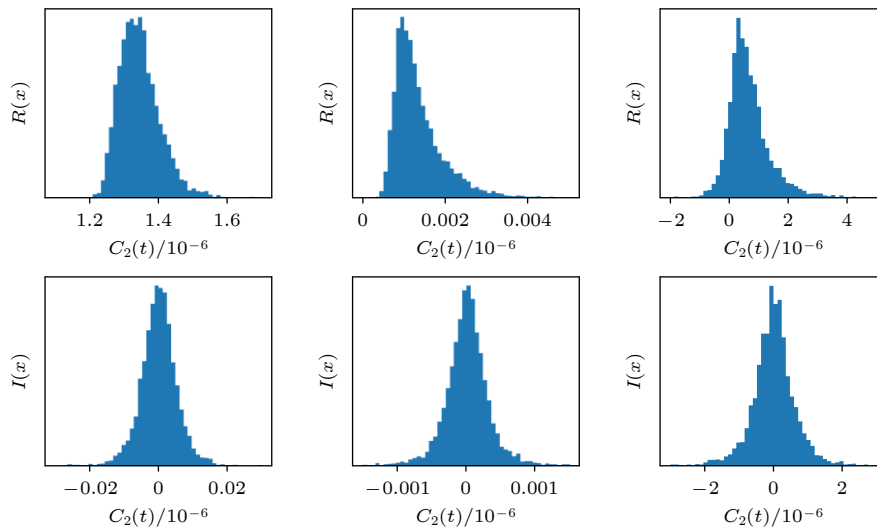


图 2 $p^2 = 1$ 的赝标两点函数其实部 (上半部分) 虚部 (下半部分) 在规范组态上的分布, 从左至右分别对应 $t/a_t = 1, 30$ 和 90 的情况

Fig. 2. The real-part (upper panel) and imaginary-part (lower panel) distributions of the pseudoscalar two-point functions with $p^2 = 1$ over gauge configurations. From left to right, the figures are for $t/a_t = 1, 30$ and 90 , respectively.

布的直接叠加. 物理上, 这里的虚部分布可以理解为(某种)误差分布, 因为我们知道虚部的真值为零, 虚部的统计涨落反映了组态采样的随机性. 从(2)式或(3)式出发, 可以解释所有上述的数值结果. 例如, 在小 t 和中间 t 时, 虚部分布的宽度与实部相比小很多, 那么就有 $R(x) \sim S(x)$, 信号是恒正的, 信号分布是对数正态的, 所以实部也是一样. 而在大 t 时, 信号的值指数衰减到非常趋近于零, 分布接近狄拉克 δ 函数, 虚部相对于信号而言更重要(虚部/信号衰减更慢), 这时有 $R(x) \sim I(x)$, 所以实部的分布趋向于对称, 且出现了负值.

实际上, 还有更多证据支持(3)式. 前面讨论过, 根据 Lepage 规则, 仅有零动量的赝标两点函数的误差不随时间增加而变大. 但同时, 零动量的赝标两点函数还有一个非常重要的性质: 即便是在有限统计下, 其虚部也是严格为零的. 这是一个很有意思的事实, 这说明, 对于零动量赝标情形, $I(x)$ 是以零为中心的 δ 函数, $R(x) = S(x)$. 也就是说, 赝标没有虚部, 其信噪比也不随时间衰减. 这为我们提供了一个自洽的极限例子. 如果考虑信噪比改进的话, 零动量赝标情况就是我们的目标. 当然, (2)式及其特例(3)式的正确性很难从 QCD 第一性原理直接导出. 本文下一部分将进一步通过考虑实、虚部数据的统计相关性具体验证上述公式.

3 实部与虚部分布的统计相关性

两个分布叠加而成的新分布的均值和方差与原始分布的均值和方差具有确定的关系. 如(3)式可以给出

$$E(R) = E(S) + E(I), \quad (4)$$

且

$$V(R) = V(S) + V(I), \quad (5)$$

其中 E 表示分布的均值, V 表示分布的方差. 类似地, 如果把核函数与虚部分布的整体视作一个新的“虚部分布”, 则上述关系对于非平庸核函数的情况依旧成立. 可以看到, 由于方差为非负, 所以 $V(S) \leq V(R)$, 虚部分布的宽度越大, 信号的方差比实部方差减小得越多. 这直接提示我们, 不直接使用实部的结果, 而是通过(2)式或(3)式抽取信号分布, 可以减小格点计算的统计误差. 但是, (4)式告诉我们, 信号分布 $S(x)$ 的均值也同时相对于实部分

布 $R(x)$ 发生了变换. 数值上, 既可以直接通过(5)式计算信号分布的方差, 也可以利用如 Jackknife 重采样方法, 在每个重采样样本中根据(4)式计算 $S(x)$ 的均值并由此估计 $S(x)$ 的分布方差. 这是一个非常重要的验证. 由重采样方法得到的方差直接反映了信号 S 在样本上的分布, 是更准确的估计, 如果两种方法得到的方差不一致, 则说明本文的理论出发点是不合理的. 物理上, 这对应于一个直观的要求: 即如果抽取的新分布 $S(x)$ 的方差相对 $R(x)$ 减小, 那 $S(x)$ 的均值就需要更接近真值. 后文信号部分的所有方差计算均采用重采样方法.

要通过重采样方法得到减小的误差, 就需要在每个重采样点上得到的 $S(x)$ 的均值都更接近于真值. 考虑到 Jackknife 重采样的具体形式, 即在不考虑组态自相关的情况下, 每个重采样样本是样本总体去掉某一个原始样本所得, 于是重采样样本的统计涨落与原样本的涨落是同步的. 进而可以推知, 上述一致性的必要条件是, 作为随机变量, 虚部和实部是统计正相关的. 即如果在某个组态采样上实部大于或小于实部的均值, 那么虚部也会同时倾向于大于或小于虚部的均值. 考虑到虚部的均值非常接近零, 这样在每个采样点上, 实部减去虚部之后都会更接近于实部的均值, 那么实部的方差就会相应地减小.

实际上, 一般地, 假设有两个相关的随机变量, O_1, O_2 , 满足

$$E(O_2) = 0, \quad (6)$$

且

$$C(O_1, O_2) > 0, \quad (7)$$

其中 C 表示协方差:

$$\begin{aligned} C(O_1, O_2) &= E((O_1 - E(O_1))O_2) \\ &= E(O_1 O_2) - E(O_1)E(O_2) \\ &= E(O_1 O_2), \end{aligned} \quad (8)$$

则总会有

$$\begin{aligned} V(O_1 - O_2) &= E((O_1 - O_2)^2) - E^2(O_1 - O_2) \\ &= V(O_1) + V(O_2) - 2E(O_1 O_2) \\ &= V(O_1) + [V(O_2) - 2C(O_1, O_2)], \end{aligned} \quad (9)$$

即如果 O_1, O_2 的协方差大于 O_2 方差的 1/2, 那么新随机变量 $(O_1 - O_2)$ 的方差减小. 进一步考虑 O_1, O_2 的统计相关性

$$R(O_1, O_2) = \frac{C(O_1, O_2)}{\sqrt{V(O_1)V(O_2)}}, \quad (10)$$

可得

$$\begin{aligned} & \frac{V(O_1 - O_2)}{V(O_1)} \\ &= 1 + \frac{\sqrt{V(O_2)}}{\sqrt{V(O_1)}} \left(\frac{\sqrt{V(O_2)}}{\sqrt{V(O_1)}} - 2R(O_1, O_2) \right). \quad (11) \end{aligned}$$

改进的随机变量 $(O_1 - O_2)$ 具有较小方差的条件为 O_1, O_2 的统计相关性强大于 $\frac{\sqrt{V(O_1)}}{\sqrt{V(O_2)}}$ 的一半.

具体到关于关联函数实、虚部相关性的讨论. 取实部为 O_1 , 虚部为 O_2 , 以上公式可直接用于理解和估计误差改进. 例如, 之前讨论过, 在 t 较大时, 虚部的方差与实部相近, 此时有

$$\frac{V(O_1 - O_2)}{V(O_1)} \sim 2 - 2R(O_1, O_2), \quad (12)$$

即误差改进的程度取决于实部和虚部的相关性. 当相关性为 1 时, 实部减虚部不再具有误差, 当相关性为 70% 时, 方差减为原方差的 60%, 当相关性小于 50% 时, 方差不再有改进.

以上讨论详细论述了 (2) 式和 (3) 式的自洽性, 要求关联函数的实部与虚部具有相当的相关性. 为了具体验证 (3) 式, 计算了单位动量赝标关联函数在每个 t 上实部和虚部之间的统计相关性 (如图 3 中蓝色虚线所示). 可以明显看到, 蓝线在零上下涨落, 即在平庸核函数的假设性下, 实部和虚部之间并没有表现出具有统计意义的相关性. 这直接说明, 即便可以解释很多数据现象, (3) 式也不足以反映真实的物理.

那让我们退回到 (2) 式. 前面已经讨论过, 考虑到实、虚部的分布均来自于规范场的采样, 加入跟规范场相关的修正核函数 $K(U_x)$ 之后, (2) 式是具有普适性的. (3) 式作为 (2) 式的简化, 相当于取了完全平庸的核函数, 这目前看来是不够的. 可以进而假设核函数不是完全平庸的, 但仅是符号函数, 只可能改变虚部的符号. 这一点假设实际上是来自于上面对实部虚部相关性的讨论. 相关性要求实部虚部在各自均值上下同步涨落, 又考虑到虚部的均值非常接近零, 那么相关性就要求虚部的正负与实部的涨落方向是倾向于一致的. 据此, 我们对数据进行修正, 改变虚部的符号使其与实部减实部均值的符号相同. 所得结果如图 3 中橙色实线所

示. 可以看到, 这样修正之后, 实部与虚部表现出了较强的关联性 (约 70%).

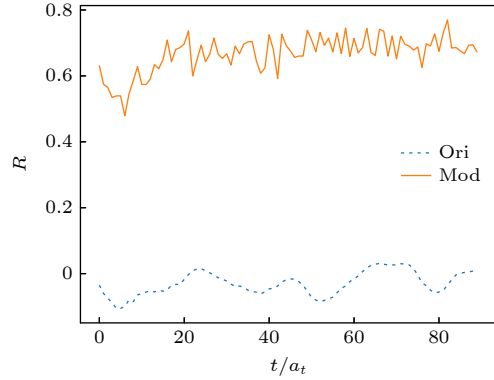


图 3 赝标单位动量两点关联函数实部与虚部的统计相关性. 蓝色虚线表示原始数据, 橙色实线表示符号修正过的数据

Fig. 3. Statistical correlations between the real and imaginary parts of the pseudoscalar two-point correlation function with unit momentum, where the blue dashed line represents the original data, and the orange solid one is for the data after sign-correction.

这里需要着重说明的是, 由于修正虚部符号的准则是使其与实部的涨落方向同步, 图 3 的结果似乎陷入了循环论证. 但实际上, 这里只是修正了虚部涨落的方向, 并没有修正虚部涨落的幅度. 作为对比, 图 4 给出了在修正符号的基础上, 同时对虚部的值进行随机扰动后的关联性结果. 可以看到, 即便是 1% 量级的扰动, 也会使相关性降到 50% 以下. 仅有当扰动弱到 0.1% 量级, 相关性才能恢复到没有扰动的情况. 这说明, 实部和虚部的相关性不仅依赖虚部的符号 (涨落的方向), 也强烈依赖虚部的大小 (涨落的幅度). 换言之, 如果原本实部和虚部之间没有任何联系的话, 仅修正符号是远不足以得到图 3 所示的相关性的, 图 3 展现出的强的关联性是高度非平庸的. 这同时也说明, 假定核函数 $K(U_x)$ 仅是一个符号函数是一个相当经济且有效的假设. 修正符号之后, 实部和虚部之间的相关性 (部分) 显现了. 此外, 值得额外说明的是, 在符号修正过程中, 约 23% 的虚部符号由正改为负, 约 26% 的虚部符号由负改为正, 修正之后的虚部依旧近似为以零为中心的对称分布, 这一点也是一个非常重要的检验. 当然将核函数近似为符号函数的有效性还有待通过分析更多更精确的格点数据进一步验证. 同时, 后续的分析也将对确定核函数的具体形式提供更多的线索及限制.

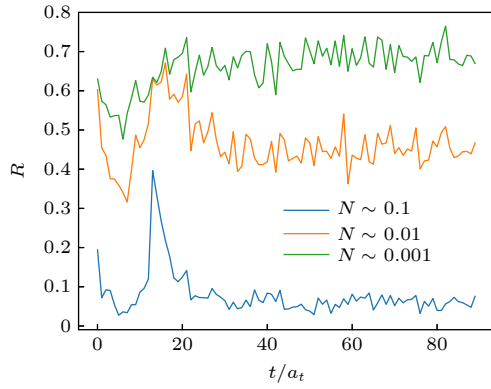


图 4 在修正符号的基础上,考虑对虚部的值进行扰动后的赝标单位动量两点关联函数实部与虚部的统计相关性
Fig. 4. On the basis of sign-correction, the statistical correlations between the real and imaginary parts of the pseudo-scalar two-point correlation function with unit momentum after distortions on the absolute values of the imaginary parts.

4 方差改进结果

在修正虚部符号的情况下,得到实部与虚部具有大约 70% 的统计相关性. 根据前文的讨论,我们期望可以由此改进两点关联函数的信号. 利用 Jackknife 重采样方法,可以在每次重采样时利用 (4) 式计算信号分布 $S(x)$ 的均值,在得到 N ($N = 4000$) 个重采样均值后,可给出抽取的 $S(x)$ 在原始采样数据上的分布方差. 得到的数值结果如图 5 所示,方差的改进为 60%—70%,这与 (12) 式给出的结果一致. 值得注意的是,不同量子数的情况是基本相同的,也就是说,实部与虚部之间的关联是与观测量的具体形式无关的.

目前为止,本文关注的主要是动量为一个格点单位动量的情况. 一个直接的原因是零动量的赝标两点函数是纯实的,无法从虚部入手改进. 实际在物理上,非零动量的两点关联函数的虚部可以看作是规范场采样在空间方向上的涨落导致的. 具体地,动量投影可分为实部虚部两部分 $\sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\mathbf{x}} [\cos(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}) - i\sin(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x})]$. 这里余弦是偶函数,正弦是奇函数,所以如果关联函数在空间上是对称的,则仅有实部留存. 但在有限统计下,规范场在空间正反方向上有涨落,关联函数在空间的正反方向上就不完全对称,导致有限的虚部. 从这个角度出发,我们还计算了不同动量情况下关联函数实部虚部的相关性以及方差改进,矢量道的数值结果如图 6 所示. 可以看到,与动量为 1 的情况类似,对

高动量的两点函数也可以获得类似的改进. 限于目前的数据精度,不同动量情况下方差改进的区别和规律还不明晰.

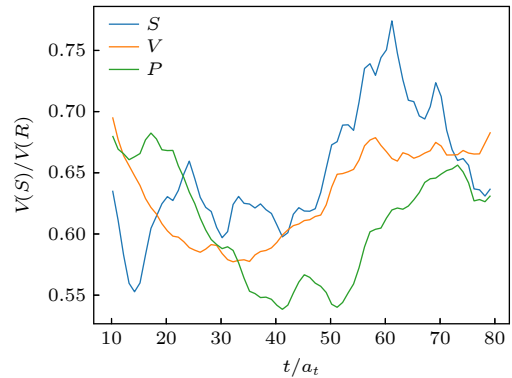


图 5 不同量子数两点关联函数的方差改进
Fig. 5. The variance improvements of two-point correlation functions with different quantum numbers.

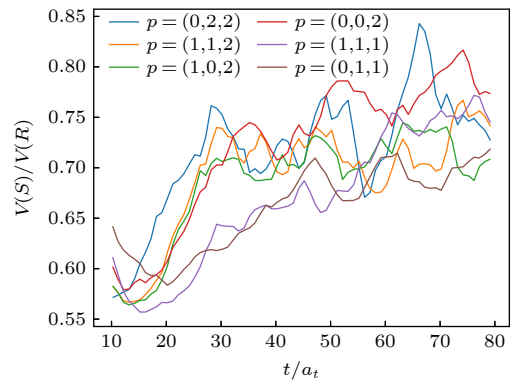


图 6 不同动量矢量两点关联函数的方差改进
Fig. 6. The variance improvements of two-point correlation functions with different momenta.

5 总结与展望

本文通过分析非零动量格点两点关联函数实部与虚部对组态采样的分布,提出了 $R(x) = S(x) \otimes [I(y)K(U_y)]$ 的理论猜想. 并在假设核函数 $K(U_y)$ 仅体现符号修正的前提下,数值验证了实部与虚部的统计相关性,同时说明了该统计相关性是高度非平庸的,体现了实部与虚部的内在关联. 由此,通过抽取真实信号分布 $S(x)$,给出了利用虚部分布改进格点信号的一种可能,数值结果显示,两点关联函数的方差可以降到改进前的约 60%.

虽然目前得到的改进并不十分显著,但原则上,如果可以全知核函数 $K(U_x)$ 的形式,或者对核函数有更强的约束,则可以进一步得到更强的相关

性和更有效的误差改进. 这需要更精确的格点数值结果与先进的算法技术. 本质上, 通过分析有限的实部与虚部分布完全确定积分中的信号分布和核函数属于求逆问题, 是没有唯一解的. 但近年来格点领域出现了很多新的算法 (如文献 [19–21] 等), 可以在考虑先验条件的情况下给出求逆问题的最可能的解. 利用这些算法进一步探索格点数据实部虚部的关系, 帮助理解格点计算的误差, 为解决符号问题提供新的思路, 是我们正在进行中的工作.

感谢美国肯塔基大学刘克非教授和中国科学院理论物理研究所杨一玻研究员的早期工作和讨论. 本工作的数据产生和数据分析分别在湖南师范大学湘江一号计算机群以及华南师范大学南方核科学计算中心完成.

参考文献

- [1] Chen Y, Ding H T, Feng X, et al. 2020 *Modern Physics* **32** 36 (in Chinese) [陈莹, 丁亨通, 冯旭, 等 2020 现代物理知识 **32** 36]
- [2] Chang C C, Nicholson A N, Rinaldi E, et al. 2018 *Nature* **558** 91
- [3] Borsanyi Sz, Fodor Z, Guenther J N, et al. 2021 *Nature* **593** 51
- [4] Yang Y B, Liang J, Bi Y J, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 212001
- [5] Joó Bálint, Jung C, Christ N H, et al. 2019 *Eur. Phys. J. A* **55** 199
- [6] Liu K F, Liang J, Yang Y B 2018 *Phys. Rev. D* **97** 034507
- [7] Liang J, Alexandru A, Draper T, et al. 2023 arXiv: 2301.04331 [hep-lat]
- [8] Liang J, Yang Y B, Draper T, et al. 2018 *Phys. Rev. D* **98** 074505
- [9] Yang Y B, Gong M, Liang J, et al. 2018 *Phys. Rev. D* **98** 074506
- [10] Endres M G, Kaplan D B, Lee J W, et al. 2011 *Phys. Rev. Lett.* **197** 201601
- [11] Gupta R 1997 arXiv: hep-lat/9807028[hep-lat]
- [12] DeGrand T 2012 *Phys. Rev. D* **86** 014512
- [13] Wagman M L, Savage M J 2017 arXiv: 1704.07356[hep-lat]
- [14] Wagman M L 2017 arXiv: 1711.00062[hep-lat]
- [15] Sheikholeslami B, Wohlert R 1985 *Nucl. Phys. B* **259** 572
- [16] Gui L C, Dong J M, Chen Y, et al. 2019 *Phys. Rev. D* **100** 054511
- [17] Parisi G 1984 *Phys. Rep.* **103** 203
- [18] Lepage G P 1989 Proceedings of Theoretical Advanced Study Institute in Elementary Particle Physics (TASI89) Boulder, Colorado, United States, June 5–30, 1989 p97
- [19] Burnier Y, Rothkopf A 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 182003
- [20] Hansen M, Lupo A, Tantalo N 2019 *Phys. Rev. D* **99** 094508
- [21] Chen S Y, Ding H T, Liu F Y, et al. 2021 arXiv: 2110.13521 [hep-lat]

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Imaginary-part distribution and signal improvement of lattice quantum chromodynamics data*

Hong Hao-Yi¹⁾²⁾³⁾ Gao Mei-Qi¹⁾²⁾³⁾ Gui Long-Cheng^{4)†} Hua Jun¹⁾²⁾³⁾
 Liang Jian^{1)2)3)‡} Shi Jun^{1)2)3)††} Zou Jin-Tao⁴⁾

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Nuclear Science, Institute of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

3) (*Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Southern Nuclear Science Computing Center, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

4) (*School of Physics and Electronics, Hunan Normal University, Changsha 410000, China*)

(Received 27 May 2023; revised manuscript received 30 June 2023)

Abstract

Understanding the statistical fluctuations of lattice observables over the gauge configurations is important both theoretically and practically. It provides a physical insight into tackling the famous signal-to-noise problem and the sign problem, and inspires new thoughts in developing methods to improve the signal of lattice calculations. Among many efforts, exploring the relationship between the real part and imaginary part of lattice

numerical result is a new method to understand lattice signal and error, because both the real part and imaginary part come from the same sample of gauge field and their distributions on the gauge sample are related in principle. Specifically, by analyzing the distributions of the real part and imaginary part of quenched lattice two-point function with high statistics and non-zero momentum, this work proposes a possible quantitative formula connecting these two distributions as $R(x) = \int dy S(y-x) [I(y)K(U_y)]$, where $R(x)$ denotes the real-part distribution, $I(x)$ the imaginary-part distribution, $S(x)$ the underlying signal distribution and $K(U_x)$ a kernel function of the gauge field. This theoretical assumption has universal validity because the kernel function contains the gauge field information that determines all the distributions. The formula is numerically verified by calculating the non-trivial statistical correlations of the real part and the kernel-function-modified imaginary part under the further assumption of the kernel function. It is found that the most naïve guess of $K(U_x) = 1$ does not work, which leads to no statistically significant correlation. Meanwhile, the assumption that $K(U_x)$ is only a sign function works well, giving rise to $\sim 70\%$ correlation. Then, through the process of adding random distortions to the absolute values of the imaginary part, it is found that even a slight distortion, of around 1% could result in a significant reduction in the correlation between the real part and imaginary part down to less than 50% or lower. This essentially proves that the observed $\sim 70\%$ correlation is highly non-trivial and the hypothesis that $K(U_x)$ is a sign function captures at least some of the physical mechanisms behind the scenes. Employing this correlation, the variance of lattice results can be improved by around 40%. It is not a significant improvement in practice; however, this study offers an innovative strategy to understand the source of statistical uncertainties in lattice QCD and to improve the signal-to-noise ratio in lattice calculation. Further research on the ability to use machine learning on various more accurate lattice data will hopefully give better instructions and constraint on the form of the kernel function.

Keywords: lattice quantum chromodynamics, sampling distribution, sum of probability distributions, signal-to-noise ratio

PACS: 11.15.Ha, 12.38.Gc

DOI: 10.7498/aps.72.20230869

* Project supported by the Excellent Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12222503), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12175073, 12175063), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12105108, 12205106), the Natural Science Foundation of Basic and Applied Basic Research of Guangdong Province, China (Grant No. 2020B0301030008), and the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2023JJ30380).

† Corresponding author. E-mail: guilongcheng@hunnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: jianliang@scnu.edu.cn

†† Corresponding author. E-mail: jun.shi@scnu.edu.cn

格点量子色动力学的虚部分布与信号改进

洪浩艺 高美琪 桂龙成 华俊 梁剑 史君 邹锦涛

Imaginary-part distribution and signal improvement of lattice quantum chromodynamics data

Hong Hao-Yi Gao Mei-Qi Gui Long-Cheng Hua Jun Liang Jian Shi Jun Zou Jin-Tao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 201101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230869

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230869>

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

格点量子色动力学蒸馏算法中关联函数的计算优化

Calculation and optimization of correlation function in distillation method of lattice quantum chromodynamics

物理学报. 2021, 70(16): 161201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210030>

高斯色噪声激励下非对称双稳耦合网络系统的随机共振

Stochastic resonance in asymmetric bistable coupled network systems driven by Gaussian colored noise

物理学报. 2022, 71(19): 190501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220909>

二维相敏检波器及其在调幅图像解调中应用

Two-dimensional phase sensitive detector and its application to demodulating amplitude modulated image

物理学报. 2019, 68(22): 224204 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190803>

采用反抽运光改善光泵铷原子磁强计的灵敏度

Improving the sensitivity of an optically pumped rubidium atomic magnetometer by using of a repumping laser beam

物理学报. 2021, 70(23): 230702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210920>

单量子点光谱与激子动力学研究进展

Research progress of single quantum-dot spectroscopy and exciton dynamics

物理学报. 2022, 71(6): 067802 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212050>

单光子调制频谱用于量子点荧光寿命动力学的研究

Research on fluorescence lifetime dynamics of quantum dot by single photons modulation spectrum

物理学报. 2019, 68(1): 017803 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181797>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

原子台阶调控二维单晶材料生长*

常超^{1)2)#} 寇金宗^{1)2)#†} 徐小志^{1)2)‡}

1) (华南师范大学物理学院, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

2) (华南师范大学物理前沿科学研究院, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

(2023 年 5 月 29 日收到; 2023 年 6 月 29 日收到修改稿)

自 2004 年成功实现石墨烯的机械剥离制备以来, 二维材料凭借其独特的结构和物理化学性质, 在电子、光电和能源等领域引起了广泛的研究和发展. 在合成方法方面, 科研人员在传统的机械剥离、液相剥离、气相沉积、湿化学合成以及纳米材料相工程等基础上, 进一步推进了原子台阶方法, 用于制备高质量、大尺寸二维单晶材料 (2DSCM). 本文详细介绍了近几年关于原子台阶调控 2DSCM 生长的代表性工作. 首先, 对研究背景进行了简要介绍; 然后, 讨论了 2DSCM 的主要合成方法, 并分析了外延制备非中心对称材料的困难及原因; 之后, 介绍了通过原子台阶辅助制备 2DSCM 的生长机制和最新进展, 分析了原子台阶调控 2DSCM 成核的理论基础及通用性, 并对未来实现大尺寸、方向可控的 2DSCM 的挑战和发展方向进行了预测; 最后, 系统展望了台阶方法制备大尺寸 2DSCM 在未来规模化芯片器件方向的潜在应用.

关键词: 二维单晶材料, 原子台阶, 非中心对称, 外延生长**PACS:** 81.15.-z, 68.55.A-, 81.10.-h, 81.15.Gh**DOI:** 10.7498/aps.72.20230887

1 引言

二维材料是一类以超薄厚度为特征的材料, 通常只有几个原子层的厚度, 2004 年单层石墨烯的发现激发了人们对二维材料的极大研究兴趣^[1]. 从那时起, 人们发现了许多不同种类的二维材料, 包括过渡金属二硫化物 (transition metal dichalcogenides, TMDs), 如 MoS_2 , MoSe_2 , MoTe_2 , WS_2 , WSe_2 , ReS_2 , TaS_2 等^[2,3]、六方氮化硼 (hexagonal boron nitride, hBN)^[4,5]、贵金属二硫化物 (noble metal dichalcogenides, NMDs), 如 PdSe_2 , PtSe_2 , PtS_2 等^[6,7] 和单元素二维材料 (黑磷、碲烯、硅烯、锗 (germanium, Ge) 烯、硼烯等)^[8-10]. 这些典型的二维单晶材料 (two-dimensional single crystal mate-

rials, 2DSCM) 具有长程有序和低缺陷密度等特点, 能够展现出多晶材料中所不具备的特性^[11], 极大地促进了其在电子、光电和能源等领域的广泛关注及应用.

1.1 二维单晶材料性质及应用方向

2DSCM 在不同领域展现出了独特的性质. 在电子设备方面, 通过合成不同类型的 2DSCM, 可以制备各种性能的电子器件, 提高晶体管和光电探测器的性能^[12-18]. 例如, Wang 等^[16] 成功构建了基于 MoS_2 的场效应晶体管, 实现了目前已知的最大迁移率 $102.6 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 及饱和电流 $450 \mu\text{A} \cdot \mu\text{m}^{-1}$. 此外, 石墨烯表现出高载流子迁移率、低接触电阻和低漏电流的特性, 具有替代硅基的潜力^[19,20]. Wang 等^[21] 测试石墨烯室温载流子迁移率为 $(7.0 \pm$

* 广东省自然科学基金杰出青年项目 (批准号: 2020B1515020043)、广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2019A1515110302) 和国家自然科学基金 (批准号: 52102043) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: jinzhongkou@senu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xiaozhixu@senu.edu.cn

$1.0) \times 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, Chen 等 [22] 在温度 4 K 下获得的迁移率达到了 $14700 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. 然而, 传统器件的制备过程中, 衬底在很大程度上会导致二维材料的载流子输运性能下降 [23–25], 高质量的 hBN 可以有效改善这一问题, 并在电学器件领域展现出了巨大的应用前景 [26,27]. Banszerus 等 [28] 通过构建 hBN 和石墨烯的异质结, 实现了低温下迁移率高达 $350000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. 在光电器件方面, 2DSCM 具有高效的光传输和吸收效益, 在光电探测器、太阳能电池和光信号传输领域表现出了卓越的性能 [29–37]. 例如 Novotny 等 [38] 构建了 MoTe_2 与石墨烯的异质结构, 在 -3 V 的偏压下实现了 24 GHz 的带宽, 并在 1300 nm 入射光下实现了高达 $0.2 \text{ A} \cdot \text{W}^{-1}$ 的外部响应率. 此外, 由于 hBN 具有高温和化学稳定性, 其可为基于石墨烯等二维材料的光电设备提供均匀平坦的生长表面 [39]. 2DSCM 在能源领域也有潜在的应用, 例如石墨烯具有高达 $2630 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ 的超高表面积, 有望在电池和超级电容器等储能领域发挥作用 [40], 而单层石墨烯具有比其他碳基材料更高的电容性能 ($21 \text{ } \mu\text{F} \cdot \text{cm}^{-2}$) [41]. 单晶 TMDs 表现出良好的催化活性, 可用于能量转换和存储过程中的析氢反应和氧化还原反应. Li 等 [42] 研究了单层 $2H$ 相 MoS_2 中硫 (sulfur, S) 空位和应变对析氢反应的影响, 实验和理论研究表明, 当 S 空位浓度为 12.5% 时, 氢吸附自由能达到最佳值. 单晶 SnSe 因其超低晶格热导率和超高品质因子在热电材料领域引起了极大的关注, Qin 等 [43] 制备的 p 型 SnSe 在温度 300 K 时展现出增强的功率因子 ($85 \text{ } \mu\text{W} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$), 热电效应品质因子 ZT 达到 1.4 . 此外, 2DSCM 还具有高机械强度和

柔韧性, 例如单晶石墨烯的机械强度比多晶石墨烯高出 50% [44], 研究人员已开发出基于石墨烯的高频谐振器和滤波器 [45–47], 以及具有高灵敏度和低检测限的石墨烯传感器 [48]、TMDs 应变传感器 [49,50] 和以单晶 MoSe_2 为基础的生物传感器 [51,52]. 表 1 总结了 2DSCM 在电子、光电子、催化和储能等领域的广泛应用潜力.

1.2 二维单晶材料的制备方法

单晶材料由于其没有晶界的特性, 可以表现出材料固有的物理化学性质; 同时, 由于单晶材料具备出色的均匀性, 被认为是未来电子学领域中的理想材料. 与半导体工业类似, 制备大尺寸、高质量的单晶对于材料的规模化应用具有重要意义 [53–57]. 从生长原理角度来看, 目前 2DSCM 的制备主要采用以下 2 种方法. 1) 单核生长. 通过控制材料的成核, 使材料从单一晶核逐渐长大, 最后长成大单晶 (图 1(a)). 2) 外延生长. 材料在衬底上可以有多个成核点, 通过控制每个成核点上晶畴的一致取向, 最终将其完美地拼接成单晶薄膜 (图 1(b)).

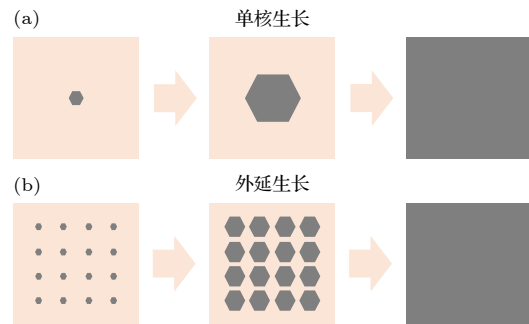


图 1 (a) 单核生长和 (b) 外延生长原理示意图

Fig. 1. Schematic diagrams of (a) single nuclei growth and (b) epitaxial growth.

表 1 二维材料的应用领域及其挑战

Table 1. Applications and future challenges of two-dimensional materials.

领域	应用方向	优势	挑战
电子	晶体管、传感器、存储设备、互连、柔性电子产品、透明导电薄膜	高载流子迁移率、可调带隙、优异的机械和化学稳定性	可扩展性、可重复性、接口工程、设备集成、环境稳定性
光电子	LEDs、太阳能电池、光电探测、光调制器、吸收器	高载流子迁移率、可调带隙、优异的光吸收和发射	可重复性、环境稳定性、界面能源、设备集成、成本
催化	水分解、 CO_2 还原、析氢反应、氧化还原反应	高比表面积、可调电子和化学性能、催化活性	可扩展性、反应稳定性、优异的选择性、成本
储能	电池、超级电容器、燃料电池、电催化、储氢	高表面积、可调的电子和化学性能、优异的电化学性能	可扩展性、反应稳定性、选择性、成本、毒性
传感器	气体、生物、应变传感器	灵敏度高、选择性好、电子和化学性能可调、稳定性好	可扩展性、环境稳定性、选择性、设备集成
生物医学	药物输送、生物传感、组织工程、生物成像	生物相容性、高表面积、可调的电子和化学性质、稳定性	选择性、可扩展性、毒性、生物环境稳定性、监管批准
环境	水处理、空气净化、能量收集	高表面积、电子和化学性能可调、优异的光催化和电催化	可扩展性、环境稳定性、选择性、成本

1.2.1 单核生长

单核生长是指控制材料的成核密度, 在单一位置成核并长大的过程. 为了制备大尺寸的 2DSCM, 首先需要解决的问题是如何在衬底上将成核密度降到最低, 从而仅获得单核的晶圆级材料, 为此可以采用蚀刻衬底或引入氧气等方法^[58–60]; 其次是如何实现单晶的单点成核控制, 在该过程中, 生长较快的晶粒将占据主导地位并实现大尺寸的生长, 而生长速度较慢的晶粒会逐渐消失. 2016 年, 谢晓明团队^[61]设计了一种局域碳源供应方法, 通过在具有溶碳能力的铜镍合金表面形成局部碳浓度过饱和区域, 在 2.5 h 内成功地控制单个形核位点, 制备出了 1.5 inch (1 inch = 2.54 cm) 的单晶石墨烯. 此外, 为了最大程度地减少界面缺陷并确保适当的附着力, 需要选择衬底和目标晶体的晶格常数相似匹配的材料^[62,63]; 同时通过控制温度、压力和气体成分等参数^[64–66], 可以优化目标晶体的生长速率与纯度. 此外, 液态金属和奇异分子也被证明能够降低成核率, 实现单核生长^[67,68].

单核生长具有多项优势, 其能够精确控制材料的厚度和质量, 实现大面积的制备, 这对电子设备和传感器在可扩展性和商业化的应用非常重要. 通过单核生长工艺, 已经成功得到了低缺陷密度和厚度均匀性较高的高质量石墨烯^[69,70]、TMDs^[55,71–74]以及 hBN^[75], 这为实现二维材料的高性能应用提供了良好的基础.

1.2.2 外延生长

外延生长是指生长过程中允许材料在多个位置成核, 并通过控制材料的取向, 使每个位置的晶格取向一致. 随后, 具有一致取向的晶畴会逐渐生长并无缝拼接成单晶薄膜^[53,76]. 外延生长方法已成为生产大面积、高质量 2DSCM 的重要技术, 包括化学气相沉积 (chemical vapor deposition, CVD)、分子束外延 (molecular beam epitaxy, MBE)、金属有机化学气相沉积 (metal-organic chemical vapor deposition, MOCVD)、脉冲激光沉积 (pulsed laser deposition, PLD) 和原子层沉积 (atomic layer deposition, ALD) 等方法. MBE 被证明是一种能够精确控制高质量、大面积二维材料 (如 b-AsP^[77], 硅烯^[78]) 形态的方法, 其性能优于 CVD 法^[79,80]. 然而, MBE 方法需要超高真空、表面洁净度与平整度等苛刻条件, 昂贵的成本使其难以在工业中得到

广泛应用. MOCVD 方法可以制备晶圆级的均匀晶体^[72], 但缺点是晶粒尺寸相对 CVD 法较小^[79]. PLD 法可以精确控制生长厘米级尺寸的 MoS₂^[81]以及晶圆级的 WSe₂^[82], 但会产生团簇颗粒和不均匀厚度等问题. 等离子体增强原子层沉积 (plasma-enhanced ALD, PE-ALD) 方法可以得到大面积的 MoS₂^[83], 但受原子层沉积机制限制会导致沉积速度缓慢. 目前, 自下而上的 CVD 外延方法被认为是最有效的外延技术, 适用于多种材料, 且易于操作, 但缺点是目标晶体可能存在固有缺陷^[84]. 以 CVD 法生长常见的石墨烯、hBN 和 TMDs 等二维材料的主要步骤包括: 1) 前驱气体分子在衬底上分解成活性前体; 2) 活性前体在衬底上聚集和扩散, 与衬底相互作用形成种子并长大成取向一致的二维岛; 3) 多个二维岛无缝拼接成 2DSCM^[65,85–93].

外延生长过程中有几个关键因素: 1) 衬底选择, 衬底在晶体生长方面起着重要作用, 晶格的失配可能会导致缺陷和应变^[94,95]; 2) 温度控制, 温度过高会形成混乱的相, 而温度过低则会导致生长质量下降^[96,97]; 3) 杂质污染, 杂质或污染物会引入缺陷, 破坏晶体的单晶性并影响生长^[60,66,98]; 4) 生长动力学, 生长速率会随时间变化, 影响晶体的边缘形态^[87,88,99,100]; 5) 层厚控制, 层厚差异可能导致转角, 无法获得均匀厚度的单晶^[101–103]; 6) 取向控制, 晶体取向的不一致会导致晶界的存在, 影响晶畴的无缝拼接^[104,105].

外延生长技术的选择也取决于具体应用和所需的材料特性. 例如, CVD 法适用于大规模生产电子和传感应用的二维材料, 如石墨烯、hBN 和 TMDs 薄膜; 而 MBE 方法更适合生产光电应用的二维材料, 如 GaN 和 InGaN 等半导体材料^[106,107]. 结合 CVD 和 MBE 方法, 可进一步优化目标材料的质量和器件性能^[108].

1.3 台阶调控引入的必要性

外延制备 2DSCM 是一个复杂的过程, 除了前面提到的外延工艺, 材料本身的晶格对称性也在外延制备中起着重要作用. 对于中心对称性的材料, 如石墨烯等, 在 Cu(111) 和 Ni(111) 这种衬底上可以实现单一取向 (图 2(a)), 从而制备出大尺寸单晶薄膜, 甚至可以通过逐层外延制备出多达 100000 层的单晶石墨^[109]. 然而, 对于非中心对称的材料, 如 hBN 等, 在常见的 Cu(111) 衬底上会出现 2 个

相差 180° 的取向 (图 2(b)), 这些晶畴在拼接过程中会形成晶界, 影响材料的质量^[110–113]. 因此, 需要找到与这类材料具有相同对称性的衬底. 常用方法是在衬底上构造原子级台阶, 由于上台阶和下台阶之间存在能量差异, 从而可以实现非中心对称二维材料的单一取向.

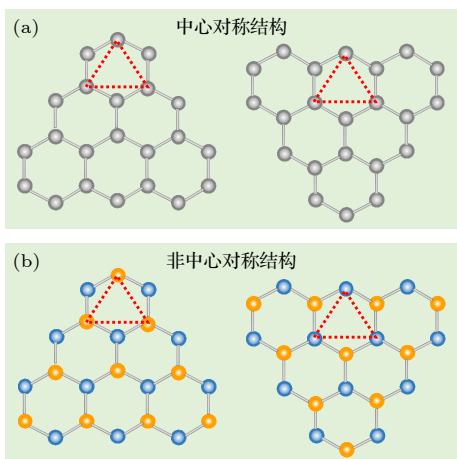


图 2 (a) 中心对称和 (b) 非中心对称二维材料的原子结构示意图. 图 (a) 中灰色圆球对应同种元素原子; 图 (b) 中橙色圆球和蓝色圆球分别对应 2 种元素原子. 中心对称的结构翻转 180° 后可以复原, 非中心对称的结构翻转 180° 后无法复原

Fig. 2. Schematic diagrams of atomic structure of (a) centrosymmetric and (b) non-centrosymmetric 2D materials. Gray balls in Fig. (a) correspond to the same kind of atoms, orange and blue balls in Fig. (b) correspond to two kinds of atoms, respectively. A centrosymmetric structure can be restored after being turned over 180° , and a non-centrosymmetric structure cannot be restored after being turned over 180° .

总的来说, 单核方法可以精确控制生长过程, 获得高质量的晶体. 然而, 该方法的时间和成本较高, 效率较低, 不适用于规模化生产. 相比之下, 外延方法可以合成大面积、均匀的二维材料, 并且能够生长复杂的横向异质结构. 然而, 外延方法需要考虑目标晶体的取向一致性以及衬底的结构匹配性, 另外某些具有特殊物化性质限制的烯类材料更难以进行外延生长^[114–118]. 因此, 进一步开发和改进现有的制备技术对于实现大尺寸、高质量和规模化的 2DSCM 生长具有重要意义.

2 原子台阶制备二维单晶材料生长机制及影响因素

衬底表面的原子台阶在 2DSCM 的生长机制

中起着重要作用, 这是由于原子台阶能够改变能量势垒, 从而影响原子的吸附、扩散和结合行为. 一些研究表明, 衬底表面的原子台阶边缘可以作为二维材料的优先成核位点. 例如, Gao 等^[119]发现在 Ni(111) 衬底生长石墨烯过程中, Ni 原子台阶边缘可以作为碳原子的优先成核位点, 这是因为石墨烯核的临界成核势垒和临界尺寸在衬底台阶边缘附近比在平坦表面上小得多, 因此台阶边缘附近的成核速率更快, 主导了石墨烯的成核过程, 这一发现为在其他金属表面上的石墨烯成核提供了研究思路. Yuan 等^[120]的研究表明, 在沿着 Cu(110) 台阶边缘的石墨烯之字形 (Zigzag, ZZ) 边缘具有最低的形成能, 作者将该现象归因于石墨烯 ZZ 边缘和 Cu(110) 台阶边缘的平直度, 这种形状的匹配使得石墨烯在该方向上的生长更加稳定.

原子台阶边缘的扭结现象会对二维材料的生长模式和表面结构产生影响^[121]. 在这些扭结处, 前驱气体具有优先吸附和结合的活性位点, 从而影响了二维材料的生长行为. 以 hBN 为例, hBN 岛在 Cu 的低指数晶面 (如 (111) 和 (100)) 上存在优势取向, 但会存在反平行排列的现象^[75]; 而在原子台阶边缘的高指数晶面上形成的扭结处, 扭结处消除了大部分低指数晶面的对称性, 使得 hBN 能够在这些高指数晶面上单向排列^[122]. Wang 等^[123]对 30 多个 Cu 高指数晶面进行统计, 发现 hBN 在这些面上都可以呈现出单向排列的现象. Dong 等^[90]通过总结研究发现, 具有三重对称性的二维材料无法在面心立方的任何低指数晶面上实现岛的单向排列, 而像 FeSe 和 ReSe₂ 等具有其他对称性的晶体却可以在低指数晶面实现单向排列. 对于石墨烯来说, 具有单向排列的岛可以沿着错切角大于 10° 的邻位 Ge(001) 衬底的原子台阶边缘成核, 并且在 15° 错切角的 Ge(001) 表面成功合成无缝拼接的石墨烯^[124].

原子台阶还会形成缺陷和杂质, 影响二维材料成核位点的可控性, 进而影响二维材料的质量和结构完整性^[125]. 研究发现对衬底表面进行预处理, 调控杂质含量和表面粗糙度, 如湿法刻蚀和电化学刻蚀等方法, 可以调控石墨烯的成核密度^[98,126], 优化其外延生长. 研究原子台阶与缺陷、杂质之间的关系可以深入了解缺陷工程, 并为后续的无缺陷生长提供指导.

此外, 二维材料边缘与衬底的原子台阶之间存

在相互作用, 这会导致二维材料在生长过程中的结构和流动性发生变化. 例如, 石墨烯锯齿状边缘与 Ge (110) 表面的原子台阶边缘发生化学结合, 从而引起石墨烯岛的单向排列^[127].

当多个台阶合并形成更大的梯田时, 会出现聚束现象, 这种情况下台阶的移动或波动时会导致台阶曲折^[128], 台阶的传递和湮灭等变化会影响生长机制和最终的表面形态. 目前研究发现, 在具有曲折台阶边缘的衬底上可以实现单向对齐排列的 2D 岛^[129], 但也有可能会形成复杂的图案^[130].

除了上述的描述, 台阶的高度会影响原子扩散和结合能力, 台阶之间的宽度与密度则会影响成核位点的密度和生长区域的横向尺寸. 因此, 深入了解台阶的影响机制对于实现大尺寸、高质量 2DSCM 的可控制备具有重要意义.

3 原子台阶生长单晶二维材料

本节将对衬底表面的原子台阶外延生长石墨烯、硼烯、hBN 和 TMDs 等典型的二维材料进行讨论.

3.1 石墨烯

早期在多种衬底上制备的大尺寸石墨烯往往呈现多晶结构, 其中的晶界会降低石墨烯的电学和机械性能^[131–134]. 为了优化实验方案, 研究人员发现过渡金属衬底可以较好地控制石墨烯成核为大尺寸的单晶.

Cu(111) 表面和石墨烯具有良好的匹配性, 晶格失配仅为 4%, 因此经过高温处理后形成的单晶 Cu(111) 成为制备大尺寸单晶石墨烯外延生长的理想衬底^[135]. 此外, Cu 的其他高指数晶面中存在多样的原子排列, 提供了丰富的表面结构, 通过利用不同的晶面指数也可以实现大尺寸单晶石墨烯的生长. 理论计算结果表明, 石墨烯在 Cu 的高指数晶面上成核依然会有单一的最低能态成核位置, 可以实现单向排列的生长^[136], 并且能够在晶界处实现拼接, 形成大尺寸的单晶石墨烯^[137].

2020 年, Wu 等^[138]通过对 Cu 箔进行高温退火, 得到了不同高指数晶面的单晶 Cu 箔, 并在 Cu (112), (113), (133) 和 (223) 这 4 种高指数晶面的原子台阶处制备了单晶石墨烯. 通过扫描电子显微镜 (scanning electron microscope, SEM) 观察, 发

现在不同指数晶面上制备的石墨烯均具有相同的排列方向, 并且具有很高的结晶质量 (图 3). 这项工作为在金属的高指数晶面上实现石墨烯的外延生长提供了重要的研究基础.

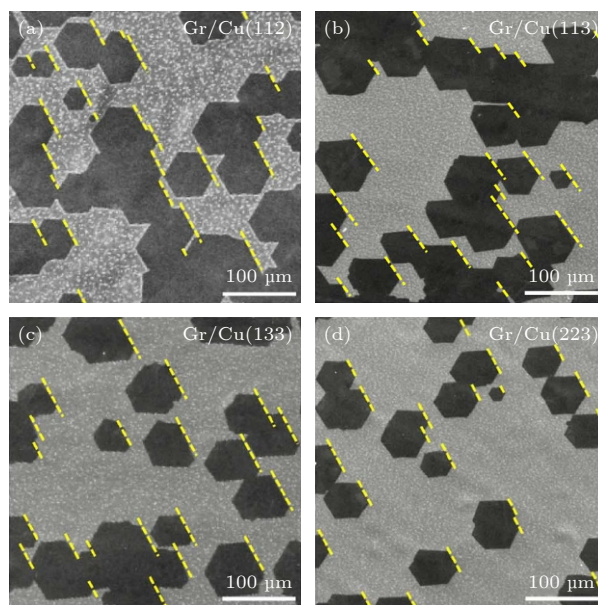


图 3 在 Cu (a) (112), (b) (113), (c) (133) 和 (d) (223) 晶面上制备的单向排列石墨烯 SEM 图^[138]

Fig. 3. SEM images of unidirectionally aligned graphene domains on (a) (112), (b) (113), (c) (133) and (d) (223) facets of Cu^[138].

2020 年, Li 等^[139]利用应变诱导异常晶粒生长的技术制备了高晶面指数的单晶 Cu 箔. 在退火过程中, Cu 箔上的应力导致高指数晶面不断扩展到整个 Cu 箔, 他们在 Cu(311) 晶面制备了单向排列的石墨烯. 2021 年, Tian 课题组^[140]通过在具有边缘切口的多晶 Cu 箔上进行高温退火, 也在不同高指数晶面的单晶 Cu 箔上制备了单向排列的石墨烯. 2022 年的一项工作报道在 Cu(112), Cu(311) 和 Cu(455) 等高指数晶面上获得了更大尺寸的单晶单层石墨烯^[141].

除了金属 Cu, 金属 Ge 也可以制备单晶单层石墨烯. 2014 年, Lee 等^[142]在 Si 晶圆上制备了晶圆级 Ge(110) 面, 并成功合成了大尺寸的单层单晶石墨烯, 研究结果显示 Ge 可以引导石墨烯种子沿着 $[\bar{1}10]$ 方向对齐生长 (图 4(a)); 高分辨透射电子显微镜 (high resolution transmission electron microscopy, HRTEM) 结果表明石墨烯晶畴之间不存在晶界 (图 4(b)). 为了解释石墨烯岛在 Ge(110) 表面单向排列的现象, Dai 等^[127]于 2016 年指出

Ge 衬底表面台阶在石墨烯的单向成核中起关键作用, 原子力显微镜 (atomic force microscope, AFM) 观察结果显示石墨烯从台阶边缘处开始成核, 并沿着同一方向生长 (图 4(c)); 模拟结果表明单层石墨烯的锯齿状边缘与 Ge(110) 表面的 [001] 方向原子台阶具有很强的化学键, 从而使石墨烯晶核沿着 Ge(110) 表面的 $[\bar{1}10]$ 方向生长 (图 4(d), (e)). 值得注意的是, 尽管 Ge 原子台阶的高度达到 0.2 nm, 但对齐的石墨烯之间仍可以无缝拼接成完美的单层单晶石墨烯.

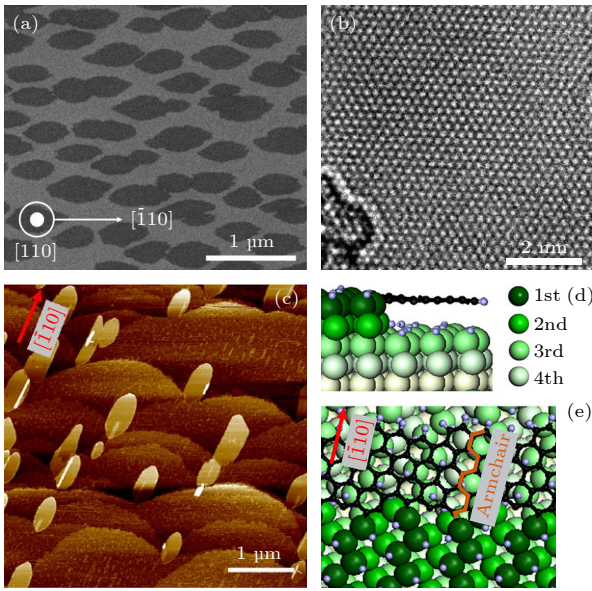


图 4 (a) Ge (110) 面单向排列石墨烯 SEM 图^[142]; (b) 单晶单层石墨烯的 HRTEM 图^[142]; (c) 石墨烯种子沿 Ge (110) 面的 $[\bar{1}10]$ 方向单向排列的 AFM 图^[127]; (d), (e) 石墨烯成核与台阶边缘对接的单向排列示意图^[127]

Fig. 4. (a) SEM image of unidirectional graphene grown on Ge (110) surface^[142]; (b) HRTEM image of single crystal monolayer graphene^[142]; (c) AFM image of graphene seeds aligned along $[\bar{1}10]$ direction of Ge (110) surface^[127]; (d), (e) schematic illustration of graphene nucleation docking with the step edge for unidirectional alignment^[127].

3.2 硼烯

硼烯是由硼的单层原子构成的二维同素异形体, 主要有 sp^2 和 sp^3 两种杂化方式, 并存在多种晶格结构阵列. 在自然界中, 二维硼烯的稳定性较体相单质硼差很多^[143], 因此其外延制备较为困难. 然而, 选用低硼溶解度以及不易形成硼化物的衬底可以使二维硼薄片在衬底上稳定外延生长^[144,145], 此外 Au, Ag 和 Cu 也可以满足二维硼烯的外延生长^[145–148].

2017 年, Chen 等^[149] 成功地利用 MBE 方法在单晶 Ag(110) 表面合成了单原子厚的硼烯纳米带. 通过扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscope, STM) 观察, 发现所有纳米带 (宽度为 (10.3 ± 0.2) nm) 都沿着单晶 Ag(110) 的 $[\bar{1}10]$ 方向生长, 并能穿过表面上的台阶; 结合密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算, 确定硼烯纳米带的结构均由宽度不同的硼链组成, 并由六边形的孔阵列隔开. Wu 等^[150,151] 于 2019 年和 2022 年分别在 Cu (111) 和 Cu (100) 衬底上成功合成了不同结构相的微米级单晶硼烯. 在实验过程中, 硼原子最先在衬底表面的台阶处成核, 并沿着台阶边缘方向快速生长. 通过原位辅助监测薄膜形貌、衍射图案和化学成分, 最终制备了高质量的微米级二维单晶硼烯. 这些实验工作为利用单晶衬底台阶设计生长硼烯及其他烯类材料提供了研究基础.

3.3 六方氮化硼

hBN 与石墨烯的晶格结构相似, 具有较大的带隙和超平的表面^[152,153], 因此被认为是最优秀的二维绝缘体材料^[154,155]. 然而, 传统的制备方法通常得到多晶薄膜, 并且尺寸局限于厘米量级^[46,156,157], 此外, 由于 hBN 成核控制困难, 很难将其从单核长大为大单晶; 在外延生长方面, hBN 具有三重对称, 导致在大多数衬底上会形成反平行结构和孪晶^[75].

2019 年, Wang 等^[158] 通过温度梯度驱动得到了单晶 Cu (110), 利用其 $\langle 211 \rangle$ 方向的台阶与 hBN 具有不同晶格方向匹配的能量差异, 实现了 hBN 晶畴的单一取向生长 (图 5(a)), 并将其无缝拼接为 $10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$ 的单晶薄膜. HRTEM 的结果表明未在 hBN 晶畴之间发现晶界 (图 5(b)), 而经过 H_2 刻蚀后的 hBN 薄膜也没有出现晶界 (图 5(c), (d)). 进一步的理论验证证实, hBN 晶畴中 B-ZZ 和 N-ZZ 与 Cu $\langle 211 \rangle$ 台阶耦合的形成能存在较大差异, 这打破了衬底表面的中心反演对称性, 并消除了 2 个优势取向的能量简并, 从而实现了 hBN 晶畴的同取向生长并无缝拼接为大面积、高质量的单晶薄膜 (图 5(e), (f)).

Cu (111) 表面的六重对称性会导致 hBN 在该表面上出现正反晶畴, 难以实现单一取向. 为了解决这个问题, 2020 年 Chen 等^[130] 在 C 面蓝宝石衬底

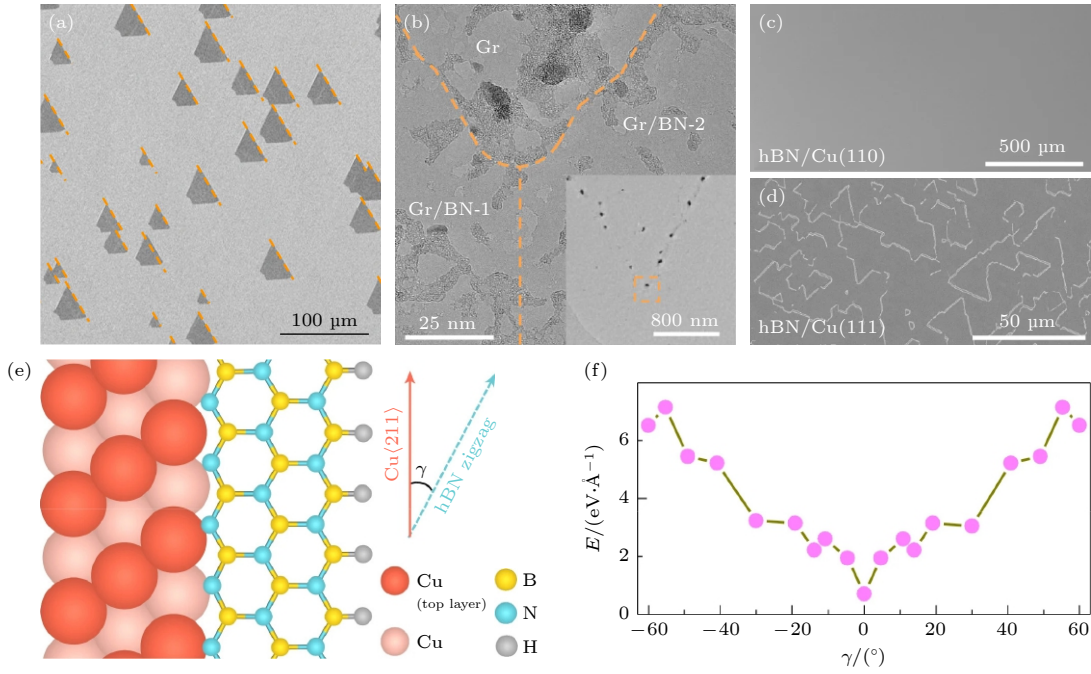


图 5 (a) Cu (110) 面单向排列的 hBN SEM 图; (b) hBN 晶畴拼接处的 TEM 图, 插图为低倍 TEM 图; (c), (d) H_2 在 1000 °C 下经 30 min 刻蚀 Cu(110) 和 Cu(111) 上 hBN 的 SEM 图; (e) hBN 晶格之字形边缘与 Cu(110) 表面的 Cu <211> 方向台阶结合原子示意图; (f) 不同 hBN 边缘与 Cu (110) 表面的 Cu <211> 方向台阶形成能^[158]

Fig. 5. (a) SEM image of as-grown unidirectionally aligned hBN domains on Cu (110) substrate; (b) TEM images of neighboring merged hBN domains, inset shows the same image at a lower magnification; (c), (d) SEM images of hBN film as-grown on Cu(110) and Cu(111) surfaces after H_2 etching at 1,000 °C for 30 min; (e) atomic configuration of a zigzag edge of hBN lattice attaching to the Cu <211> atomic step edge on the vicinal Cu (110) surface; (f) formation energies of various hBN edges attached to a Cu <211> step edge of vicinal Cu(110) substrate^[158].

上通过溅射和热退火的方法制备了富含台阶的单晶 Cu(111) 表面, 并在该面上合成了晶圆级单晶单层 hBN. 实验与理论结果均表明, 顶层 Cu 原子台阶可以打破能量简并, 消除 Cu(111) 中的孪晶, 实现了几乎单向对齐的三角形 hBN 晶畴的无缝拼接.

相比于单晶单层 hBN, 制备单晶多层 hBN 一直是个技术难题. 2022 年, Ma 等^[159] 在 Ni (111) 上解决了此前无法合成多层单晶 hBN 以及层数不可控的问题^[160–164]. 在实验中, hBN 首先在衬底台阶处成核, 并跨越衬底台阶生长, 最终其中一条边与衬底台阶平行; 随后, 衬底上生长的大量多层 hBN 无缝拼接成单晶薄膜. 通过湿法转移技术, 成功制备了尺寸达到 10 cm² 的 hBN 单晶薄膜, AFM 观察显示其高度为 1.2 nm, 再结合其他测试结果证实了该工作合成了 3 层单晶 hBN.

3.4 过渡金属硫族化合物

在合成 TMDs 方面, 科研人员已经进行了大量努力, 其中合成大面积均匀的薄膜一直是一个不断追求的目标. 早期在绝缘衬底上主要利用硫化或

者硒化的方法合成原子级薄层的 TMDs, 但往往会以单层与多层的混合形式存在^[101]. 初始的 CVD 法制备 MoS₂ 时常选用 MoO₃ 和 S 粉作为前驱体, 但是合成的尺寸较小且排列不一致^[165], 存在倾斜和镜像的双生边界现象^[166–168]. 随着工艺参数的改进, CVD 法在 TMDs 的制备过程中得到了进一步优化.

2015 年, Chen 等^[105] 首次报道了在蓝宝石 (0001) 表面的平行台阶边缘附近成功实现了 WSe₂ 的对齐生长. 高温退火后的蓝宝石 (0001) 表面形成了具有 0.2 nm 高度的均匀平行原子台阶, WSe₂ 会沿着台阶的长边方向平行生长, 形成了单向排列的结构, 这项实验证明了衬底台阶在 TMDs 单向排列中起到了关键作用. 但是, 大部分单向排列的 WSe₂ 岛在生长过程中会发生重叠, 导致形成很多晶界, 最终不能无缝拼接成单晶.

2020 年, Yang 等^[169] 通过退火方法制备了具有台阶结构的 Au (111) 表面, 并在这些台阶边缘实现了单向排列的 MoS₂ 晶畴 (图 6(a)), 实验结果表明, 约 98% 的 MoS₂ 晶畴呈单向排列 (图 6(b)). 2023 年, 该团队进一步在 Au(607) 等高指数晶

面上实现了 MoS₂ 晶畴的单向对齐 (图 6(c)—(e)), 并成功制备了单晶薄膜 [170]. 此外, 该团队还于 2022 年通过调节 S/Mo 的比例, 在 Au 衬底上制备了单向排列的 MoS₂ 三角晶畴和 MoS₂ 纳米带 (图 6(f)—(i)) [171].

虽然在 Au 衬底上已经合成了大面积的单晶单层 TMDs 薄膜, 但是, 单晶 Au 衬底价格昂贵, 在一定程度上限制了材料的大规模应用, 因此仍需探索在其他衬底上合成单层单晶 TMDs 的方法. 2020 年, Aljarb 等 [172] 在 β -Ga₂O₃(100) 衬底上利用台阶边缘定向外延机制, 即 MoS₂ 在台阶边缘成核, 成功制备了连续的毫米级 MoS₂ 单晶纳米带. 2021 年, Wang 等 [16] 在特殊角度的蓝宝石 (0001) 衬底上, 成功合成了晶圆级单层单晶 MoS₂, 通过切割蓝宝石衬底并形成特定方向的台阶, 在蓝宝石表面打破对称性, 实现了 MoS₂ 的单向排列且无缝拼接, 最终合成了晶圆级单层单晶 MoS₂ 薄膜. 该工作指出蓝宝石 (0001) 表面的 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 台阶会降低对称性, 沿着 $C/M \langle 11\bar{2}0 \rangle$ 的 2 条台阶具有非常接近的形成能, 会得到反平行排列的 MoS₂ 畴, 不能

实现 MoS₂ 的单向成核. 计算结果表明, 当 S 含量不同时, MoS₂ 具有不同类型的 ZZ-Mo 和 ZZ-S 边缘, 这些边缘与 C/A 蓝宝石 $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ 台阶的形成能存在差异. 在 100% S 源条件下, ZZ-Mo 边缘是最稳定的, 其形成能比相反排列的 ZZ-S₂ 边缘低了 1 eV·nm⁻¹, 这保证了在生长初期 MoS₂ 沿台阶边缘单向成核. 类似的工作也表明在较少的 S 条件下不利于单向成核生长 [173].

同期, 北京大学 Liu 等 [174] 在蓝宝石 (11 $\bar{2}0$) 面利用双耦合机制合成了晶圆级单晶单层 WS₂ 薄膜. 研究团队首先对蓝宝石进行氧气下退火, 形成稳定的平行原子台阶. 这些原子台阶的边缘可打破 A 面蓝宝石的 C₂ 对称性, 并通过双耦合机制引导 WS₂ 晶畴的单向对齐 (图 7(a)). 扫描透射电子显微镜 (scanning transmission electron microscope, STEM) 显示相邻的 WS₂ 晶畴之间是无缝拼接的, 这与单层 WS₂ 的原子相结构一致 (图 7(b), (c)). 光学图像显示在整个 2 inch 的蓝宝石衬底上形成的薄膜具有高度一致的颜色, 表明了薄膜良好的均匀性 (图 7(d)). 在生长初期, WS₂ 以独立晶畴的形

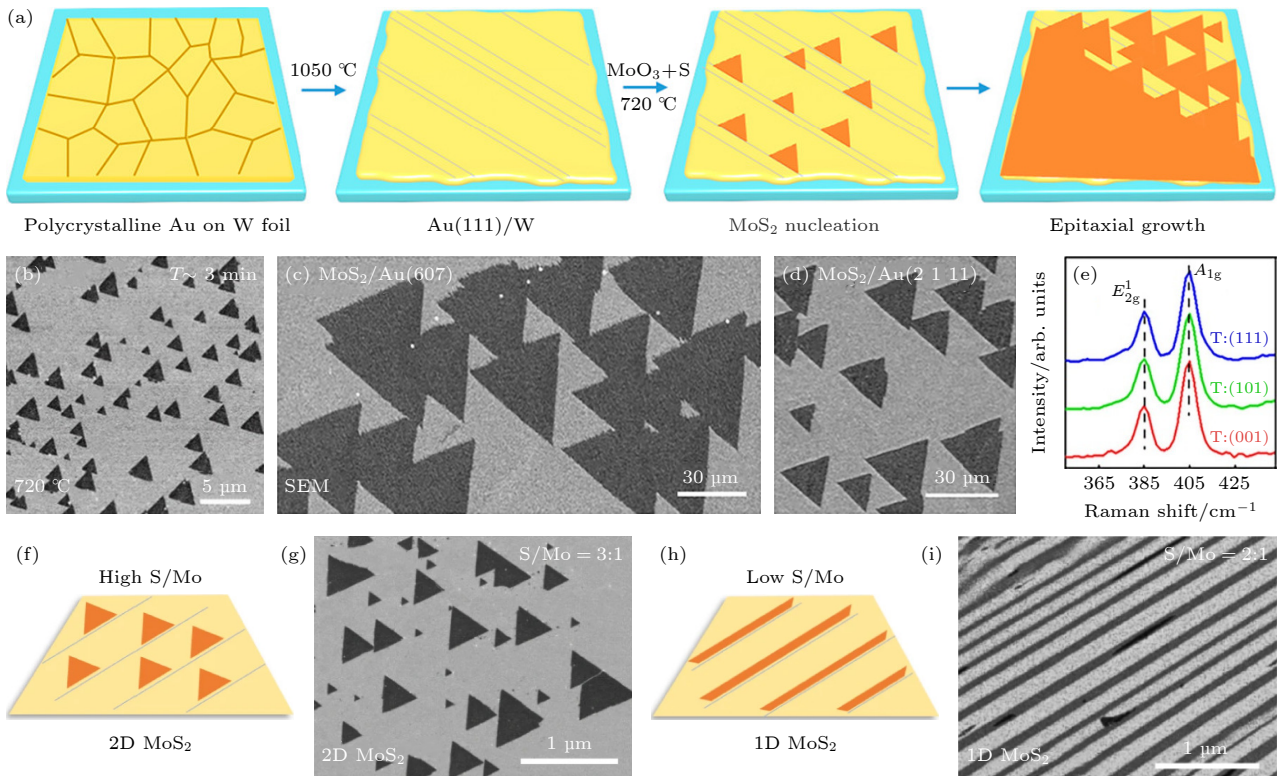


图 6 (a), (b) 制备单晶 Au (111) 的示意图及 CVD 法在其表面生长 MoS₂ 的 SEM 图 [169]; (c)—(e) Au (607), Au (2 1 11) 面的 MoS₂ SEM 以及拉曼图 [170]; (f), (h) MoS₂ 形态变化示意图; (g), (i) 不同 S/Mo 比例下制备的 2D MoS₂ 三角形、1D MoS₂ 纳米带 SEM 图 [171].
Fig. 6. (a), (b) Schematic illustration of processes of single crystal Au(111) formation and SEM image of MoS₂ grown on its surface by CVD method [169]; (c)—(e) SEM images and Raman spectra of MoS₂ on Au (607), Au (2 1 11) facets [170]; (f), (h) schematic illustration of the morphological evolution of MoS₂; (g), (i) SEM images of 2D monolayer MoS₂ triangles and 1D MoS₂ nanoribbons at different S/Mo ratios [171].

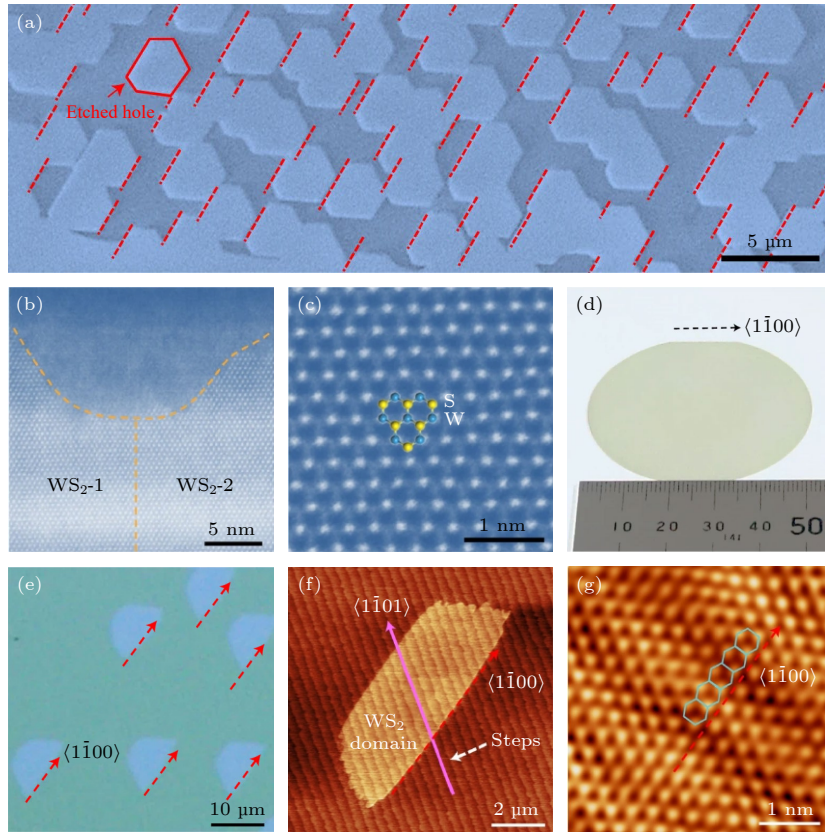


图 7 (a) O_2 刻蚀 WS_2 薄膜后的 SEM 图; (b) 对齐 WS_2 岛拼接区域 STEM 图; (c) WS_2 晶格 STEM 图; (d) 2 inch 单层 WS_2 薄膜光学图; (e) $\alpha-Al_2O_3$ 独立 WS_2 晶畴光学图; (f), (g) WS_2 晶畴 AFM 图, 台阶方向 $\langle 1\bar{1}01 \rangle$ [174]

Fig. 7. (a) SEM image of WS_2 films after O_2 etching; (b) STEM image of merged area of aligned WS_2 islands; (c) STEM image of WS_2 lattice; (d) photograph of 2 inch WS_2 monolayer thin film; (e) optical image of individual WS_2 islands on $\alpha-Al_2O_3$; (f), (g) AFM image of a WS_2 island, the direction of the steps is $\langle 1\bar{1}01 \rangle$ [174].

式存在, 并且呈现取向一致的单向排列 (图 7(e)); AFM 证实了蓝宝石表面的平行台阶边使得 WS_2 晶畴可以单向排列, 同时呈锯齿型的 WS_2 晶畴最长边沿着蓝宝石的 $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ 方向而不是 $\langle 1\bar{1}01 \rangle$ 方向 (图 7(f), (g)).

核位置不同导致的: 即使衬底表面存在台阶, 如果成核同时在台阶边缘和台阶平面上发生, 那么晶畴在平面上由于感受不到上台阶和下台阶的区别, 依然会存在相反的取向 (图 8(a)). 如果在某些条件下能够使成核完全发生在台阶边缘处, 则台阶会限制所有晶畴的取向 (图 8(b)), 从而实现单一取向 [180].

4 原子台阶控制二维材料成核

4.1 原子台阶控制二维材料成核的研究现状

有计算表明, 二维材料的种类超过 1800 种, 其中 99.5% 的材料具有非中心对称的晶体结构 [175]. 在生长非中心对称的二维材料时, 大多数衬底上具有能量简并, 会经常观察到反平行晶畴 [113,176–179]. 在衬底表面上引入原子台阶, 可以打破正反晶畴的能量简并, 这在前面所述的单晶 hBN 和 TMDs 制备过程中得到了验证. 然而, 不同的课题组采用相同的衬底和生长技术得到了截然不同的结果 (表 2、表 3). 这种不一致的结果后来被证实是由材料成

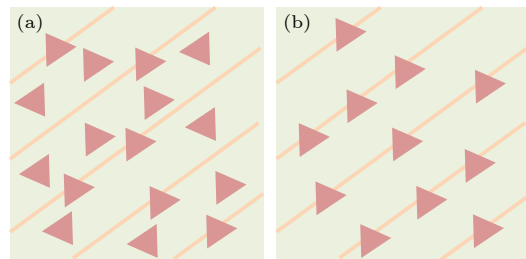


图 8 不同成核位置导致不同生长结果的原理示意图 (a) 同时在台阶边缘和台阶平面处成核会导致正反取向; (b) 只在台阶边缘处成核会导致单一取向

Fig. 8. Schematic diagrams of different growth results at different nucleation positions: (a) Positive and negative orientation when nucleation occur on both step edges and terrace; (b) single orientation when nucleation only occurs on step edges.

表 2 衬底台阶调控 TMDs 生长^[180]
Table 2. Controversial growth behaviours of TMDs on substrates with steps^[180].

Substrate	TMDs	Alignment/%	Symmetry breaking	Ref.
<i>a</i> -Al ₂ O ₃	WS ₂	99	✓	[174]
<i>a</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	86	✓	[181]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	99	✓	[16]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	WS ₂	>90	✓	[182]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	WSe ₂	92	✓	[105]
Au(533)	WS ₂	>90	✓	[183]
Au(111)	MoS ₂	99	✓	[184]
Au(111)	MoS ₂	98	✓	[169]
β-Ga ₂ O ₃	MoS ₂	>90	✓	[172]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	50	×	[177]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	50	×	[178]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	60	×	[173]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	50	×	[185]
<i>c</i> -Al ₂ O ₃	MoS ₂	56	×	[176]
Au(111)	MoS ₂	50	×	[186]
Au(111)	MoS ₂	50	×	[187]
Ag(111)	MoS ₂	50	×	[188]

表 3 衬底台阶调控 hBN 生长^[180]
Table 3. Controversial growth behaviours of hBN on substrates with steps^[180].

Substrate	Alignment/%	Symmetry breaking	Ref.
Cu (110)	99	✓	[158]
Cu (111)	99	✓	[130]
Cu (102) Cu (103)	97	✓	[122]
Cu (110)	50	×	[189]
Cu (110) Cu (111)	21 54	×	[75]
Cu (111)	50	×	[190]
Ni (111)	50	×	[113]
Ni (111)	54	×	[191]
Ge (110)	52	×	[179]

因此, 虽然研究人员发现了台阶可以破坏衬底的中心反演对称性, 但是对于材料成核位点的控制依然需要进一步研究.

4.2 原子台阶通用性控制二维材料成核的原理

为了深入了解外延生长机理的通用性, 以 MoS₂ 在蓝宝石的 *C* 面生长为例, 根据 DFT 分析表明: 1) 原子台阶会破坏衬底的对称性, 这在 TMDs 的外延生长过程中是必不可少的; 2) 退火过程中 TMDs

与未成熟的原子台阶之间发生强相互作用保证了晶粒在台阶附近成核, 从而破坏反平行晶粒的能量简并, 实现 TMDs 的单向对齐.

切割后的蓝宝石表面会布满随机分布的台阶边缘及氧空位 (图 9(a)). 在退火重构的过程中, 绝大部分氧空位会消失, 唯有在未成熟的台阶边缘处存在具有化学活性的氧空位, 可以诱导大多数二维晶粒在台阶边缘附近成核 (图 9(b)), 经过长时间退火, 表面完全重构, 形成平行的台阶边缘 (图 9(c)), 这主要是因为氧空位能使 MoS₂ 与衬底的结合增强 1.0 eV (图 9(d)). 此外, 与无原子台阶的蓝宝石和完全形成原子台阶的蓝宝石相比, MoS₂ 与具有缺陷台阶边缘的蓝宝石的结合力更强. 这种强的结合力使 TMDs 更容易在未成熟的台阶边缘附近成核.

MoS₂ 晶格和具有 *C*₂ 对称性的 *C* 面蓝宝石之间发生耦合的过程中, 会出现 2 个等效反平行的 MoS₂ 晶畴. 当 MoS₂ 在衬底台阶边缘附近开始成核, 就会破坏反平行晶格之间的等效性, 从而使得 MoS₂ 晶粒呈单向排列的趋势. 此外, 计算结果表明, 不同方向的台阶可以破坏 MoS₂ 晶粒的能量简并, 即使台阶方向发生变化, MoS₂ 晶粒仍然能保持最稳定的单向排列. 如图 9(e), (f) 所示, MoS₂ 在 3 个不同方向台阶的对齐的方式是相同的. 在 *c*-Al₂O₃ 上的 WS₂ 和在 *a*-Al₂O₃ 上的 WS₂/MoS₂ 的计算结果显示 (图 10), 2 个反平行 WS₂(MoS₂) 晶粒穿过相邻 *a*-Al₂O₃ 或 *c*-Al₂O₃ 台阶边缘之间的能量差具有相同规律. 经过进一步研究发现, 该机制对制备多种 2DSCM 是通用的, 这为控制台阶形成与材料的成核同步, 以及实现各种 2DSCM 的大规模制备与集成应用拓展了新的研究思路.

5 未来发展方向及挑战

5.1 大范围内均匀、可控方向的原子台阶

虽然原子台阶有助于控制二维晶畴在成核阶段实现单向排列, 但衬底表面的多样性和复杂的台阶结构会显著增加实验的难度. 此外, 陡峭的台阶高度也可能导致材料出现线缺陷或叠层生长的问题^[105,182]. 以 *C* 面蓝宝石衬底为例: 不同的初始切割角度和退火条件 (例如温度和真空度等), 会导致蓝宝石表面形成多种不同高度的台阶 (高度范围 0.22—5.5 nm). 这意味着, 在退火过程中, 一旦条

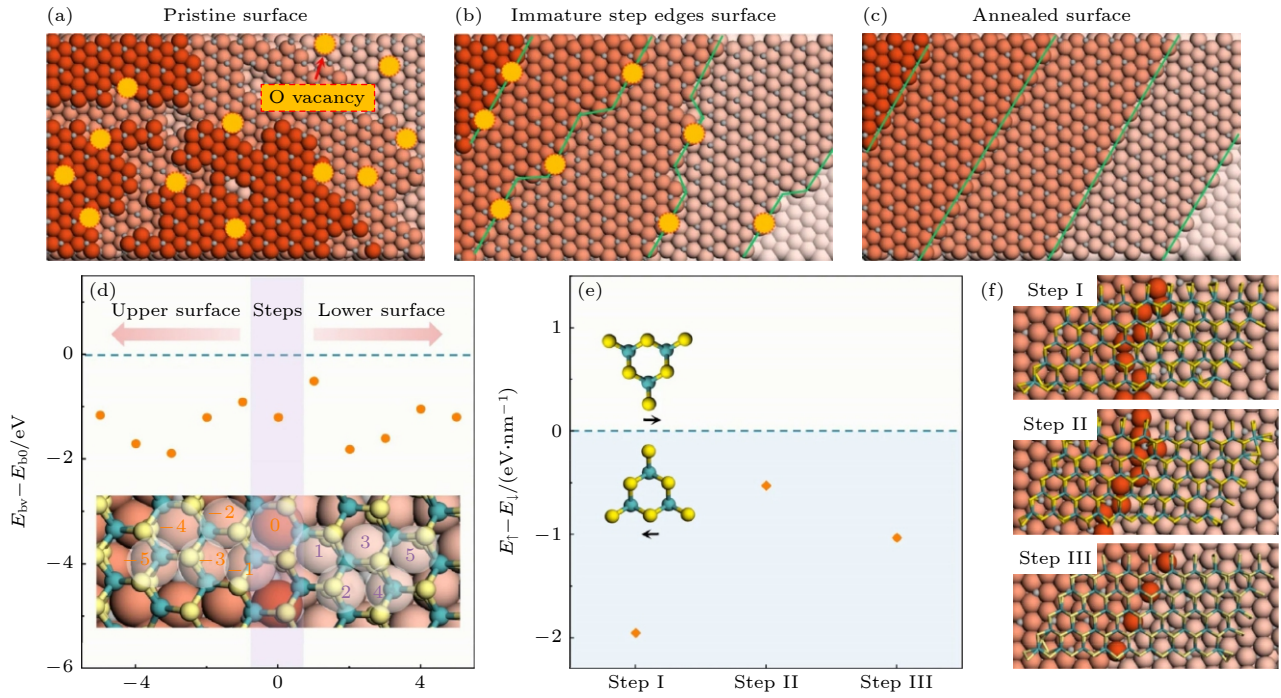


图 9 (a) 退火前 $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面; (b) 退火中 $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面; (c) 长时间退火后 $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面; (d) MoS_2 边缘同氧空位缺陷台阶与无氧空位平行台阶结合能; (e) 反平行 MoS_2 晶畴跨不同台阶 (I, II 和 III) 能量; (f) 3 种台阶边缘处 MoS_2 边缘^[180]

Fig. 9. (a) Original $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ surface before annealing; (b) original $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ surface during annealing; (c) original $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ surface after a long annealing time; (d) binding energy of a MoS_2 grain on a straight parallel step with O vacancy and on a defective step without O vacancy; (e) energy difference between antiparallel MoS_2 grains that cross different types of step edges (I, II and III); (f) MoS_2 grain on three types of step edges^[180].

件有所偏差, 蓝宝石表面很有可能会形成复杂的形貌, 从而增加了 2DSCM 外延生长的难度^[192]. 此外, 即使对衬底表面的结构经过多次特殊加工, 也难以完全避免轻微缺陷的存在, 这导致 2DSCM 难以实现单一取向排列.

5.2 台阶调控制备二维单晶多层材料

多层 TMDs 和多层 hBN 相较于单层具有更多优异的性能^[34,193–195]. 但是, 由于多层种子的形成机制以及横向/纵向生长方式的转变机制尚未明确, 大尺寸多层 2DSCM 的外延生长仍然是一个巨大的挑战. 虽然在 $\text{Cu}(111)$ 表面利用 MBE 方法合成了大尺寸的单晶双层硼烯^[196], 但其成本及复杂性仍需要进一步优化, 至今尚未实现单晶多层 TMDs 薄膜的制备. 虽然台阶边缘可以诱导多层 hBN 和双层 TMDs 的晶粒的单向对齐^[104,159], 但对于制备单晶多层来说, 层数和堆垛方式是 2 个亟需克服的问题, 只有同时解决这些问题, 才有可能制备出多层 2DSCM.

2022 年, Liu 等^[104] 首次报道了厘米级均匀双层 TMDs. 理论计算表明, 更高的原子台阶可以直

接降低双层成核的能量. 该团队通过高温退火方法制备了接近 1.5 nm 高的原子台阶, 使得 MoS_2 在台阶边缘发生双层成核, 并呈单向对齐排列; 随后晶畴会跨越台阶生长, 最终拼接成均匀的双层薄膜. 遗憾的是, 二次谐波结果显示双层 TMDs 同时存在 AA 和 AB 两种不同的堆垛方式, 从而导致不能无缝拼接成完美的双层单晶 TMDs.

5.3 台阶调控制备大面积垂直单晶异质结

制备大面积双层垂直单晶异质是实现双层 2DSCM 的重要目标, 然而目前仍存在诸多困难. 首先, 垂直异质结构通常需要分阶段生长, 这在一定程度上增加了实验难度; 其次, 第 2 层的取向很可能会随机分布, 出现多个转角; 此外, 虽然某些垂直异质结可以通过 CVD 法制备, 但是尺寸通常较小^[197]. 上述限制条件提示我们需要寻找新的方法来实现大面积双层垂直单晶异质结的制备. 幸运的是, 衬底原子台阶调控方法为这一问题带来了希望. 我们推测, 首先需要将第 1 层材料制备成均匀拼的大面积单晶薄膜, 此时由于原子厚度的薄层会继承衬底表面原子台阶的形貌, 衬底台阶同样可以

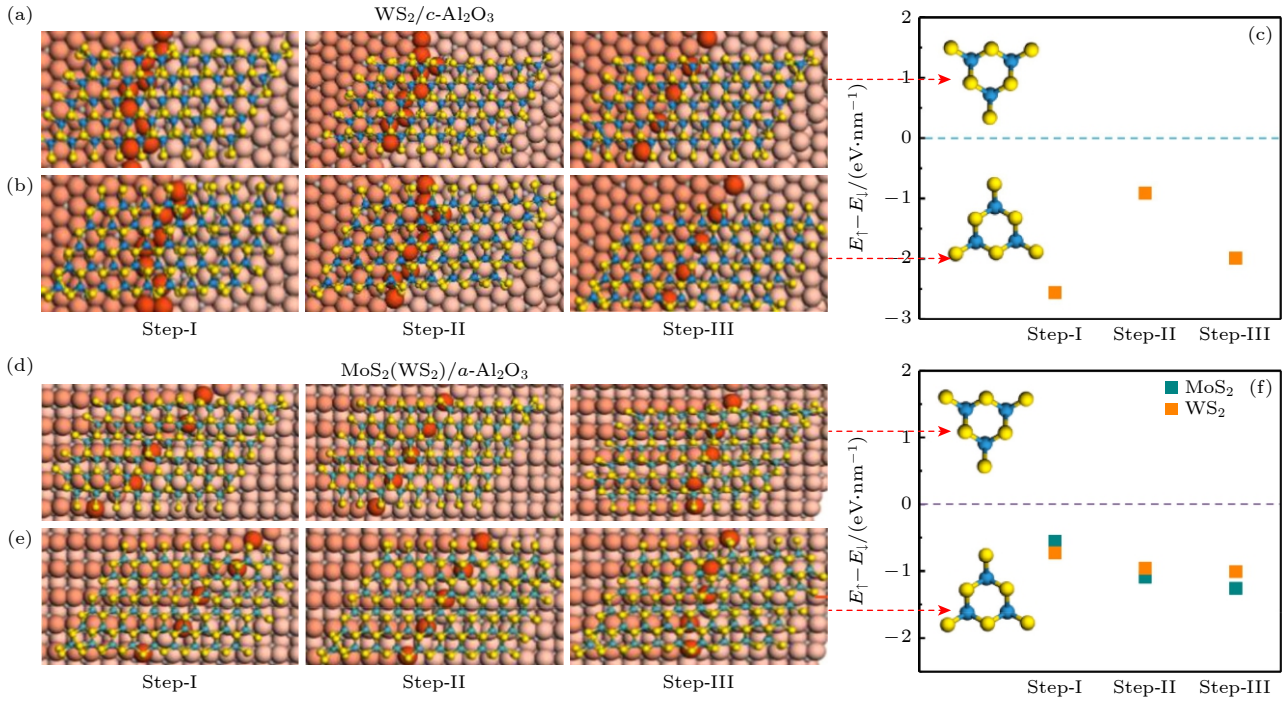


图 10 (a), (b) 穿过 $c\text{-Al}_2\text{O}_3$ 台阶边缘的 2 个反平行 WS₂ 晶粒示意图; (c) 2 个反平行 WS₂ 晶粒之间的能量差; (d), (e) 穿过 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 台阶边缘的 2 个反平行 WS₂(MoS₂) 晶粒示意图; (f) 2 个反平行 WS₂(MoS₂) 晶粒之间的能量差, 沿着不同方向的台阶都是为了打破反平行线^[180]

Fig. 10. (a), (b) Schematic diagrams of two antiparallel WS₂ grains that across a step edge of $c\text{-Al}_2\text{O}_3$; (c) energy difference between two antiparallel WS₂ grains; (d), (e) schematic diagrams of two antiparallel WS₂(MoS₂) grains that across a step edge of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$; (f) energy difference between two antiparallel WS₂(MoS₂) grains. Steps along different directions all work for breaking of antiparallel alignments^[180].

调控第 2 层薄膜的生长取向, 使其与第 1 层保持一致, 从而实现大面积双层垂直单晶异质结的制备。

总的来说, 研究人员对原子台阶调控 2DSCM 的生长机制理解已经变得越来越深刻. 然而, 原子台阶调控二维材料的生长模型仍需进一步完善, 特别是考虑多种条件下的热力学和动力学共同调节的成核过程; 此外, 多层 2DSCM 的合成 (如厚度, 异质结) 仍处于起步阶段, 其形成机制仍需要进一步地探索与优化。

6 总结与展望

本文对原子台阶调控制备 2DSCM 领域的研究进展进行了梳理和总结, 包括主要的合成方法、生长机制、影响因素以及台阶成核理论, 并对未来的发展方向和面临的挑战进行了预测. 原子台阶通过多种机制影响生长: 台阶边缘势垒影响原子吸附、扩散和结合, 而台阶边缘形成的扭结充当了优先的成核位点; 此外, 台阶相互作用、表面宽度和流动性影响二维材料的表面结构, 而台阶的高度、

密度和梯度会动态地影响生长的动力学过程; 控制晶畴成核时间与衬底表面台阶形成时间可以调控二维材料的成核位置. 目前, 基于台阶调控的研究思路已成功实现了非中心对称二维单晶 TMDs 的通用制备. 未来预期利用台阶辅助的大规模生产方法, 将有望推进电子、光电和储能的高效发展, 实现高质量 2DSCM 的工业化应用. 此外, 通过利用台阶来操纵生长条件和设计策略, 可以合成具有独特结构的材料, 构建大面积定制型的叠层垂直异质结构, 为全二维电子器件在多领域中的应用奠定基础。

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D E, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Manzeli S, Ovchinnikov D, Pasquier D, Yazyev O V, Kis A 2017 *Nat. Rev. Mater.* **2** 17033
- [3] Huang H, Zha J, Li S, Tan C 2022 *Chinese Chem. Lett.* **33** 163
- [4] Zhang J, Tan B, Zhang X, Gao F, Hu Y, Wang L, Duan X, Yang Z, Hu P 2021 *Adv. Mater.* **33** 2000769

- [5] Caldwell J D, Aharonovich I, Cassabois G, Edgar J H, Gil B, Basov D N 2019 *Nat. Rev. Mater.* **4** 552
- [6] Miró P, Ghorbani-Asl M, Heine T 2014 *Angew. Chem. Int. Edit.* **53** 3015
- [7] Pi L, Li L, Liu K, Zhang Q, Li H, Zhai T 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1904932
- [8] Si J, Yu J, Shen Y, Zeng M, Fu L 2021 *Small Struct.* **2** 2000101
- [9] Lin Z, Wang C, Chai Y 2020 *Small* **16** 2003319
- [10] Mannix A J, Zhang Z, Guisinger N P, Yakobson B I, Hersam M C 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 444
- [11] Tan C, Cao X, Wu X J, He Q, Yang J, Zhang X, Chen J, Zhao W, Han S, Nam G H 2017 *Chem. Rev.* **117** 6225
- [12] Koman V B, Liu P, Kozawa D, Liu A T, Cottrill A L, Son Y, Lebron J A, Strano M S 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 819
- [13] Zhao C, Tan C, Lien D-H, Song X, Amani M, Hettick M, Nyein H Y Y, Yuan Z, Li L, Scott M C, Javey A 2020 *Nat. Nanotechnol.* **15** 53
- [14] Zhu W, Low T, Wang H, Ye P, Duan X 2019 *2D Mater.* **6** 032004
- [15] Conti S, Pimpolari L, Calabrese G, Worsley R, Majee S, Polyushkin D K, Paur M, Pace S, Keum D H, Fabbri F, Iannaccone G, Macucci M, Coletti C, Mueller T, Casiraghi C, Fiori G 2020 *Nat. Commun.* **11** 3566
- [16] Li T, Guo W, Ma L, Li W, Yu Z, Han Z, Gao S, Liu L, Fan D, Wang Z, Yang Y, Lin W, Luo Z, Chen X, Dai N, Tu X, Pan D, Yao Y, Wang P, Nie Y, Wang J, Shi Y, Wang X 2021 *Nat. Nanotechnol.* **16** 1201
- [17] Kim K S, Lee D, Chang C S, Seo S, Hu Y, Cha S, Kim H, Shin J, Lee J H, Lee S 2023 *Nature* **614** 88
- [18] Wang J, Huang C, You Y, Guo Q, Xue G, Hong H, Jiao Q, Yu D, Du L, Zhao Y, Liu K 2022 *J. Phys. Chem. C* **126** 3797
- [19] Akinwande D, Huyghebaert C, Wang C H, Serna M I, Goossens S, Li L J, Wong H S P, Koppens F H 2019 *Nature* **573** 507
- [20] Kim K, Choi J Y, Kim T, Cho S H, Chung H J 2011 *Nature* **479** 338
- [21] Wang M, Huang M, Luo D, Li Y, Choe M, Seong W K, Kim M, Jin S, Wang M, Chatterjee S 2021 *Nature* **596** 519
- [22] Chen Z, Xie C, Wang W, Zhao J, Liu B, Shan J, Wang X, Hong M, Lin L, Huang L 2021 *Sci. Adv.* **7** eabk0115
- [23] Shi Z, Wang X, Li Q, Yang P, Lu G, Jiang R, Wang H, Zhang C, Cong C, Liu Z, Wu T, Wang H, Yu Q, Xie X 2020 *Nat. Commun.* **11** 849
- [24] Chen J, Wen Y, Guo Y, Wu B, Huang L, Xue Y, Geng D, Wang D, Yu G, Liu Y 2011 *J. Am. Chem. Soc.* **133** 17548
- [25] Wang H, Xue X, Jiang Q, Wang Y, Geng D, Cai L, Wang L, Xu Z, Yu G 2019 *J. Am. Chem. Soc.* **141** 11004
- [26] Yazyev O V, Louie S G 2010 *Nat. Mater.* **9** 806
- [27] Hao Y, Bharathi M S, Wang L, Liu Y, Chen H, Nie S, Wang X, Chou H, Tan C, Fallahazad B, Ramanarayan H, Magnuson C W, Tutuc E, Yakobson B I, McCarty K F, Zhang Y W, Kim P, Hone J, Colombo L, Ruoff R S 2013 *Science* **342** 720
- [28] Banszerus L, Schmitz M, Engels S, Dauber J, Oellers M, Haupt F, Watanabe K, Taniguchi T, Beschoten B, Stampfer C 2015 *Sci. Adv.* **1** e1500222
- [29] 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
- [30] Mak K F, Shan J 2016 *Nat. Photonics* **10** 216
- [31] Lv L, Zhuge F, Xie F, Xiong X, Zhang Q, Zhang N, Huang Y, Zhai T 2019 *Nat. Commun.* **10** 3331
- [32] Li J, Ding Y, Zhang D W, Zhou P 2019 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **35** 1058
- [33] Yin J, Tan Z, Hong H, Wu J, Yuan H, Liu Y, Chen C, Tan C, Yao F, Li T, Chen Y, Liu Z, Liu K, Peng H 2018 *Nat. Commun.* **9** 3311
- [34] Zhou X, Cheng J, Zhou Y, Cao T, Hong H, Liao Z, Wu S, Peng H, Liu K, Yu D 2015 *J. Am. Chem. Soc.* **137** 7994
- [35] 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, Bai X, Liu Z 2020 *Nat. Nanotechnol.* **15** 987
- [36] Chen K, Zhou X, Cheng X, Qiao R, Cheng Y, Liu C, Xie Y, Yu W, Yao F, Sun Z, Wang F, Liu K, Liu Z 2019 *Nat. Photonics* **13** 754
- [37] Hong H, Wu C, Zhao Z, Zuo Y, Wang J, Liu C, Zhang J, Wang F, Feng J, Shen H, Yin J, Wu Y, Zhao Y, Liu K, Gao P, Meng S, Wu S, Sun Z, Liu K, Xiong J 2021 *Nat. Photonics* **15** 510
- [38] Flöry N, Ma P, Salamin Y, Emboras A, Taniguchi T, Watanabe K, Leuthold J, Novotny L 2020 *Nat. Nanotechnol.* **15** 118
- [39] Dean C R, Young A F, Meric I, Lee C, Wang L, Sorgenfrei S, Watanabe K, Taniguchi T, Kim P, Shepard K L 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 722
- [40] El-Kady M F, Shao Y, Kaner R B 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16033
- [41] Xia J, Chen F, Li J, Tao N 2009 *Nat. Nanotechnol.* **4** 505
- [42] Li H, Tsai C, Koh A L, Cai L, Contryman A W, Fragapane A H, Zhao J, Han H S, Manoharan H C, Abild-Pedersen F 2016 *Nat. Mater.* **15** 48
- [43] Qin B, Wang D, Hong T, Wang Y, Liu D, Wang Z, Gao X, Ge Z H, Zhao L D 2023 *Nat. Commun.* **14** 1366
- [44] Kotakoski J, Meyer J C 2012 *Phys. Rev. B* **85** 195447
- [45] Lee M, Renshof J R, van Zeggeren K J, Houmes M J, Lesne E, Šiškins M, van Thiel T C, Guis R H, van Blankenstein M R, Verbiest G J 2022 *Adv. Mater.* **34** 2204630
- [46] Liu Z, Ma L, Shi G, Zhou W, Gong Y, Lei S, Yang X, Zhang J, Yu J, Hackenberg K P 2013 *Nat. Nanotechnol.* **8** 119
- [47] Ye F, Lee J, Feng P X L 2018 *Nano Lett.* **18** 1678
- [48] Mehmood A, Mubarak N, Khalid M, Walvekar R, Abdullah E, Siddiqui M, Baloch H A, Nizamuddin S, Mazari S 2020 *J. Environ. Chem. Eng.* **8** 103743
- [49] Jiang H, Zheng L, Liu Z, Wang X 2020 *InfoMat* **2** 1077
- [50] Liang J, Wang J, Zhang Z, Su Y, Guo Y, Qiao R, Song P, Gao P, Zhao Y, Jiao Q, Wu S, Sun Z, Yu D, Liu K 2019 *Adv. Mater.* **31** 1808160
- [51] Liu T, Cui Z, Li X, Cui H, Liu Y 2020 *ACS Omega* **6** 988
- [52] Jiang F, Zhao W S, Zhang J 2020 *Microelectron. Eng.* **225** 111279
- [53] Xu X Z, Zhang X W, Wang R, Zeng F K, Zhou T 2021 *J. South China Normal Univ. (Natural Science Edition)* **53** 1 (in Chinese) [徐小志, 张晓闻, 王然, 曾凡凯, 周涛 2021 华南师范大学学报(自然科学版) **53** 1]
- [54] Xu X, Liu K 2022 *Sci. Bull.* **67** 1410
- [55] Liu C, Wang L, Qi J, Liu K 2020 *Adv. Mater.* **32** 2000046
- [56] Liu T Y, Liu C, Liu K H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 108103 (in Chinese) [刘天瑶, 刘灿, 刘开辉 2022 物理学报 **71** 108103]
- [57] Zhang Z, Forti S, Meng W, Pezzini S, Hu Z, Coletti C, Wang X, Liu K 2023 *2D Mater.* **10** 032001
- [58] Yan Z, Lin J, Peng Z, Sun Z, Zhu Y, Li L, Xiang C, Samuel E L, Kittrell C, Tour J M 2012 *ACS Nano* **6** 9110
- [59] Luo Z, Lu Y, Singer D W, Berck M E, Somers L A, Goldsmith B R, Johnson A C 2011 *Chem. Mater.* **23** 1441

- [60] Han G H, Gunes F, Bae J J, Kim E S, Chae S J, Shin H J, Choi J Y, Pribat D, Lee Y H 2011 *Nano Lett.* **11** 4144
- [61] Wu T, Zhang X, Yuan Q, Xue J, Lu G, Liu Z, Wang H, Wang H, Ding F, Yu Q, Xie X, Jiang M 2016 *Nat. Mater.* **15** 43
- [62] Safron N S, Kim M, Gopalan P, Arnold M S 2012 *Adv. Mater.* **24** 1041
- [63] Kim H, Mattevi C, Calvo M R, Oberg J C, Artiglia L, Agnoli S, Hirjibehedin C F, Chhowalla M, Saiz E 2012 *ACS Nano* **6** 3614
- [64] Liu C, Xu X, Qiu L, Wu M, Qiao R, Wang L, Wang J, Niu J, Liang J, Zhou X, Zhang Z, Peng M, Gao P, Wang W, Bai X, Ma D, Jiang Y, Wu X, Yu D, Wang E, Xiong J, Ding F, Liu K 2019 *Nat. Chem.* **11** 730
- [65] Xu X, Zhang Z, Qiu L, Zhuang J, Zhang L, Wang H, Liao C, Song H, Qiao R, Gao P, Hu Z, Liao L, Yu D, Wang E, Ding F, Peng H, Liu K 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 930
- [66] Xu X, Qiao R, Liang Z, Zhang Z, Wang R, Zeng F, Cui G, Zhang X, Zou D, Guo Y, Liu C, Fu Y, Zhou X, Wu M, Wang Z J, Zhao Y, Wang E, Tang Z, Yu D, Liu K 2022 *Nano Res.* **15** 919
- [67] Geng D, Wu B, Guo Y, Huang L, Xue Y, Chen J, Yu G, Jiang L, Hu W, Liu Y 2012 *P. Natl. A. Sci.* **109** 7992
- [68] Zang X, Zhou Q, Chang J, Teh K S, Wei M, Zettl A, Lin L 2017 *Adv. Mater. Interfaces* **4** 1600783
- [69] Zhou H, Yu W J, Liu L, Cheng R, Chen Y, Huang X, Liu Y, Wang Y, Huang Y, Duan X 2013 *Nat. Commun.* **4** 2096
- [70] Vlassiounk I V, Stehle Y, Pudasaini P R, Unocic R R, Rack P D, Baddorf A P, Ivanov I N, Lavrik N V, List F, Gupta N, Bets K V, Yakobson B I, Smirnov S N 2018 *Nat. Mater.* **17** 318
- [71] Chung J W, Dai Z R, Ohuchi F S 1998 *J. Cryst. Growth* **186** 137
- [72] Cun H, Macha M, Kim H, Liu K, Zhao Y, LaGrange T, Kis A, Radenovic A 2019 *Nano Res.* **12** 2646
- [73] Ishihara S, Hibino Y, Sawamoto N, Machida H, Wakabayashi H, Ogura A 2018 *MRS Adv.* **3** 379
- [74] Eichfeld S M, Hossain L, Lin Y C, Piasecki A F, Kupp B, Birdwell A G, Burke R A, Lu N, Peng X, Li J, Azcatl A, McDonnell S, Wallace R M, Kim M J, Mayer T S, Redwing J M, Robinson J A 2015 *ACS Nano* **9** 2080
- [75] Song X, Gao J, Nie Y, Gao T, Sun J, Ma D, Li Q, Chen Y, Jin C, Bachmatiuk A, Röttmeli M H, Ding F, Zhang Y, Liu Z 2015 *Nano Res.* **8** 3164
- [76] Zhang Z, Yang X, Liu K, Wang R 2022 *Adv. Sci.* **9** 2105201
- [77] Young E P, Park J, Bai T, Choi C, DeBlock R H, Lange M, Poust S, Tice J, Cheung C, Dunn B S 2018 *ACS Appl. Nano Mater.* **1** 4737
- [78] Tao L, Cinquanta E, Chiappe D, Grazianetti C, Fanciulli M, Dubey M, Molle A, Akinwande D 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 227
- [79] Kang K, Xie S, Huang L, Han Y, Huang P Y, Mak K F, Kim C J, Muller D, Park J 2015 *Nature* **520** 656
- [80] Shi J, Chen X, Zhao L, Gong Y, Hong M, Huan Y, Zhang Z, Yang P, Li Y, Zhang Q 2018 *Adv. Mater.* **30** 1804616
- [81] Jiao L, Jie W, Yang Z, Wang Y, Chen Z, Zhang X, Tang W, Wu Z, Hao J 2019 *J. Mater. Chem. C* **7** 2522
- [82] Seo S, Choi H, Kim S Y, Lee J, Kim K, Yoon S, Lee B H, Lee S 2018 *Adv. Mater. Interfaces* **5** 1800524
- [83] Keller B D, Bertuch A, Provine J, Sundaram G, Ferralis N, Grossman J C 2017 *Chem. Mater.* **29** 2024
- [84] Zhou W, Zou X, Najmaei S, Liu Z, Shi Y, Kong J, Lou J, Ajayan P M, Yakobson B I, Idrobo J C 2013 *Nano letters* **13** 2615
- [85] Shu H, Tao X M, Ding F 2015 *Nanoscale* **7** 1627
- [86] Metin O, Mazumder V, Ozkar S, Sun S 2010 *J. Am. Chem. Soc.* **132** 1468
- [87] Liu S, Van Duin A C, Van Duin D M, Liu B, Edgar J H 2017 *ACS Nano* **11** 3585
- [88] Liu S, Comer J, Van Duin A C, Van Duin D M, Liu B, Edgar J H 2019 *Nanoscale* **11** 5607
- [89] Zhang X, Xu Z, Hui L, Xin J, Ding F 2012 *J. Phys. Chem. Lett.* **3** 2822
- [90] Dong J, Zhang L, Dai X, Ding F 2020 *Nat. Commun.* **11** 5862
- [91] Wang Z J, Dong J, Li L, Dong G, Cui Y, Yang Y, Wei W, Blume R, Li Q, Wang L, Xu X, Liu K, Barroo C, Frenken J W M, Fu Q, Bao X, Schlögl R, Ding F, Willinger M G 2020 *ACS Nano* **14** 1902
- [92] Dong J, Geng D, Liu F, Ding F 2019 *Angew. Chem. Int. Edit.* **58** 7723
- [93] Zuo Y, Liu C, Ding L, Qiao R, Tian J, Liu C, Wang Q, Xue G, You Y, Guo Q, Wang J, Fu Y, Liu K, Zhou X, Hong H, Wu M, Lu X, Yang R, Zhang G, Yu D, Wang E, Bai X, Ding F, Liu K 2022 *Nat. Commun.* **13** 1007
- [94] Zhao R, Zhao X, Liu Z, Ding F, Liu Z 2017 *Nanoscale* **9** 3561
- [95] Pan Y, Zhang H, Shi D, Sun J, Du S, Liu F, Gao H j 2009 *Adv. Mater.* **21** 2777
- [96] Hu B, Ago H, Ito Y, Kawahara K, Tsuji M, Magome E, Sumitani K, Mizuta N, Ikeda K I, Mizuno S 2012 *Carbon* **50** 57
- [97] Zhang X, Wu T, Jiang Q, Wang H, Zhu H, Chen Z, Jiang R, Niu T, Li Z, Zhang Y 2019 *Small* **15** 1805395
- [98] Braeuninger-Weimer P, Brennan B, Pollard A J, Hofmann S 2016 *Chem. Mater.* **28** 8905
- [99] Wang Z J, Liang Z, Kong X, Zhang X, Qiao R, Wang J, Zhang S, Zhang Z, Xue C, Cui G, Zhang Z, Zou D, Liu Z, Li Q, Wei W, Zhou X, Tang Z, Yu D, Wang E, Liu K, Ding F, Xu X 2022 *Nano Lett.* **22** 4661
- [100] Zhang Z, Xu X, Qiu L, Wang S, Wu T, Ding F, Peng H, Liu K 2017 *Adv. Sci.* **4** 1700087
- [101] Zhan Y, Liu Z, Najmaei S, Ajayan P M, Lou J 2012 *Small* **8** 966
- [102] Graf D, Molitor F, Ensslin K, Stampfer C, Jungen A, Hierold C, Wirtz L 2007 *Nano Lett.* **7** 238
- [103] Xu X, Lin C, Fu R, Wang S, Pan R, Chen G, Shen Q, Liu C, Guo X, Wang Y, Zhao R, Liu K, Luo Z, Hu Z, Li H 2016 *AIP Adv.* **6** 025026
- [104] Liu L, Li T, Ma L, Li W, Gao S, Sun W, Dong R, Zou X, Fan D, Shao L, Gu C, Dai N, Yu Z, Chen X, Tu X, Nie Y, Wang P, Wang J, Shi Y, Wang X 2022 *Nature* **605** 69
- [105] Chen L, Liu B, Ge M, Ma Y, Abbas A N, Zhou C 2015 *ACS Nano* **9** 8368
- [106] Deshpande S, Heo J, Das A, Bhattacharya P 2013 *Nat. Commun.* **4** 1675
- [107] Kim I H, Park H S, Park Y J, Kim T 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 1634
- [108] Wang R, Koch N, Martin J, Sadofev S 2023 *Phys. Status. Solidi-R* **17** 2200476
- [109] Zhang Z, Ding M, Cheng T, Qiao R, Zhao M, Luo M, Wang E, Sun Y, Zhang S, Li X, Zhang Z, Mao H, Liu F, Fu Y, Liu K, Zou D, Liu C, Wu M, Fan C, Zhu Q, Wang X, Gao P, Li Q, Liu K, Zhang Y, Bai X, Yu D, Ding F, Wang E, Liu K 2022 *Nat. Nanotechnol.* **17** 1258
- [110] Lin Y C, Komsa H P, Yeh C H, Bjorkman T, Liang Z Y, Ho

- C H, Huang Y S, Chiu P W, Krashennnikov A V, Suenaga K 2015 *ACS Nano* **9** 11249
- [111] Jiang S, Hong M, Wei W, Zhao L, Zhang N, Zhang Z, Yang P, Gao N, Zhou X, Xie C 2018 *Commun. Chem.* **1** 17
- [112] Wu K, Chen B, Yang S, Wang G, Kong W, Cai H, Aoki T, Soignard E, Marie X, Yano A 2016 *Nano Lett.* **16** 5888
- [113] Meng J, Zhang X, Wang Y, Yin Z, Liu H, Xia J, Wang H, You J, Jin P, Wang D 2017 *Small* **13** 1604179
- [114] Mannix A J, Zhou X F, Kiraly B, Wood J D, Alducin D, Myers B D, Liu X, Fisher B L, Santiago U, Guest J R 2015 *Science* **350** 1513
- [115] Wang X, He J, Zhou B, Zhang Y, Wu J, Hu R, Liu L, Song J, Qu J 2018 *Angew. Chem. Ger. Edit* **130** 8804
- [116] Yuhara J, Shimazu H, Ito K, Ohta A, Araidai M, Kurosawa M, Nakatake M, Le Lay G 2018 *ACS Nano* **12** 11632
- [117] Yuhara J, He B, Matsunami N, Nakatake M, Le Lay G 2019 *Adv. Mater.* **31** 1901017
- [118] Zhou J, Chen J, Chen M, Wang J, Liu X, Wei B, Wang Z, Li J, Gu L, Zhang Q 2019 *Adv. Mater.* **31** 1807874
- [119] Gao J, Yip J, Zhao J, Yakobson B I, Ding F 2011 *J. Am. Chem. Soc.* **133** 5009
- [120] Yuan Q, Yakobson B I, Ding F 2014 *J. Phys. Chem. Lett.* **5** 3093
- [121] Li X, Dong J, Idrobo J C, Puzos A A, Rouleau C M, Gehegan D B, Ding F, Xiao K 2017 *J. Am. Chem. Soc.* **139** 482
- [122] Li J, Li Y, Yin J, Ren X, Liu X, Jin C, Guo W 2016 *Small* **12** 3645
- [123] Wang S, Dearle A E, Maruyama M, Ogawa Y, Okada S, Hibino H, Taniyasu Y 2019 *Adv. Mater.* **31** 1900880
- [124] Li P, Wei W, Zhang M, Mei Y, Chu P K, Xie X, Yuan Q, Di Z 2020 *Nano Today* **34** 100908
- [125] Nie S, Wofford J M, Bartelt N C, Dubon O D, McCarty K F 2011 *Phys. Rev. B* **84** 155425
- [126] Griep M H, Sandoz-Rosado E, Tumlin T M, Wetzel E 2016 *Nano Lett.* **16** 1657
- [127] Dai J, Wang D, Zhang M, Niu T, Li A, Ye M, Qiao S, Ding G, Xie X, Wang Y 2016 *Nano Lett.* **16** 3160
- [128] Driver S, Toomes R, Woodruff D 2016 *Surf. Sci.* **646** 114
- [129] Bets K V, Gupta N, Yakobson B I 2019 *Nano Lett.* **19** 2027
- [130] Chen T A, Chuu C P, Tseng C C, Wen C K, Wong H S P, Pan S, Li R, Chao T A, Chueh W C, Zhang Y 2020 *Nature* **579** 219
- [131] Ohta T, Bostwick A, Seyller T, Horn K, Rotenberg E 2006 *Science* **313** 951
- [132] Berger C, Song Z, Li X, Wu X, Brown N, Naud C, Mayou D, Li T, Hass J, Marchenkov A N, Conrad E H, First P N, de Heer W A 2006 *Science* **312** 1191
- [133] Li X, Cai W, An J, Kim S, Nah J, Yang D, Piner R, Velamakanni A, Jung I, Tutuc E, Banerjee S K, Colombo L, Ruoff R S 2009 *Science* **324** 1312
- [134] Kim K S, Zhao Y, Jang H, Lee S Y, Kim J M, Kim K S, Ahn J H, Kim P, Choi J Y, Hong B H 2009 *Nature* **457** 706
- [135] Xu X, Zhang Z, Dong J, Yi D, Niu J, Wu M, Lin L, Yin R, Li M, Zhou J, Wang S, Sun J, Duan X, Gao P, Jiang Y, Wu X, Peng H, Ruoff R S, Liu Z, Yu D, Wang E, Ding F, Liu K 2017 *Sci. Bull.* **62** 1074
- [136] Hou Y, Wang B, Zhan L, Qing F, Wang X, Niu X, Li X 2020 *Mater. Today* **36** 10
- [137] Yu Q, Jauregui L A, Wu W, Colby R, Tian J, Su Z, Cao H, Liu Z, Pandey D, Wei D, Chung T F, Peng P, Guisinger N P, Stach E A, Bao J, Pei S S, Chen Y P 2011 *Nat. Mater.* **10** 443
- [138] Wu M, Zhang Z, Xu X, Zhang Z, Duan Y, Dong J, Qiao R, You S, Wang L, Qi J, Zou D, Shang N, Yang Y, Li H, Zhu L, Sun J, Yu H, Gao P, Bai X, Jiang Y, Wang Z J, Ding F, Yu D, Wang E, Liu K 2020 *Nature* **581** 406
- [139] Li Y, Sun L, Chang Z, Liu H, Wang Y, Liang Y, Chen B, Ding Q, Zhao Z, Wang R, Wei Y, Peng H, Lin L, Liu Z 2020 *Adv. Mater.* **32** 2002034
- [140] Li L, Ma T, Yu W, Zhu M, Li J, Chen Z, Li H, Zhao M, Teng J, Tian B, Su C, Loh K P 2021 *2D Mater.* **8** 035019
- [141] Wan Y, Fu J H, Chuu C P, Tung V, Shi Y, Li L J 2022 *Chem. Soc. Rev.* **51** 803
- [142] Lee J H, Lee E K, Joo W J, Jang Y, Kim B S, Lim J Y, Choi S H, Ahn S J, Ahn J R, Park M H, Yang C W, Choi B L, Hwang S W, Whang D 2014 *Science* **344** 286
- [143] Zhang Z, Penev E S, Yakobson B I 2016 *Nat. Chem.* **8** 525
- [144] Sun X, Liu X, Yin J, Yu J, Li Y, Hang Y, Zhou X, Yu M, Li J, Tai G, Guo W 2017 *Adv. Funct. Mater.* **27** 1603300
- [145] Liu Y, Penev E S, Yakobson B I 2013 *Angew. Chem. Int. Edit.* **52** 3156
- [146] Feng B, Zhang J, Zhong Q, Li W, Li S, Li H, Cheng P, Meng S, Chen L, Wu K 2016 *Nat. Chem.* **8** 563
- [147] Kiraly B, Liu X, Wang L, Zhang Z, Mannix A J, Fisher B L, Yakobson B I, Hersam M C, Guisinger N P 2019 *ACS Nano* **13** 3816
- [148] Liu H, Gao J, Zhao J 2013 *Sci. Rep. -UK* **3** 3238
- [149] Li W, Kong L, Chen C, Gou J, Sheng S, Zhang W, Li H, Chen L, Cheng P, Wu K 2018 *Sci. Bull.* **63** 282
- [150] Zhong Q, Kong L, Gou J, Li W, Sheng S, Yang S, Cheng P, Li H, Wu K, Chen L 2017 *Phys. Rev. Mater.* **1** 021001
- [151] Wu R, Drozdov I K, Eltinge S, Zahl P, Ismail-Beigi S, Božović I, Gozar A 2019 *Nat. Nanotechnol.* **14** 44
- [152] Wu R, Eltinge S, Drozdov I K, Gozar A, Zahl P, Sadowski J T, Ismail-Beigi S, Božović I 2022 *Nat. Chem.* **14** 377
- [153] Yang W, Berthou S, Lu X, Wilmart Q, Denis A, Rosticher M, Taniguchi T, Watanabe K, Fève G, Berroir J M, Zhang G, Voisin C, Baudin E, Plaças B 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 47
- [154] Yankowitz M, Ma Q, Jarillo-Herrero P, LeRoy B J 2019 *Nat. Rev. Phys.* **1** 112
- [155] Hu S, Lozada-Hidalgo M, Wang F, Mishchenko A, Schedin F, Nair R R, Hill E, Boukhvalov D, Katsnelson M, Dryfe R A 2014 *Nature* **516** 227
- [156] Wang L, Meric I, Huang P, Gao Q, Gao Y, Tran H, Taniguchi T, Watanabe K, Campos L, Muller D 2013 *Science* **342** 614
- [157] Lu G, Wu T, Yuan Q, Wang H, Wang H, Ding F, Xie X, Jiang M 2015 *Nat. Commun.* **6** 6160
- [158] Liu L, Park J, Siegel D A, McCarty K F, Clark K W, Deng W, Basile L, Idrobo J C, Li A-P, Gu G 2014 *Science* **343** 163
- [159] Wang L, Xu X, Zhang L, Qiao R, Wu M, Wang Z, Zhang S, Liang J, Zhang Z, Zhang Z, Chen W, Xie X, Zong J, Shan Y, Guo Y, Willinger M, Wu H, Li Q, Wang W, Gao P, Wu S, Zhang Y, Jiang Y, Yu D, Wang E, Bai X, Wang Z J, Ding F, Liu K 2019 *Nature* **570** 91
- [160] Ma K Y, Zhang L, Jin S, Wang Y, Yoon S I, Hwang H, Oh J, Jeong D S, Wang M, Chatterjee S, Kim G, Jang A R, Yang J, Ryu S, Jeong H Y, Ruoff R S, Chhowalla M, Ding F, Shin H S 2022 *Nature* **606** 88
- [161] Liu Z, Gong Y, Zhou W, Ma L, Yu J, Idrobo J C, Jung J, MacDonald A H, Vajtai R, Lou J, Ajayan P M 2013 *Nat. Commun.* **4** 2541
- [162] Caneva S, Weatherup R S, Bayer B C, Blume R, Cabrero-Vilatelata A, Braeuninger-Weimer P, Martin M-B, Wang R,

- Baecht C, Schloegl R, Meyer J C, Hofmann S 2016 *Nano Lett.* **16** 1250
- [163] Liu D, Chen X, Yan Y, Zhang Z, Jin Z, Yi K, Zhang C, Zheng Y, Wang Y, Yang J, Xu X, Chen J, Lu Y, Wei D, Wee A T S, Wei D 2019 *Nat. Commun.* **10** 1188
- [164] Jang A R, Hong S, Hyun C, Yoon S I, Kim G, Jeong H Y, Shin T J, Park S O, Wong K, Kwak S K, Park N, Yu K, Choi E, Mishchenko A, Withers F, Novoselov K S, Lim H, Shin H S 2016 *Nano Lett.* **16** 3360
- [165] Biswas A, Ruan Q, Lee F, Li C, Iyengar S A, Puthirath A B, Zhang X, Kannan H, Gray T, Birdwell A G, Neupane M R, Shah P B, Ruzmetov D A, Ivanov T G, Vajtai R, Tripathi M, Dalton A, Yakobson B I, Ajayan P M 2023 *Appl. Mater. Today* **30** 101734
- [166] Lee Y H, Yu L, Wang H, Fang W, Ling X, Shi Y, Lin C T, Huang J K, Chang M T, Chang C S 2013 *Nano Lett.* **13** 1852
- [167] Zhang Y, Zhang Y, Ji Q, Ju J, Yuan H, Shi J, Gao T, Ma D, Liu M, Chen Y 2013 *ACS Nano* **7** 8963
- [168] Van Der Zande A M, Huang P Y, Chenet D A, Berkelbach T C, You Y, Lee G H, Heinz T F, Reichman D R, Muller D A, Hone J C 2013 *Nat. Mater.* **12** 554
- [169] Najmaei S, Liu Z, Zhou W, Zou X, Shi G, Lei S, Yakobson B I, Idrobo J-C, Ajayan P M, Lou J 2013 *Nat. Mater.* **12** 754
- [170] Yang P, Zhang S, Pan S, Tang B, Liang Y, Zhao X, Zhang Z, Shi J, Huan Y, Shi Y, Pennycook S J, Ren Z, Zhang G, Chen Q, Zou X, Liu Z, Zhang Y 2020 *ACS Nano* **14** 5036
- [171] Hu J, Quan W, Yang P, Cui F, Liu F, Zhu L, Pan S, Huan Y, Zhou F, Fu J, Zhang G, Gao P, Zhang Y 2023 *ACS Nano* **17** 312
- [172] Yang P, Wang D, Zhao X, Quan W, Jiang Q, Li X, Tang B, Hu J, Zhu L, Pan S, Shi Y, Huan Y, Cui F, Qiao S, Chen Q, Liu Z, Zou X, Zhang Y 2022 *Nat. Commun.* **13** 3238
- [173] Aljarb A, Fu J H, Hsu C C, Chuu C P, Wan Y, Hakami M, Naphade D R, Yengel E, Lee C J, Brems S, Chen T A, Li M Y, Bae S H, Hsu W T, Cao Z, Albaridy R, Lopatin S, Chang W H, Anthopoulos T D, Kim J, Li L J, Tung V 2020 *Nat. Mater.* **19** 1300
- [174] Aljarb A, Cao Z, Tang H L, Huang J K, Li M, Hu W, Cavallo L, Li L J 2017 *ACS Nano* **11** 9215
- [175] Wang J, Xu X, Cheng T, Gu L, Qiao R, Liang Z, Ding D, Hong H, Zheng P, Zhang Z, Zhang Z, Zhang S, Cui G, Chang C, Huang C, Qi J, Liang J, Liu C, Zuo Y, Xue G, Fang X, Tian J, Wu M, Guo Y, Yao Z, Jiao Q, Liu L, Gao P, Li Q, Yang R, Zhang G, Tang Z, Yu D, Wang E, Lu J, Zhao Y, Wu S, Ding F, Liu K 2022 *Nat. Nanotechnol.* **17** 33
- [176] Mounet N, Gibertini M, Schwaller P, Campi D, Merkys A, Marrazzo A, Sohler T, Castelli I E, Cepellotti A, Pizzi G 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 246
- [177] Dumcenco D, Ovchinnikov D, Marinov K, Lazić P, Gibertini M, Marzari N, Sanchez O L, Kung Y C, Krasnozhan D, Chen M W, Bertolazzi S, Gillet P, Fontcuberta i Morral A, Radenovic A, Kis A 2015 *ACS Nano* **9** 4611
- [178] Li N, Wang Q, Shen C, Wei Z, Yu H, Zhao J, Lu X, Wang G, He C, Xie L, Zhu J, Du L, Yang R, Shi D, Zhang G 2020 *Nat. Electron.* **3** 711
- [179] Wang Q, Li N, Tang J, Zhu J, Zhang Q, Jia Q, Lu Y, Wei Z, Yu H, Zhao Y, Guo Y, Gu L, Sun G, Yang W, Yang R, Shi D, Zhang G 2020 *Nano Lett.* **20** 7193
- [180] Yin J, Liu X, Lu W, Li J, Cao Y, Li Y, Xu Y, Li X, Zhou J, Jin C, Guo W 2015 *Small* **11** 5375
- [181] Zheng P, Wei W, Liang Z, Qin B, Tian J, Wang J, Qiao R, Ren Y, Chen J, Huang C, Zhou X, Zhang G, Tang Z, Yu D, Ding F, Liu K, Xu X 2023 *Nat. Commun.* **14** 592
- [182] Ma Z, Wang S, Deng Q, Hou Z, Zhou X, Li X, Cui F, Si H, Zhai T, Xu H 2020 *Small* **16** 2000596
- [183] Chubarov M, Choudhury T H, Hickey D R, Bachu S, Zhang T, Sebastian A, Bansal A, Zhu H, Trainor N, Das S, Terrones M, Alem N, Redwing J M 2021 *ACS Nano* **15** 2532
- [184] Choi S H, Kim H J, Song B, Kim Y I, Han G, Nguyen H T T, Ko H, Boandoh S, Choi J H, Oh C S, Cho H J, Jin J W, Won Y S, Lee B H, Yun S J, Shin B G, Jeong H Y, Kim Y M, Han Y K, Lee Y H, Kim S M, Kim K K 2021 *Adv. Mater.* **33** 2006601
- [185] Li J, Wang S, Jiang Q, Qian H, Hu S, Kang H, Chen C, Zhan X, Yu A, Zhao S, Zhang Y, Chen Z, Sui Y, Qiao S, Yu G, Peng S, Jin Z, Liu X 2021 *Small* **17** 2100743
- [186] Yu H, Liao M, Zhao W, Liu G, Zhou X J, Wei Z, Xu X, Liu K, Hu Z, Deng K, Zhou S, Shi J-A, Gu L, Shen C, Zhang T, Du L, Xie L, Zhu J, Chen W, Yang R, Shi D, Zhang G 2017 *ACS Nano* **11** 12001
- [187] Grønberg S S, Ulstrup S, Bianchi M, Dendzik M, Sanders C E, Lauritsen J V, Hofmann P, Miwa J A 2015 *Langmuir* **31** 9700
- [188] Pan S, Yang P, Zhu L, Hong M, Xie C, Zhou F, Shi Y, Huan Y, Cui F, Zhang Y 2021 *Nanotechnology* **32** 095601
- [189] Tumino F, Grazianetti C, Martella C, Ruggeri M, Russo V, Li Bassi A, Molle A, Casari C S 2021 *J. Phys. Chem. C* **125** 9479
- [190] Tay R Y, Park H J, Ryu G H, Tan D, Tsang S H, Li H, Liu W, Teo E H T, Lee Z, Lifshitz Y, Ruoff R S 2016 *Nanoscale* **8** 2434
- [191] Uchida Y, Iwaizako T, Mizuno S, Tsuji M, Ago H 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 8230
- [192] Taslim A B, Nakajima H, Lin Y C, Uchida Y, Kawahara K, Okazaki T, Suenaga K, Hibino H, Ago H 2019 *Nanoscale* **11** 14668
- [193] Butashin A V, Vlasov V P, Kanevskii V M, Muslimov A E, Fedorov V A 2012 *Crystallogr. Rep.* **57** 824
- [194] Zhang X, Nan H, Xiao S, Wan X, Gu X, Du A, Ni Z, Ostrikov K 2019 *Nat. Commun.* **10** 598
- [195] Li X, Shi X, Marian D, Soriano D, Cusati T, Iannaccone G, Fiori G, Guo Q, Zhao W, Wu Y 2023 *Sci. Adv.* **9** eade5706
- [196] Liu F, Wu W, Bai Y, Chae S H, Li Q, Wang J, Hone J, Zhu X Y 2020 *Science* **367** 903
- [197] Chen C, Lv H, Zhang P, Zhuo Z, Wang Y, Ma C, Li W, Wang X, Feng B, Cheng P 2022 *Nat. Chem.* **14** 25
- [198] Zhang X, Huangfu L, Gu Z, Xiao S, Zhou J, Nan H, Gu X, Ostrikov K 2021 *Small* **17** 2007312

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Growth of two-dimensional single crystal materials controlled by atomic steps^{*}

Chang Chao^{1)2)#} Kou Jin-Zong^{1)2)#†} Xu Xiao-Zhi^{1)2)‡}

1) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Frontier Research Institute for Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 29 May 2023; revised manuscript received 29 June 2023)

Abstract

Since the successful mechanical exfoliation of graphene in 2004, two-dimensional materials have aroused extensive research and fast developed in various fields such as electronics, optoelectronics and energy, owing to their unique structural and physicochemical properties. In terms of synthesis methods, researchers have made further advancements in the atomic step method, building upon traditional techniques such as mechanical exfoliation, liquid-phase exfoliation, vapor-phase deposition, wet chemical synthesis, and nanomaterial self-assembly. These efforts aim to achieve high-quality large-scale two-dimensional single crystal materials. In this article, the representative research on the growth of two-dimensional single crystal materials controlled by atomic steps in recent years is reviewed in detail. To begin with, the research background is briefly introduced, then the main synthesis methods of two-dimensional single crystal materials are discussed and the challenges and reasons for the difficulty in epitaxially preparing non-centrosymmetric materials are analyzed. Subsequently, the growth mechanisms and recent advances in the preparation of two-dimensional single crystal materials assisted by atomic steps are presented. The theoretical basis and universality of atomic step-controlled nucleation in two-dimensional single crystal material are analyzed. Furthermore, the challenges and future directions for achieving large-scale, directionally controllable two-dimensional single crystal materials are predicted. Finally, potential applications of the step method in the future scalable chip device fabrication are systematically discussed.

Keywords: two-dimensional single crystal materials, atomic steps, non-centrosymmetry, epitaxial growth

PACS: 81.15.-z, 68.55.A-, 81.10.-h, 81.15.Gh

DOI: 10.7498/aps.72.20230887

^{*} Project supported by the Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (Grant Nos. 2020B1515020043, 2019A1515110302) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52102043).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: jinzongkou@sncu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: xiaozhixu@sncu.edu.cn

原子台阶调控二维单晶材料生长

常超 寇金宗 徐小志

Growth of two-dimensional single crystal materials controlled by atomic steps

Chang Chao Kou Jin-Zong Xu Xiao-Zhi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 208101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230887

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230887>

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

表界面调控米级二维单晶原子制造

Atomic-scale manufacture of metre-sized two-dimensional single crystals by interfacial modulation

物理学报. 2022, 71(10): 108103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212399>

超高真空条件下分子束外延生长的单层二维原子晶体材料的研究进展

Research progress of monolayer two-dimensional atomic crystal materials grown by molecular beam epitaxy in ultra-high vacuum conditions

物理学报. 2020, 69(11): 118101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200174>

原子尺度构建二维材料的第一性原理计算研究

First principles calculation of two-dimensional materials at an atomic scale

物理学报. 2021, 70(2): 027301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201636>

二维原子层谷电子学材料和器件

Valleytronic properties and devices based on two-dimensional atomic layer materials

物理学报. 2021, 70(2): 027302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201415>

二维Janus原子晶体的电子性质

Electronic properties of two-dimensional Janus atomic crystal

物理学报. 2021, 70(2): 026801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201406>

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>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

石墨烯类超导体的单磁性杂质效应*

赵宗阳 李铭[†] 周涛[‡]

(华南师范大学物理学院, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

(2023 年 5 月 23 日收到; 2023 年 8 月 30 日收到修改稿)

超导体的磁性杂质效应以及其中存在的束缚态 (即 Yu-Shiba-Rusinov 态) 一直受到较多的关注. 最近, 在实验室中, 成功发现了石墨烯类超导材料中 Yu-Shiba-Rusinov 态的存在. 本文在实空间建立描述石墨烯材料超导态的有效哈密顿量, 考虑单个磁性杂质, 构造 Bogoliubov-de Gennes (BdG) 方程, 并对超导序参量做自洽计算, 在此基础上, 理论研究了石墨烯类超导体的磁性杂质效应. 计算结果显示, 仅当超导的配对对称性是传统的 s 波配对时, 能隙内会出现 Yu-Shiba-Rusinov 束缚态, 束缚态的位置以及强度和杂质的磁矩有关, 且强度显示出了明显的正负非对称性, 但对于 p+ip 和 d+id 配对对称性, 则不存在能隙内的束缚态. 本文的理论计算结果一方面对实验现象做了合理解释, 另一方面指出了石墨烯和传统超导组成的异质结系统, 石墨烯层由于临近效应诱导出来的超导配对项仍然是 s 波配对.

关键词: 石墨烯, 超导, 磁性杂质, 束缚态**PACS:** 74.20.Fg, 74.62.Dh, 74.70.Wz**DOI:** 10.7498/aps.72.20230830

1 引言

由于二维的石墨烯材料具有独特的物理特性以及广阔的应用前景, 近 20 年来其物理性质受到了广泛的关注^[1]. 一个重要的研究方向是在石墨烯类材料中实现超导电性. 理想的石墨烯材料是一种半金属材料. 没有超导电性, 但近年来在实验室中已通过多种辅助途径在石墨烯类材料中成功实现超导电性, 有效的手段包括: 通过插入其他原子层的方法实现超导电性^[2,3], 在双层和三层石墨烯材料中通过外加电场和磁场的方法诱导出超导电性^[4,5], 在双层和三层魔角石墨烯中实现超导电性^[6,7], 以及用超导材料和石墨烯材料构成异质结, 通过邻近效应在石墨烯材料中实现有效的超导配对项^[8,9].

对于超导体材料, 一个核心的研究内容是探索其配对对称性. 对于石墨烯类超导体, 过去十几年

来, 很多研究组理论探索了它可能的配对对称性. 目前主要候选配对对称性是 p+ip 配对^[10,11] 和 d+id 配对^[12-15]. 另一方面, 对于超导体和普通金属组成的异质结系统, 由于邻近效应, 通常会在普通金属材料中诱导出有效的超导配对项. 一般认为, 诱导出的超导配对项对称性应与原超导体的配对对称性相同. 但是, 在石墨烯材料中, 实验测量得到结果却并非必然如此. 实验中, 将石墨烯材料放在电子型掺杂铜氧化物超导体 $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_x$ 上形成异质结, 通过扫描隧道光谱实验得到其局域电子态密度的信息, 结果显示石墨烯中诱导出了 p 波对称性^[9], 而原铜氧化物超导体却是 d 波对称性, 两者的配对对称性并不相同, 因此, 即使对于石墨烯-超导的异质结系统, 其配对对称性也是一个值得研究的课题.

杂质效应往往可以用来作为判断超导体配对对称性的有力工具, 比如在某些对称性下, 杂质可

* 国家自然科学基金 (批准号: 12074130) 和广东省自然科学基金 (批准号: 2021A1515012340) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: wliming@senu.edu.cn[‡] 通信作者. E-mail: tzhou@senu.edu.cn

以导致能隙内的束缚态^[16]. 在过去几年, 理论研究者对石墨烯材料中的杂质效应有过一定的关注^[17-19], 其中的束缚态的存在被建议可以用来判断石墨烯材料的配对对称性. 而本文主要关注石墨烯超导体的磁性杂质效应. 事实上, 超导体中的磁性杂质效应一直是一个重要的研究方向, 早在1960年代, 于禄^[20], Shiba^[21]和Rusinov^[22]分别独立地通过理论计算提出超导体中磁性杂质周围会存在能隙内的束缚态, Yu-Shiba-Rusinov态(简称为YSR态). 需要指出的是, YSR态与杂质原子的局域磁矩密切相关, 所以YSR态背后的物理原因与上述非磁性杂质诱导出的束缚态完全不同^[16-18]. 1997年, YSR态的存在被实验证实^[23]. 在石墨烯类超导体中, 理论预测可以通过氢化的方法引入局域磁矩, 进一步的计算预测了YSR态的存在^[24]. 最近, 实验上对石墨烯类超导体的YSR的观测也有了进展, 在一个石墨烯和传统的铅超导体的耦合系统中, 在晶界附近观测到了YSR态的存在^[25].

理论计算显示, 在石墨烯材料的晶界附近会引入磁性的点缺陷^[26-28], 因此, 理论上可以通过单个磁性杂质附近的局域电子结构来定性模拟晶界附近的电子结构并进一步研究YSR态. 对超导体的单个杂质效应的研究通常有两种有效的方法, 一种是忽略杂质对超导序参量的影响, 近似认为超导序参量均匀分布, 将哈密顿量分为均匀项和杂质项两个部分, 其中均匀部分可以进行傅里叶变换到动量空间, 杂质项可以视作微扰或者一个散射中心处理, 在T矩阵或者微扰论结合戴逊方程的基础上获得系统的格林函数, 进一步可以研究系统的其他性质^[16,17,24]. 这种方法的缺点是忽略了序参量的空间涨落, 尤其是我们通常关心杂质附近的局域特性, 而杂质附近的超导序参量往往被压制了. 优点是格林函数有很好的解析形式, 可以根据格林函数分母的零点分析能隙内束缚态产生的原因, 且在动量空间处理问题, 不存在尺寸效应.

早期, 针对石墨烯超导态, 有研究组运用T矩阵的方法研究了单个磁性杂质效应^[19], 计算结果表明: 仅仅在杂质原子的磁交换作用大于石墨烯的能带宽度时, YSR态才出现. 这一条件在实际材料中比较难满足. 但是由于T矩阵方法忽略了杂质对超导序参量的压制, 所以该方法虽然可以定性地研究杂质效应, 但是, 杂质的作用有可能会被低估. 理论上存在着另一种研究杂质效应的方法, 就是实

空间的BdG方程方法^[18,29,30], 采用这种方法需要在实空间写出整个哈密顿量, 自洽求解实空间所有格点的超导序参量, 进一步用实空间对角化的方法求解系统的实空间格林函数. 这种方法的缺点是只能在有限大小的系统中计算, 具有一定的尺寸效应, 且没有办法进一步理论分析束缚态产生的原因, 优点是进行了全空间对角化, 且充分考虑了杂质对序参量的影响, 结果较为精确. 在过去石墨烯超导体的非磁性杂质的理论研究中, 这两种方法都被采用^[17,18], 结果定性上大体相同, 但细节处仍然有较多的差异.

本文采用了实空间BdG方程的方法结合自洽计算来对石墨烯材料的磁性杂质效应进行理论研究. 由于实验上YSR是在石墨烯和传统超导体耦合系统中发现了YSR态, 可判断该实验中石墨烯材料诱导出的配对对称性有比较大的概率也是传统的s波配对. 所以本文主要研究也是基于传统的s波配对. 计算结果显示, s波配对的石墨烯超导体具有明显的YSR束缚态, 其性质定性符合实验结果. 另一方面, 也研究了p+ip和d+id配对的石墨烯超导体的磁性杂质效应, 计算结果和s波配对有非常大的区别, 对于这两种配对对称性, 并没有出现明显的YSR态. 结果一方面表明, 磁性杂质效应可以作为判断石墨烯类超导体配对对称性的一个有力的工具, 另一方面, 和最近发表的实验结果相比较, 本文结果说明, 石墨烯和传统超导体组成的异质结其邻近效应诱导出来的石墨烯中的超导配对仍然是传统的s波配对. 这一结果有别于石墨烯-电子型铜氧超导体异质结的情况.

2 理论模型

我们的出发模型包含正常态项、超导配对项和磁性杂质项, 总的哈密顿量可表示为

$$\hat{H} = \hat{H}_N + \hat{H}_{SC} + \hat{H}_i. \quad (1)$$

其中, \hat{H}_N 是定义在实空间蜂窝格子上的紧束缚近似的哈密顿量, 表达式为

$$\hat{H}_N = - \sum_{ij\sigma} (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (2)$$

其中, t_{ij} 表示*i*格点和*j*格点之间的跳跃, 实际计算中, 取最近邻格点之间的跳跃, σ 表示电子的自旋, μ 是化学势.

\hat{H}_{SC} 表示超导配对项, 如果是传统的 s 波配对, 超导配对项可以表示为同一个格点的配对:

$$\hat{H}_{\text{sc}}^{\text{s}} = \sum_i (\Delta_{ii} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \text{h.c.}), \quad (3)$$

如果是 d+id 或者 p+ip 配对, 超导配对项可表示为近邻格点之间的配对:

$$\hat{H}_{\text{sc}}^{\text{d(p)}} = \sum_{\langle ij \rangle} (\Delta_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + \text{h.c.}), \quad (4)$$

$\langle ij \rangle$ 表示 j 格点在 i 格点的最近邻.

\hat{H}_i 表示磁性杂质项, 考虑系统中有一个磁性杂质在 i_0 格点, \hat{H}_i 表达式为^[29,30]

$$\hat{H}_i = -J_s c_{i_0\uparrow}^\dagger c_{i_0\uparrow} + J_s c_{i_0\downarrow}^\dagger c_{i_0\downarrow}, \quad (5)$$

J_s 为杂质点自旋和石墨烯格点上传导电子的交换耦合常数^[29,30].

考虑实空间共有 N 个格点, 超导态总的哈密顿量可以写成 $2N \times 2N$ 的矩阵形式, 可以列出如下的 BdG 方程:

$$\sum_j \begin{pmatrix} H_{ij} & \Delta_{ij} \\ \xi \Delta_{ij}^* & -H_{ij}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{jm} \\ v_{jm} \end{pmatrix} = E_m \begin{pmatrix} u_{jm} \\ v_{jm} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中, $H_{ij} = -t_{ij} - \mu \delta_{ij}$, 来自正常态哈密顿量 \hat{H}_N 的贡献, 如果是 d+id 和 p+ip 配对, 配对项需满足额外的约束条件, 即 $\Delta_{ji} = \xi \Delta_{ij}$, 其中, $\xi = +1$ 或者 $\xi = -1$, 分别对应 d+id 配对和 p+ip 配对. u_{jm} 和 v_{jm} 是哈密顿量矩阵的本征矢中的分量, E_m 是哈密顿矩阵的本征值, 均可通过对角化哈密顿量矩阵求得.

根据 BdG 方程, 可以自洽地求解超导序参量, 如果考虑超导项是起源于同一个格点上的电子间的有效吸引相互作用, 吸引势为 V , 这种情况是 s 波配对, 自洽方程可以表示为

$$\Delta_{ii} = \frac{V}{2} \sum_m [u_{im} v_{im}] \tanh(\beta E_m / 2). \quad (7)$$

对于 p+ip 配对和 d+id 配对, 超导项是来自最近邻格点之间的有效吸引相互作用, 同样考虑吸引势为 V , 自洽方程可以表示为

$$\Delta_{ij} = \frac{V}{4} \sum_m [u_{im} v_{jm} + \xi u_{jm} v_{im}] \tanh(\beta E_m / 2). \quad (8)$$

在自洽地求解得出每一个格点的超导序参量之后, 可以进一步计算格点上的粒子数 n_i , 以及局域磁矩 m_i , 由于自旋磁矩和自旋角动量成正比, 可

采用自旋角动量 z 方向平均值 S_z 表示局域磁矩:

$$n_i = \sum_m |u_{im}|^2 f(E_m) + \sum_m |v_{im}|^2 [1 - f(E_m)], \quad (9)$$

$$m_i = \frac{1}{2} \left\{ \sum_m |u_{im}|^2 f(E_m) - \sum_m |v_{im}|^2 [1 - f(E_m)] \right\}. \quad (10)$$

最后, 可以得出格点 i 处的局域电子态密度 $\rho_i(\omega)$ 的表达式:

$$\rho_i = \sum_m |u_{im}|^2 \delta(\omega - E_m) + \sum_m |v_{im}|^2 \delta(\omega + E_m), \quad (11)$$

其中, δ -函数的表达式为 $\delta(x) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1}{x + i\Gamma} \right)$, 其中, $i = (0, 1)$ 是虚数因子, Γ 是一个小量.

在下文计算结果展示中, 取最近邻格点的跃迁常数为能量的单位, 即 $t_{ij} = t = 1$ (i 和 j 为最近邻格点). 在自洽计算中, 配对势 V 的大小决定了超导能隙的大小, 两者是单调递增的关系. 通常来说, 超导能隙大小不改变杂质效应的定性行为, 但是超导能隙越小, Γ 就需要越小, 这样才能使得能隙内的特征被更好的展示. 但是 Γ 太小, 会使得 LDOS 曲线急剧振荡, 所以, 通常理论计算会取一个相对大的配对势, 这样 Γ 也可以取得较大, 使得曲线平滑且能隙内的特征更加明显^[17], 本文取 $V = 2.15$ 和 $\Gamma = 0.01$. 化学势取值决定了电子浓度的大小, 由于实验中运用邻近效应在石墨烯中实现超导电性^[25], 可以预计掺杂浓度较小, 这里也考虑低掺杂的情况, 选取化学势 $\mu = 0.4$. 在计算局域电子态密度的时候, 采用 10×10 的超原胞. 我们已经通过数值计算进行仔细验证, 当参数在实验允许的范围发生合理的变化时, 结果定性的行为不发生变化.

3 计算结果和讨论

本文重点讨论石墨烯材料在 s 波超导态下的磁性杂质效应, 首先根据 (7) 式的超导序参量的自洽方程, 考虑同一个格点上存在有效吸引势 V , 在 $J_s = 0.6$ 时, 自洽求解得到超导序参量的空间分布. 结果展示在图 1, 其中, 序参量的大小用格点的颜色表示, 蓝色点是杂质所在位置.

如图 1 所示, 在杂质点附近, 超导序参量在一定程度上被压制. 序参量在杂质点处达到最小值, 在这里, 杂质对超导序的压制, 主要是由于局域磁

矩的影响. 通常, 超导序和磁性总是互相竞争的关系, 局域磁矩的存在一定会压制超导电性. 但另一方面, 根据自洽结果可以看出, 杂质对超导序的影响范围并不大, 当格点远离杂质点时, 序参量慢慢增加, 当格点距杂质点超过两个晶格常数的距离之后, 序参量大小恢复为均匀值. 因此, 可以合理地预期, 不需要太大的格点系统就可以得到比较准确的结果. 本文通过数值验证了这一点, 在考虑的原胞数从 6×6 慢慢增加到 20×20 之后, 得到的结果并没有明显差别.

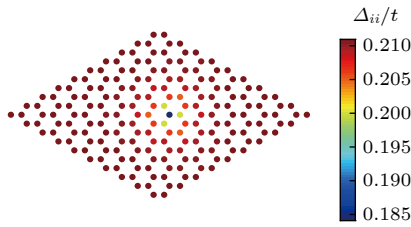


图 1 根据 (7) 式自洽计算得到的 s 波超导序参量的空间分布

Fig. 1. Spatial distribution of the superconducting order parameter based on the self-consistent calculation [Eq.(7)].

我们进一步研究杂质对粒子数以及局域磁矩的影响, 根据 (8) 式和 (9) 式, 计算了平均粒子数和局域磁矩在实空间的分布, 计算结果在图 2 展示. 对于粒子数和杂质的关系, 如图 2(a) 所示, 杂质的存在对粒子数影响很小, 整个空间粒子数分布接近均匀 (均在 1.04—1.05 之间). 这是因为在计算中仅仅考虑了杂质带来的磁效应, 忽略了杂质的非磁散射项. 另一方面, 从图 2(b) 可以看出, 在杂质点上, 有明显的局域磁矩存在, 在杂质最近邻点, 局域磁矩急剧减小. 在距离更远的地方, 局域磁矩消失. 众所周知, 超导体中局域磁矩的存在可能会导致 YSR 态的出现^[20–22]. 但是目前根据局域磁矩在空间的分布, 我们可以预期, 如果单个磁性杂质确实可以诱导出 YSR 态, 则仅仅在杂质点以及杂

质的最近邻点可以看到明显的 YSR 共振峰.

我们展示磁性杂质附近局域电子态密度的计算结果. 首先看 s 波配对的情况, 图 3(a), (b) 分别展示了杂质点以及杂质最近邻格点处局域电子态密度和能量之间的关系. 在杂质点处, 如图 3(a) 所示, 随着杂质项的引入, 当 $J_s = 0.6$ 时, 在能隙内, 出现了额外的共振峰, 随着 J_s 变大, 共振峰往费米能处移动, 在 $J_s = 2$ 时, 共振峰出现在非常接近费米能的低能位置. 此外, 研究结果显示, 共振峰总是成对出现的, 并且出现的能量始终是正负对称的, 这是起源于超导体的电子空穴对称性. 另一方面, 共振峰的强度是正负不对称的.

在杂质的近邻格点, 如图 3(b) 所示, 和杂质点的局域电子态密度类似, 当 $J_s \neq 0$ 时, 出现了明显的能隙内的共振峰. 和杂质点上的计算结果相比, 共振峰的位置没有发生变化, 但是, 共振峰的强度明显减小. 通过数值验证了在距离杂质更远的格点, 共振峰几乎消失, 这一结果也与图 2(b) 所展示的局域磁矩的计算结果一致. 以上共振峰的性质符合 YSR 态的特性^[20–22]. 最近, 实验上在石墨烯超导材料的晶界附近观测到了 YSR 态的特征^[25], 实验结果显示: 共振峰的强度具有正负不对称的特性, 且共振峰的位置依赖于磁交换作用 J 的大小, 图 3 中展示的理论计算结果和实验结果定性一致.

之前, 在 T-矩阵的基础上, 针对石墨烯超导材料的磁性和非磁性杂质效应有过系统的理论研究. 有必要将计算结果与 T 矩阵的结果进行定性的比较. 对于磁性杂质, 基于 T 矩阵的理论计算显示, 在磁性杂质势不是足够强时, 不存在能隙内杂质态, 能隙内的杂质态仅仅在杂质势超过能带宽度 W (石墨烯的能带宽度约为 6), 杂质态才会出现, 并且杂质态的位置和杂质势大小密切相关. 在本文计算中, 在杂质势 $J = 0.6$ 的时候, 杂质态已经出现, 显然, 基于 BdG 方程方法得到的杂质效应要

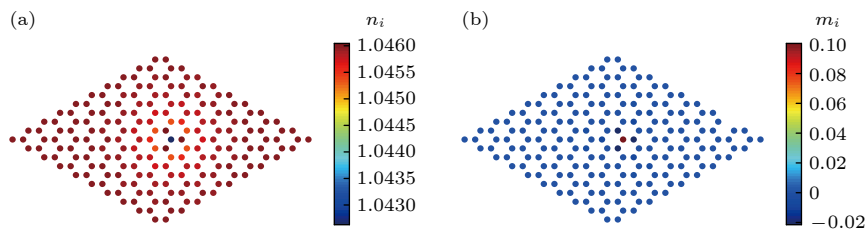


图 2 (a) 平均粒子数 n_i 的空间分布; (b) 局域磁矩 m_i 的空间分布

Fig. 2. (a) Spatial distribution of the on-site particle number n_i ; (b) spatial distribution of the local magnetic moment m_i .

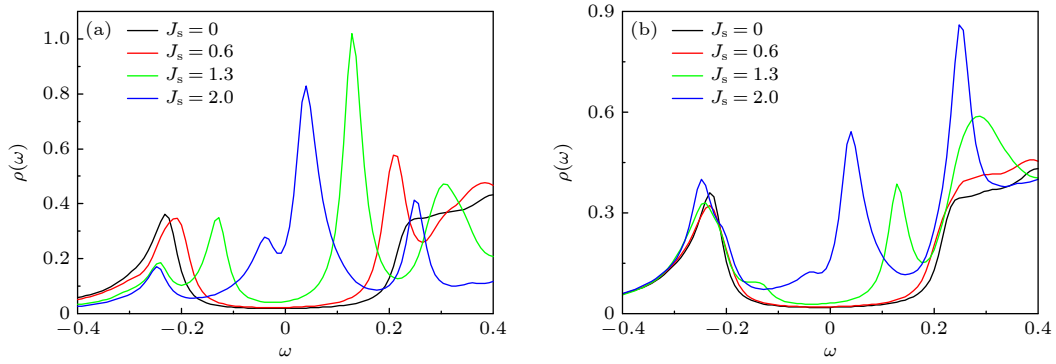


图 3 s 波配对情况下磁性杂质附近的局域电子态密度的计算结果 (a) 杂质点位置的局域电子态密度; (b) 杂质最近邻格点上的局域电子态密度

Fig. 3. Numerical results of the local density of states near the magnetic impurity site for the s-wave graphene based superconductor: (a) The local density of states at the impurity site; (b) the local density of states at the nearest neighbor site of the impurity.

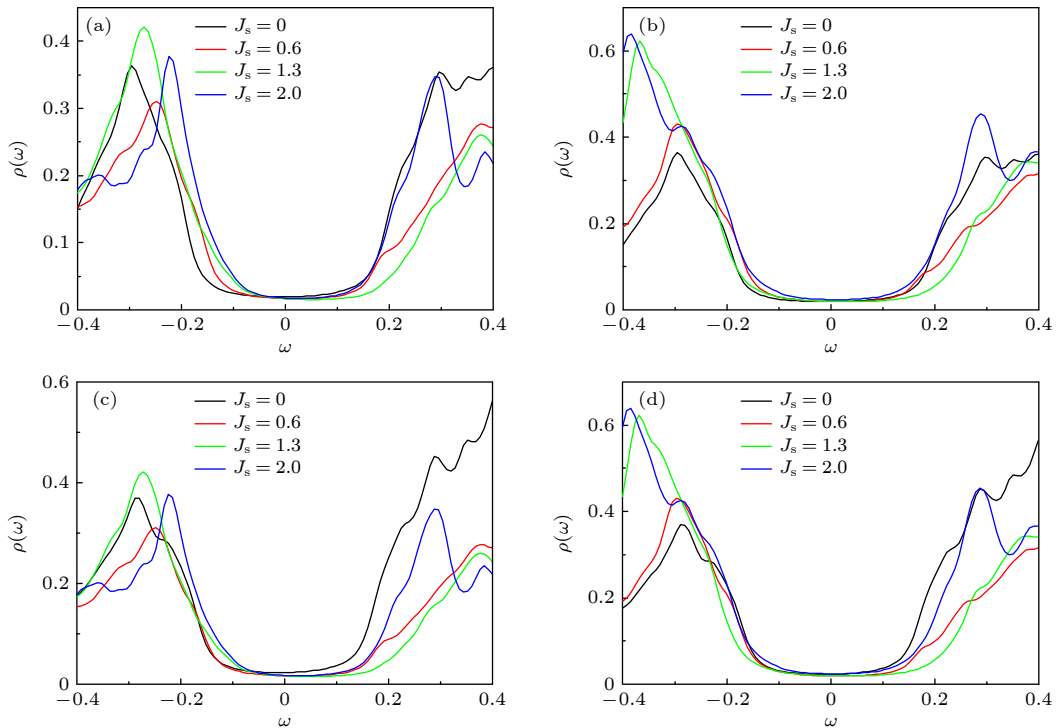


图 4 d+id 波和 p+ip 波配对情况下磁性杂质附近的局域电子态密度的计算结果 (a) d+id 配对杂质点位置的局域电子态密度; (b) d+id 配对杂质最近邻格点上的局域电子态密度; (c) p+ip 配对杂质点位置的局域电子态密度; (d) p+ip 配对杂质最近邻格点上的局域电子态密度

Fig. 4. Numerical results of the local density of states near the magnetic impurity site for the d+id-wave and p+ip-wave graphene based superconductor: (a) The local density of states at the impurity site for the d+id pairing symmetry; (b) the local density of states at the nearest neighbor site of the impurity for the d+id pairing symmetry; (c) the local density of states at the impurity site for the p+ip pairing symmetry; (d) the local density of states at the nearest neighbor site of the impurity for the p+ip pairing symmetry.

显著得多。由于 BdG 方程是全空间的自洽计算，充分考虑了杂质对序参数的影响，所以分析认为，BdG 方程的计算结果更加接近于实际情况。

进一步研究 d+id 和 p+ip 配对对称性情况下的磁性杂质效应，考虑最近邻格点之间存在有效吸引势 V ，根据 (8) 式自洽计算超导配对序参数，在

自洽计算基础上进一步根据 (11) 式计算局域电子态密度。图 4(a) 和图 4(b) 分别展示了 d+id 配对时，杂质点上和杂质近邻格点的局域电子态密度的计算结果，图 4(c) 和图 4(d) 是相应的 p+ip 配对对称性时的计算结果。如图所示，对于这两种配对对称性，始终没有 YSR 态的出现。本文结果表明，

对于单层石墨烯超导体, 仅仅在 s 波超导态中存在 YSR 态, 这一方面解释了最近的实验结果^[25], 另一方面, 也明确了该实验中石墨烯材料中由于临近效应导致的有效配对是 s 波对称.

我们有必要讨论石墨烯超导中磁性杂质效应和非磁性杂质效应的不同. 本文主要讨论的是低掺杂浓度的石墨烯超导体, 在这一掺杂区域下, 对于非磁性杂质, 根据之前 T 矩阵的理论计算结果^[17], 当配对对称性为 s 波和 $p+ip$ 波时, 均不存在能隙内的杂质态, 当配对对称性为 $d+id$ 配对时, 非磁性杂质会诱导出能隙内的共振态, 但是其性质和磁性杂质诱导的 YSR 态具有明显区别. 非磁性杂质诱导出来的共振态, 共振峰的位置相对比较稳定, 随着杂质势的变化仅仅有轻微的移动.

杂质态产生的位置和原因, 通常可以根据 T 矩阵的方法来分析, 对于超导体, 由于能隙的存在, 通常 T 矩阵分母的虚部在能隙内会很小, 如果在低能量时 T 矩阵分母实部也穿过零点, 就会出现能隙内的共振态. 在过去基于 T 矩阵方法对杂质效应的研究中, 已经广泛地通过研究 T 矩阵分母来讨论杂质态产生的机制^[16,17]. 但是, 由于本文是基于 BdG 方程的方法研究杂质效应, 目前无法进一步给出杂质态产生, 以及 s 波和其他两种配对对称性磁性杂质效应计算结果不同的物理原因, 背后的物理机制需要进一步研究.

4 结 论

本文在实空间 BdG 方程的基础上, 研究了石墨烯超导体的磁性杂质效应. 考虑磁性杂质破坏了系统的平移对称性, 在平均场的基础上自洽计算了超导序参量. 在此基础研究了磁性杂质附近的局域电子态密度计算结果表明, 在超导配对是传统的 s 波配对时, 磁性杂质附近出现了 YSR 态. 但对于 $p+ip$ 配对和 $d+id$ 配对, 则没有出现任何能隙内的共振态.

针对 s 波超导体的理论计算结果和近年来在石墨烯-传统超导体组成的异质结系统中发现的 YSR 态的实验结果定性一致. 一方面解释了实验现象, 另一方面促进了我们对石墨烯类超导体的理解. 同时本工作仍然存在一些不足, 其中最主要的不足是在 BdG 方程的框架下, 无法对 YSR 态的成因以及产生条件做进一步的理论分析. 这是 BdG

方法研究杂质效应的缺点. 我们预期, 如果从 T 矩阵的角度研究磁性杂质效应, 能够解决这一不足, 给出能隙内束缚态的成因, 并讨论其产生条件, 这也是我们下一步研究工作的方向.

参考文献

- [1] Tonnoir C, Kimouche A, Coraux J, Magaud L, Delsol B, Gilles B, Chapelier C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 246805
- [2] Ichinokura S, Sugawara K, Takayama A, Takahashi T, Hasegawa S 2016 *Acs Nano* **10** 2761
- [3] Ichinokura S, Sugawara K, Takayama A, Takahashi T, Hasegawa S 2016 *Sci. Rep.* **6** 23254
- [4] Zhou H X, Xie T, Taniguchi T, Watanabe K, Young A F 2021 *Nature* **598** 434
- [5] Zhou H, Holleis L, Saito Y, Cohen L, Huynh W, Patterson C L, Yang F, Taniguchi T, Watanabe K, Young A F 2022 *Science* **375** 774
- [6] Cao Y, Fatemi V, Fang S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [7] Cao Y, Park J M, Watanabe K, Taniguchi T, Jarillo-Herrero P 2021 *Nature* **595** 526
- [8] Lee G H, Lee H J 2018 *Rep. Prog. Phys.* **81** 056502
- [9] Bernardo A D, Millo O, Barbone M, et al. 2017 *Nat. Commun.* **8** 14024
- [10] Ma T, Yang F, Yao H, Lin H Q 2014 *Phys. Rev. B* **90** 245114
- [11] Faye J P L, Sahebsara P, Senechal D 2015 *Phys. Rev. B* **92** 085121
- [12] Nandkishore R, Levitov L S, Chubukov A V 2012 *Nat. Phys.* **8** 158
- [13] Kiesel M L, Platt C, Hanke W, Abanin D A, Thomale R 2012 *Phys. Rev. B* **86** 020507(R)
- [14] Nandkishore R, Thomale R, Chubukov A V 2014 *Phys. Rev. B* **89** 144501
- [15] Xiao L Y, Yu S L, Wang W, Yao Z J, Li J X 2016 *Europhys. Lett.* **115** 27008
- [16] Balatsky A V, Vekhter I, Zhu J X 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 373
- [17] Li Y Q, Zhou T 2021 *Front. Phys.* **16** 43502
- [18] Awoga O A, Black-Schaffer A M 2018 *Phys. Rev. B* **97** 214515
- [19] Wehling T O, Dahal H P, Lichtenstein A I, Balatsky A V 2008 *Phys. Rev. B* **78** 035414
- [20] Yu L 1965 *Acta Phys. Sin.* **21** 75 (in Chinese) [于渌 1965 物理学报 **21** 75]
- [21] Shiba H 1968 *Progress of theoretical Physics* **40** 435
- [22] Rusinov A I 1969 *Sov. Phys. JETP* **29** 1101
- [23] Yazdani A, Jones B A, Lutz C P, Crommie M F, Eigler D M 1997 *Science* **275** 1767
- [24] Lado J L, Fernandez-Rossier J 2016 *2D Mater.* **3** 025001
- [25] Río E C, Lado J L, Cherkez V, et al. 2021 *Adv. Mater.* **33** 2008113
- [26] Cervenka J, Katsnelson M I, Flipse C F J 2009 *Nat. Phys.* **5** 840
- [27] Akhukov M A, Fasolino A, Gornostyrev Y N, Katsnelson M I 2012 *Phys. Rev. B* **85** 115407
- [28] Dutta S, Wakabayashi K 2015 *Sci. Rep.* **5** 11744
- [29] Zuo X J, An J, Gong C D 2008 *Phys. Rev. B* **77** 144512
- [30] Zuo X J, An J, Gong C D 2008 *Phys. Rev. B* **77** 212508

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Single magnetic impurity effects in graphene based superconductors^{*}

Zhao Zong-Yang Li Ming[†] Zhou Tao[‡]

(Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 23 May 2023; revised manuscript received 30 August 2023)

Abstract

The magnetic impurity effects and the existence of bound states (i.e. Yu-Shiba-Rusinov states) in superconductors have been a topic of great interest. Recently, the existence of Yu-Shiba-Rusinov states in graphene-based superconducting materials has been successfully observed in the laboratory. In this work, an effective Hamiltonian in real space is established to describe the superconducting state of graphene materials by considering a single magnetic impurity. Thus the Bogoliubov-de Gennes (BdG) equation is constructed and the self-consistency calculations of the superconducting order parameter are conducted. On this basis, the effects of magnetic impurities on graphene-like superconductors are investigated theoretically. The numerical results show that the Yu-Shiba-Rusinov state can only appear in the symmetry of the superconducting pair of the traditional *s*-wave coupling. The position and strength of the bound state are related to the magnetic moment of the impurity, showing a notable electron-hole asymmetry. There are no bound states in the energy gap for other pairing symmetries. This theoretical calculation not only provides a reasonable explanation for experimental phenomena, but also demonstrates that the heterojunction system composed of graphene and traditional superconductors has an *s*-wave superconducting pairing induced by the proximity effect in the graphene layer.

Keywords: graphene, superconductor, magnetic impurity, bound state

PACS: 74.20.Fg, 74.62.Dh, 74.70.Wz

DOI: 10.7498/aps.72.20230830

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12074130) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2021A1515012340).

[†] Corresponding author. E-mail: wliming@scnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: tzhou@scnu.edu.cn



石墨烯类超导体的单磁性杂质效应

赵宗阳 李铭 周涛

Single magnetic impurity effects in graphene based superconductors

Zhao Zong-Yang Li Ming Zhou Tao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 207401 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230830

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230830>

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Yu-Shiba-Rusinov态的拓扑超导理论

Theory of topological superconductivity based on Yu-Shiba-Rusinov states

物理学报. 2020, 69(11): 117401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200831>

电子型FeSe基高温超导体的磁通束缚态与Majorana零能模

Vortex bound states and Majorana zero mode in electron-doped FeSe-based high-temperature superconductor

物理学报. 2021, 70(1): 017401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201673>

一种基于束缚态的可调等离子体光子晶体窄带滤波器

A tunable narrow-band plasma photonic crystal filter based on bound state

物理学报. 2021, 70(17): 175201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210241>

基于磁激元效应的石墨烯-金属纳米结构近红外吸收研究

Near-infrared absorption of graphene-metal nanostructure based on magnetic polaritons

物理学报. 2018, 67(11): 118101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180196>

双层石墨烯中的偶数分母分数量子霍尔态

Even-denominator fractional quantum Hall state in bilayer graphene

物理学报. 2022, 71(18): 187202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220905>

外加横向电场作用下石墨烯纳米带电子结构的密度泛函紧束缚计算

Electronic structure of graphene nanoribbons under external electric field by density functional tight binding

物理学报. 2021, 70(5): 053101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201619>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

正弦微波磁场驱动亚铁磁畴壁动力学*

赵晨蕊 魏云昕 刘婷婷 秦明辉†

(华南师范大学华南先进光电子研究院, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 7 月 12 日收到修改稿)

亚铁磁畴壁在角动量补偿点附近具有非零净磁化强度, 同时具有超快动力学性质, 有望应用于未来的自旋电子学存储和逻辑器件中. 探寻低能耗和高效驱动畴壁的手段和机制可以为实验设计和器件开发提供重要参考. 本文使用理论分析和微磁学模拟研究了亚铁磁畴壁在正弦微波磁场驱动下的动力学行为, 表明了微波磁场在一定的频率范围内可有效驱动畴壁运动, 使得人们可通过调制不同频率的微波磁场来调控畴壁动力学. 本文详细分析和解释了正弦微波磁场驱动亚铁磁畴壁的物理机理, 探讨了双轴各向异性等参数对畴壁运动速度的影响, 表明了磁各向异性和外加微波磁场频率等参量对不同净自旋角动量亚铁磁畴壁的调控行为.

关键词: 畴壁动力学, 自旋电子学, 正弦微波磁场, 亚铁磁体**PACS:** 85.75.-d, 75.50.Gg**DOI:** 10.7498/aps.72.20230913

1 引言

以铁磁材料为研究基石的自旋电子学, 经历三十年的发展, 涌现出许多新奇的物理现象和概念, 如巨磁电阻效应、隧穿磁电阻效应、自旋转移力矩效应和自旋轨道力矩效应等^[1-3]. 这些物理现象和概念的应用极大地促进了信息存储技术的发展变革, 使得自旋电子学在信息存储方面发挥着越来越重要的作用. 随着互联网、大数据和人工智能的快速发展及应用, 人们对信息存储容量和性能的需求日益提高, 铁磁基自旋电子学在超快和超高密度信息存储方面遇到了瓶颈. 因此, 开发具有更高速、更高密度、更低能耗以及抗电磁干扰的自旋电子器件是当前自旋电子学的重要努力目标.

具体来讲, 铁磁磁矩具有杂散场, 容易导致器件之间的相互干扰, 一定程度限制了高密度器件的发展. 另外, 铁磁材料工作频率主要处于 GHz 频段, 更高频器件研发受到一定限制. 从这一角度出

发, 反铁磁材料在无杂散场和超快磁化动力学方面具有优势, 有望针对性解决这些问题^[4,5]. 例如, 反铁磁体净磁矩为零并具有超低磁化率, 存储信息稳定性更好^[6-13]. 反铁磁存储基元之间不会产生磁干扰, 可实现更高密度集成. 而反铁磁动力学特征频率通常在太赫兹量级, 表现出超快动力学行为, 磁畴翻转比铁磁快 2—3 个数量级. 然而, 反铁磁体两套磁性子晶格具有非常强的反铁磁交换作用, 导致反铁磁序不易被外磁场等传统手段精确探测和有效操控^[14].

在此情形下, 亚铁磁材料兼具铁磁材料和反铁磁材料的优势 (图 1 所示), 有望成为新一代高性能自旋电子器件的候选材料^[15-20], 其优势主要体现在: 亚铁磁材料同样存在两套子晶格^[16], 在角动量补偿点 (T_A) 处, 两套子晶格的自旋角动量相互抵消, 使得体系在补偿点附近具有可比于反铁磁的超快动力学; 同时, 两套子晶格的旋磁比不同, 材料在角动量补偿点仍然存在有限大小的净磁矩, 可以被传统电学和磁学等手段探测和操控. 这一优势使

* 国家自然科学基金 (批准号: U22A20117, 52371243, 51971096)、广东省自然科学基金 (批准号: 2022A1515011727) 和广州市科技计划项目 (批准号: 202201000008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qinmh@senu.edu.cn

得亚铁磁有望规避反铁磁在探测和操控方面的短板. 而以磁畴壁为代表的磁结构, 可作为信息存储和逻辑运算的基本比特单元应用于器件设计, 使得畴壁动力学的调控成为自旋电子学应用研发领域的热点课题之一.

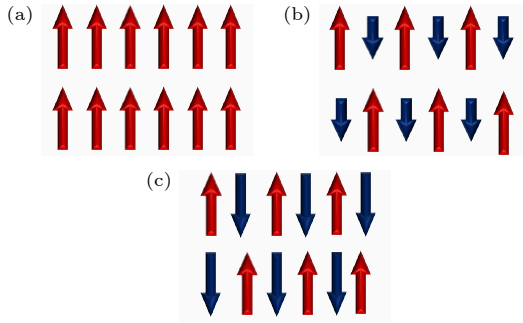


图 1 磁矩排列示意图 (a) 铁磁; (b) 亚铁磁; (c) 反铁磁
Fig. 1. Spin configurations: (a) Ferromagnetic; (b) ferrimagnetic; (c) antiferromagnetic states.

迄今, 相关理论和实验研究已分别揭示了电流^[18]、自旋波^[17,21,22]、磁场^[16,23]和磁各向异性梯度^[15]等对亚铁磁畴壁的有效驱动. 这些调控畴壁动力学的手段和机制有益于实验设计和器件研发, 但也存在一些不足之处. 例如, 自旋极化电流驱动只适用于导体, 且驱动临界电流密度通常都比较高^[24], 会产生较多的焦耳热, 不利于降低能耗和维持器件的使用稳定性. 另一方面, 受限于当前的技术和条件, 实验上激发特定偏振性和特定频率的自旋波非常困难, 很大程度限制了自旋波调控畴壁运动的实验研究. 因此, 探寻低能耗和快速有效调控亚铁磁畴壁的新手段对亚铁磁自旋电子学器件的设计开发至关重要. 而交变磁场如正弦微波磁场在低能耗驱动畴壁方面具有较大的潜力.

相比于静磁场, 微波磁场具有频率和相位等更多的可调控参数, 为畴壁动力学调控提供了更多的可能性. 例如, 在铁磁体系中, 交变磁场和绝热自旋转移力矩共同作用, 可以驱动畴壁运动^[25]. 重要的是, 畴壁运动的速度和方向与微波磁场的频率和相位相关, 使得人们可通过改变微波磁场来调控畴壁动力学. 对于反铁磁体系, 前期研究揭示了恒定磁场和交变微波磁场的共同作用可以有效驱动反铁磁畴壁^[26]. 在亚铁磁体系中, 已有理论研究揭示了圆偏振磁场对畴壁的驱动行为, 表明了偏振频率对动力学的调控^[27]. 具体而言, 在临界频率以下(以上), 畴壁速度随频率增大而线性增大(非线性

减小). 我们进一步的研究还揭示了非线性 Dzyaloshinskii–Moriya 相互作用与净自旋角动量对圆偏振磁场驱动亚铁磁畴壁动力学的调控^[28], 表明了亚铁磁具有比铁磁更快的畴壁动力学.

相比于圆偏振磁场, 线偏振的微波磁场更容易实现并且能耗更低. 而相比自旋极化电流, 微波磁场调控可适用于各种结构的材料, 且可用于绝缘体. 另外, 亚铁磁材料具有可调控的净自旋角动量(δ_s), 其与微波磁场的耦合会导致丰富的动力学行为. 例如, 非零的 δ_s 使得微波磁场在一个周期内施加在畴壁上的合力矩不为零, 可以有效驱动亚铁磁畴壁运动. 另外, 运动的速度和方向与 δ_s 和微波磁场的频率相关, 可以调控这些参数来实现更快的畴壁动力学. 因此, 微波磁场驱动亚铁磁畴壁动力学不仅在自旋电子学科学基础具有意义, 还可以为实验设计和原型器件开发提供参考, 值得深入探索和揭示.

本工作基于经典的海森堡自旋模型, 研究了正弦微波磁场驱动亚铁磁畴壁的动力学行为. 不同于反铁磁体系, 单一的微波磁场可以驱动亚铁磁畴壁的高速运动. 本工作系统分析了不同参数下的畴壁速度, 阐明了共振频率和畴壁速度与微波磁场和轴各向异性的依赖关系, 揭示了微波磁场频率具有调控畴壁动力学的重要作用. 另外, 通过外场与畴壁的耦合阐明了正弦微波磁场驱动亚铁磁畴壁的作用机理, 并对模拟结果进行了系统的讨论和分析.

2 理论分析与模拟方法

本工作考虑沿 z 方向的一维亚铁磁体系, 体系具有最近邻交换相互作用和双轴各向异性^[11,26,28], 在 y 方向施加正弦的微波磁场, 如图 2 所示.

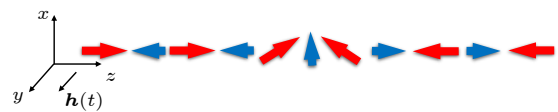


图 2 一维亚铁磁纳米线畴壁结构以及外加正弦微波磁场示意图
Fig. 2. Schematic depiction of a one-dimensional ferrimagnetic nanowire along the z direction with a domain wall under a sinusoidal microwave magnetic field.

首先使用集体坐标理论分析正弦微波场驱动亚铁磁畴壁运动. 模型中两套子晶格分别具有反铁磁耦合的磁矩 $\mu_1 \mathbf{S}_1$ 和 $\mu_2 \mathbf{S}_2$, 磁矩大小为 $\mu_{1,2}$, 归一

化磁矩 $\mathbf{S}_{1,2}$, 旋磁比 $\gamma_{1,2}$, 吉尔伯特阻尼常数 $\alpha_{1,2}$. 因此, 子晶格 i 的自旋密度为 $s_i = M_i/\gamma_i$, 其中 $\gamma_i = g_i\mu_B\hbar$, M_i 是子晶格的磁化强度, g_i 是朗德因子, μ_B 是玻尔磁子, 交错矢量 $\mathbf{n} = (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2)/2$, 磁化矢量 $\mathbf{m} = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)/2$. 体系的拉格朗日密度为^[17]

$$L = L_B - u, \quad (1)$$

其中第 1 项是贝里项, $L_B = s\dot{\mathbf{n}}(\mathbf{n} \times \mathbf{m}) + \delta_s \mathbf{a}(\mathbf{n}) \cdot \dot{\mathbf{n}}$, $s = (s_1 + s_2)/2$ 为交错自旋密度, $\delta_s = s_1 - s_2$ 为净自旋密度. $\mathbf{a}(\mathbf{n})$ 是由单位电荷磁单极子产生的矢势, 满足 $\nabla_{\mathbf{n}} \times \mathbf{a} = \mathbf{n}$ ^[28], $\dot{\mathbf{n}} = d\mathbf{n}/dt$. u 是磁相互作用导致的自由能密度, 表示为

$$u = \frac{A_{\text{ex}}}{2}(\nabla \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2\chi} \mathbf{m}^2 - \frac{K_Z}{2} n_z^2 - \frac{K_X}{2} n_x^2 - \mathbf{h}(t) \cdot \mathbf{n}, \quad (2)$$

其中, 第 1 项与第 2 项分别为非齐次与齐次交换能, A_{ex} 为交换刚度, χ 为磁化率. 第 3 项为沿 z 轴的各向异性, 各向异性常数为 K_Z , 第 4 项为沿 x 轴各向异性, 各向异性常数为 K_X , 第 5 项为 y 方向的正弦微波磁场 $\mathbf{h}(t) = M_{\text{net}}\mu_0 h_0(0, \sin(\omega t), 0)$, 其中振幅为 h_0 , 频率为 ω , M_{net} 为净磁化强度, 磁化矢量 \mathbf{m} 表示为 $\mathbf{m} = s\chi \dot{\mathbf{n}} \times \mathbf{n}$, 可以将拉格朗日量密度转换为 \mathbf{n} 的函数.

结合 (1) 式和 (2) 式, 总的拉格朗日密度为

$$L = \frac{1}{2}\rho\dot{\mathbf{n}}^2 + \delta_s \mathbf{a}(\mathbf{n}) \cdot \dot{\mathbf{n}} - \frac{A_{\text{ex}}}{2}(\nabla \mathbf{n})^2 + \frac{K_Z}{2} n_z^2 + \frac{K_X}{2} n_x^2 + \mathbf{h}(t) \cdot \mathbf{n}, \quad (3)$$

其中 $\rho = s^2\chi$ 表示动力学的惯性. 采用沃克分析 $\mathbf{n}(z, t) = (\text{sech}((z-q)/\lambda)\cos\phi, \text{sech}((z-q)/\lambda)\sin\phi, \tanh((z-q)/\lambda))$, $\lambda = a(J/(2K))^{1/2}$ 为畴壁的特征宽度, a 为晶格尺寸.

在拉格朗日量中, 通常引入瑞利函数 $R = (\alpha_1 s_1 + \alpha_2 s_2) \dot{\mathbf{n}}^2/2$ 来描述耗散动力学. 为简便起见, 设定两个子晶格的吉尔伯特阻尼常数相等, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. 引入方程 (2) 中使用的两个集合坐标位置 $q(t)$ 和方位 $\varphi(t)$, 以描述畴壁在正弦微波磁场下的运动. 将欧拉-拉格朗日方程与瑞利耗散函数相结合, 得到两个坐标方程:

$$M\ddot{q} + G\dot{q} + M\dot{q}/\tau = 0, \quad (4a)$$

$$I\ddot{\varphi} - G\dot{\varphi} + I\dot{\varphi}/\tau = F - K_X \sin(2\phi\lambda), \quad (4b)$$

其中 $M = 2\rho A/\lambda$ 是质量, $G = 2\delta_s A$ 是回旋系数, A 是畴壁的横截面积, $I = 2\rho A\lambda$ 是惯性矩, $\tau =$

ρ/s_α 是弛豫时间, $F = \pi M_{\text{net}} h_0 \lambda \sin\omega t \cos\phi$ 是正弦微波场施加的力. (4) 式即是畴壁在微波场作用下的动力学方程.

当微波磁场频率小于临界频率时, 畴壁面角振荡的频率高于磁场振荡的频率, 通过估算引入系数 $x = 1.88$ 来描述它们之间的关系, 表示为 $d\varphi/dt = x\omega$. 在临界频率以上, 畴壁与磁场同步振荡, 畴壁不再进动, 只在初始位置振荡. 考虑畴壁的稳态解, 忽略二阶项, 求解方程 (4a) 和方程 (4b) 得到畴壁的运动速度和临界频率:

$$v = \dot{q} = \frac{|\delta_s| \lambda x \omega}{s_\alpha}, \quad (5)$$

$$\omega_c = \frac{(\sqrt{2\pi} M_{\text{net}} h_0 - 2K_X) s_\alpha}{4(s_\alpha^2 + x\delta_s^2)}. \quad (6)$$

(5) 式表明畴壁的运动速度 v 与磁场频率 ω 成线性关系. 在角动量补偿点 $\delta_s = 0$ 处, 畴壁速度为零, 与单一微波磁场无法驱动反铁磁畴壁结果一致. (6) 式表明临界频率与外场和 x 轴各向异性有关, 而与 z 轴各向异性无关.

为验证理论结果并进一步揭示物理机制, 接下来使用微磁学模拟研究畴壁的动力学行为. 纳米条尺寸为 $1 \times 1 \times 600$, 离散形式的哈密顿量为

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - \sum_i K_z (\mathbf{S}_i^z)^2 - \sum_i K_x (\mathbf{S}_i^x)^2 + g_i \mu_B \mu_0 \sum_i \mathbf{H}(t) \cdot \mathbf{S}_i, \quad (7)$$

其中 $J < 0$ 为反铁磁耦合常数, 第 2, 3 项为轴各向异性, 其中与 (3) 式的系数关系是 $K_Z = 2K_z/a^3$, $K_X = 2K_x/a^3$, $\mathbf{H}(t) = h_0(0, \sin(\omega t), 0)$ 是 y 方向的微波磁场.

基于原子模型的 LLG 方程进行数值模拟, 研究过程中考虑了亚铁磁 GdFeCo 材料参数进行模拟, 参数为: $J = 7.5$ meV, $K_z = 0.01J$, $K_x = 0.004J$, 晶格尺寸 $a = 0.4$ nm, 阻尼常数为 $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.01$, 旋磁比为 $\gamma_1 = 1.76 \times 10^{11}$ rad/sT 和 $\gamma_2 = 1.936 \times 10^{11}$ rad/sT, 材料的磁矩和 δ_s 如表 1 所列.

3 模拟结果与讨论

图 3 为不同 δ_s 的理论计算和数值模拟的畴壁速度与 ω 的关联结果. 对于 $\delta_s > 0$, 模拟数据与理论计算符合得很好, 证实了理论的正确性. 在临界频率以下, 畴壁速度随频率线性增长. 当微波磁

表 1 模拟选择的参数, 参数 4 为角动量补偿点 T_A , 净自旋密度 $\delta_s = 0$

 Table 1. Parameters chosen for the simulations, the fourth parameter set corresponds to the angular momentum compensation point T_A with the net spin density $\delta_s = 0$.

参数	1	2	3	4	5	6	7
$M_1 (\mu_s)$	1.13	1.12	1.11	1.10	1.09	1.08	1.07
$M_2 (\mu_s)$	1.06	1.04	1.02	1.0	0.98	0.96	0.94
$\delta_s (\mu_s/\gamma)$	-0.03273	-0.0218	-0.0109	0	0.0109	0.0218	0.03273

场频率高于临界频率后, 不能再有效驱动畴壁. 在 $\delta_s = 0$ 的角动量补偿点, 畴壁不能被微波磁场有效驱动^[26]. 某种程度上, 亚铁磁畴壁可以看作是头对头和尾对尾畴壁的组合, 两套子晶格受到的驱动力矩相互竞争. 当 $\delta_s = 0$ 时, 驱动力矩相互抵消, 无法驱动畴壁运动. 对于有限的 δ_s , 两套子晶格的驱动力矩不能完全抵消, 继而可以驱动畴壁运动. 具体而言, 亚铁磁畴壁面角随着微波磁场旋转, 并且与微波磁场相位存在一定的差值, 继而导致驱动力矩的产生. 对于 $\delta_s < 0$, 模拟和计算结果在低频下存在一定的偏差. 模拟表明, 在大于一定的频率后, 畴壁才能被有效驱动. 为进一步理解相关物理机制, 统计了不同频率下亚铁磁畴壁面的角度 ϕ , 在有效驱动畴壁和不能有效驱动畴壁的频率范围内随机选择 3 种不同的频率进行分析, 结果整理于图 4 中.

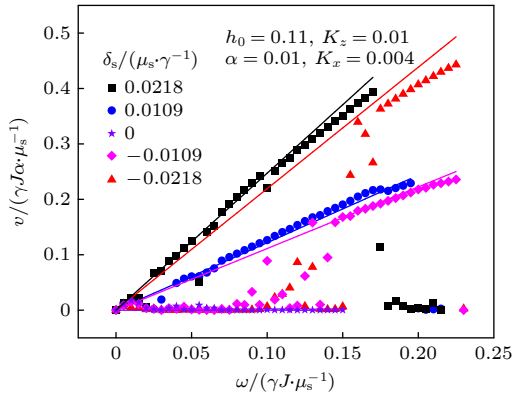

 图 3 $h_0 = 0.11J$, 理论计算 (实线) 和模拟 (实心点) 不同 δ_s 下的畴壁速度 $v(\omega)$

 Fig. 3. The calculated (solid lines) and simulated (solid points) v as a function of ω for various δ_s under $h_0 = 0.11J$.

图 4(a) 给出了低频 $\omega = 0.035$ (~ 31 GHz) 的统计结果. 对于 $\delta_s = 0.0218$, 畴壁面角振荡与微波磁场相位存在一定的偏差, 导致有效力矩作用于畴壁, 驱动畴壁运动. 而与 $\delta_s > 0$ 的情形不同, $\delta_s < 0$ 时畴壁面角的振荡与微波磁场几乎同步, 不会产生进动力矩, 继而无法驱动畴壁运动. 值得关注的是, 不同 δ_s 对应驱动频率不同, 使得可通过调控微波

磁场的频率来定向驱动亚铁磁畴壁. 例如, 低频 $\omega = 0.09$ 可以定向驱动 $\delta_s > 0$ 畴壁, 高频 $\omega = 0.20$ 可以定向驱动 $\delta_s < 0$ 畴壁. 随着频率的进一步增大, 畴壁面角与微波磁场相位产生偏差, 导致净力矩作用于畴壁, 如图 4(b) 所示. 在 $\omega = 0.21$ (~ 191 GHz) 处, 畴壁面角旋转频率约为微波磁场的 2 倍, 产生的作用力矩可以驱动畴壁快速运动, 与理论计算结果相符合. 当微波频率增大到临界频率以上 $\omega = 0.24$ (~ 218 GHz), 畴壁面角旋转无法跟上微波的进动, 如图 4(c) 所示. 在此情况下, 畴壁面角表现出振荡行为, 此时畴壁受到的微波磁场力矩为零, 无法被有效驱动.

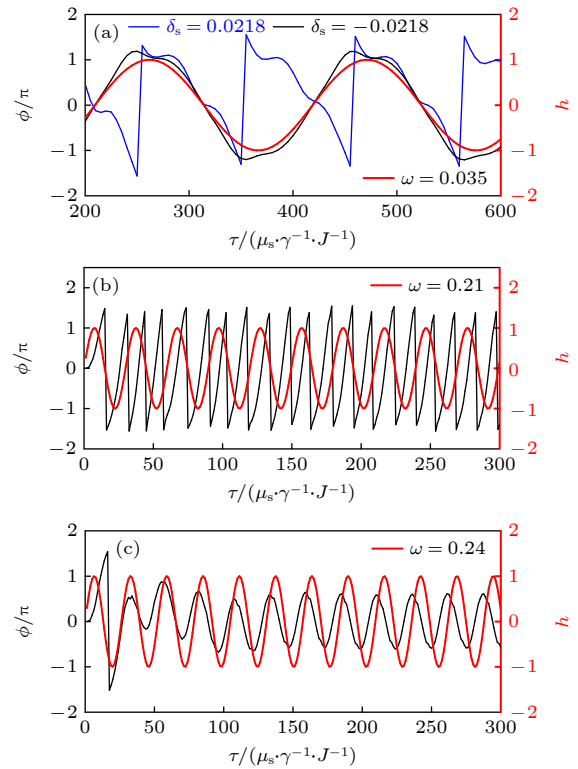

 图 4 不同频率下, 畴壁面角 ϕ 振荡, 红线表示微波场的相位 (a) $\omega = 0.035$, $\delta_s = -0.0218$ 和 0.0218 ; (b) $\omega = 0.21$, $\delta_s = -0.0218$; (c) $\omega = 0.24$, $\delta_s = -0.0218$

 Fig. 4. The domain wall angle ϕ and phase position (red line) of microwave field as functions of time: (a) $\omega = 0.035$, $\delta_s = -0.0218$ and 0.0218 ; (b) $\omega = 0.21$, $\delta_s = -0.0218$; (c) $\omega = 0.24$, $\delta_s = -0.0218$.

另一方面,上述结果也可以从系统能量的角度定性理解.在较低频率下,畴壁面角与微波磁场同步运动降低塞曼能.随着微波频率增大,微波磁场引入的能量增大,导致了畴壁面角的快速和稳定转动释放能量.在一定频率范围内,畴壁面 ϕ 角与微波磁场的频率差导致进动力矩的产生,继而驱动畴壁运动.因此,畴壁面角的稳定旋转及其与微波磁场间的频率差是驱动亚铁磁畴壁运动的必要条件.在临界频率以上,畴壁面角无法稳定旋转,继而无法被有效驱动.前人工作表明,当微波磁场与体系的特征频率接近时,会有快的畴壁动力学[29].本工作中,在频率 $\omega \approx 0.2$ 下得到最高速度,比同强度的圆偏振磁场驱动畴壁运动速度快数倍[28].

另外,强的轴各向异性会抑制畴壁面 ϕ 角的翻转,继而抑制畴壁的运动.畴壁的宽度 $\lambda \sim (J/(2K))^{1/2}$ 也随着各向异性强度的增大而变窄,导致有效驱动力矩的减弱,继而抑制畴壁运动.该现象也得到了模拟结果的证实.如图5(a)所示,对于同一驱动畴壁运动的微波频率,如 $\omega = 0.15$,畴壁速度随着 K_z 的增强而降低.进一步,研究了次各向异性强度

对畴壁动力学的影响,结果如图5(b)所示.结果表明,次各向异性 K_x 对临界频率有很明显的影响.随着 K_x 的增大,临界频率明显降低,与理论推导的(6)式符合得很好.值得注意的是,次各向异性的存在为畴壁面角的翻转提供了一个势垒,增加了畴壁面角翻转的难度.因此,随着次各向异性的增强,该势垒增大,导致了临界频率向低频偏移.

4 结论

使用集体坐标理论结合经典海森伯自旋模型的微磁学模拟,从理论和数值上研究了正弦微波磁场驱动的亚铁磁畴壁运动.结果表明,在一定的微波频率范围内,微波磁场会快速驱动畴壁运动,可以获得比同强度圆偏振磁场更大的运动速度.此外研究和解释了微波磁场驱动畴壁的物理机制,以及速度的影响参数.该工作表明微波磁场可以有效驱动亚铁磁畴壁,为亚铁磁自旋电子学实验设计和器件开发提供了重要参考.

参考文献

- [1] Žutić I, Fabian J, Sarma S Das 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 323
- [2] Zhao W S, Zhang B Y, Peng S Z 2022 *Spintronic Science and Technology* (Beijing: Posts and Telecommunications Press) p6 (in Chinese) [赵巍胜, 张博宇, 彭守仲 2022 自旋电子科学与技术 (北京: 人民邮电出版社) 第6页]
- [3] Han X F 2014 *Introduction to Spintronics* (Vol. 1) (Beijing: Science Press) p10 (in Chinese) [韩秀峰 2014 自旋电子学导论 (上卷) (北京: 科学出版社) 第10页]
- [4] Chen X Z, Zarzuela R, Zhang J, Song C, Zhou X F, Shi G Y, Li F, Zhou H A, Jiang W J, Pan F, Tserkovnyak Y 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 207204
- [5] Baltz V, Manchon A, Tsoi M, Moriyama T, Ono T, Tserkovnyak Y 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015005
- [6] Yu W, Lan J, Xiao J 2018 *Phys. Rev. B* **98** 144422
- [7] Wen D L, Chen Z Y, Li W H, Qin M H, Chen D Y, Fan Z, Zeng M, Lu X B, Gao X S, Liu J M 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013166
- [8] Jin Z, Liu T T, Li W H, Zhang X M, Hou Z P, Chen D Y, Fan Z, Zeng M, Lu X B, Gao X S, Qin M H, Liu J M 2020 *Phys. Rev. B* **102** 054419
- [9] Chen Z Y, Qin M H, Liu J M 2019 *Phys. Rev. B* **100** 020402(R)
- [10] Zhang Y L, Chen Z Y, Yan Z R, Chen D Y, Fan Z, Qin M H 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 112403
- [11] Selzer S, Atxitia U, Ritzmann U, Hinze D, Nowak U 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 107201
- [12] Tveten E G, Qaiumzadeh A, Brataas A 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 147204
- [13] Jin Z, Meng C Y, Liu T T, Chen D Y, Fan Z, Zeng M, Lu X B, Gao X S, Qin M H, Liu J M 2021 *Phys. Rev. B* **104** 054419
- [14] Zvezdin A K, Gareeva Z V, Zvezdin K A 2020 *J. Magn.*

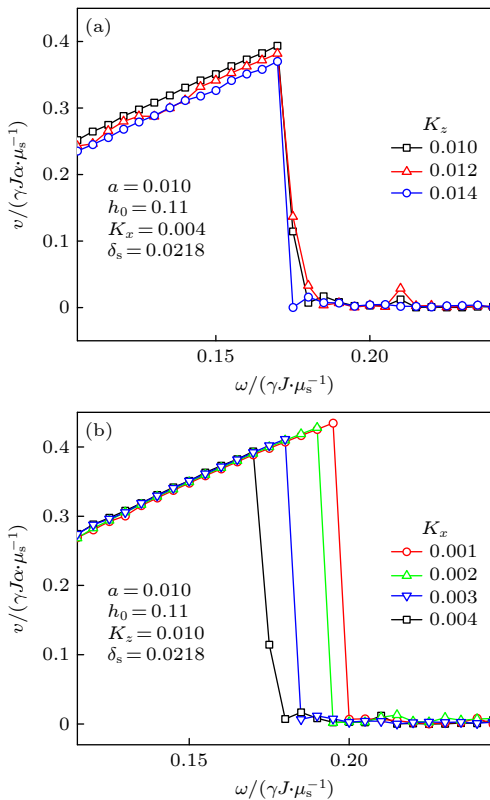


图5 (a) $K_x = 0.004J$ 时不同 K_z , (b) $K_z = 0.010J$ 时不同 K_x 下模拟的 $v(\omega)$ 曲线

Fig. 5. The simulated $v(\omega)$ curves (a) for various K_z at $K_x = 0.004J$, and (b) for various K_x at $K_z = 0.010J$.

- Magn. Mater.* **509** 166876
- [15] Li W H, Jin Z, Wen D L, Zhang X M, Qin M H, Liu J M 2020 *Phys. Rev. B* **101** 024414
- [16] Kim K J, Kim S K, Hirata Y, Oh S H, Tono T, Kim D H, Okuno T, Ham W S, Kim S, Go G, Tserkovnyak Y, Tsukamoto A, Moriyama T, Lee K J, Ono T 2017 *Nat. Mater.* **16** 1187
- [17] Oh S H, Kim S K, Xiao J, Lee K J 2019 *Phys. Rev. B* **100** 174403
- [18] Caretta L, Mann M, Büttner F, Ueda K, Pfau B, Günther C M, Hessing P, Churikova A, Klose C, Schneider M, Engel D, Marcus C, Bono D, Bagschik K, Eisebitt S, Beach G S D 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 1154
- [19] Caretta L, Oh S H, Fakhrul T, Lee D K, Lee B H, Kim S K, Ross C A, Lee K J, Beach G S D 2020 *Science*. **370** 1438
- [20] Sun C, Yang H, Jalil M B A 2020 *Phys. Rev. B* **102** 134420
- [21] Yuan H Y, Cao Y, Kamra A, Duine R A, Yan P 2022 *Phys. Rep.* **965** 1
- [22] Yu H, Xiao J, Schultheiss H 2021 *Phys. Rep.* **905** 1
- [23] Oh S H, Kim S K, Lee D K, Go G, Kim K J, Ono T, Tserkovnyak Y, Lee K J 2017 *Phys. Rev. B* **96** 100407(R)
- [24] Martínez E, Raposo V, Alejos Ó 2019 *J. Magn. Magn. Mater.* **491** 165545
- [25] Wang X G, Guo G H, Nie Y Z, Wang D W, Zeng Z M, Li Z X, Tang W 2014 *Phys. Rev. B* **89** 144418
- [26] Chen Z Y, Yan Z R, Zhang Y L, Qin M H, Fan Z, Lu X B, Gao X S, Liu J M 2018 *New J. Phys.* **20** 063003
- [27] Jin M, Hong I S, Kim D H, Lee K J, Kim S K 2021 *Phys. Rev. B* **104** 184431
- [28] Liu T T, Hu Y F, Liu Y, Jin Z J Y, Tang Z H, Qin M H 2022 *Rare Met.* **41** 3815
- [29] Wadley P, Howells B, Železný J, Andrews C, Hills V, Champion R P, Novák V, Olejník K, Maccherozzi F, Dhesi S S, Martin S Y, Wagner T, Wunderlich J, Freimuth F, Mokrousov Y, Kuneš J, Chauhan J S, Grzybowski M J, Rushforth A W, Edmond K, Gallagher B L, Jungwirth T 2016 *Science* **351** 587

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Dynamics of ferrimagnetic domain walls driven by sinusoidal microwave magnetic field*

Zhao Chen-Rui Wei Yun-Xin Liu Ting-Ting Qin Ming-Hui[†]

(Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, South China Institute of Advanced Optoelectronics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 1 June 2023; revised manuscript received 12 July 2023)

Abstract

Ferrimagnetic domain walls have received more and more attention because of their interesting physics and potential applications in future spintronic devices, particularly attributing their non-zero net magnetization and ultrafast dynamics. Exploring effective methods of driving domain walls with low energy consumption and high efficiency can provide important information for experimental design and device development. In this work, we study theoretically and numerically the dynamics of ferrimagnetic domain wall driven by the sinusoidal microwave magnetic field using the collective coordinate theory and Landau-Lifshitz-Gilbert simulations of atomistic spin model. It is revealed that the microwave field drives the propagation of the domain wall when the frequency falls into an appropriate range, which allows one to modulate the domain wall dynamics through tuning field frequency. Specifically, below the critical frequency, the domain wall velocity is proportional to the field frequency and the net angular momentum, while above the critical frequency, the domain wall velocity decreases rapidly to zero. The physical mechanisms of the results are discussed in detail, and the influences of the biaxial anisotropy and other parameters on the velocity of domain wall are studied. It is suggested that the wall dynamics can be effectively regulated by adjusting the basic magnetic structure and magnetic anisotropy, in addition to the external microwave field frequency. This work uncovers the interesting dynamics of ferrimagnetic domain wall driven by sinusoidal microwave magnetic field, which is helpful for designing domain wall-based spintronic device.

Keywords: domain wall dynamics, spintronics, sinusoidal microwave magnetic field, ferrimagnets

PACS: 85.75.-d, 75.50.Gg

DOI: [10.7498/aps.72.20230913](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230913)

* Project supported by the Natural Science Foundation of China (Grants No. U22A20117, 52371243, 51971096), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2022A1515011727), and the Funding by Science and Technology Projects in Guangzhou, China (Grant No. 202201000008).

[†] Corresponding author. E-mail: qinmh@scnu.edu.cn



正弦微波磁场驱动亚铁磁畴壁动力学

赵晨蕊 魏云昕 刘婷婷 秦明辉

Dynamics of ferrimagnetic domain walls driven by sinusoidal microwave magnetic field

Zhao Chen-Rui Wei Yun-Xin Liu Ting-Ting Qin Ming-Hui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 208502 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230913

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230913>

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

斯格明子电子学的研究进展

Overview and advances in skyrmionics

物理学报. 2018, 67(13): 131205 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180554>

磁斯格明子器件及其应用进展

Overview of magnetic skyrmion-based devices and applications

物理学报. 2018, 67(13): 137505 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180894>

磁性二维材料的近期研究进展

Recent research advances in two-dimensional magnetic materials

物理学报. 2022, 71(12): 127504 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220301>

层状手性拓扑磁材料 $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$ 的磁学特性

Magnetic properties of layered chiral topological magnetic material $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$

物理学报. 2020, 69(11): 117501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200007>

铁磁/非磁金属异质结中的拓扑霍尔效应

Topological Hall effect in ferromagnetic/non-ferromagnetic metals heterojunctions

物理学报. 2018, 67(13): 131202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180369>

马约拉纳费米子与杂质自旋相互作用的热偏压输运

Interplay between Majorana fermion and impurity in thermal-driven transport model

物理学报. 2021, 70(11): 117401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202241>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

拓扑材料中的平面霍尔效应*

巴佳燕# 陈复洋# 段后建 邓明勋 王瑞强†

(华南师范大学物理学院, 广东省高等学校物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

(华南师范大学物理前沿科学研究院, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

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

平面霍尔效应 (planar Hall effect, PHE) 是当前凝聚态输运中研究的热点之一. 近年来, 平面霍尔效应, 尤其是拓扑材料中的平面霍尔效应, 引起了人们的广泛关注和研究, 并取得了很大的进展. 不同于普通霍尔效应, 平面霍尔效应中的横向电流、磁场和电场可以出现在同一平面, 无法用洛伦兹力解释, 其很大程度上依赖于磁电阻的各向异性. 本文从理论和实验两个角度介绍拓扑材料中平面霍尔效应的研究进展, 深入分析了导致线性和非线性平面霍尔效应的各种外禀和内禀机制, 并讨论尚待解决的相关问题和未来的发展方向.

关键词: 平面霍尔效应, 非线性效应, 拓扑材料**PACS:** 72.15.Gd, 73.20.At, 73.43.Qt, 75.70.Tj**DOI:** 10.7498/aps.72.20230905

1 引言

霍尔效应是物理学中最基本和研究最广泛的现象之一^[1,2]. 1879 年, 美国物理学家埃德温·霍尔 (E. H. Hall) 在研究金属的导电机制时发现, 当电流垂直于外磁场通过导体时, 将在垂直于电流和磁场的方向上产生电势差^[1,3], 这种现象被称为霍尔效应. 研究表明, 霍尔电压与磁场强度呈线性关系, 其斜率 (霍尔系数) 的大小和符号取决于导体中的载流子浓度和载流子类型 (电子或空穴). 随后, 霍尔在研究磁性金属的霍尔效应时又发现了反常霍尔效应: 磁性金属的霍尔电阻率包含了一个不需要外磁场且比普通霍尔效应大得多的反常贡献, 它直接取决于材料的磁化强度, 并且偏离与磁场的线性关系. 例如, 金属镍的反常霍尔系数在居里温度附近大约比普通霍尔系数大 100 倍^[4]. 1980 年, 德国物理学家冯·克利钦 (Klaus von Klitzing) 在研究

二维电子气在强磁场和低温环境下的输运性质时发现分立的霍尔电导, 即所谓的量子霍尔效应, 其数值上等于电导量子单位 e^2/h 的整数倍^[5]. 后来, 人们又相继发现了自旋霍尔效应^[6]、分数量子霍尔效应^[7]、量子反常霍尔效应^[8,9]、三维量子霍尔效应^[10,11]、平面霍尔效应 (planar Hall effect, PHE)^[12-14]、以及非线性平面霍尔效应 (nonlinear planar Hall effect, NPHE)^[15] 等. 在此领域已经诞生了多个诺贝尔物理学奖. 近年来, 平面霍尔效应和非线性平面霍尔效应引起了人们的广泛关注和研究, 并迅速取得了进展^[16-18]. 本文将从理论和实验两个方面介绍拓扑材料中的线性和非线性平面霍尔效应研究进展, 及涉及的相关物理机制.

2 平面霍尔效应

物理上, 霍尔效应的出现是由于带电粒子受到洛伦兹力发生轨道偏转, 而反常霍尔效应不需要

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874016, 12274146, 12174121, 12104167) 和广东省自然科学基金 (批准号: 2021A1515010369) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: wangruiqiang@m.scnu.edu.cn

洛伦兹力的作用,因而与普通霍尔效应存在本质上的不同.反常霍尔效应的物理机制直到二十世纪八十年代贝里(Berry)相位理论建立起来后才逐渐被揭示^[19].事实上,反常霍尔效应与材料的电子自旋轨道耦合作用以及电子能带的拓扑性质相关.在铁磁材料中,反常霍尔效应可以由外禀和内禀机制贡献^[4,20].外禀机制由晶体周期势的突然变化,如结构缺陷或杂质导致载流子的不对称散射引起^[21–23],而内禀反常霍尔效应源于材料的量子力学特性,由晶体动量空间中的贝里曲率导致^[24,25].从理论上说,霍尔效应和反常霍尔效应都可以归结于传导电子由于某种机制而获得一个横向的速度.在半经典理论框架下,能带电子在实空间的运动速度满足半经典运动方程^[25]: $\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n$, 其中 $\dot{\mathbf{r}}$ 表示电子速度, $\boldsymbol{\Omega}_n = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k})$ 为贝里曲率矢量. $\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle$ 代表贝里联络,描述相邻两个 \mathbf{k} 点之间波函数的交叠程度.形式上, $\mathbf{A}_n(\mathbf{k})$ 可以看作是动量空间中的“矢势”,相应地, $\boldsymbol{\Omega}_n$ 可以看作动量空间中的“磁场”.因此,贝里曲率将贡献一个垂直于电场和“磁场”方向的反常速度项,导致内禀反常霍尔效应的出现,其霍尔电导率由反常速度项在布里渊区内的积分给出:

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \Omega_n^z f(\varepsilon_n(\mathbf{k})), \quad (1)$$

其中, $f(\varepsilon) = 1/[1 + \exp(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T})]$ 表示费米分布函数, E_F 为费米能.在动量空间,电子的速度为

$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B})$, 其中第二项为洛伦兹力在动量空间贡献的反常速度.由此可见,能带电子反常速度的方向总是与“磁场”和电场垂直,导致无论是普通霍尔效应还是反常霍尔效应中的横向电流都与“磁场”和电场不共面.

最近,另一种霍尔效应引起了人们的广泛关注和研究,其横向电流、磁场和电场三者共面,故称为平面霍尔效应.通常,平面霍尔效应出现在磁性材料中,如铁磁和反铁磁半导体^[12,14,26,27],并伴随着大各向异性磁电阻(anisotropic magnetoresistivity, AMR)效应的出现.最近的实验发现,在强自旋轨道耦合系统中,如二维电子气体^[28,29]、拓扑绝缘体^[15,30]和狄拉克/外尔半金属^[31–36]等非磁性材料,也能出现平面霍尔效应,掀起了研究平面霍尔效应的热潮^[37–39].

2.1 三维拓扑绝缘体中的线性平面霍尔效应

2017年,Taskin等^[30]首次在非磁性三维拓扑绝缘体 $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ 中观测到了平面霍尔效应,他们的实验装置如图1(a)所示.测量的平面霍尔效应和各向异性磁电阻随电场和磁场的夹角变化满足标准的正余弦函数关系,同时,平面霍尔电阻的幅值在狄拉克点附近出现一个双峰特征结构,如图1(c)和图1(d)所示.随后,在Sn掺杂拓扑绝缘体 $\text{Bi}_{1.1}\text{Sb}_{0.9}\text{Te}_2$ 中观测到了平面霍尔效应的SdH(Shubnikov-de-Haas)振荡,由此确定了三维拓扑

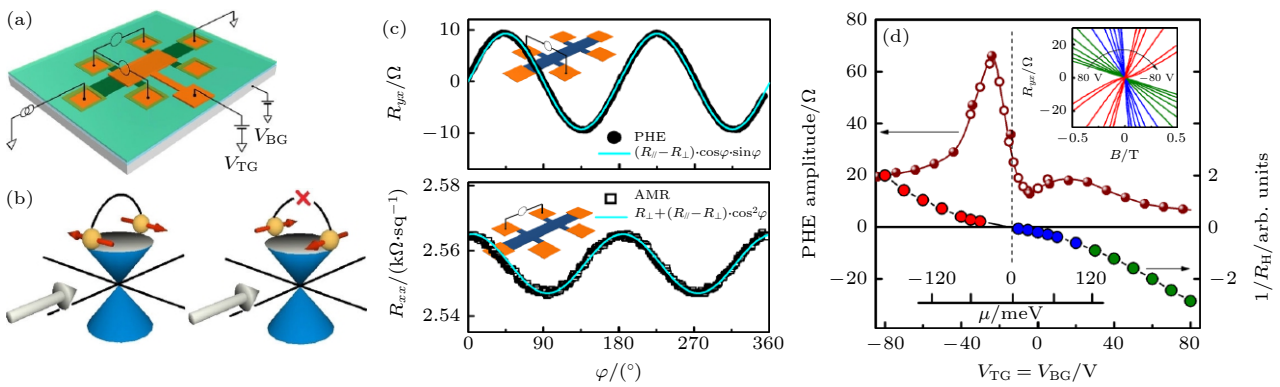


图1 (a) $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ 的薄膜双门霍尔棒控器件简图; (b) 自旋极化杂质背散射以及背散射锁定的示意图; (c) 磁场下 PHE 和纵向磁电阻振幅随着角度的变化; (d) 磁场下的 PHE 振幅(左轴)以及有效总载流子密度(右轴)关于门电压的依赖性^[30]

Fig. 1. (a) A sketch of the $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ dual-gate Hall-bar device and the measurement configuration; (b) schematic diagram of spin-polarized impurity backscattering and backscattering locking; (c) PHE and longitudinal magnetoresistance variation with angle at magnetic field; (d) dependence of PHE amplitude (left axis) and effective total carrier density (right axis) about gate voltage under magnetic field. Image cited from Ref.^[30].

绝缘体中的平面霍尔效应源于螺旋拓扑表面态的自旋动量锁定^[40]. Taskin 等理论上将观测到的平面霍尔效应归因于磁性杂质导致的各向异性电子散射, 而事实上实验中并没有掺磁性杂质. 因此, 探索平面霍尔效应的物理机制成为大家关注的焦点.

2.1.1 狄拉克锥倾斜机制

我们研究组发现不需要磁性杂质散射也能导致平面霍尔效应, 提出拓扑表面态在面内磁场作用下的狄拉克锥倾斜与表面态自旋动量锁定是导致平面霍尔效应的根源^[41]. 水平磁场作用下的三维拓扑绝缘体表面态可表示为

$$h_{\text{TI}}(\mathbf{k}) = Dk^2 + \hbar v_F (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})_z - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{//} - \mu, \quad (2)$$

其中 v_F 是费米速度; $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利矩阵; μ 表示化学势; $\mathbf{B}_{//} = (B_x, B_y) = B(\cos \theta_B, \sin \theta_B)$ 代表外加水平磁场; 动量的平方项对应于费米子的牛顿质量项, 由电子-空穴不对称性引起^[42]. 若哈密顿量不含平方项 ($D = 0$), 面内磁场的作用只是在动量空间平移狄拉克锥, 因此不会产生任何可观测的物理效应. 若 $D \neq 0$, 在平移后的狄拉克点附近, 对哈密顿量作泰勒展开可得到:

$$h_{\text{TI}}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \hbar v_F (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma})_z + \hbar v_B (k_x \sin \theta_B - k_y \cos \theta_B) - \mu, \quad (3)$$

其中 $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ 表示动量的平方项, $\hbar v_B = 2DB/\hbar v_F$. 显然, 面内磁场使得哈密顿量多出一项, 由此导致狄拉克锥倾斜, 见图 2(a) 和图 2(b). 狄拉克锥倾斜后, 电子的自旋动量锁定将发生变化. 如图 2(c) 和图 2(d) 所示, 狄拉克锥倾斜后, 等能面由圆变成椭圆, 使得平行于磁场方向的态 $|k\rangle$ 和 $|-k\rangle$ 的自旋不再反平行, 从而打开背散射通道, 而垂直于磁场的方向上背散射仍被抑制. 各向异性电子散射将导致磁电阻的各向异性, 从而产生平面霍尔效应.

进一步通过格林函数形式下的久保 (Kubo) 公式

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{\hbar}{2\pi V} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \text{Tr} \{ [\hat{j}_\alpha \partial_\varepsilon \hat{G}_k^R(\varepsilon) \hat{j}_\beta - \hat{j}_\beta \partial_\varepsilon \hat{G}_k^A(\varepsilon) \hat{j}_\alpha] [\hat{G}_k^R(\varepsilon) - \hat{G}_k^A(\varepsilon)] \}, \quad (4)$$

可以计电导率, 其中 V 为原胞体积, $\hat{G}_k^{\text{R(A)}}(\varepsilon) = 1/(\varepsilon - \hat{H}_0 \pm i\Gamma)$ 表示推迟 (超前) 格林函数, $i\Gamma$ 为弱杂质散射时的自能, $\hat{j}_{\alpha,\beta}$ 表示电流密度算符. 若 $\hbar v_B \ll \hbar v_F$, 在零温近似及弱杂质散射情况下, 电

导率可表示为

$$\sigma_{xx} = \sigma_\perp + (\sigma_{//} - \sigma_\perp) \cos^2 \theta_B, \quad (5)$$

$$\sigma_{xy} = (\sigma_{//} - \sigma_\perp) \sin \theta_B \cos \theta_B, \quad (6)$$

其中 $\sigma_\perp = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \frac{|\mu|}{\Gamma}$, $\sigma_{//} = \frac{e^2}{h} \frac{|\mu|}{\Gamma} \left(\frac{1}{2} - \frac{v_B^2}{v_F^2} \right)$. 由 (6) 式可见, 平面霍尔电导率除了在平行和垂直于磁场的方向上为零, 其他方向上都具有非零值, 满足平面霍尔效应的典型角度依赖关系. 需要强调的是, 这里的平面霍尔效应不需要杂质的自旋极化, 与 Taskin 等在文献^[30]中提出的机制完全不同. 在相对弱杂质散射情况下, 平面霍尔电阻 (planar Hall resistivity, PHR) ρ_{xy} 和各向异性磁电阻 ρ_{xx} 遵循普遍规律 (5) 式和 (6) 式, 如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 然而, 随着杂质势 U 的增强, 它们的振幅发生明显变化, 最终出现 ρ_{xy} 和 ρ_{xx} 振幅不相等的情况, 见图 3(c) 和图 3(d), 与 Taskin 等的实验观测结果相符. 这里, 振幅之所以不相等, 是因为存在自能的非对角分量 Σ_x 和 Σ_y . 在弱杂质散射下, 这些自能的非对角分量趋于零, 因而平面霍尔电阻和各向异性磁电阻退回到 (5) 式和 (6) 式中的普遍规律.

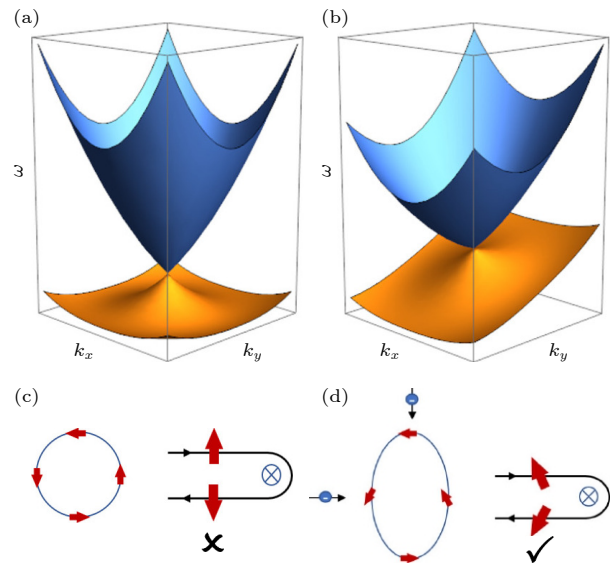


图 2 (a) 和 (b) 展现了包含动量平方项的狄拉克锥在平面磁场下发生倾斜; (c) 和 (d) 展示了加入面内磁场后造成的背散射锁定的解除, 从而导致各向异性的纵向磁电阻率^[41]

Fig. 2. (a) and (b) exhibit the Dirac cone containing the momentum squared term tilted under a planar magnetic field; in (c) and (d) the unlocking of the backscattering caused by the addition of an in-plane magnetic field is shown, resulting in an anisotropic longitudinal magnetoresistivity. Image cited from Ref.^[41].

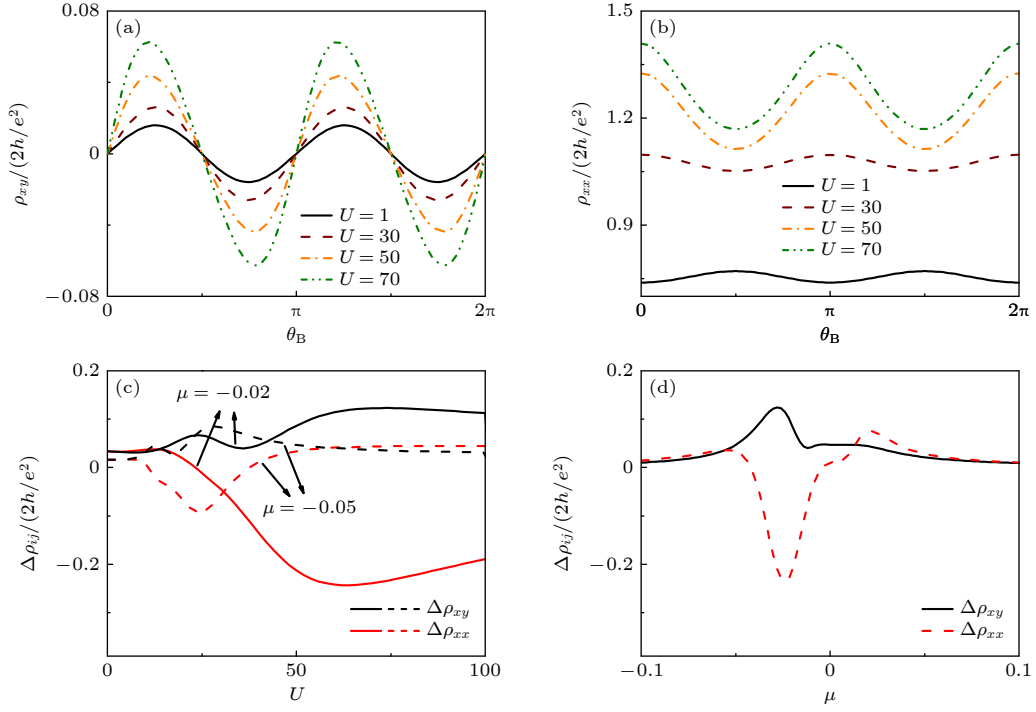


图 3 (a) 平面霍尔电阻 (planar Hall resistivity, PHR) 和 (b) 各向异性磁电阻 (anisotropic magnetoresistivity, AMR) 随着磁场与电场的角度 θ_B 振荡; (c) 在不同化学势下, PHR 和 AMR 的振幅与杂质势 U 的关系; (d) PHR 和 AMR 的振幅与化学势 μ 的关系 (其中 $U = 50$)^[41]

Fig. 3. (a) Planar Hall resistivity (PHR) and (b) anisotropic magnetoresistivity (AMR) oscillate with the angle θ_B of the magnetic and electric fields; (c) amplitudes of PHR and AMR versus impurity potential U at different chemical potentials; (d) amplitudes of PHR and AMR versus chemical potential μ where $U = 50$. Image cited from Ref.[41].

研究还发现, 无论杂质势和化学势如何变化, PHR 的振幅不变号, 然而 AMR 的振幅却会随着两者变号, 如图 3(c) 和图 3(d) 所示, 这与文献 [30] 中的观测一致. 该理论很好地复现了实验观测到的特征双峰结构, 如图 4 所示, 该双峰结构对杂质势和磁场很敏感.

2.1.2 磁振子散射机制

尽管在不同体系中平面霍尔效应的机制可能不同, 但其纵向和横向电导率普遍满足 (5) 式和 (6) 式. 最近在拓扑绝缘体/铁磁层中发现, 平面霍尔效应在电场和磁场共线的情况下也能出现, 并表现出复杂的角度依赖关系^[29,38,43]. 如何从理论上理解这些实验结果, 也是一个开放的问题.

为了解释实验观测到的复杂平面霍尔效应, 我们研究组从铁磁/拓扑绝缘体异质结模型出发^[16], 如图 5(a) 所示, 其哈密顿量可以写为

$$H = \sum_k c_k^\dagger \mathcal{H}_k c_k + \sum_k c_k^\dagger V_q c_{k+q} - J_{\text{ex}} \sum_{kq} \left(c_{k+q}^\dagger \varsigma_- c_k b_q + c_{k-q}^\dagger \varsigma_+ c_k b_q^\dagger \right) + \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q, \quad (7)$$

其中, $\mathcal{H}_k = \hbar v_F (\boldsymbol{\sigma} \times \hat{e}_z) \cdot \mathbf{k} + h_k + g\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{//}$ 表示拓扑绝缘体表面态的单粒子激发; $V_{k-k'} = \sum_m V_m e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_m}$ 表示随机分布杂质引起的不同波矢之间的电子跳跃; $\hbar\omega_q$ 表示铁磁绝缘体 (FMI) 中磁振子的频谱^[44]; μ_B , g 和 V_m 分别为玻尔磁子、 g 因子及在 \mathbf{R}_m 处的杂质散射势. $c_k^\dagger = (c_{k,\uparrow}^\dagger, c_{k,\downarrow}^\dagger)$ 和 b_q^\dagger 分别表示费米子和磁振子产生算符, $\varsigma_{\pm} = \varsigma_x \pm i\varsigma_y$ 是自旋泡利矩阵, v_F 是费米速度, $h_k = Dk^2 + \frac{1}{2}\lambda(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z$ 表示拓扑绝缘体表面态的高阶项. 这里, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, Dk^2 表示表面态的牛顿质量项^[42], $\frac{1}{2}\lambda(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z$ 描述色散关系中的六角翘曲 (warping) 效应^[45,46]. 对于低能磁振子激发, $2S \gg \langle b_q^\dagger b_q \rangle$ (S 是自旋密度的大小), 自旋密度算符可表示为: $S_q^{\bar{x}} = \mathbf{S}\delta_{q,0} - b_q^\dagger b_q$, $S_q^+ = S_q^z + iS_q^y = \sqrt{2S}b_q$, $S_q^- = S_q^z - iS_q^y = \sqrt{2S}b_q^\dagger$. 其中, $\mathbf{S} = S\hat{e}_x$ 是自旋密度的大小, \hat{e}_x 是铁磁绝缘体的磁化方向.

由海森伯运动方程 $i\hbar\partial_t \langle \langle \hat{A} | \hat{B} \rangle \rangle_\tau^R = \delta(\tau) \langle \{ \hat{A}, \hat{B} \} \rangle_\tau^R + \langle \langle [\hat{A}, H] | \hat{B} \rangle \rangle_\tau^R$, 结合傅里叶变换: $G_k^R(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle c_k | c_k^\dagger \rangle \rangle_\tau^R e^{-i\varepsilon\tau/\hbar} d\tau$, 我们可以推导出体系的推

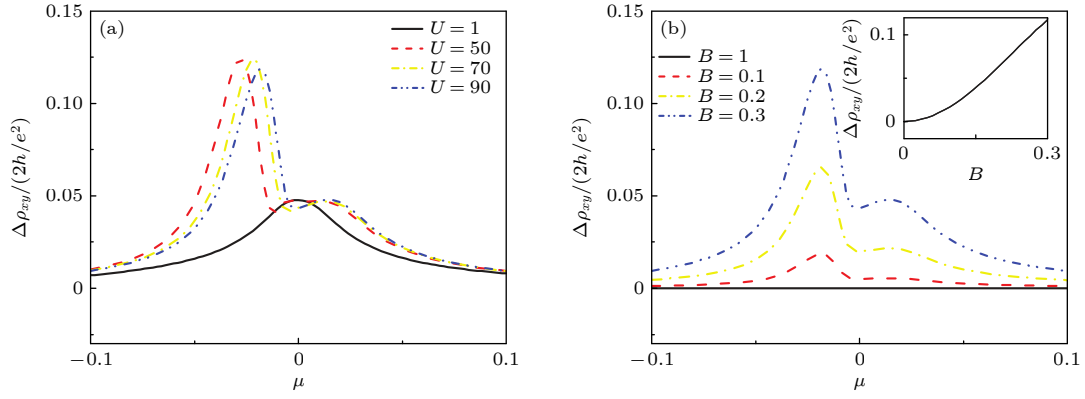


图 4 平面霍尔电阻 (planar Hall resistivity, PHR) 随化学势的演化图 (a) 不同杂质势取值对双峰的影响; (b) 不同磁场强度对双峰的影响. 插图展示了 PHR 振幅随磁场强度 B 的变化, 当 B 较小时呈二次方关系, 较大时呈线性关系^[41]

Fig. 4. Evolution of the double-peak structure in planar Hall resistivity (PHR) amplitude $\Delta\rho_{xy}$ with (a) Effect of different U values on double-peaks, and (b) effect of different magnetic field strength on double-peaks. The inset of (b) shows the $\Delta\rho_{xy}$ as a function of the magnetic field strength B . Image cited from Ref.[41].

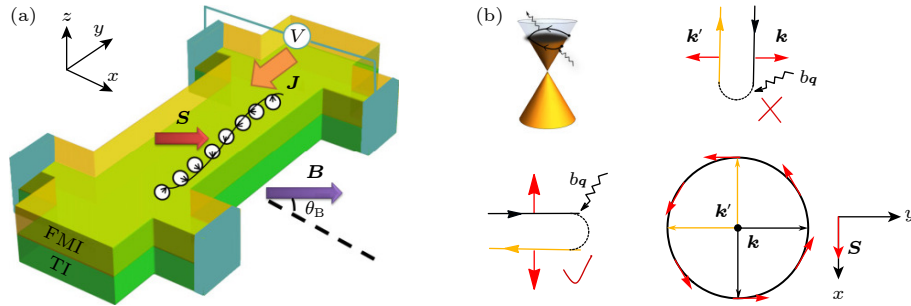


图 5 (a) 铁磁绝缘体/拓扑绝缘体双层异质结构装置以及所选坐标系示意图, 其中 θ_B 为外磁场与 x 轴的夹角. 这里假设铁磁体被完全磁化 (S 与 B 平行). (b) 各向同性费米表面上的磁振子散射示意图^[16]

Fig. 5. (a) Schematic diagram of the ferromagnetic insulator/topological insulator bilayer heterostructure device and the chosen coordinate system, where θ_B is the angle between the external magnetic field and the x -axis. We assume that the ferromagnet is fully magnetized, which leads to $S//B$. (b) Schematic of the magnon scattering for isotropic Fermi surface. Image cited from Ref.[16].

迟格林函数 $G_k^R(\varepsilon) = g_k^R(\varepsilon) [1 - g_k^R(\omega)\Sigma_k(\varepsilon)]^{-1}$, 其中 $g_k^R(\varepsilon)$ 为无微扰下的格林函数, $\Sigma_k(\varepsilon) = \Sigma_{k,0}(\varepsilon) + \Sigma_{k,+}(\varepsilon) + \Sigma_{k,-}(\varepsilon)$ 为自能, 这 3 项分别对应杂质散射、磁振子吸收和发射过程. 零温时, 由于泡利阻塞, 磁振子吸收和发射过程被抑制, 此时电子散射主要由杂质散射即自能 $\Gamma_0(\varepsilon) = \text{Im}[\Sigma_{k,0}(\varepsilon)]$ 主导. 如果 $D = 0$, $\lambda = 0$, $\Gamma_0(\varepsilon)$ 与角度无关, 此时, 面内磁化可通过规范变换消去, 因此无法导致平面霍尔效应. 有限温度下, 费米面因热涨落而变模糊, 有利于磁振子的吸收和放出. 随着温度升高, 磁振子主导电子散射. 即使色散是各向同性的, 磁振子散射也会导致角度相关的自能, 表现出各向异性电子散射. 这里, 自旋与动量是垂直锁定的, 因此, 与自旋翻转过程相关的磁振子散射倾向于在垂直于磁化的方向 (即 $\phi - \theta_B = n\pi/2$) 上发生, 如图 5(b) 所示, 导致各向异性磁电导率以及平面霍尔效应的出现.

由 Kubo-Streda 公式可以得到沿电场方向 (纵向) 和垂直于电场方向 (横向) 的电导率:

$$\sigma_L = \sigma_{\perp} + \Delta\sigma \cos^2\theta - (\sigma_{//\perp} + \sigma_{\perp//}) \sin\theta \cos\theta, \quad (8)$$

$$\sigma_H = \sigma_{//\perp} + \Delta\sigma \sin\theta \cos\theta - (\sigma_{//\perp} + \sigma_{\perp//}) \sin^2\theta, \quad (9)$$

其中 $\Delta\sigma = \sigma_{//} - \sigma_{\perp}$, $\theta = \theta_B - \theta_E$ 为电场和磁场的相对夹角. 这里采用缩写 $\sigma_{\perp} \equiv \sigma_{\perp\perp}$, $\sigma_{//} \equiv \sigma_{//}$, 其中, $//$ 对应 \hat{e}_x 方向, 即平行于磁场的方向, \perp 对应 \hat{e}_y 方向, 即垂直于磁场的方向. 电导率的数值结果表明, $\Delta\sigma = \sigma_{//} - \sigma_{\perp}$ 在零温下等于零. 随着温度升高, 磁振子散射过程被激活, $\Delta\sigma$ 变为有限值, 从而导致各向同性的线性色散下也能出现平面霍尔效应. 与 (5) 式和 (6) 式比较可知, 这里的 (8) 式和 (9) 式新增了后面一项, 来自于非对角的霍尔效应, 它们依赖于角度, 最终导致复杂的角度依赖关系. 此外, 在翘曲效应的作用下, 即 $\lambda \neq 0$ 时, 系

统将会打开能隙, 出现非零的贝里曲率, 产生非平庸陈数, 因而产生内禀的平面霍尔电导, 对 (9) 式中的第一项产生贡献.

2.2 外尔半金属中的线性平面霍尔效应

在过去的几年里, 从有能隙的拓扑绝缘体到各种无能隙的拓扑半金属, 物质的拓扑相受到了极大的关注 [47–49]. 外尔半金属作为三维拓扑半金属的一个典型例子, 在理论 [33–35,50,51] 和实验 [52–54] 方面都得到了广泛研究. 外尔半金属在外尔点附近激发的外尔费米子具有线性色散关系, 并且费米面包围的贝里通量在外尔点附近被量子化. 外尔点可以看成具有明确手性的拓扑电荷, 并且在动量空间充当贝里曲率的源或汇 [55].

理论预言不久 [56,57], 外尔半金属态在 TaAs [58,59] 以及几种不同的化合物 [60–62] 中被实验所证实. 它们独特的拓扑性质赋予了外尔半金属态许多有趣的物理特性, 其中, 手征反常和手征磁效应最为突出. 在拓扑场论框架下, 若配对的外尔点在能量-动量空间沿四维轴矢量 (b_0, \mathbf{b}) 分离, 则可以在外尔半金属中观察到手征反常和手征磁效应. 虽然四维轴矢量没有打破系统的手征对称性, 但它打破了体系的洛伦兹对称性 [63]. 因此, 通过局域手征变换消除四维轴矢量后, 将会在路径积分测度中引入一个类 Chern-Simons 项 [63,64], 由此导致反常电磁响应 $\mathbf{j} = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar}(b_0\mathbf{B} + \mathbf{b} \times \mathbf{E})$. 由规范不变性, 可以推导出连续性方程

$$\partial_\nu j_5^\nu = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}, \quad (10)$$

其中, $j_5^{\nu \geq 1}$ 是手征电流密度, j_5^0 是手征电荷密度, \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 分别表示外电场和外磁场. (10) 式描述了手征反常, 即当 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \neq 0$ 时, 手征荷不守恒, 从而在两个相反的外尔点间形成非平衡手征化学势 [65], 如图 6 所示. 手征磁效应由 $\mathbf{j} \sim b_0\mathbf{B}$ 描写, 即: 当两个外尔点在能量空间上分离或者在外尔点之间存在手征化学势时, 可以沿外磁场方向诱导出可观测的电荷电流. 固体中手征反常的观测不仅在概念上具有重要意义, 而且可以为实现高速电子电路和拓扑量子计算提供理论基础 [66,67]. 因此, 近年来, 人们致力于在各种外尔材料中寻找手征反常的证据 [68,69]. 其中, 测量手征反常引起的正纵向磁电导率和平面霍尔效应是识别外尔半金属材料的常用方法之一.

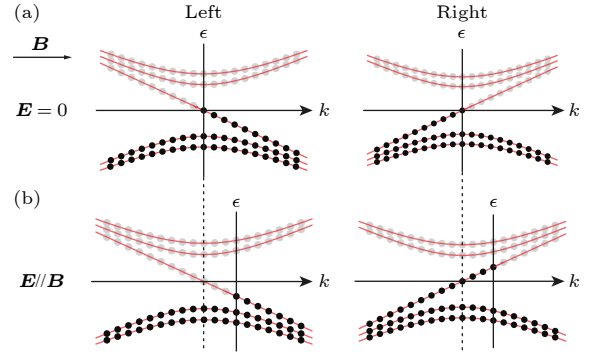


图 6 (a) 在磁场 \mathbf{B} 存在下, 左手性和右手性费米子填充的能谱; (b) 存在额外平行于磁场 \mathbf{B} 的电场 \mathbf{E} 时左手性和右手性费米子的能谱填充图 [65]

Fig. 6. (a) Energy spectra of left-handed and right-handed fermions in the presence of a magnetic field \mathbf{B} ; (b) energy spectra of left-handed and right-handed fermions in the presence of an electric field \mathbf{E} additionally parallel to the magnetic field \mathbf{B} . Image cited from Ref. [65].

2.2.1 (类) 手征反常机制

一般情况下, 单手性外尔点附近的低能有效哈密顿量可以表示为

$$H_k^X = \hbar v_F (\chi \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} + C k_x \sigma_0), \quad (11)$$

其中 $\chi = \pm 1$ 表示外尔费米子的手征荷, 常数 C 是倾斜因子. 在弱磁场下, 朗道量子化可以忽略, 电子输运可以用半经典玻尔兹曼方程描述:

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{k}} = I_{\text{coll}}\{f_k\}, \quad (12)$$

其中, f_k 是电子的分布函数, $\hbar \mathbf{k}$ 是准动量, $I_{\text{coll}}\{f_k\}$ 是碰撞积分. 通过解 \mathbf{r} 和 \mathbf{k} 满足的半经典运动方程可得:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_k\right)^{-1} \\ &\quad \times \left[\mathbf{v}_k + e \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_k + \frac{e}{\hbar} (\boldsymbol{\Omega}_k \cdot \mathbf{v}_k) \mathbf{B}\right], \\ \dot{\mathbf{k}} &= \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_k\right)^{-1} \\ &\quad \times \left[e \mathbf{E} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{v}_k \times \mathbf{B} + \frac{e^2}{\hbar} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}) \boldsymbol{\Omega}_k\right], \end{aligned} \quad (13)$$

其中, $\mathbf{v}_k = \partial \varepsilon_k / \partial \mathbf{k}$ 为电子的群速度. 这里, 除了洛伦兹力的贡献, 动量空间下的反常速度出现了 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ 项, 并且与贝里曲率绑定. 实际上, 这一项对应了手征反常的贡献.

在弛豫时间近似下, 考虑洛伦兹力的影响, 将 (13) 式代入电流密度公式, 可求得体系的电导率表达式 [31]:

$$\sigma_{xx} = e^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} D_k \tau \left(-\frac{\partial f_{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \right) \times \left[v_x + \frac{eB \cos \theta}{\hbar} (\mathbf{v}_k \cdot \boldsymbol{\Omega}_k) \right]^2, \quad (14)$$

$$\sigma_{yx} = e^2 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} D_k \tau \left(-\frac{\partial f_{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \right) \frac{eB \sin \theta}{\hbar} \times (\mathbf{v}_k \cdot \boldsymbol{\Omega}_k) \left[v_x + \frac{eB \cos \theta}{\hbar} (\mathbf{v}_k \cdot \boldsymbol{\Omega}_k) \right], \quad (15)$$

其中 $D_k = \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_k\right)^{-1}$ 是由于贝里曲率引起的相空间的体积修正, τ 为弛豫时间, f_{eq} 是无外场下平衡时的费米分布函数. 图 7 给出了 σ_{xx} 和 σ_{yx} 的数值结果. 由图 7 可见, σ_{xx} 和 σ_{yx} 满足 (5) 式和 (6) 式的一般形式. 与拓扑绝缘体表面态不同, 这里电导率的各向异性 $\Delta\sigma = \sigma_{//} - \sigma_{\perp}$ 来源于外尔半金属的手征反常, 是体系内禀拓扑特性的体现.

我们研究组发现, 若外尔半金属存在电子-空穴不对称 tk^2 , 手征化学势除了手征反常的拓扑项贡献, 还包含非拓扑的贡献^[70]. 考虑外尔半金属的电子-空穴不对称后, 不加磁场时, 外尔锥不倾斜, 如图 8(a) 所示. 随着外磁场的加入, 两个外尔锥将

沿着磁场向相反方向移动并倾斜, 见图 8(b). 此时, 两个费米子口袋中电子的填充形式是相互对称的, 因此具有相同高度的费米面. 然而, 在电场的作用下, 这种对称性会被破坏, 导致不同手性外尔锥的费米面不再对齐, 从而产生手征化学势. 因此, 即使没有手征反常效应, 也可能在两个外尔谷之间建立非零手征化学势, 如图 8(d) 所示. 在弱磁场和零温近似下, 应用玻尔兹曼方程可以获得手征化学势如下:

$$\Delta\mu = \frac{e^2(1 - |\boldsymbol{\alpha}|^2)^2 v_F \tau_{\text{inter}}}{2\hbar k_F^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} - e v_F \tau_{\text{intra}} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\alpha}, \quad (16)$$

其中 τ_{inter} (τ_{intra}) 代表谷间 (谷内) 弛豫时间, $\boldsymbol{\alpha} = 2t g \mu_B \mathbf{B} / (\hbar v_F)^2$, $k_F = E_F / (\hbar v_F)$ 为费米波矢, E_F 表示费米能. 由 (16) 式可以看到, 外尔锥的倾斜效应不仅会抑制手征反常, 还会产生一个正比于倾斜参数和磁场的额外类手征化学势. 此外, 这里的贝里曲率 $\boldsymbol{\Omega}_\chi = -\chi \mathbf{k} / (2|k|^3)$ 与倾斜因子完全无关, 这意味着倾斜机制并不会影响手征反常的拓扑性质, 也就是说它所导致的类手征化学势可以是非拓扑的.

计算的纵向磁电导率和平面霍尔电导率分解成三部分^[70]: $\Delta\sigma_{iz} = \sigma_D \delta_{iz} + \Delta\sigma_{iz}^{\text{ch}}(B) + \Delta\sigma_{iz}^{\text{tilt}}(B)$,

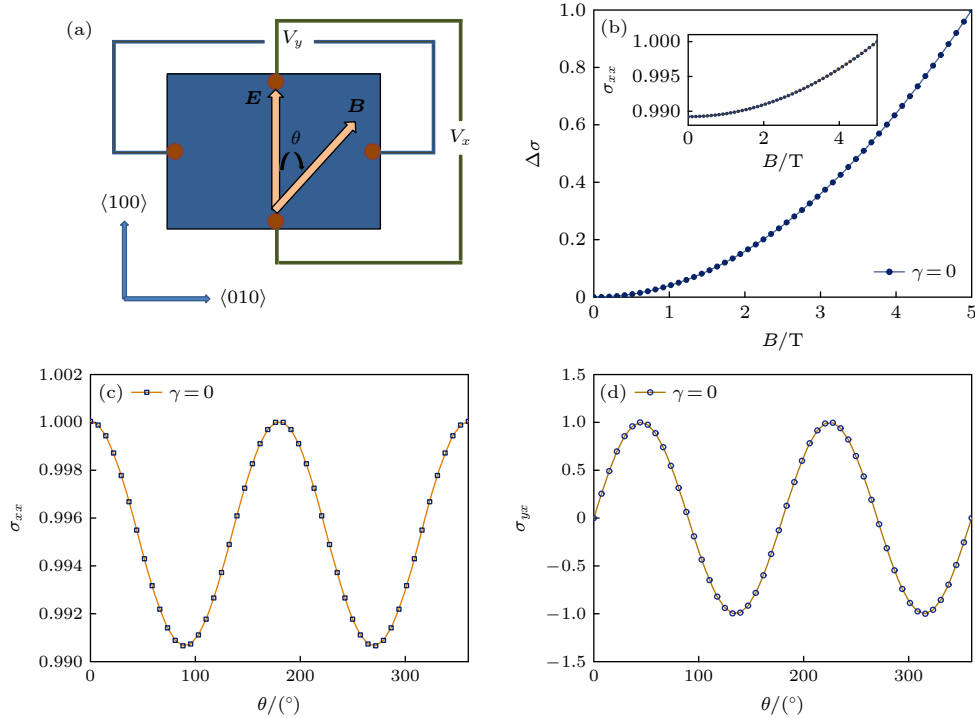


图 7 (a) 平面霍尔效应测量装置示意图; (b) 平面霍尔电导率振幅随磁场强度 B 的变化 (其中插入图为纵向电导率); (c), (d) $B = 5$ T 时纵向磁电导率和平面霍尔电导率随角度 θ 的变化^[31]

Fig. 7. (a) Schematic diagram of the planar Hall effect measurement device; (b) amplitude of planar Hall conductivity as a function of magnetic field (the inset is the longitudinal conductivity); (c), (d) variation of longitudinal magnetoconductivity and planar Hall conductivity with angle θ for $B = 5$ T. Image cited from Ref.[31].

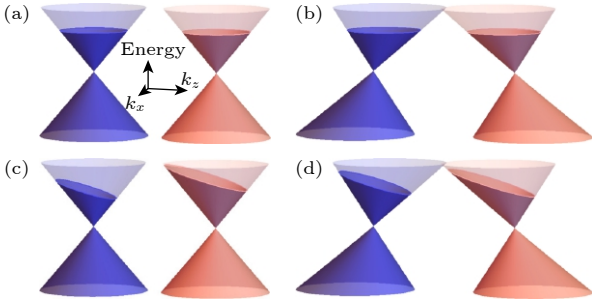


图 8 塞曼场不存在 [(a), (c)] 和存在 [(b), (d)] 时的 Weyl 锥和费米子填充, 第一行和第二行分别为 $\mathbf{E} = 0$ 和 $\mathbf{E} \neq 0$. 我们注意两个锥之间的手征化学势可以分别由 (c) 手征反常, 或是 (d) 倾斜效应产生^[70]

Fig. 8. Weyl cone and fermion filling in the absence [(a), (c)] and presence [(b), (d)] of the Seeman field with $\mathbf{E} = 0$ and $\mathbf{E} \neq 0$ in the first and second rows, respectively. We note that the chiral chemical potential between the two Weyl cones can be generated by (c) the chiral anomaly, or (d) the tilt effect, respectively. Image cited from Ref.[70].

其中 σ_D 为 Drude 电导,

$$\Delta\sigma_{iz}^{\text{ch}}(B) = \frac{e^2}{h} \frac{e^2 B_i B_z}{2\pi\hbar^2 k_F^2} (1 - |\alpha|^2)^2 v_F \tau_{\text{inter}}, \quad (17)$$

$$\Delta\sigma_{iz}^{\text{tilt}}(B) = \left(\frac{\Delta n_e e^2}{\hbar k_F} - \frac{e^3}{h} \frac{B_i \alpha_z + B_z \alpha_i}{\pi\hbar} \right) v_F \tau_{\text{intra}} \quad (18)$$

分别为手征反常项和外尔锥倾斜项的贡献, 其中 $n_e = (1/3\pi^2)k_F^3$ 表示载流子浓度, $\Delta n_e = \tilde{n}_e(\alpha) - \delta_{iz} n_e$ 代表磁场修正后的载流子浓度. 当 $t = 0$ 时, 手征反常 $\Delta\sigma_{iz}^{\text{ch}}(B)$ 项满足标准的角度依赖关系^[31], 而外尔锥倾斜项为零. 有限 t 下, 手征反常项会被抑制, 导致 $\Delta\sigma_{iz}(B)$ 表现出复杂的角度依赖. 此外, (18) 式第二项来自于反常速度与倾斜效应的共同作用, 若 α 与磁场无关, 将导致正比于磁场强度 B 和倾斜参数 t 的磁电导率^[50,51,71].

3 非线性平面霍尔效应

非线性效应的早期研究主要是探讨半导体的非线性光学现象^[72]. 近年来, 随着拓扑量子材料的大量涌现, 拓扑材料中的非线性效应 (即电流对外部电场的二阶响应 $\mathbf{J} \propto \mathbf{E}^2$) 也引起了人们的关注. 在 Sodemann 和 Fu^[73] 提出非线性霍尔效应的概念后, 人们在其理论和实验方面的研究中均取得了很大的进展^[74–77]. 在非线性霍尔效应的实验装置中, 如图 9 所示, 如果施加面内磁场, 且固定外加电场的方向 (沿着 x 方向), 通过在 y 方向和 x 方向测量

电压、电阻, 便可以分别讨论非线性平面霍尔效应和非线性磁电阻效应^[15,78–83]. 此外, 旋转面内磁场的方向, 还可以得到电压、电阻 (或电流) 与磁场角度的依赖关系. 在对非线性磁电阻效应的深入研究中, 人们发现, 各向异性的非线性磁电阻可以被用来预测霍尔电压的产生. 基于实验上的重要进展, 非线性平面霍尔效应引起了国内外学者的广泛关注. 最近, Yasuda 等^[83] 在非磁性双层拓扑绝缘体中观察到了非线性霍尔效应, 该效应被认为是由磁振子的不对称散射导致的. 随后, He 等^[15] 在非磁性拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 中也观察到了非线性平面霍尔效应, 其物理机制被归结为自旋电流与电荷电流的转换, 且该转换是在自旋动量锁定和时间反演对称破缺的共同作用下发生的. 实验上的发现推动了理论方面的研究. 为更好地解释非线性平面霍尔效应的起源, 人们相继提出了诸多微观物理机制. 对非线性平面霍尔效应的研究开辟了一个新的研究课题, 即利用磁场来控制霍尔电压, 这也为电子器件的多样化发展提供了一个新的路径.

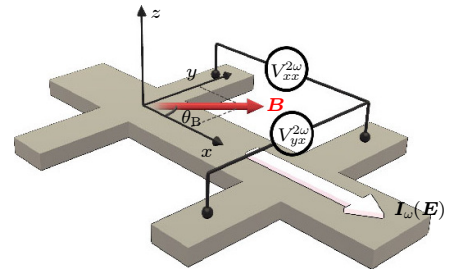


图 9 非线性平面霍尔效应和非线性磁电阻的测量示意图^[15]

Fig. 9. Schematic illustration of the simultaneous measurements of nonlinear planar Hall effect and nonlinear magnetoresistance. Image cited from Ref.[15].

最近, Rakhmievich 等^[43] 在铁磁绝缘体/拓扑绝缘体异质结上观察到非常规的平面霍尔效应, 即当面内的磁场平行于电流时, 平面霍尔效应信号显著, 而在磁场垂直于电流时, 平面霍尔效应反而受到抑制, 这与以前观察到的平面霍尔效应完全不同. 在排除线性平面霍尔效应的机制解释后, 人们将目标转向非线性平面霍尔效应. 为了更好地解释非线性平面霍尔效应的起源, 人们提出了各种微观物理机制. He 等^[15] 在非磁性拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 薄膜实验中发现了非线性平面霍尔效应, 其非线性霍尔电阻与外加电场和磁场成线性关系. 该现象的物理机制

被总结为: 在引入翘曲项或电子-空穴不对称的质量项后, 在自旋动量锁定和时间反演破缺的作用下, 非线性的横向自旋电流可以转换为电荷电流, 由此导致非线性平面霍尔效应的出现^[15,78]. Yasuda 等^[82,83] 在反铁磁/拓扑绝缘体异质结构中也观察到了非线性霍尔效应, 不同的是, 他们将其物理机制归结为磁振子的不对称散射. 针对实验上出现的现象, 我们研究组提出了两种不同的机制^[41,79]: 其一, 在考虑非线性动量项的基础上, 由外加磁场导致的狄拉克锥的倾斜; 其二, 在拓扑绝缘体薄膜中考虑上下表面的耦合, 由外加磁场导致的狄拉克锥的位移效应. 上述两种不同的机制均能诱导线性和非线性平面霍尔效应, 且两种机制之间存在着竞争. 综合目前已有的理论, 我们可以将非线性平面霍尔效应的起源归结为外禀贡献和内禀贡献, 下面分析几种代表性的机制.

3.1 外禀机制

3.1.1 非线性 Drude 项

在物理机制方面, 这种非线性平面霍尔效应所产生的原因被总结为: 在与自旋共线的面内磁场中, 由于自旋动量锁定和时间反演破缺的共同作用, 非线性横向自旋电流将转换为电荷电流^[15,78]. 下面是该物理机制的详细解释.

利用电流公式 $\mathbf{j} = -e \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})$ 计算, 其中 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 表示电子群速度, $f(\mathbf{k})$ 为电子的分布函数, d 表示系统的维度. 将电子的分布函数展开至电场的二阶 $f_2(\mathbf{k}) \propto \frac{\partial^2 f_{\text{eq}}(\mathbf{k})}{\partial k_a \partial k_b} E_a E_b$, 其中 $f_{\text{eq}}(\mathbf{k})$ 为平衡态的费米分布函数. 在不考虑磁场的情况下, 电子速度是 \mathbf{k} 的奇函数, 即 $\mathbf{v}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(\mathbf{k})$, 而二阶非平衡电子分布函数是 \mathbf{k} 的偶函数, 即 $f_2(-\mathbf{k}) = f_2(\mathbf{k})$. 由于自旋动量锁定, \mathbf{k} 和 $-\mathbf{k}$ 处的电子自旋相反, 因而可以产生净的非线性自旋电流 $Q_a^b = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \langle S^b \rangle v_a(\mathbf{k}) f(\mathbf{k})$, 其中上标 b 是自旋方向, 下标 a 是自旋流方向. 注意到, 此时的电荷电流为零, 如图 10(a) 所示. 当施加与自旋电流的自旋方向共线的面内磁场时, $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 和 $f_2(\mathbf{k})$ 在 \mathbf{k} 空间发生移动, 因而自旋流的两个自旋通量之间不平衡, 这使得部分自旋流转换为非线性平面霍尔流, 如图 10(b) 所示.

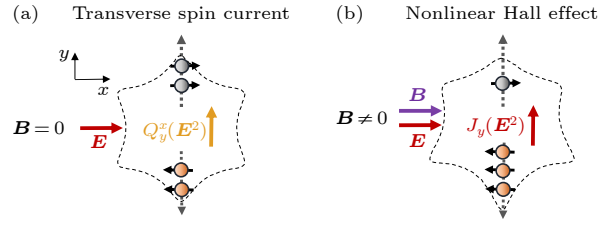


图 10 (a) 电场作用于三维拓扑绝缘体上, 横向产生电场 \mathbf{E} 的二阶非线性自旋电流 Q_y^x ; (b) 外加磁场 $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$, 横向非线性自旋电流部分转换为电荷电流 $J_y(\mathbf{E}^2)$, 产生非线性霍尔效应^[15]

Fig. 10. (a) When an electric field \mathbf{E} is applied to three-dimensional (3D) topological insulators, a transverse nonlinear spin current Q_y^x at the second order of \mathbf{E} is generated; (b) when an external magnetic field $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$, the transverse nonlinear spin current is partially converted into a charge current $J_y(\mathbf{E}^2)$, giving rise to the nonlinear Hall effect. Image cited from Ref.[15].

值得注意的是, 当色散是关于 \mathbf{k} 的线性依赖关系时, 面内磁场仅在 \mathbf{k} 空间中平移狄拉克点, 并不能使自旋电流和电荷电流之间发生转换. 只有考虑动量的高阶项如拓扑绝缘体的六角翘曲效应时, 非线性平面霍尔效应才会出现.

3.1.2 位移效应机制

我们研究组还发现, 在拓扑绝缘体薄膜中考虑上下表面态的耦合作用, 由面内磁场导致的狄拉克锥的位移效应也能产生平面霍尔效应^[79]. 该效应不仅存在于线性平面霍尔中, 还能贡献非线性平面霍尔效应. 这里暂且忽略拓扑绝缘体薄膜中高阶项的影响. 在面内磁场的作用下, 拓扑绝缘体薄膜的表面态的低能有效哈密顿量模型可表示为

$$h_{\text{Tl}}(\mathbf{k}) = \tau_z \hbar v_{\text{F}} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \hat{z} + \tau_x \sigma_0 \Delta + \tau_0 (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (19)$$

其中, Δ 是上下表面的耦合强度^[84], $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ 表示作用于上下表面的泡利矩阵, τ_0 和 σ_0 为单位矩阵. 由于面内磁场的的作用, 两个狄拉克锥在垂直于磁场 \mathbf{B} 的方向上向相反的方向移动, 如图 11(a) 所示. 当两个狄拉克锥的部分重叠时, 会在平行于磁场的方向上出现非零的净自旋极化, 如图 11(b) 所示. 根据图 11(c) 所示的净自旋极化 $|\mathbf{S}|$ 可以发现, 在弱磁场下 (即 \mathbf{B} 的取值相对较小), 沿磁场的方向存在着明显的净自旋极化. 由于自旋动量锁定, 狄拉克电子的电流所诱导的自旋 (红色细箭头) 和净自旋 (红色粗箭头) 之间形成自旋阀的结构, 如图 11(b). 该自旋极化引起各向异性的自旋输运, 进而导致横向平面霍尔效应的产生.

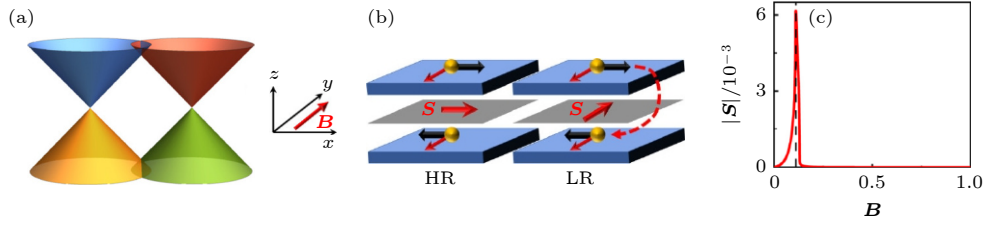


图 11 (a) 平面磁场作用下的位移效应 Dirac 锥的变化示意图; (b) 位移效应的自旋阀结构示意图; (c) 磁场 B 相关的净自旋极化 $|S|$ [79]
 Fig. 11. (a) Schematic illustration of Dirac cones of top and bottom surfaces in topological insulator thin films with shift effect induced by the in-plane magnetic field B ; (b) schematic pictures of spin valve structure with shift effect; (c) the dependence of net spin polarization $|S|$ on the field strength B . Image cited from Ref.[79].

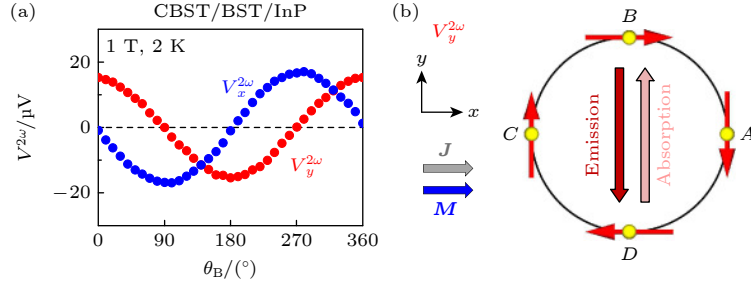


图 12 (a) CBST/BST/InP 样品的二次谐波横向电压 $V_y^{2\omega}$ 和二次谐波纵向电压 $V_x^{2\omega}$ 在 xy 平面上的角依赖性; (b) $J//M$ 时的 $V_y^{2\omega}$ 的起源说明 [83]

Fig. 12. (a) Angular dependence of second harmonic transverse (Hall) voltage $V_y^{2\omega}$ and second harmonic longitudinal voltage $V_x^{2\omega}$ in xy plane for the CBST/BST/InP sample; (b) illustration of the origin of $V_y^{2\omega}$ under $J//M$ configuration. Image cited from Ref.[83].

由位移效应贡献的平面霍尔电阻 $\rho_{yx}^{(2)}$ 与角度的关系虽然不是余弦或正弦关系, 但依然保持着 2π 的振荡周期.

3.1.3 贝里偶极子机制

除了非线性 Drude 项贡献非线性平面霍尔效应之外, 塞曼效应诱导的贝里偶极子 (Berry curvature dipole, BCD) 同样也可以贡献非线性平面霍尔效应 [85,86]. 最近, 人们在二维三角晶体中发现了一种新的反常平面霍尔效应, 它是由塞曼效应诱导的非零的贝里曲率贡献的 [85], 且与电场的相对角度无关. 当考虑额外的镜面对称时, 贝里曲率在对称约束下将使得线性反常平面霍尔效应消失. 有趣的是, 在外加电场和磁场共线且垂直于晶体的镜线方向时, 由塞曼效应所诱导的贝里曲率偶极子 [73] 将贡献非线性反常平面霍尔效应. 在这里, 贝里偶极子被定义为 $D_{bd} = \int \frac{dk}{(2\pi)^d} f_{eq}(\partial_b \Omega_d)$, 其中 Ω_d 为贝里曲率. 该贝里偶极子由振荡电场 $E_c = \text{Re}(\epsilon_c e^{i\omega t})$ 响应的非线性电流 $j_a = \text{Re}(j_a^0 + j_a^{2\omega} e^{2i\omega t})$ 中的二阶直流分量 $j_a^0 = \chi_{abc} \epsilon_b \epsilon_c^*$ 或倍频分量 $j_a^{2\omega} = \chi_{abc} \epsilon_b \epsilon_c$ 给出, 响应系数为 $\chi_{abc} = -\epsilon_{adc} e^3 \tau D_{bd} / 2 (1 + i\omega\tau)$,

其中 ϵ_{adc} 为反对称张量. 此外, 这种效应与半经典 Drude 项的贡献共存 [15,79], 它们分别贡献非线性霍尔电导率向量 $\chi_c = \epsilon_{ab} \chi_{abc} / 2$ 的反对称部分和对称部分 [87]. 这种效应不仅存在于具有强自旋轨道耦合的二维三角晶体中 [85], 也存在于无自旋轨道耦合作用的双层石墨烯中 [86].

3.1.4 磁振子散射机制

在前面提及的机制中, 没有涉及温度的影响. 当考虑有限温时, 磁振子散射可以诱导拓扑绝缘体产生非线性平面霍尔效应 [82,83]. 由于阻尼自旋轨道耦合贡献可以忽略, 因此, 在平面磁场的作用下, 二阶非线性霍尔电压将主要来源于非线性传导 $V_y = R_{yx}^{(2)} j_x^2$, 其在 CBST/BST/InP 样品上与平面内磁场和电场的相对角度依赖关系如图 12(a) 所示.

二阶非线性平面霍尔电阻的起源可用不对称的磁振子散射进行解释 [82,83], 如图 12(b) 所示. 当 $J//M$ 时, 一方面, 当 B 点附近的电子 (群速度为正、角动量为 $+1/2$) 散射至 D 点附近时, 其动量将变为 $-1/2$. 由于自旋动量锁定和角动量守恒的影响, 该过程将必然伴随着角动量为 $+1$ 的磁振子发射. 相反地, 当它从 D 点处散射到 B 点附近时, 则

必须吸收磁振子. 这种不对称的磁振子散射将导致弛豫时间的不对称, 进而引起 D 点和 B 点周围电子分布的不对称. 这种不对称的磁振子散射模型可以用来评估二阶非线性平面霍尔电阻.

3.2 内禀机制

3.2.1 贝里联络极化机制

上述提及的各种机制均属于外禀机制, 因此与弛豫时间相关. 最近, 与散射无关的内禀非线性霍尔效应引起人们极大的兴趣^[88–91], 研究者们用贝里联络极化 (Berry-connection polarizability, BCP) 来表征这一效应. 当施加平面磁场时, 在塞曼效应的耦合下, 内禀的非线性霍尔效应推广至非线性平面霍尔效应^[18]. 在外加电场的作用下, 贝里联络被附加上电场的修正项 $A_a^E = G_{ab}(\mathbf{k}) E_b$, 其中 $G_{ab}(\mathbf{k})$ 为贝里联络极化张量, 具有如下形式:

$$G_{ab}^n(\mathbf{k}) = 2\text{Re} \sum_{m \neq n} \frac{A_a^{nm} A_b^{mn}}{\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{k})}, \quad (20)$$

其中 $A_a^{nm} = \langle u_n | i\partial_{k_a} | u_m \rangle$ 为带间贝里联络, $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 是第 n 条带的能量. 由此产生场诱导的贝里曲率

$$\Omega^E = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}^E. \quad (21)$$

根据反常速度的定义, 利用 $\mathbf{j}^{\text{int}} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} f_{\text{eq}} \mathbf{E} \times \Omega^E$, 可得到关于电场二阶响应的横向电流 $j_a^{\text{int}} = \chi_{abc}^{\text{int}} E_b E_c$, 其中响应系数表示为

$$\chi_{abc}^{\text{int}} = \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} A_{abc}(\mathbf{k}), \quad (22)$$

其中 $A_{abc}(\mathbf{k}) = -\sum_n (\partial_a G_{bc}^n - \partial_b G_{ac}^n) f_{\text{eq}}$, BZ 表示布里渊区, d 表示系统的维度. 该项与散射无关, 因此被称为内禀的非线性霍尔效应. 当施加平面磁场, 平面磁场通过塞曼耦合的方式进入到带间贝里联络中, 由此得到内禀的非线性平面霍尔效应.

Huang 等^[18] 通过对称性分析得到了内禀非线性平面霍尔电流与磁场和电场的相对角度依赖关系, 相比于外禀诱导的非线性平面霍尔效应, 他们给出了不同的角度依赖性. 重要的是, 内禀非线性平面霍尔电流被认为可以作为表征不支持非线性反常霍尔效应这一类材料的工具.

至此, 我们介绍了拓扑材料中线性和非线性平面霍尔效应相关的主要物理机制, 这些机制虽然分别从线性和非线性平面霍尔效应进行讨论, 有些机制其实可以同时导致线性和非线性平面霍尔效应,

比如, 位移效应不仅可以导致非线性平面霍尔效应, 也可以导致线性平面霍尔效应, 手征反常不仅可以出现在线性平面霍尔效应中, 也可以出现在非线性平面霍尔效应中. 本文将其总结如表 1 所列. 总体来说, 平面霍尔效应目前仍是一个非常活跃的研究领域, 非线性平面霍尔效应更是一个相对较新的研究领域, 各种新的物理机制正不断地涌现, 它们彼此相互补充并被用于解释相关实验现象.

表 1 拓扑材料中的线性和非线性平面霍尔效应的主要物理机制

Table 1. Main physics mechanisms of linear and nonlinear planar Hall effect in topological materials.

平面霍尔效应	物理机制	内外禀
线性	狄拉克锥倾斜	外禀
	磁振子散射	
	(类)手征反常	
非线性	位移效应	内禀
	贝里曲率	
	非线性Drude项	外禀
	位移效应	
	贝里偶极子	
	磁振子散射	
	手征反常	内禀
	贝里联络极化	

4 实验进展

非磁拓扑材料中的线性平面霍尔效应最早是由 Taskin 等^[30] 在三维拓扑绝缘体 $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ 中观测到的, 他们发现拓扑绝缘体表面态的 PHE 会随着磁场方向的变化呈现出六重对称性的振荡, 这与材料的晶体对称性和狄拉克锥的形状一致. 通过分析霍尔电阻率的温度依赖性和磁场依赖性, 确定了电子态的有效质量和自旋轨道耦合强度, 以及狄拉克锥的能隙大小与畸变程度. 不久, Kumar 等^[92] 在 Weyl 半金属 GdPtBi 中观察到了比铁磁材料中大得多的线性平面霍尔效应, 这可以归因于材料中的手征反常和贝里曲率. 他们发现, 在施加平行于 [111] 方向的电场和磁场后, 出现了负磁阻率和量子振荡. 另外还发现, PHE 的振幅不仅会受到手征反常的影响, 还会受到轨道磁阻的影响. 因此, 要观察到明显的 PHE, 需要选择轨道磁阻较小的 Weyl 半金属. 2018 年, Singha 团队^[93] 报道了一种 Type-II 型拓扑狄拉克半金属 VAl_3 的磁输运性

质. 他们通过四探针技术测量了其单晶样品的线性平面霍尔电阻率, 并发现 VAl_3 可以出现很大的、不饱和的磁阻效应, 以及高迁移率的电子和空穴型载流子. 最重要的是观测到了一个很大的线性平面霍尔效应, 作者认为平面霍尔效应是一种可以用来鉴别拓扑半金属中狄拉克/外尔费米子的有效方法. 随后一年, Yin 等^[27]报道了反铁磁半导体 $MnTe$ 的线性平面霍尔效应, 并揭示了其自旋轨道耦合和能带各向异性.

2020年, Waddehra 等^[28]在 $LaVO_3-KTaO_3$ 的极性-极性界面上观测到了线性平面霍尔效应和各向异性磁阻, 表明材料中存在强自旋轨道耦合. 实验团队用 X 射线衍射和透射电子显微镜等方法表征了其分子结构, 并通过霍尔探针测量了不同温度和磁场下的电阻率和霍尔系数, 观测到 PHE 和 AMR 特征信号. 2021年, 人们在 Dirac 反钙钛矿 Sr_3SnO 中也观察到了类似拓扑绝缘体的六重振荡线性平面霍尔效应^[94]. 实验组测量了不同厚度 Sr_3SnO 薄膜的电阻率张量, 并发现在平面磁场下, 纵向电阻率和横向电阻率都显示出多个谐波, 其中包括二阶、四阶甚至六阶. 这些谐波具有对不同磁场、温度以及薄膜厚度的依赖性, 表现出了复杂的微观机制. 初步的研究表明: 自旋轨道耦合的 $J = 3/2$ 费米子可能在其中起到了重要的作用, 该实验进一步展现出了 PHE 的丰富性, 并推动了对拓扑材料中更高阶谐波的进一步研究. 最近, 人们在反铁磁拓扑绝缘体 $MnBi_2Te_4$ 薄片观察到了一种具有 $\pi/2$ 周期的线性平面霍尔效应^[95], 并指出其来源于体态 Dirac 电子的拓扑轨道磁矩. 实验发现, 在弱磁场下 PHE 具有 π 周期和正的幅值, 类似于非磁性拓扑绝缘体中表面态的 PHE. 但在强磁场下, PHE 的周期会变为 $\pi/2$ 并且振幅会变成负. 此外, 随着温度的变化, 由于体态和表面态之间的竞争, PHE 和各向异性磁阻的振幅和相位都发生了非平庸的演化.

非线性平面霍尔效应最早是由 He 等^[15]在拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 中发现的, 该效应源于非线性自旋流向电荷流的转换. 非线性霍尔电阻与外加电场和磁场成线性比例, 并与外加磁场和电场的相对角度呈余弦关系, 因此可用来探测自旋纹理. 这种非线性平面霍尔效应存在于非中心对称的材料中. 最近, Kozuka 等^[96]于室温下在中心对称的狄拉克半金属 $SrIrO_3$ 薄膜中也观察到非线性平面霍尔效应,

与在 Bi_2Se_3 上观察到的结果一致^[15,78]. Kozuka 等将这种现象归结为界面上的反对称自旋轨道相互作用引起的动量相关的自旋分裂, 这会进一步导致两个狄拉克带中出现复杂的自旋纹理. 因此, 双线性的磁电效应可以用于捕获复杂的自旋纹理^[96], 并在不同的镜面对称性下表现出各向异性的非线性平面霍尔效应^[96,97]. 这也表明: 在界面上具有强自旋轨道相互作用的材料中, 通过打破局部反对称性便可引起非线性自旋电荷的转换. Li 等^[98]在室温下于 $InSb/CdTe$ 异质结构中研究了由界面 Rashba 自旋轨道耦合引起的非互易磁输运现象, 同样测得与平面角度呈余弦关系的非线性平面霍尔电阻.

最近, 人们在磁绝缘体/拓扑绝缘体异质结构中也观察到了非线性平面霍尔效应^[99]. 初步的研究表明: 该效应与拓扑绝缘体表面态中磁近邻效应诱导的交换能隙和平面外的自旋纹理有关, 可用于探测磁绝缘体/拓扑绝缘体异质结构中磁近邻效应. 在不同衬底上的薄膜中, 实验上观测到的二次谐波霍尔电阻对磁场 B 呈现出显著不同的响应, 具体表现为: 1) 在 $Tm_3Fe_5O_{12}$ 和 $Y_3Fe_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 样品中测得的非线性平面霍尔的幅值比在 $Gd_3Ga_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 样品中测得的要大 1 个数量级; 2) $Tm_3Fe_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 的非线性霍尔电阻与面内磁场呈线性相关, 而 $Y_3Fe_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 的非线性霍尔电阻除了与磁场呈线性依赖之外, 在零场附近有一个额外的磁滞回线. 虽然上述实验现象可通过翘曲效应和电子-空穴不对称诱导的非线性平面霍尔效应机制进行解释^[15,79], 但是都无法解释在 $Tm_3Fe_5O_{12}$ 和 $Y_3Fe_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 样品中非线性平面霍尔效应大小的增强. 与磁相关的机制是磁振子的散射机制^[82,83], 该机制可以解释 $Y_3Fe_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 在零场附近的磁滞回线, 但在 $Tm_3Fe_5O_{12}/Bi_2Se_3$ 样品中磁振子沿 z 方向极化, 无法参与自旋面内极化的表面态电子的散射过程. 因此, 磁振子散射机制也无法同时解释两种磁性衬底的结果. 目前仍无可靠的理论机制对其进行统一解释, 需进一步进行实验和理论研究来揭示其潜在机制.

目前, 线性平面霍尔效应的实验研究已经取得重大进展, 这也推动着人们更进一步地研究非线性平面霍尔效应. 虽然非线性平面霍尔效应的相关实验较少, 但我们可以从非线性磁电阻的角度入手. 当非线性磁电阻存在各向异性时, 理论研究表明也

可能存在非线性平面霍尔效应,这在一定程度上也能推动相关实验的进展.

5 总结与展望

本文介绍了平面霍尔效应的若干物理机制,并总结了最新的实验进展.可以发现,对于线性平面霍尔效应而言,实验与理论结合已经取得了重大的进展,在众多拓扑材料中观测到的PHE,大多数都能和理论结合在一起.但是对于线性PHE更进一步的理论研究,如带间度规项或是类手征反常项的贡献,亦或是未知机制与现有机制的相互竞争作用,还有待进一步的探究.

对于非线性平面霍尔效应而言,在给定外加电流(或电场)的情况下,霍尔电压与平面内的磁场相对于电流的角度 θ_B 呈现出余弦关系.部分研究表明,在弱磁场时,霍尔电阻与磁场强度呈线性关系;也有研究表明,在反铁磁衬底上,霍尔电阻在零磁场附近出现了磁滞回线,并且在弱磁场时随着磁场的增大而增强,但这种增幅并不遵循线性规律.不同的是,所有实验在强磁场时均得到了非线性的关系,但其理论机制还有待进一步研究.

目前,现有的理论仍无法完美地解释实验上的各种现象,这意味着理论工作还需不断发展和完善.目前最大的问题是同一系统中存在多种物理机制,如何将多种机制统一成一套完善的理论是当下值得探讨的问题.此外,上述理论机制均在半经典理论的框架下进行,所得到的非线性平面霍尔效应主要为带内贡献(如非线性Drude贡献、贝里偶极子、贝里联络极化),是否存在带间贡献(如注入电流、位移电流)?这也是值得研究者们深入探讨的一个问题.最近,人们在三维拓扑半金属中发现了由类手征反常^[70]、洛伦兹力^[100]所导致的线性平面霍尔效应.那么,三维拓扑半金属中是否也存在相应机制的非线性平面霍尔效应?这还有待进一步研究和探讨.

总而言之,平面霍尔效应理论推动了量子输运和拓扑物理的研究,也为电子器件的制备提供了很多有趣的应用前景.非线性平面霍尔效应的概念已经在大量的实验中得到了验证.在理论方面,我们急需应对的是对其物理机制的全面理解,这些研究不仅能够促进实验的进展,还能够加速非线性平面霍尔效应的应用进程.

参考文献

- [1] Hall E H 1879 *Am. J. Math.* **2** 287
- [2] Nagaosa N, Sinova J, Onoda S, MacDonald A H, Ong N P 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1539
- [3] Hall E H 1880 *Philos. Mag.* **10** 301
- [4] Karplus R, Luttinger J M 1954 *Phys. Rev.* **95** 1154
- [5] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 494
- [6] König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766
- [7] Tsui D C, Stormer H L, Gossard A C 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 1559
- [8] 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
- [9] Fu L, Kane C L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 096407
- [10] Wang C M, Sun H P, Lu H Z, Xie X C 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 136806
- [11] Zhang Y, Yuan X, Lu S, Zhang J, Narayan A, Liu Y, Zhang H, Ni Z, Liu R, Choi E S, Suslov A, Sanvito S, Pi L, Lu H Z, Potter A C, Xiu F 2019 *Nature* **565** 331
- [12] Tang H X, Kawakami R K, Awschalom D D, Roukes M L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 107201
- [13] Seemann K M, Freimuth F, Zhang H, Blügel S, Mokrousov Y, Bürgler D E, Schneider C M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 086603
- [14] Bowen M, Friedland K J, Herfort J, Schönherr H P, Ploog K H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 172401
- [15] He P, Zhang S S L, Zhu D, Shi S, Heinonen O G, Vignale G, Yang H 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 016801
- [16] Weng Z J, Ba J Y, Ke Y H, Duan H J, Deng M X, Wang R Q 2022 *Phys. Rev. B* **106** 195134
- [17] Wei Y W, Feng J, Weng H 2023 *Phys. Rev. B* **107** 075131
- [18] Huang Y X, Feng X, Wang H, Xiao C, Yang S A 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 126303
- [19] Berry M V 1984 *Proc. R. Soc. London A* **392** 45
- [20] Pugh E M, Rostoker N 1953 *Rev. Mod. Phys.* **25** 151
- [21] Berger L 1970 *Phys. Rev. B* **2** 4559
- [22] Miyasato T, Abe N, Fujii T, Asamitsu A, Onoda S, Onose Y, Nagaosa N, Tokura Y 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 086602
- [23] Deng M X, Luo W, Wang R Q, Sheng L, Xing D Y 2017 *Phys. Rev. B* **96** 155141
- [24] Jungwirth T, Sinova J, Mašek J, Kučera J, MacDonald A H 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 809
- [25] Xiao D, Chang M C, Niu Q 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1959
- [26] Ge Z, Lim W L, Shen S, Zhou Y Y, Liu X, Furdyna J K, Dobrowolska M 2007 *Phys. Rev. B* **75** 014407
- [27] Yin G, Yu J X, Liu Y, Lake R K, Zang J, Wang K L 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 106602
- [28] Wadehra N, Tomar R, Varma R M, Gopal R K, Singh Y, Dattagupta S, Chakraverty S 2020 *Nat. Commun.* **11** 874
- [29] Joshua A, Ruhman J, Pecker S, Altman E, Ilani S 2013 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **110** 9633
- [30] Taskin A A, Legg H F, Yang F, Sasaki S, Kanai Y, Matsumoto K, Rosch A, Ando Y 2017 *Nat. Commun.* **8** 1340
- [31] Nandy S, Sharma G, Taraphder A, Tewari S 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 176804
- [32] Deng M X, Duan H J, Luo W, Deng W Y, Wang R Q, Sheng L 2019 *Phys. Rev. B* **99** 165146
- [33] Deng M X, Qi G Y, Ma R, Shen R, Wang R Q, Sheng L, Xing D Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 036601
- [34] Deng M X, Ba J Y, Ma R, Luo W, Wang R Q, Sheng L,

- Xing D Y 2020 *Phys. Rev. Research* **2** 033346
- [35] Li X S, Wang C, Deng M X, Duan H J, Fu P H, Wang R Q, Sheng L, Xing D Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 206601
- [36] Chen J N, Yang Y Y, Zhou Y L, Wu Y J, Duan H J, Deng M X, Wang R Q 2022 *Phys. Rev. B* **105** 085124
- [37] Sulaev A, Zeng M, Shen S Q, Cho S K, Zhu W G, Feng Y P, Eremeev S V, Kawazoe Y, Shen L, Wang L 2015 *Nano Lett.* **15** 2061
- [38] Liu Q, Fei F, Chen B, Bo X, Wei B, Zhang S, Zhang M, Xie F, Naveed M, Wan X, Song F, Wang B 2019 *Phys. Rev. B* **99** 155119
- [39] Wang Y, Lee P A, Silevitch D M, Gomez F, Cooper S E, Ren Y, Yan J Q, Mandrus D, Rosenbaum T F, Feng Y 2020 *Nat. Commun.* **11** 216
- [40] Wu B, Pan X C, Wu W, Fei F, Chen B, Liu Q, Bu H, Cao L, Song F, Wang B 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 011902
- [41] Zheng S H, Duan H J, Wang J K, Li J Y, Deng M X, Wang R Q 2020 *Phys. Rev. B* **101** 041408
- [42] Shan W Y, Lu H Z, Shen S Q 2010 *New J. Phys.* **12** 043048
- [43] Rakhmilevich D, Wang F, Zhao W, Chan M H W, Moodera J S, Liu C, Chang C Z 2018 *Phys. Rev. B* **98** 094404
- [44] Onose Y, Ideue T, Katsura H, Shiomi Y, Nagaosa N, Tokura Y 2010 *Science* **329** 297
- [45] Fu L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 266801
- [46] Nomura M, Souma S, Takayama A, Sato T, Takahashi T, Eto K, Segawa K, Ando Y 2014 *Phys. Rev. B* **89** 045134
- [47] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015001
- [48] Hasan M Z, Xu S Y, Belopolski I, Huang S M 2017 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **8** 289
- [49] Yan B, Felser C 2017 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **8** 337
- [50] Das K, Agarwal A 2019 *Phys. Rev. B* **99** 085405
- [51] Ma D, Jiang H, Liu H, Xie X C 2019 *Phys. Rev. B* **99** 115121
- [52] Wang Z Y, Cheng X C, Wang B Z, Zhang J Y, Lu Y H, Yi C R, Niu S, Deng Y, Liu X J, Chen S, Pan J W 2021 *Science* **372** 271
- [53] Yuan X, Zhang C, Zhang Y, Yan Z, Lyu T, Zhang M, Li Z, Song C, Zhao M, Leng P, Ozerov M, Chen X, Wang N, Shi Y, Yan H, Xiu F 2020 *Nat. Commun.* **11** 1259
- [54] Puphal P, Pomjakushin V, Kanazawa N, Ukleev V, Gawryluk D J, Ma J, Naamneh M, Plumb N C, Keller L, Cubitt R, Pomjakushina E, White J S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 017202
- [55] Nielsen H B, Ninomiya M 1983 *Phys. Lett. B* **130** 389
- [56] Huang S M, Xu S Y, Belopolski I, Lee C C, Chang G, Wang B, Alidoust N, Bian G, Neupane M, Zhang C, Jia S, Bansil A, Lin H, Hasan M Z 2015 *Nat. Commun.* **6** 7373
- [57] Weng H, Fang C, Fang Z, Bernevig B A, Dai X 2015 *Phys. Rev. X* **5** 011029
- [58] Xu S Y, Belopolski I, Alidoust N, Neupane M, Bian G, Zhang C, Sankar R, Chang G, Yuan Z, Lee C C, Huang S M, Zheng H, Ma J, Sanchez D S, Wang B, Bansil A, Chou F, Shibaev P P, Lin H, Jia S, Hasan M Z 2015 *Science* **349** 613
- [59] Lv B Q, Xu N, Weng H M, Ma J Z, Richard P, Huang X C, Zhao L X, Chen G F, Matt C E, Bisti F, Strocov V N, Mesot J, Fang Z, Dai X, Qian T, Shi M, Ding H 2015 *Nat. Phys.* **11** 724
- [60] Xiong J, Kushwaha S K, Liang T, Krizan J W, Hirschberger M, Wang W, Cava R J, Ong N P 2015 *Science* **350** 413
- [61] Li C Z, Wang L X, Liu H, Wang J, Liao Z M, Yu D P 2015 *Nat. Commun.* **6** 10137
- [62] Lv Y Y, Li X, Zhang B B, Deng W Y, Yao S H, Chen Y B, Zhou J, Zhang S T, Lu M H, Zhang L, Tian M, Sheng L, Chen Y F 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 096603
- [63] Goswami P, Tewari S 2013 *Phys. Rev. B* **88** 245107
- [64] Rylands C, Parhizkar A, Burkov A A, Galitski V 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 185303
- [65] Burkov A 2015 *Science* **350** 378
- [66] Ali M N, Xiong J, Flynn S, Tao J, Gibson Q D, Schoop L M, Liang T, Haldolaarachchige N, Hirschberger M, Ong N P, Cava R J 2014 *Nature* **514** 205
- [67] Shekhar C, Nayak A K, Sun Y, Schmidt M, Nicklas M, Leermakers I, Zeitler U, Skourski Y, Wosnitza J, Liu Z, Chen Y, Schnelle W, Borrmann H, Grin Y, Felser C, Yan B 2015 *Nat. Phys.* **11** 645
- [68] Chen L, Chang K 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 047402
- [69] Ong N P, Liang S 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 394
- [70] Lei Y H, Zhou Y L, Duan H J, Deng M X, Lu Z E, Wang R Q 2021 *Phys. Rev. B* **104** L121117
- [71] Ghosh S, Sinha D, Nandy S, Taraphder A 2020 *Phys. Rev. B* **102** 121105
- [72] Sipe J E, Shkrebtii A I 2000 *Phys. Rev. B* **61** 5337
- [73] Sodemann I, Fu L 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 216806
- [74] Kang K, Li T, Sohn E, Shan J, Mak K F 2019 *Nat. Mater.* **18** 324
- [75] Xu S Y, Ma Q, Shen H, Fatemi V, Wu S, Chang T R, Chang G, Valdivia A M M, Chan C K, Gibson Q D, Zhou J, Liu Z, Watanabe K, Taniguchi T, Lin H, Cava R J, Fu L, Gedik N, Jarillo-Herrero P 2018 *Nat. Phys.* **14** 900
- [76] Du Z Z, Wang C M, Lu H Z, Xie X C 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 266601
- [77] Du Z Z, Lu H Z, Xie X C 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 744
- [78] He P, Zhang S S L, Zhu D, Liu Y, Wang Y, Yu J, Vignale G, Yang H 2018 *Nat. Phys.* **14** 495
- [79] Rao W, Zhou Y L, Wu Y j, Duan H J, Deng M X, Wang R Q 2021 *Phys. Rev. B* **103** 155415
- [80] Dyrda A, Barnaś J, Fert A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 046802
- [81] Zarezad A N, Barnaś J, Qaiumzadeh A, Dyrda A 2023 *Phys. Status Solidi RRL* **2200483**
- [82] Yasuda K, Tsukazaki A, Yoshimi R, Takahashi K S, Kawasaki M, Tokura Y 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 127202
- [83] Yasuda K, Tsukazaki A, Yoshimi R, Kondou K, Takahashi K S, Otani Y, Kawasaki M, Tokura Y 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 137204
- [84] Zyuzin A A, Hook M D, Burkov A A 2011 *Phys. Rev. B* **83** 245428
- [85] Battilomo R, Scopigno N, Ortix C 2021 *Phys. Rev. Research* **3** L012006
- [86] Kheirabadi N, Langari A 2022 *Phys. Rev. B* **106** 245143
- [87] Nandy S, Sodemann I 2019 *Phys. Rev. B* **100** 195117
- [88] Gao Y, Yang S A, Niu Q 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 166601
- [89] Wang C, Gao Y, Xiao D 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 277201
- [90] Liu H, Zhao J, Huang Y X, Wu W, Sheng X L, Xiao C, Yang S A 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 277202
- [91] Liu H, Zhao J, Huang Y X, Feng X, Xiao C, Wu W, Lai S, Gao W B, Yang S A 2022 *Phys. Rev. B* **105** 045118
- [92] Kumar N, Guin S N, Felser C, Shekhar C 2018 *Phys. Rev. B* **98** 041103
- [93] Singha R, Roy S, Pariari A, Satpati B, Mandal P 2018 *Phys. Rev. B* **98** 081103
- [94] Huang D, Nakamura H, Takagi H 2021 *Phys. Rev. Research* **3** 013268
- [95] 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
- [96] Kozuka Y, Isogami S, Masuda K, Miura Y, Das S, Fujioka

- J, Ohkubo T, Kasai S 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 236801
- [97] Lao B, Liu P, Zheng X, Lu Z, et al. 2022 *Phys. Rev. B* **106** L220409
- [98] Li L, Wu Y, Liu X, Liu J, Ruan H, Zhi Z, Zhang Y, Huang P, Ji Y, Tang C, Yang Y, Che R, Kou X 2023 *Adv. Mater.* **35** 2207322
- [99] Wang Y, Mambakkam S V, Huang Y X, Wang Y, Ji Y, Xiao C, Yang S A, Law S A, Xiao J Q 2022 *Phys. Rev. B* **106** 155408
- [100] Li L, Cao J, Cui C, Yu Z M, Yao Y 2023 *Phys. Rev. B* **108** 085120

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Planar Hall effect in topological materials*

Ba Jia-Yan # Chen Fu-Yang # Duan Hou-Jian

Deng Ming-Xun Wang Rui-Qiang †

(Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Frontier Research Institute for Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 31 May 2023; revised manuscript received 7 July 2023)

Abstract

The planar Hall effect (PHE) is one of the hot topics in the field of condensed matter physics. In recent years, the PHE has received great attention especially in topological materials such as topological insulators and topological semimetals, and great progress has been made. Unlike the scenario in ordinary Hall effect, the transverse current, magnetic field, and electric field in the PHE can appear in the same plane and cannot be explained by the Lorentz force, which largely depends on the anisotropy of the magnetoresistivity. With the development of nonlinear effect in topological material, the PHE has been extended to a nonlinear regime, which has also been extensively studied experimentally. To explain the linear and nonlinear PHEs observed experimentally, various microscopic mechanisms have been proposed theoretically. In this paper, the research progress of the linear and nonlinear PHEs of topological materials is introduced theoretically and experimentally, and various extrinsic and intrinsic mechanisms leading to the linear and nonlinear PHEs are analyzed in depth. The physical mechanisms of the linear PHE mainly include the tilt of Dirac cone, magnon scattering, chiral anomaly (or chiral-anomaly-like), shift effect, and Berry curvature, whereas ones of the nonlinear PHE mainly include the nonlinear Drude term, shift effect, Berry curvature dipole, magnon scattering, chiral anomaly, and Berry-connection polarizability. In addition, the relevant problems to be solved and the future development directions are also proposed.

Keywords: planar Hall effect, nonlinear effect, topological materials

PACS: 72.15.Gd, 73.20.At, 73.43.Qt, 75.70.Tj

DOI: 10.7498/aps.72.20230905

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874016, 12274146, 12174121, 12104167) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province (Grant Nos. 2021A1515010369).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: wangruiqiang@m.scnu.edu.cn



拓扑材料中的平面霍尔效应

巴佳燕 陈复洋 段后建 邓明勋 王瑞强

Planar Hall effect in topological materials

Ba Jia-Yan Chen Fu-Yang Duan Hou-Jian Deng Ming-Xun Wang Rui-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 207201 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230905

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230905>

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

拓扑材料中的超导

Superconductivity in topological materials

物理学报. 2020, 69(2): 020301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191627>

拓扑半金属ZrSiSe器件中面内霍尔效应的观测

Observation of planar Hall effect in topological semimetal ZrSiSe device

物理学报. 2019, 68(22): 227203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191501>

铁磁/非磁金属异质结中的拓扑霍尔效应

Topological Hall effect in ferromagnetic/non-ferromagnetic metals heterojunctions

物理学报. 2018, 67(13): 131202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180369>

铁电材料中的极性拓扑结构

Polar topological structures in ferroelectric materials

物理学报. 2020, 69(12): 127702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200311>

拓扑材料BaMnSb₂的红外光谱学研究

Infrared spectroscopic study of topological material BaMnSb₂

物理学报. 2022, 71(10): 107201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220011>

拓扑节线与节面金属的研究进展

Progress on topological nodal line and nodal surface

物理学报. 2019, 68(22): 227101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191538>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

“针尖下的实验室”——扫描探针探测与调控铁电畴及其微观物性*

田国¹⁾ 樊贞¹⁾ 陈德杨¹⁾ 侯志鹏¹⁾ 刘俊明¹⁾²⁾ 高兴森^{1)†}

1) (华南师范大学, 华南先进光电子研究院, 先进材料研究所及量子调控工程与材料广东省重点实验室, 广州 510006)

2) (南京大学, 固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

(2023 年 6 月 7 日收到; 2023 年 7 月 25 日收到修改稿)

铁电和多铁材料作为未来高性能信息媒介引起广泛关注. 其中铁电畴的形态及演化特征可显著影响材料电导、光伏、磁电耦合等诸多物理性能以及器件功能, 尤其是新奇拓扑畴带来诸多新颖物性, 使得通过畴调控方法设计材料及器件性能成为可能. 深入理解铁电畴及其微观物性调控规律有望为后摩尔时代信息技术带来新的器件设计方案. 本文主要介绍通过多功能扫描探针显微镜研究铁电和多铁材料的微观畴结构和相关物理性能, 及其调控规律和机制, 并在此基础上构筑新原理信息器件.

关键词: 扫描探针显微镜, 铁电畴, 拓扑畴, 电场驱动磁翻转, 信息存储器件**PACS:** 75.85.+t, 75.60.Jk, 77.80.-e, 77.90.+k.**DOI:** 10.7498/aps.72.20230954

1 引言

铁电和多铁性材料蕴含着丰富多彩的物理性能, 因此被广泛应用于数据存储、传感、通信、能源等领域^[1-3]. 铁电畴可以在原子尺度稳定存在, 畴翻转可达到皮秒级速度和飞焦级低能耗, 还具抗辐射性能, 因此在高性能信息器件应用有巨大潜力^[4]. 然而, 传统铁电存储器受限于极化电流读出机制, 需要足够大的器件尺度, 难以发挥其高密度和低能耗的潜力. 为解决这一难题, 急需发展更新的极化畴状态读出方案. 一种可能方案是通过电流或光电流读出构筑器件, 如铁电阻变/光伏存储与类脑器件. 还有一种通过磁电耦合的方法, 实现电场调控磁性, 再通过磁输运手段读出, 如磁电存储器 (magneto-random access memory, ME-RAM) 或磁电-自旋轨道逻辑器件 (magnetoelectric-spin orbit

coupling logic, MESO logic) 等^[5,6]. 这些新原理器件方案有望突破传统铁电信息器件瓶颈, 从而实现高速、高密度、低能耗的新一代信息技术.

随着铁电畴研究的深入, 一些新颖的纳米尺度畴结构和新物理也被更多揭示出来. 近年来, 在纳米尺度铁电结构里, 揭示出一些拓扑缺陷, 如二维缺陷畴壁, 以及更为复杂的泡状畴 (bubble)、拓扑保护的涡旋畴 (vortex) 及中心畴 (center) 等^[7-15]. 这些发现为进一步探索其中所蕴含的新奇低维物性创造了条件, 并为开发高性能的拓扑电子学器件提供了新途径.

由于铁电和多铁性材料物理性能与铁电畴的形态及结构演变密切相关, 通过对畴结构的调控, 可有效影响局域能带、电导、磁性和光学性能等^[16-21]. 因此针对微观畴结构及其性能调控展开深入研究, 有望为后摩尔时代的高性能信息媒介材料与信息器件提供新途径. 这些研究离不开纳米尺度畴结构

* 国家重点研发计划 (批准号: 2022YFB3807603)、国家自然科学基金 (批准号: U22A20117, 52002134, 92163210)、广东省科技计划 (批准号: 202201000008) 和“香江学者”计划 (批准号: XJ2022004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xingsengao@scnu.edu.cn

和微观物理探测与调控手段. 为此, 本课题组发展了基于多功能扫描探针(见图1)的微观多物性观测与多场调控方法, 在纳米尺度探测电畴、磁畴、以及输运性能、表面电势等, 还通过多种外场(电、磁、力、热、光等)激励调控畴结构和相关物性, 揭示其微观机制, 并在此基础上探索器件用途. 这些研究大多在原子力针尖下完成, 因此戏称为“针尖下的微观物性探索实验室”.

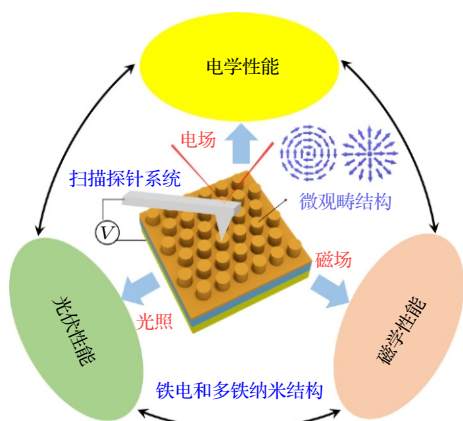


图1 基于多功能扫描探针的微观多物性观测与多场调控系统

Fig. 1. A sketched experimental system based on scanning probe microscopy that enables the probing and tailoring of multi-functionalities and properties under multi-fields/stimuli.

2 铁电畴及输运特性调控

在铁电薄膜异质结中, 铁电的极化行为可以影响其输运行为. 例如, 通过改变界面肖特基势垒, 影响异质结的输运行为, 可导致铁电阻变效应或铁电隧穿效应^[22–25]. 利用这些效应可以实现非破坏的读出铁电极化方向, 用于设计非易失性的铁电电阻式存储器件或类脑器件, 为突破铁电存储器的容量瓶颈和能耗提供一种新方案^[26]. 当前电阻式存储结构简单, 集成度高, 成为极具潜力的新一代存储器. 然而, 大多基于缺陷形成的导电通道稳定性较低, 难以实现稳存储. 而铁电极化调控的阻变行为, 具备与铁电类似的稳定性, 有望解决这一问题, 因此引起广泛关注.

另外一方面, 铁电材料还会产生与极化相关的内建电场(如退极化场), 为光生载流子的分离提供驱动力, 从而产生稳定的光伏电压和电流, 称为铁电光伏效应^[27–30]. 铁电极化能够产生可受电场调

控的光伏效应, 有望用于构筑新概念信息器件, 如电写-光读的存储方式, 或用于实现神经元突触器件, 如“感-存-算”一体化器件. 为实现这一目标, 首先是实现微区铁电畴的构筑与调控, 并进一步调控其阻变和光伏效应, 为探索器件应用打下基础.

2.1 微区畴结构的探测与调控

近年来, 研究人员发展了多种微区铁电畴结构探测技术. 例如, 使用高分辨压电响应力显微镜和球差校正的高分辨透射电子显微镜能够观察铁电材料中的原子尺度的极化畴^[11–14]; 也有利用超高真空的扫描隧道显微镜在单原子层及超薄的二维铁电材料中观测到纳米级铁电畴^[31,32]. 比较常用的是利用原子力的压电响应力显微镜 (piezoresponse force microscopy, PFM) 实现铁电畴的探测, 通过扫描探针的悬臂形变来反映不同畴结构的压电信号, 如图2(a)所示. 与透射电子显微镜或扫描隧道显微镜相比, PFM的分辨率更低(达到纳米尺度), 但由于操作简便、非破坏性, 还可在测试电畴时候同时检测其他物性(如导电性), 因此得到较多应用, 这也是本课题组采用的主要手段. 图2(b), (c)展示了用脉冲激光沉积 (pulsed laser deposition, PLD) 方法制备的外延钛酸钡 (BaTiO_3 :BTO) 超薄膜的面外压电信号图像, 其中不同相位衬度显示上下极化方向, 而振幅衬度显示压电信号强弱^[33]. 利用双频追踪模式, 可以放大压电信号, 几纳米厚度薄膜也可获得质量较好的信号. 而通过翻转压电力谱显微镜 (switching spectra PFM, SSPFM), 可获得特定区域每一像素的压电-电压曲线, 然后通过拟合压电曲线重构矫顽场与翻转电压分布图. 如图2(d)所示, 在含导电氧化铅纳米岛电极的钛酸铅薄膜异质结 ($\text{PbO}_2/\text{Pb}(\text{ZrTi})\text{O}_3/\text{SrRuO}_3$:PO/PZT/SRO) 中, 观察到有氧化铅纳米岛的薄膜的平均矫顽场相比较于外围的薄膜偏低, 说明纳米导电电极可降低局部翻转电压^[34].

PFM 还可通过检测悬臂扭曲同时探测面内的压电信号, 进而探究畴结构及其调控机制. 以外延铁酸铋薄膜 (BiFeO_3 , BFO) 为例, 通过 PFM 可以观测到清晰的条带畴(而面外显示单一衬度), 如图2(e)所示. 由于菱方相 BFO 铁电体只有 8 个可能的极化方向, 通过分析可以确定这是典型的 71° 条带畴. 如果在 BFO 薄膜下方插入介电层(掺 La 的 BFO:LBFO), 可在面内观测到更细的条带畴,

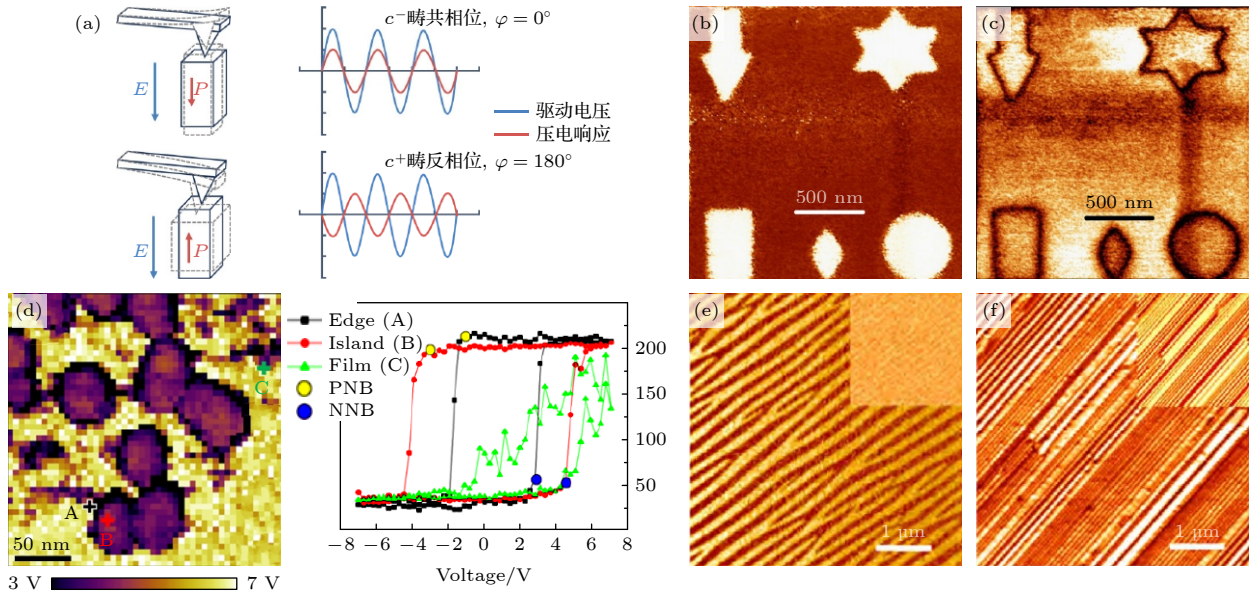


图 2 铁电畴结构探测 (a) 压电力显微镜原理示意图; (b), (c) 通过扫描探针的针尖在超薄 BTO 薄膜施加 3 V 图案化电压后的 PFM 相位与振幅图^[33]; (d) 自组装 PbO₂/PZT/SRO 薄膜-纳米岛中测得的 SSPFM 图像及对应 3 个区域的压电响应曲线, A 为纳米岛边缘, B 为纳米岛中心, C 为薄膜区域^[34]; (e), (f) 随着插入层厚度的增大, BFO/LBFO/SRO/DSO 薄膜面内和面外 (右上插图) PFM 图像; (e) 71° 条带畴, 没有 La 掺杂 BFO 插入层; (f) 109° 畴, 10 nm 厚的 La 掺杂 BFO 插入层^[35]

Fig. 2. Measurement of ferroelectric domain structures: (a) Schematic diagram of piezoelectric response force microscope; (b), (c) piezoresponse phase and amplitude images for the ultra-thin BTO film, in which the bright/dark contrast were poled by applying 3 V through AFM tip using a predefined pattern^[33]; (d) SSPFM mapping for the PbO₂/PZT/SRO film-island structure, and piezoresponse loops for three typical locations: Island edge A, center of an island B, naked film C, respectively^[34]; (e), (f) in-plane and out-of-plane PFM images of BFO/LBFO/SRO/DSO films, (e) pure 71° domains without LBFO layer, (f) pure 109° domains with 10 nm LBFO layer^[35].

面外衬度也是条带畴, 则可以判断其为 109° 条带畴, 见图 2(f)。这些不同条带畴主要是弹性能、畴壁形成能、退极化能相互竞争的结果。当退极化被较好屏蔽时, 容易形成 71° 条带畴, 而插入介电层则退极化能作用较大程度地增加, 形成 109° 条带畴, 如图 2(e), (f) 所示^[35]。

2.2 微观阻变和光伏特性

铁电阻变和光伏特性有望用于构筑低能耗且稳定性高的存储或类脑器件, 引起广泛关注。其中大多研究主要集中于宏观阻变现象, 对微观阻变现象和机制研究较少。针对铁电阻变器件的微型化和高密度需求, 将 PFM 与导电原子力显微镜 (conductive atomic force microscopy, CAFM) 相结合, 探测其微观阻变行为和光伏行为。

例如 Lu 等^[36] 利用多孔氧化铝掩模版辅助脉冲激光沉积生长技术在原子级平整的 BFO 薄膜表面 (厚度 < 10 nm) 沉积了纳米 Pt 电极阵列, 形成 Pt/BFO/SRO 纳米铁电电容器 (横向尺寸 ~60 nm), 并观测其微观畴结构和导电性, 如图 3(a), (b) 所

示。这种 Pt/BFO/SRO 纳米铁电电容器显示出可翻转的压电信号, 并在纳米电极区域测得较强导电信号。通过探针定点施加电压可探测纳米电容的 $I-V$ 曲线, 表现出明显对称且可切换的二极管式整流行为, 并具有 ~1000 的阻变开/关比和较长稳定保持时间, 显示出制作每英寸 100 Gbit 级高密度阻变存储器件的潜力。深入分析其微区 $I-V$ 曲线, 其中铁电极化翻转有效地改变界面肖特基势垒, 进而显著改变在同一电压下的电阻态。利用 CAFM 测试发现了电极上具有明显增强的电流信号, 有望应用于高密度集成电阻式存储器件。此外, Gao 等^[33] 还利用 Ag 团簇技术, 在超薄 BTO 薄膜上制备了约 20 nm 尺度的纳米电极, 并观测到铁电隧穿效应的阻变行为。在薄膜中自组装形成的 BFO/Bi₂O₃ 超小纳米电容器 (最小到 10 nm 尺度) 中观察到明显的阻变现象, 显示出铁电阻变在超高密度存储应用的潜力^[37]。

通过导电原子力显微镜测试在光照下产生的光伏电流, 可以有效探测微区光伏效应。Lu 等^[38] 在四方相 BFO(T-BFO) 薄膜表面沉积了微米级金

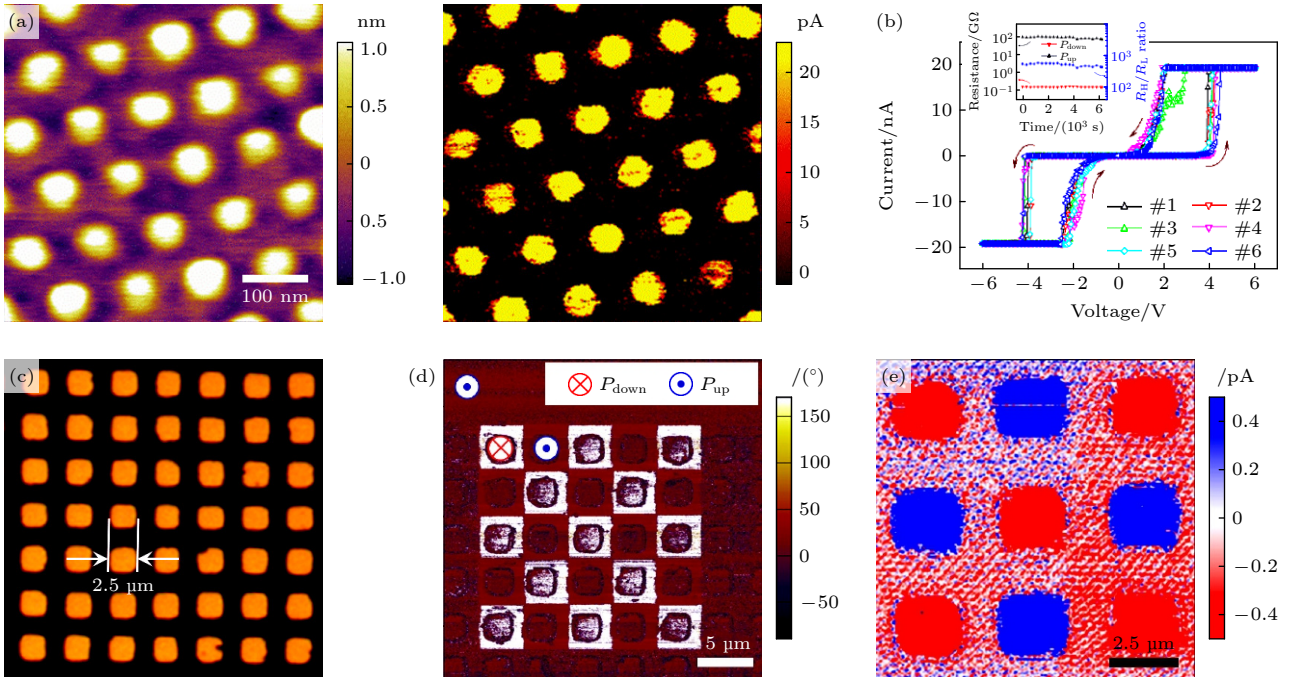


图 3 铁电阻变与光伏效应 (a) Pt/BFO/SRO 纳米电容器阵列的形貌和导电原子力显微镜图像^[36]; (b) Pt/BFO/SRO 纳米电容器的电流-电压多次循环回线, 左上为纳米电容器阻变开关比保持特性曲线^[36]; (c) Au/Ti/T-BFO/LSMO 微米器件阵列的光学显微镜图像^[38]; (d) Au/Ti/T-BFO/LSMO 微米器件阵列的 PFM 相位图, 其中亮区表示极化朝下, 暗区表示极化朝上^[38]; (e) 导电原子力显微镜测得微米电极上的光电流图像^[38]

Fig. 3. Ferroelectric resistive switching and photovoltaic effect: (a) Topography and CAFM current mapping of Pt/BFO/SRO nanocapacitor arrays^[36]; (b) I - V hysteresis loops measured for multiple cycles (Inset top shows retention properties of a typical nanocapacitor^[36]); (c) optical image of the microarray derived from Au/Ti/T-BFO/LSMO^[38]; (d) ferroelectric phase images recorded by PFM, bright contrast represents polarized-down (P_{down}) state, and dark contrast represents polarized-up (P_{up}) state^[38]; (e) photocurrent image of a microarray scanned by CAFM^[38].

属电极, 形成微电容阵列, 然后结合扫描探针技术、紫外光源和高精度源表, 观察到极化调控光伏现象. 如图 3(c)–(e) 所示, 可以清楚看到极化方向改变影响光电流方向. 通过拟合微区 I - V 曲线可知, 这种光伏效应主要源自退极化和界面内建电场共同作用. Fan 等^[39] 还在 T-BFO 超薄膜上生长 Au 纳米电极从而形成纳米电容结构, 观测到兼具铁电隧穿行为的阻变以及可调控的光伏效应现象. 其中, 在 4 nm 厚的铁电薄膜上观察到开关电阻变化大于 10^4 , 以及高稳定性等特征. 这种阻变及光伏现象, 表现出优秀的可控性, 快速响应性, 及稳定性的存储功能, 为开发新一代光电信息器件, 如“存储-计算”一体, 或“传感-计算-存储”一体的类脑器件打下基础.

2.3 铁电类脑突触器件

利用铁电极化对电阻态/光伏电流的多级调控, 可用于构筑忆阻/光电突触, 并进一步构筑人

工神经网络, 用于实现识别或预测的功能^[40–45]. 这种类脑器件有望用于构建“存储-计算”一体或“传感-计算-存储”一体等新架构, 从而克服传统“存储-计算”分离架构的低速、高能耗等问题, 实现更高效率的计算功能^[46,47].

为此, Chen 等^[45] 利用铁电阻变效应构筑了突触器件, 并借助铁电印刻效应调控极化动力学, 获得了易失和非易失两种铁电阻变器件. 以二者分别作为储备池和读出层核心单元, 构建了全铁电储备池计算硬件系统 (图 4(a), (b)). 在该系统中, 易失性铁电阻变器件的短期记忆和非线性保障了丰富的储备池状态, 进一步采用时分复用的虚拟节点方法提升了状态丰富程度和反馈强度; 而非易失性铁电阻变器件则提供了稳定的多电导态用于映射读出层权重. 该系统成功演示了曲率识别 (图 4(c))、数字识别、波形分类和混沌序列预测等任务, 并展现出优异的识别性能. 特别地, 在混沌序列预测中取得了超低预测误差 (NRMSE = 0.017), 长期稳

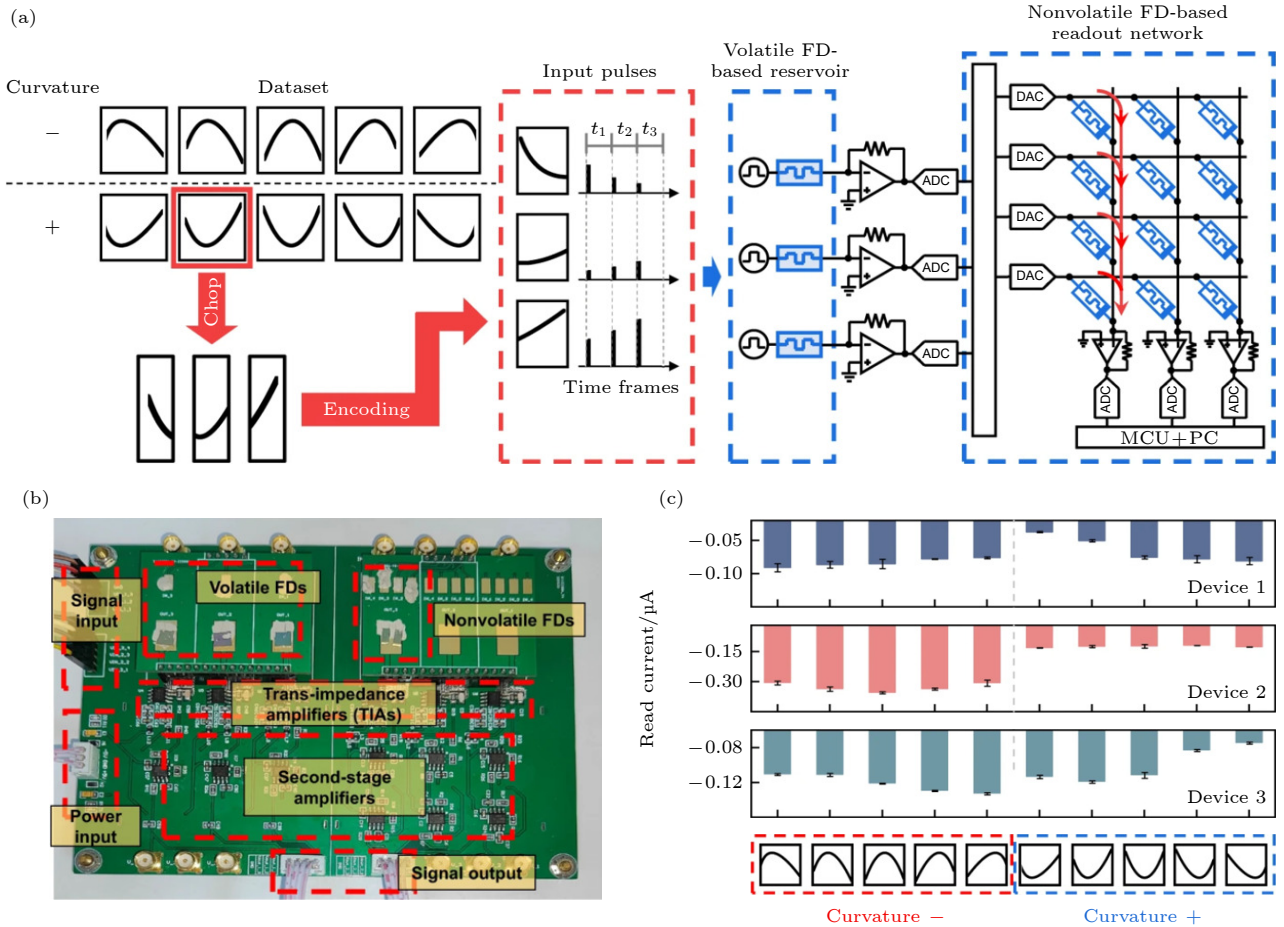


图 4 (a) 全铁电储备池计算系统的电路图, 其中易失性和非易失性铁电电阻变器件分别用于构建储备池和读出层; (b) 全铁电储备池计算系统的实物图; (c) 曲率识别任务中不同曲线输入后获得的储备池状态^[45]

Fig. 4. (a) A schematic flow of the curvature discrimination task implemented on the all-ferroelectric reservoir computing system, in which the reservoir and readout network are implemented with volatile and nonvolatile ferroelectric diodes, respectively; (b) photo of the experimentally constructed all ferroelectric reservoir computing system; (c) the reservoir states after presenting different curves in the curvature discrimination task^[45].

定性、高耐久性和低功耗等优点, 这表明全铁电储备池计算系统有望成为一种准确、可靠、低功耗的类脑时序信息处理硬件。

此外, Cui 等^[43] 还提出并制备了一种基于光伏读取的新型铁电类脑器件, 即铁电光伏突触 (图 5(a)). 该器件利用受极化调控的光伏效应和极化逐渐翻转技术, 实现了多级、非易失、正负对称可调的光电流. 进一步在实验上构建了“传感-计算-存储”一体神经网络电路 (图 5(b)), 实现了图像实时感知与处理, 获得高准确率 (二分类图案识别准确率达 100%, 见图 5(d); 边缘检测 F-Measure 达 1)、低延时 (μs 量级) 及低能耗 (推理过程零能耗) 等优异的性能. 这些成果为发展高稳定性和可控性的铁电类脑器件提供了一些新思路, 也为开发“传感-计算-存储”一体类脑芯片提供了一种新的硬件基

础, 有望应用于下一代机器视觉系统的硬件方案中。

3 铁电拓扑畴

铁电畴结构可通过尺寸效应来调控, 由于边界与退极化能、应变能, 以及极化梯度能的相互作用, 可诱导产生一些与常见的畴结构不同的复杂性拓扑结构, 已成为当前的研究热点^[7-10]. “拓扑”原是一个数学概念, 指的是几何图形或空间在连续改变形状后保持不变的性质. 这一概念被引入到凝聚态物理领域后, 留下了浓墨重彩的一笔, 引起大量新物理现象和新拓扑材料体系的发现, 也为未来拓扑电子学器件打开了大门. 因此, 2016 年诺贝尔物理学奖被授予了在该领域的三位开创者. 在铁电材料中常见的拓扑结构为铁电畴壁 (二维拓扑缺陷), 表现出例如导电增强等诸多新颖物理现象^[16].

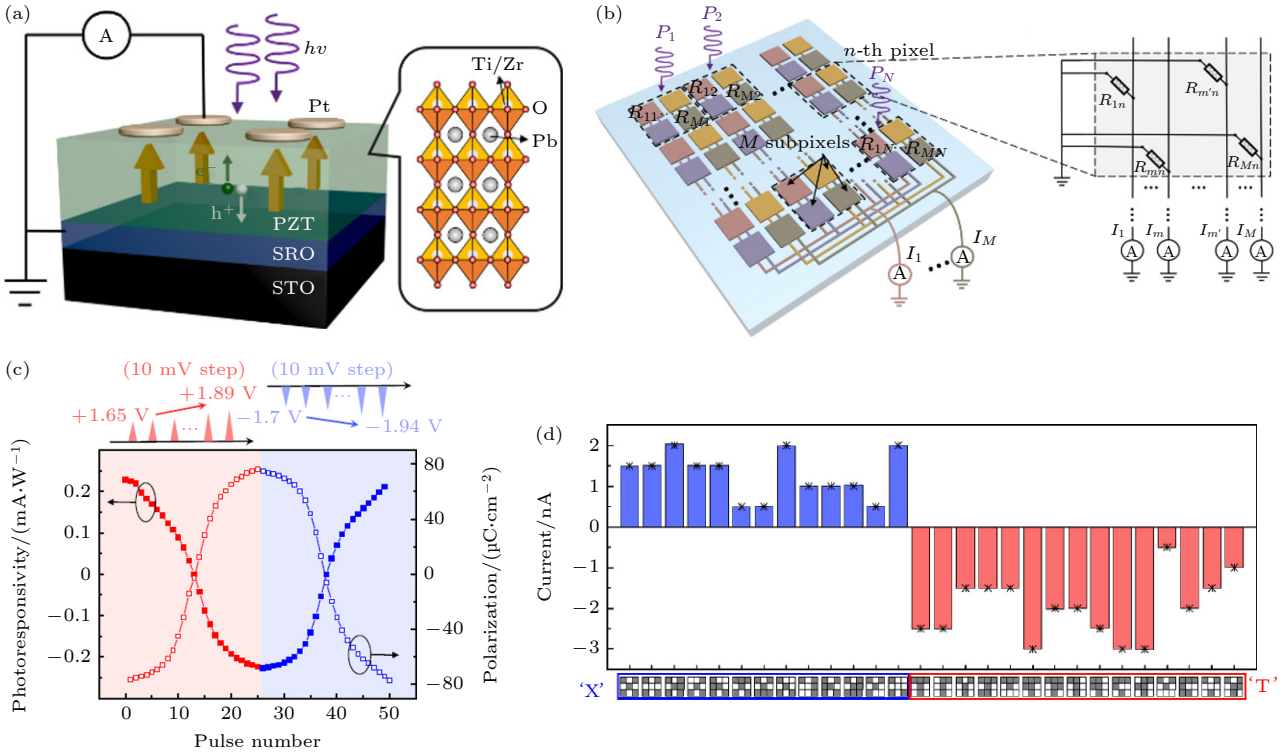


图 5 (a) 铁电光伏突触器件示意图; (b) “传感-计算-存储”一体神经网络电路示意图; (c) 器件的长期增强和抑制特性, 其中光响应度表示权重; (d) 图像识别任务中不同图像输入时获得的输出电流, 理论值用“星号”符号表示^[43]

Fig. 5. (a) Schematic diagram of ferroelectric photovoltaic synapse; (b) schematic illustration of the architecture of the ferroelectric photosensor network; (c) long-term potentiation and depression characteristics of the device, where the photoresponsivity represents the weight; (d) output currents during the presentations of different input patterns. The theoretical values are indicated by the “star” symbols^[43].

近年来, 得益于先进的透射电镜技术的发展, 一些更为复杂的铁电拓扑畴, 如涡旋^[11,12,15]、中心畴^[13, 48-49]、斯格明子^[14]、麦韧^[50]等拓扑态相继被发现. 这些发现为进一步探索其中所蕴含的新奇低维物性创造了条件, 并为开发高性能的拓扑电子学器件提供了新途径. 有预测表明, 双稳态涡旋畴可在小至 3 nm 尺度稳定存在, 有望实现每英寸 60 Tb 的超高密度信息存储^[51]. 目前, 众多铁电拓扑畴已被发现, 但其潜在新奇物性及器件用途还鲜有报道, 是待挖掘的富矿. 下文主要介绍利用扫描探针针对铁电拓扑畴及其导电特性进行观测与调控, 并探索基于拓扑畴的器件应用潜力.

3.1 铁电拓扑畴的探测与调控

为确定这些复杂性畴结构, 需要使用更复杂的转角矢量压电力显微镜测试方法. 因为在复杂性畴结构中, 难以通过一次测试获得其准确的面内极化方向(面内 PFM 只能获得垂直悬壁方向的信号), 因此需要综合分析不同角度的 PFM 分量才能确定

其极化方向. 以纳米岛内具有的中心型拓扑畴为例, 如图 6(a) 所示. 首先通过扫描不同角度的面内压电响应信号 ($\text{amplitude} \cdot \cos(\text{phase degree})$), 然后提取图中每个像素点的压电信号随角度变化曲线, 便可拟合出面内极化方向^[52]. 最后根据每个像素点的面内和面外极化分量便可重构三维空间极化分布状态. 在 BFO 材料中, 通过针尖沿样品两个晶面 [010] 和 [100] 方向测试 PFM 数据, 也大致重构其极化矢量分布. 这种转角 PFM 测试方法虽然精度不如透射电子显微镜技术, 但操作更为方便, 且不会对样品造成损伤.

利用 3 个方向的转角 PFM 测试技术, Li 等^[13]将 BFO 薄膜刻蚀成小尺寸的纳米岛阵列(直径 ~60 nm), 观察到自发形成中心型拓扑畴(其面内畴表现为中心发散和中心收敛, 以及发散和收敛不同的类型), 如图 6(b) 所示. 纳米岛中稳定存在发散、收敛、以及兼具发散-收敛等类型的拓扑畴, 并可通过外场驱动实现发散和收敛的两种中心拓扑畴之间相互切换, 显示可用单个纳米岛作为信息存

储单元的可能. 然而, 这种中心型畴会形成头对头或尾对尾的带电极化中心, 通常带来巨大的静电能, 理论上难以稳定存在. 通过热离子探针观测和相场

模拟结合, 表明源于材料内部的离子缺陷、电子、空穴等可以吸附临近带电极化畴的电荷, 通过汇聚(发散)中心的电荷富集屏蔽静电场来提升其稳定性.

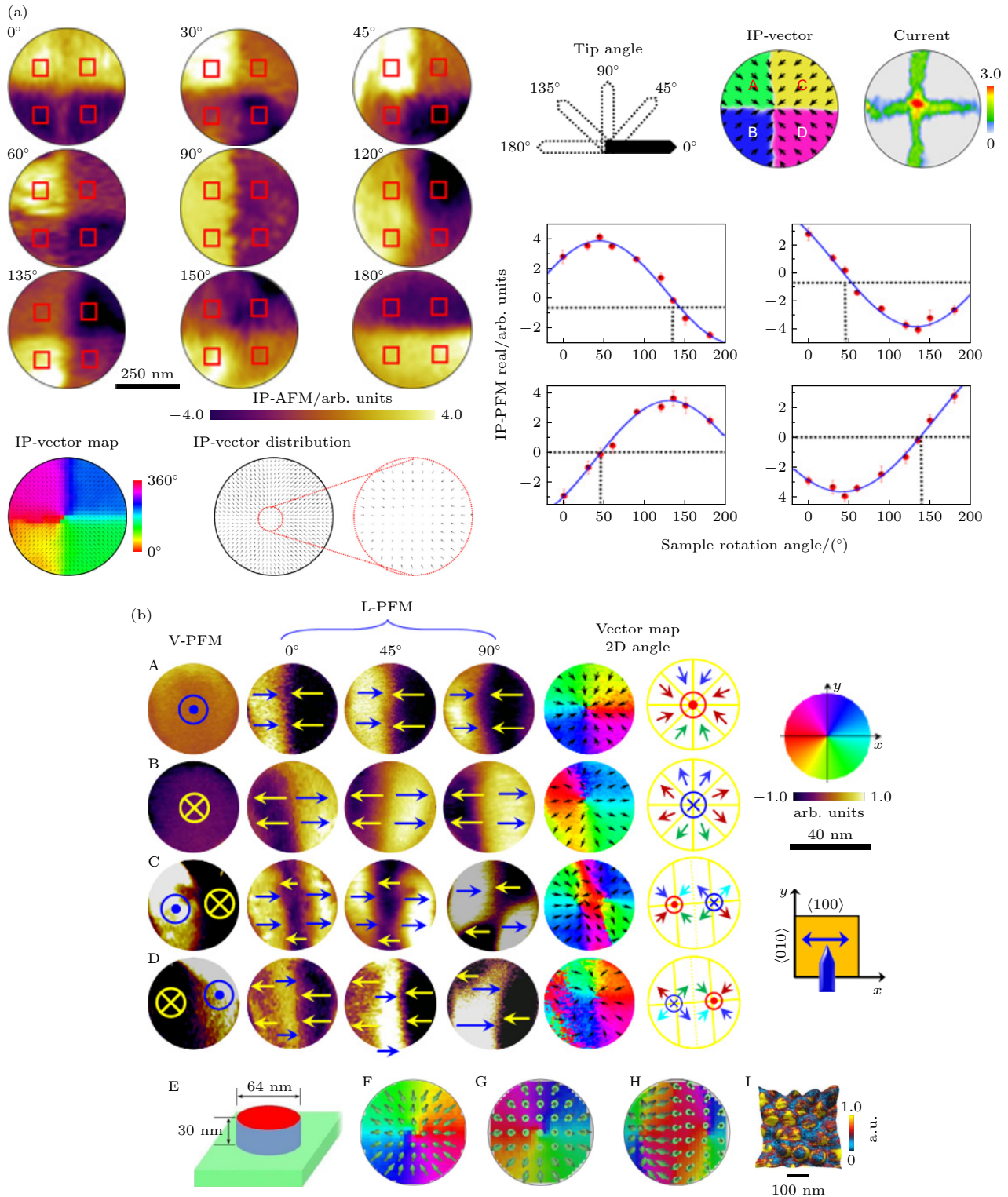


图 6 铁电拓扑畴结构 (a) 角度分辨的矢量 PFM 技术用于重构中心型拓扑畴的极化分布图像^[56]; (b) BFO 纳米点中的一些典型拓扑畴的矢量 PFM 图像及理论模拟示意图^[13]

Fig. 6. Ferroelectric topological domains: (a) The angle-resolved lateral PFM images used to reconstruct the polarization vector map for a selected center domain state^[56]; (b) vector PFM images and vector maps, along with the simulated contours for some typical topological domains in the BFO nanodots^[13].

此外, Tian 等^[53]在模板辅助 Ar 离子束刻蚀的 BFO 纳米岛 (直径~400 nm) 中观察到了零星的四象限涡旋与反涡旋对. 与上述中心型拓扑畴相比, 该样品缺陷浓度较小, 其退极化场被屏蔽程度更小, 因此更容易驱动形成电中性的涡旋型拓扑畴.

除了电荷能够稳定中心型拓扑畴结构外, 纳米结构中应变梯度也可以驱动形成中心型拓扑畴^[48]. Tian 等^[54]提出了一种模板辅助生长策略, 在 SRO 底电极上刻蚀获得圆形 SRO 纳米岛阵列, 然后用 PLD 在其上生长 BFO 薄膜, 可以自组装形成的方形 BFO 纳米岛-薄膜结构. 由于纳米岛中界面弯曲, 引起 BFO 纳米岛中应变不均匀分布从而产生挠曲电, 也可诱导形成中心型拓扑畴结构. 这类中心型拓扑畴同样能够通过施加电场实现发散和收敛两态之间可逆切换, 展示了作为信息存储单元的可能性.

此外, 为寻找不同铁电材料体系中的铁电拓扑畴, 在菱方相的锆钛酸铅 ($\text{Pb}(\text{Zr}_{0.3}, \text{Ti}_{0.7})\text{O}_3$; PZT) 纳米岛中, 也观测到类似的中心型纳米畴, 所不同

的是纳米岛中心出现反方向的柱状气泡畴, 并经过高温退火后还可恢复这类拓扑结构, 显示了良好的稳定性^[55].

除了初始就存在的拓扑畴, 还可以通过外场诱导普通畴转变为拓扑畴. 例如, 在初始为条带畴或楔形畴的 BFO 纳米岛中, 通过扫描探针的针尖施加电场, 人工诱导出中心型拓扑畴或涡旋型拓扑畴, 并且在电场下可以往复切换^[56]. 这种拓扑畴状态的切换可归因于电荷注入的程度不同导致的. 除此之外, 可通过扫描探针针尖施加应力产生绕曲电效应, 还可在初始为单畴结构的钛酸铅 (PbTiO_3 ; PTO) 薄膜中诱导出类斯格明子的泡状畴^[57]. 以上通过扫描探针观测及调控拓扑畴的研究, 为进一步探索其新颖物性及器件用途打下基础.

3.2 拓扑缺陷的导电性调控及器件应用

在铁电畴中含有拓扑缺陷, 即无法通过连续形变产生或擦除的突变点, 包括二维畴壁, 以及更复杂的一维缺陷 (如涡心、中心畴中心等). 由于拓扑缺失

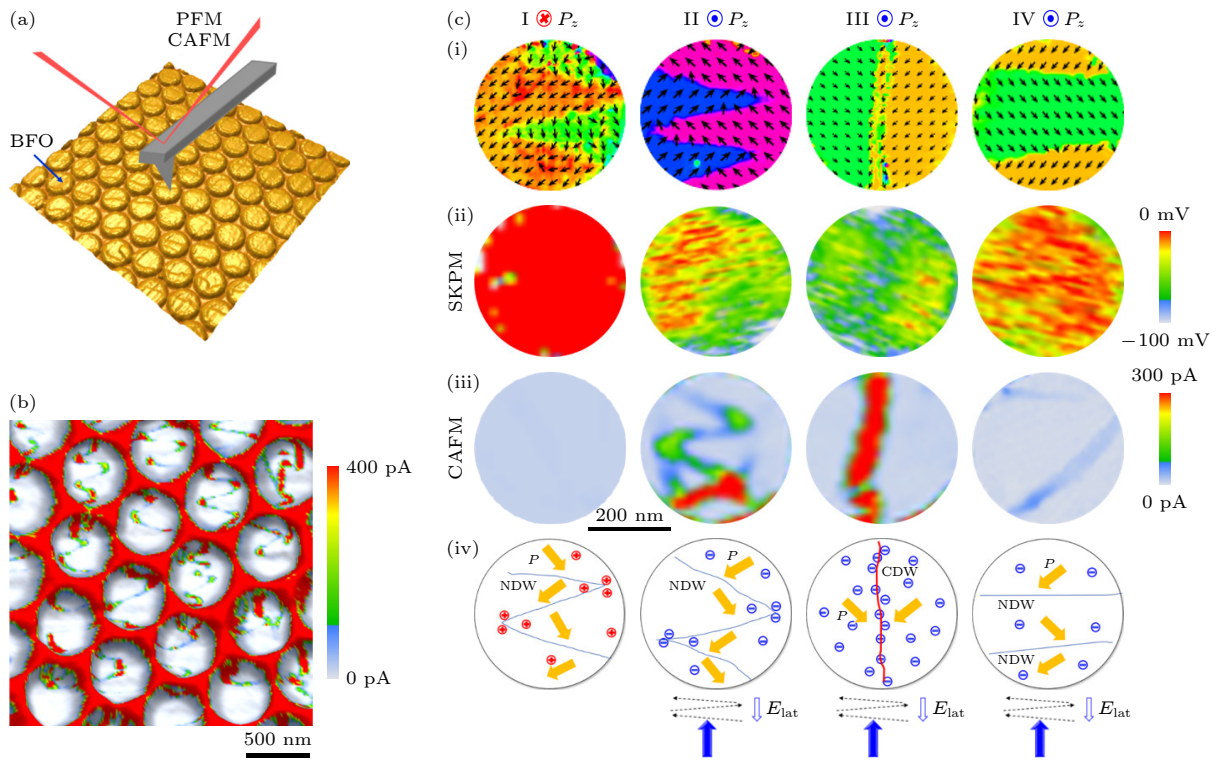


图 7 铁电纳米岛的畴壁导电性 (a) BFO 纳米岛阵列的 PFM 和 CAFM 表征示意图; (b) BFO 纳米岛阵列中导电畴壁的 CAFM 图; (c) 单个 BFO 纳米岛中不同畴壁状态相对应的表面电势、导电态和形成机制示意图, 其中 (i) 为不同畴壁状态的极化分布图象, (ii) 为对应的表面电势分布如图, (iii) 为不同的畴壁电导分布图, (iv) 为不同畴壁状态的形成机制的示意图^[58]

Fig. 7. Ferroelectric domain wall conductivity: (a) Schematic diagram of PFM and CAFM characterization of the BFO nanodot array; (b) CAFM map of conductive domain walls in an array of BFO nanodots; (c) surface potential and schematics of possible formation mechanisms for various domain wall states in individual nanodots, where (i) is the vector map, (ii) is the SKPFM map, (iii) is the corresponding CAFM images, and (iv) is the schematic diagram to help explain the formation mechanisms for different domain wall states^[58].

极化突变点, 其大小只有几个原子层, 往往展现出与铁电畴区域截然不同的物理性能. 最具代表性的是2009年 Seidel 等^[16]于 BFO 薄膜中发现的畴壁导电增强特征. 这种原子级功能拓扑缺陷可以在外加电场下产生、擦除和读取, 被认为是未来畴壁电流存储器的基本单元. 然而, 有关纳米尺度下畴壁的导电机理、可控调控性以及反复读取性还需深入研究.

针对这些问题, 本课题组探索了纳米尺度下高导电畴壁和拓扑缺陷的形成与调控机制. 沿着这一思路, Tian 等^[58]首先通过聚合物微球模板辅助刻蚀法制备出高质量外延的 BFO 纳米点, 并采用 PFM 与 CAFM 来观察畴壁及其导电性(图 7(a)). 在 BFO 纳米点阵列中可清晰观察到不同类型的导电畴壁, 包括头对头电荷型畴壁、锯齿形畴壁, 以及 71°头对尾中性畴壁, 并表现不同量级的导电性,

见图 7(b). 进一步通过对比 PFM, CAFM 和表面电势 (Kelvin potential force microscopy, KPFM) 成像, 揭示针尖加电场产生的离子注入诱导不同导电畴壁形成的机制, 见图 7(c). 利用扫描探针施加电压, 还在 BFO 薄膜中实现了多种畴壁类型的可控调控, 特别是可擦写的具有高导电畴壁的纳米畴结构^[59]. 以上研究结果克服了畴壁定位困难及擦写稳定性等问题, 也为电场诱导产生多导电态存储器件提供新途径.

更为有趣的是, 后续研究在一维拓扑缺陷中心处发现了准一维超导通道^[56]. 通过扫描针尖施加适当电压, 可在初始为近条带畴的 BFO 纳米岛中诱导产生四象限涡旋型和中心型拓扑畴结构, 并观测到拓扑畴的缺陷中心显示出类金属性高导电通道, 如图 8 所示. 结合相场模拟, 揭示了这类

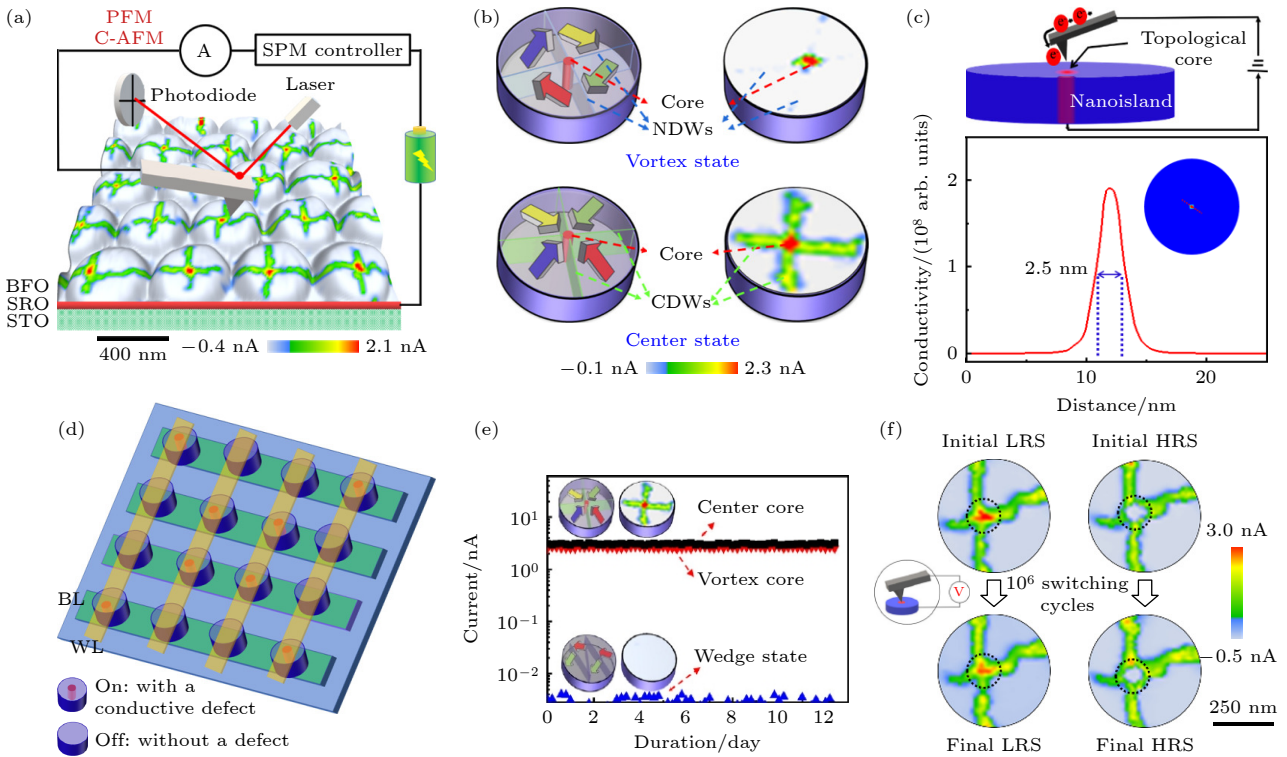


图 8 铁电拓扑缺陷中心的准一维金属性导电通道 (a) 在 BFO 纳米岛阵列上探测 CAFM 和 PFM 图像的实验装置示意图, 其中纳米岛阵列的三维形态与中心拓扑畴阵列的 CAFM 图像叠加; (b) 两种拓扑畴的极化分布示意图及对应的导电分布图像; (c) 拓扑缺陷中心的准一维导电通道示意图 (上) 和相场模拟得到的导电拓扑缺陷核心的横向尺寸 (下); (d) 利用拓扑缺陷中的可编程金属传导通道作为数据位设计的概念存储器的示意图; (e) 电阻的在高低阻态之间变化的保持特性曲线; (f) 可往复切换的导电拓扑缺陷中心的疲劳特性^[56]

Fig. 8. Quasi-one-dimensional metallic conduction channels in ferroelectric topological defects: (a) Schematic experimental setup for probing the C-AFM and PFM maps on an array of BFO nanoislands, wherein the 3 D morphology of an array of nanoislands was superimposed with a C-AFM map for an array of center topological states; (b) the typical domain structures of two types of topological states, along with their conduction patterns; (c) schematic diagram of the quasi-one-dimensional conductive channel at the topological core and the lateral dimension of the conductive topological core by phase field simulation; (d) a schematic conceptual crossbar memory device using the programmable metallic conduction channels in topological defects as data bits; (e) retention properties of resistance changes between the low and high-conduction states; (f) the fatigue behaviors for a switchable central core^[56].

导电通道是电荷型拓扑缺陷中心吸引的屏蔽载流子引起能带弯曲导致的, 而中性涡旋中心的导电性则源于外场诱导产生的类中心汇聚的极化扭曲态产生的. 这种导电通道理论尺度小于 3 nm, 可以看成可擦写的准一维电子气导电通道. 利用导电通道的擦写导致电导显著变化, 可以构筑新概念存储器. 通过导电针尖进行了读写验证, 显示 12 d 稳定保持特性, 10^6 次翻转后还可保持 80% 的开关比等良好器件性能, 显示出开发超小尺寸器件的巨大潜力.

另一方面, 为进一步开发与集成工艺相兼容的拓扑畴原型器件, Yang 等^[60]在 BFO 薄膜中设计了具有独特同轴电极结构的拓扑器件单元, 可通过电极施加电场直接诱导产生中心畴并调控切换, 进而带动镶嵌其中的畴壁导电态的反复切换, 如图 9(a)–(c) 所示. 通过 CAFM 外接仪器测试显示, 这种存储器件原型的开关比可达 10^4 以上, 读取电流高达 40 nA, 足以满足微电子器件高速存取的需求. 由于拓扑畴和铁弹性畴对导电畴壁态的保护作用, 器件表现出高稳定性, 可实现亿次反复

擦写, 12 d 的稳定性. 除此之外, 这种器件可以大面积制备, 与传统存储芯片的叉指电极布线架构相兼容, 器件间串扰小等优异特性. 该结果为开发有应用价值的拓扑器件迈出一小步, 也成为拓扑电子学领域一个原型器件范例.

4 极化调控磁畴

利用铁电极化相关的压电效应和界面效应, 还可用于实现电场调控磁畴. 电场驱动磁翻转是多铁性材料和磁电耦合领域的最重要课题之一, 旨在用电场替代磁场/电流驱动磁翻转, 从而大幅降低自旋电子学器件 (如新兴的自旋扭矩转移磁随机存储器) 的能耗和发热^[5,6]. 电控磁翻转有望用于构筑超低能耗的磁电存储或磁电耦合-自旋轨道耦合逻辑器件, 从而为解决日益增长的数据处理用电问题提供一种新方案^[61–66]. 虽然电控磁性的器件应用远景十分诱人, 但器件化的前提是实现可控电驱动磁畴态往复翻转这一巨大挑战. 近十年来, 研究人员已探索了众多多铁异质结体系, 揭示了多种新颖的

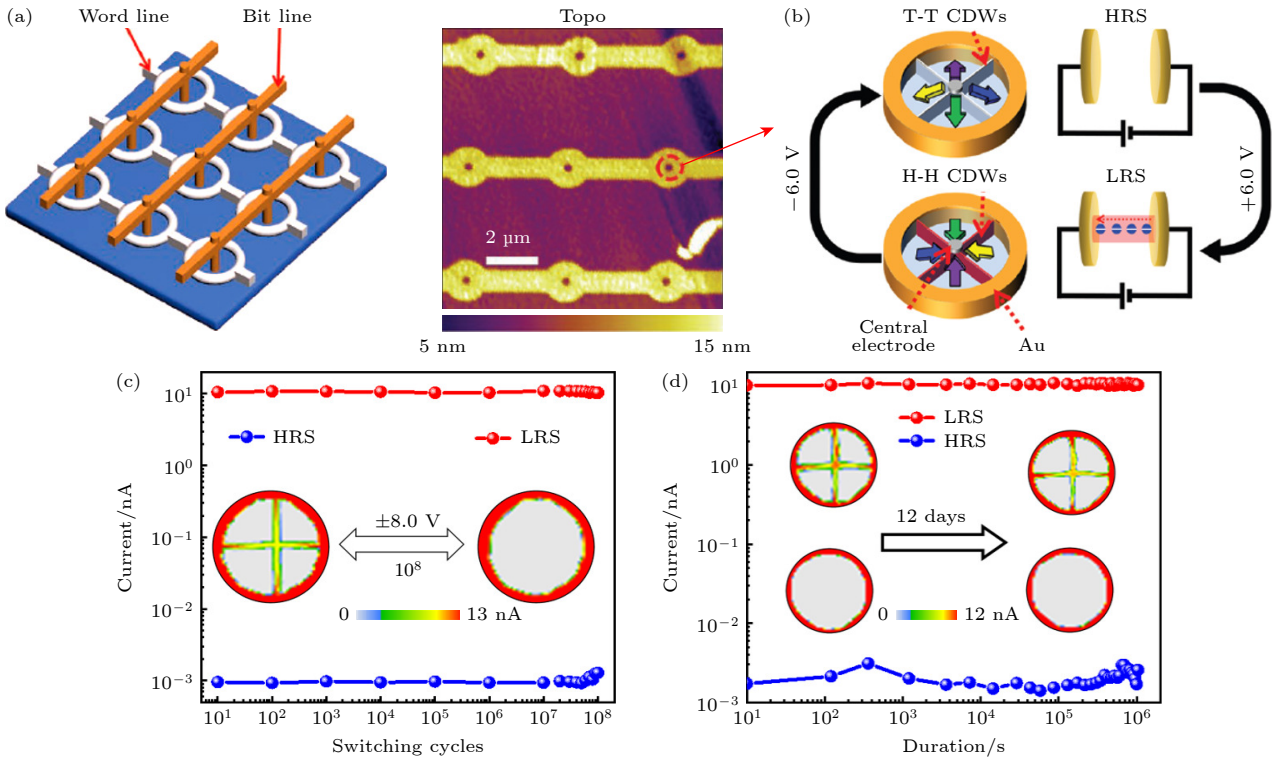


图 9 (a) 交叉集成的畴壁存储概念器件示意图和用电子束光刻技术 (electron beam lithography, EBL) 制备的器件阵列的实例; (b) 基于导电畴壁态产生和消除的原理图; (c) 高低阻态在 10^8 次切换的耐受性能; (d) 高低阻态在室温下的保持特性^[60]

Fig. 9. (a) Conceptual crossbar-integrated domain-wall memory device and an example of a device array fabricated by the Electron beam lithography (EBL) technique; (b) schematic working principle based on creation and erasure of conductive domain-wall states; (c) endurance properties for both LRS and HRS over 10^8 switching cycles; (d) the retention properties for LRS and HRS at a room temperature^[60].

电控磁机理, 丰富了电场调控磁性的手段. 随着电控磁研究向器件应用推进, 微型化问题变得越发重要, 尤为迫切的是探索小尺度器件单元内电场驱动磁反转行为. 下文介绍利用扫描探针研究纳米多铁性材料的电控磁性工作.

4.1 电控纳米磁畴观测

为了观测纳米尺度多铁性材料的电控磁性, 课题组采用磁力显微镜 (magnetic force microscopy, MFM) 观测磁畴的变化, 并通过针尖施加电场调控磁畴. Tian 等^[67] 利用针尖电场扫描 SrRuO₃/CoFe₂O₄/BiFeO₃(SRO/CFO/BFO) 外延多铁异质结纳米岛 (直径约为 60 nm) 阵列表面, 诱导磁力显微镜图像的衬度改变 (见图 10(a)), 显示出电控磁翻转可能. 通过微观磁电耦合测量, 其磁电耦合系数比传统多铁异质结薄膜高 3 个量级, 这可归因于该结构可有效释放界面挟持效应, 从而显著增

强磁电耦合并导致电控磁翻转成为可能. 利用这种方法, 在 1-3 型柱状 CFO/BFO 复合多铁性薄膜中观测到 CFO 纳米磁畴的电控磁翻转^[68], 并诱导 BFO 薄膜上方的圆形 Co 纳米岛产生从初始单畴态到涡旋畴的转变^[69]. 然而, 以上电控磁翻转并不可控或需要外磁场参与才可能实现往复翻转.

为获得更可控的磁翻转, Yao 等^[70] 设计了超四方相 BFO/三角状纳米 Co 点组成的多铁异质结, 通过应变与界面交换耦合协同作用, 实现了 Co 纳米点的磁畴态 120° 往复翻转, 如图 10(b) 所示. 为解析 MFM 所代表的较复杂的磁畴态, 通过将 MFM 像与微磁学模拟的磁畴态的 MFM 仿真衬度, 揭示出“Y 型”磁畴态. 通过扫描探针针尖施加脉冲电压, 可诱导纳米 Co 点的磁畴出现往复可控 120° 翻转, 并可在 10 ns 短电脉冲下驱动磁畴翻转. 该结果提供了一种构建可高速读写的高密度磁电存储器件的新途径.

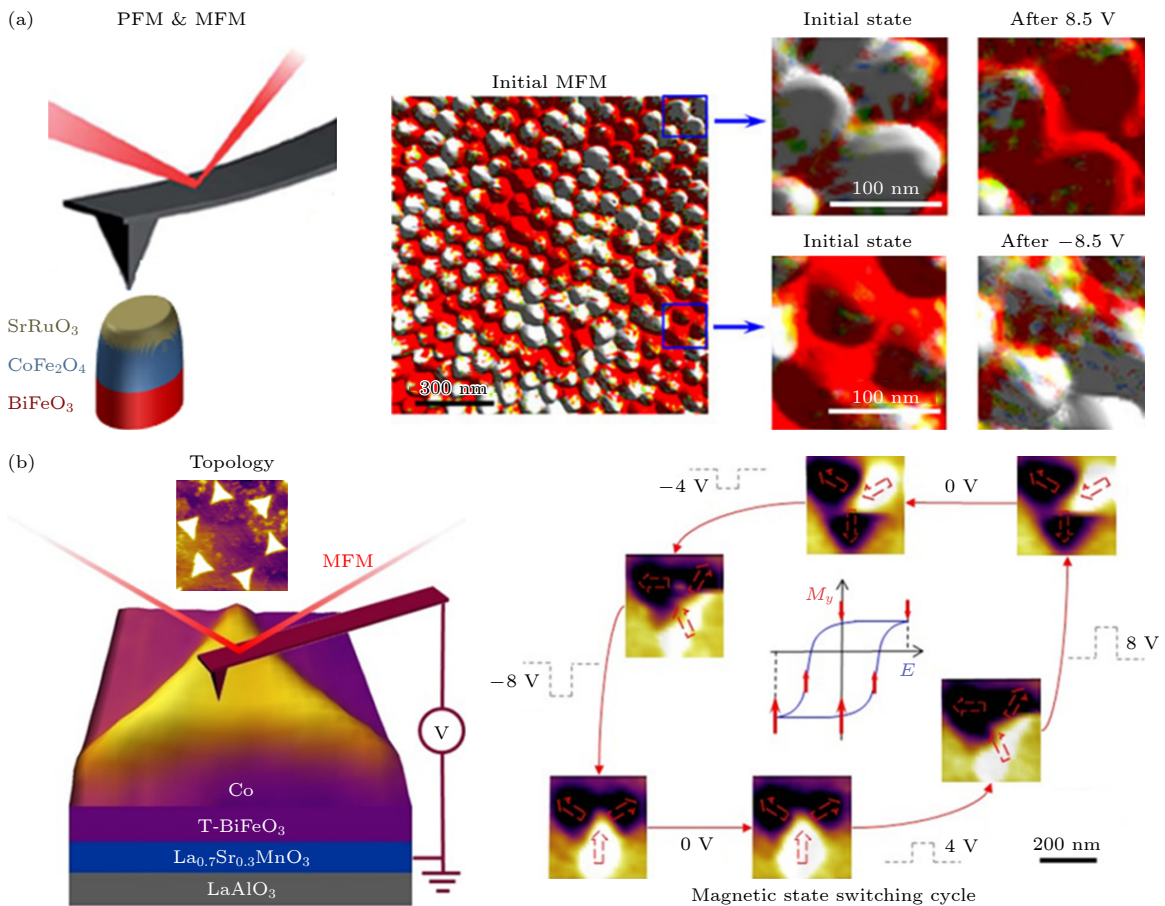


图 10 (a) 电场控制 SRO/CFO/BFO 多铁异质结纳米岛中的磁畴翻转^[67]; (b) 电场驱动在 T-BFO/LAO 薄膜上的三角形 Co 纳米磁体的可逆 120° 磁畴态旋转^[70]

Fig. 10. (a) Electric field control of magnetic domain switching in SRO/CFO/BFO nanodots^[67]; (b) electric field driven reversible 120° magnetic state rotation in triangular-shape Co nanomagnets on tetragonal-structured BiFeO₃ film on LaAlO₃ substrate^[70].

4.2 电场驱动磁斯格明子翻转

磁性斯格明子被认为是下一代超高密度数据存储的理想媒介,其尺寸可小至几纳米,并具有拓扑保护等特征,有望用于开发高密度和低能耗信息器件,因此成为近年来的研究热点^[71-77].这种新奇磁性拓扑态的引入,也为电场调控磁性提供一种新的自由度.

2020年, Wang等^[78]在基于铁电与压电 Pb(Mg_{1/3}, Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃ (PMN-PT) 衬底和 Pt/Co/Ta 多层膜磁性纳米岛构成的多铁异质结中,利用扫描探针的 MFM 等功能成功实现了电场诱导磁性纳米岛中产生斯格明子等多态翻转,如图 11(a), (b) 所示.这种调控是非易失性且无需施加外磁场,主要通过应变调控磁各向异性和 DM (Dzyaloshinskii-Moriya) 效应起作用.2022年, Hou等^[79]进一步在类似的多铁异质结构中,通过电场成功诱导实现单纳米岛中斯格明子数目的精准调

控,如 0, 1, 2, 4 个斯格明子数变化,如图 11(c), (d) 所示.这些结果表明,通过施加电场可以实现磁电多态存储,其翻转能量比传统电流调控方案可降低 3 个数量级以上,为拓扑磁畴在低能耗磁电器件中的应用迈出重要一步.

5 总结和展望

经过多年努力,扫描探针系统成为探索微观铁性畴及其物性调控的重要手段,也为探索微器件及新原理提供一种简捷途径.本课题组利用扫描探针探测和调控电畴及其输运性能,尤其是新奇拓扑畴带来的新物性及器件用途,以及电控磁畴,研究结果为应对后摩尔时代器件持续微型化和降低能耗需求提供了新方案.针对铁电畴相关领域,尚有诸多问题亟待解决,下面从新物性探索,新原理器件开发,以及扫描探针技术发展等层面提出一些思考.

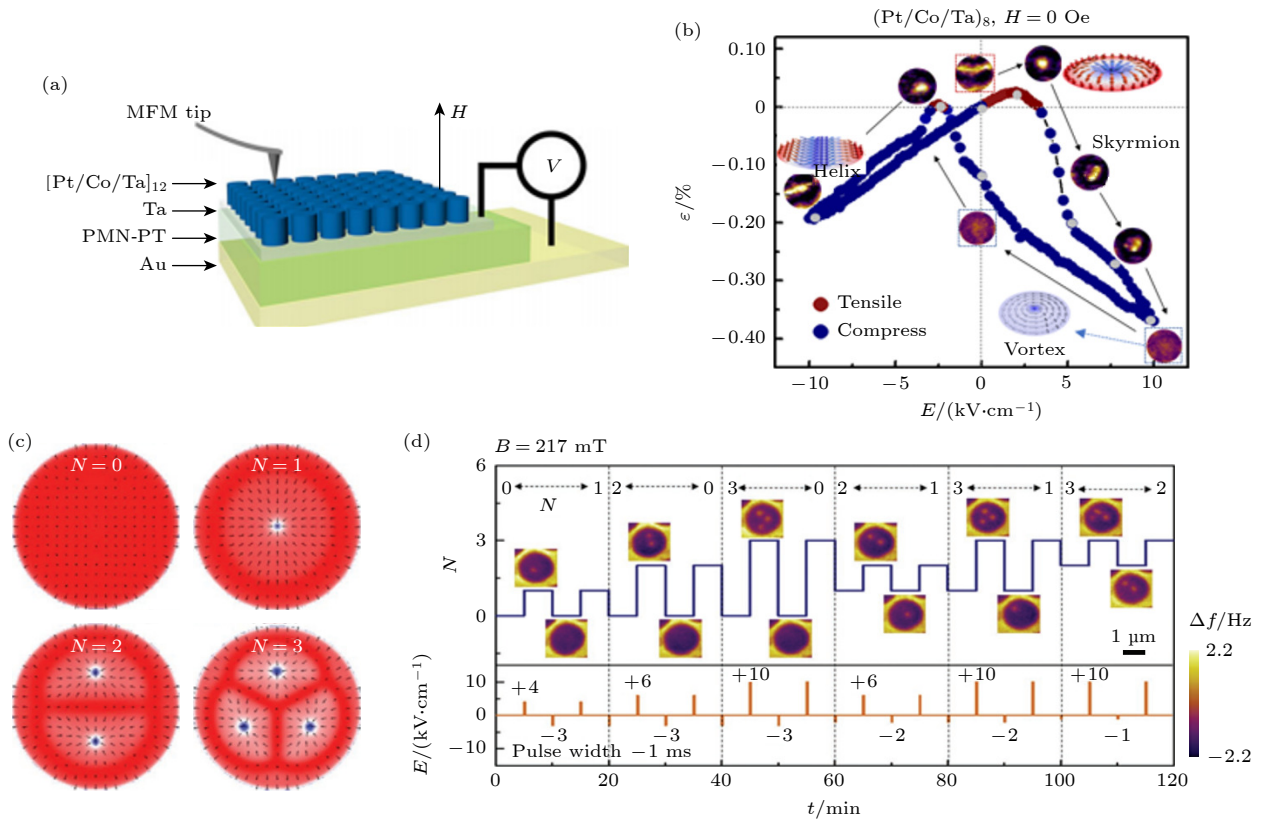


图 11 电场控制磁斯格明子 (a) [Pt/Co/Ta]₁₂/PMN-PT 纳米点阵列结构及测试示意图^[78]; (b) 在 ~ 350 nm [Pt/Co/Ta]₈ 纳米点上的平均转移应变曲线和相应的磁畴演化过程 (涡旋态、条带、斯格明子态翻转)^[78]; (c) 直径 900 nm 纳米点在不同应变下的模拟自旋图^[77]; (d) 电场脉冲驱动斯格明子团簇四态转变^[79]

Fig. 11. Electric field manipulation of magnetic skyrmion: (a) [Pt/Co/Ta]₁₂/PMN-PT nanodot array structure and test diagram^[78]; (b) the transferred average strain curve and corresponding magnetic domain evolution processes in the $d \sim 350$ nm [Pt/Co/Ta]₈ nanodots^[78]; (c) the simulated spin diagram of 900 nm diameter nanodots under different strains^[77]; (d) the electric field pulse drives the four-state transformation of skyrmions cluster^[79].

1) 新性能的探索. 铁电拓扑畴的诸多新物性尚未进行深入研究, 可以预见, 拓扑畴调控研究有望带来丰富的物理性能, 如低维度输运性能、磁电阻、负电容效应、光电性能等, 有望成为发现新物性和新机制的富矿, 并为构筑未来新原理器件提供新途径.

2) 新原理器件探索. 铁电畴在开发未来低能耗器件拥有巨大潜力, 有望实现飞焦到阿焦级的超低操作能耗. 利用电控磁与自旋轨道耦合机制相结合构筑 MESO 逻辑器件, 已显示出低能耗器件功能. 而铁电拓扑缺陷的超细导电通道的发现并成功擦写, 也提供一种可能. 为此实现低能耗器件, 在材料层面需大幅降低铁电翻转电压并且实现稳定可控的畴翻转或电控磁翻转. 在器件层面, 由于微加工和布线的难度及成本较大, 而通过原子力扫描探针测试器件性能并研究微观机制, 可以简化这一过程, 从而成为器件原理研究的利器. 此外, 扫描探针还具备纳米尺度辅助微加工功能, 为原型新原理器件探索提供便利. 同时也需认识到, 利用针尖进行器件功能验证跟实际器件探测还有差异, 需细致比较两者测试结果, 建立起探针验证与实际器件测试的桥梁.

3) 进一步发展探测系统的新功能. 扫描探针系统是集成多功能探测、调控与微加工功能于一体的仪器. 然而, 也存在一些问题, 如分辨率不如球差电镜, 成像速度慢等, 难以同时进行成分和结构成像, 以及存在假信号等问题. 一方面需要与其他测试技术(如透射电镜等)的结果相比较, 用以克服仪器短板, 并排除假信号. 为更好探索铁电畴和多铁性材料的新物性和新功能, 还需在扫描探针系统集成更多新功能, 例如利用多普勒效应定量化测试压电系数, 扫描微波功能测试载流子状态, 近场红外技术高分辨探测光学性能, 金刚石色心技术探测弱磁场, 超快扫描实现视频级成像等. 而原子力与深度学习的结合, 也为探索新功能和新机制带来机会. 这些技术的发展, 有望大幅拓展扫描探针技术的深度和广度, 成为功能更强大的“针尖实验室”.

参考文献

- [1] Scott J F 2007 *Science* **315** 954
- [2] Nan C W, Bichurin M I, Dong S X, Viehland D, Srinivasan G 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 031101
- [3] Dong S, Liu J M, Cheong S W, Ren Z F 2015 *Adv. Phys.* **64** 519
- [4] Polking M J, Han M G, Yourdkhani A, Petkov V, Kisielowski C F, Volkov V V, Zhu Y, Caruntu G, Alivisatos A P, Ramesh R 2012 *Nat. Mater.* **11** 700
- [5] Hu J M, Chen L Q, Nan C W 2016 *Adv. Mater.* **28** 15
- [6] Hu J M, Li Zheng, Chen L Q, Nan C W 2011 *Nat. Commun.* **2** 553
- [7] Seidel J, Vasudevan R K, Nagarajan V 2016 *Adv. Electron. Mater.* **2** 1500292
- [8] Seidel J 2019 *Nat. Mater.* **18** 188
- [9] Das S, Hong Z, McCarter M, Shafer P, Shao Y T, Muller D A, Martin L W, Ramesh R 2020 *APL Mater.* **8** 120902
- [10] Tang Y L, Zhu Y L, Ma X L 2021 *J. Appl. Phys.* **129** 200904
- [11] Tang Y L, Zhu Y L, Ma X L, Borisevich A Y, Morozovska A N, Eliseev E A, Wang W Y, Wang Y J, Xu Y B, Zhang Z D, Pennycook S J 2015 *Science* **348** 547
- [12] Yadav A K, Nelson C T, Hsu S L, Hong Z, Clarkson J D, Schlepütz C M, Damodaran A R, Shafer P, Arenholz E, Dedon L R, Chen D, Vishwanath A, Minor A M, Chen L Q, Scott J F, Martin L W, Ramesh R 2016 *Nature* **530** 198
- [13] Li Z W, Wang Y J, Tian G, Li P L, Zhao L N, Zhang F Y, Yao J X, Fan H, Song X, Chen D Y, Fan Z, Qin M H, Zeng M, Zhang Z, Lu X B, Hu S J, Lei C H, Zhu Q F, Li J Y, Gao X S, Liu J M 2017 *Sci Adv* **3** e1700919
- [14] Das S, Tang Y L, Hong Z, et al. 2019 *Nature* **568** 368
- [15] Rodriguez B J, Gao X S, Liu L F, Lee W, Naumov I I, Bratkovsky A M, Hesse D, Alexe M 2009 *Nano Lett.* **9** 1127
- [16] Seidel J, Martin L W, He Q, Zhan Q, Chu Y H, Rother A, Hawkridge M E, Maksymovych, Yu P, Gajek M, Balke N, Kalinin S V, Gemming S, Wang F, Catalan G, Scott J F, Spaldin N A, Orenstein J, Ramesh R 2009 *Nat. Mater.* **8** 229
- [17] Gao F, Chen X Y, Yin K B, Dong S, Ren Z F, Yuan F, Yu T, Zou Z G, Liu J-M 2007 *Adv. Mater.* **19** 2889
- [18] Seidel J, Fu D, Yang S Y, Alarcon-Llado E, Wu J, Ramesh R, Ager III J W 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 126805
- [19] He Q, Yeh C H, Yang J C, Singh-Bhalla G, Liang C W, Chiu P W, Catalan G, Martin L W, Chu Y H, Scott J F, Ramesh R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 067203
- [20] Park T J, Papaefthymiou G C, Viascas A J, Moodenbaugh A R, Wong S S 2007 *Nano Lett.* **7** 766
- [21] Vasudevan R K, Bogle K A, Kumar A, Jesse S, Magaraggia R, Stamps R, Ogale S B, Potdar H S, Nagarajan V 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 252905
- [22] Tsymbal E Y, Kohlstedt 2006 *Science* **313** 181
- [23] Lin Y B, Yan Z B, Lu X B, Lu Z X, Zeng M, Chen Y, Gao X S, Wan J G, Dai J Y, Liu J-M 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 143503
- [24] Yan F, Xing G Z, Li L 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 132904
- [25] Wang C, Jin K J, Xu Z T, Wang L, Ge C, Lu H-B, Guo H-Z, He M, Yang G Z 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 192901
- [26] Banerjee W, Kashir A, Kamba S 2022 *Samll* **18** 2107575
- [27] Choi T, Lee S, Choi Y J, Kiryukhin V, Cheong S-W 2009 *Science* **324** 63
- [28] Guo R, You L, Zhou Y, Lim Z S, Zou X, Chen L, Ramesh R, Wang J L 2013 *Nat. Commun.* **4** 1990
- [29] Hu W J, Wang Z H, Yu W L, Wu T 2016 *Nat. Commun.* **7** 10808
- [30] Yi H T, Choi T, Choi S G, Oh Y S, Cheong S W 2011 *Adv. Mater.* **23** 3403
- [31] Chang K, Liu J W, Lin H C, Wang N, Zhao K, Zhang A M, Jin F, Zhong Y, Hu X P, Duan W H, Zhang Q M, Fu L, Xue Q K, Chen X, Ji S H 2016 *Science* **353** 274

- [32] Gou J, Bai H, Zhang X L, Huang Y L, Duan S S, Ariando A, Yang S A, Chen L, Lu Y H, Wee A T S 2023 *Nature* **617** 67
- [33] Gao X S, Liu J-M, Au K, Dai J Y 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 142905
- [34] Zhang F Y, Miao Q, Tian G, Lu Z X, Zhao L N, Fan H, Song X, Li Z W, Zeng M, Gao X S, Liu J M 2016 *Nanotechnology* **27** 015703
- [35] Chen D Y, Chen Z H, He Q, Clarkson J D, Serrao C R, Yadav A K, Nowakowski M E, Fan Z, You L, Gao X S, Zeng D H, Chen L, Borisevich A Y, Salahuddin S, Liu J-M, Bokor J 2017 *Nano Lett.* **17** 486
- [36] Lu Z X, Fan Z, Li P L, Fan H, Tian G, Song X, Li Z W, Zhao L N, Huang K R, Zhang F Y, Zhang Z, Zeng M, Gao X S, Feng J J, Wan J G, Liu J M 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 23963
- [37] Miao Q, Zeng M, Zhang Z, Lu X B, Dai J Y, Gao X S, Liu J M 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 182903
- [38] Lu Z X, Li P L, Wan J G, Huang Z F, Tian G, Pan D F, Fan Z, Gao X S, Liu J M 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 27284
- [39] Fan H, Fan Z, Li P L, Zhang F Y, Tian G, Yao J X, Li Z W, Song X, Chen D Y, Han B, Zeng M, Wu S J, Zhang Z, Qin M H, Lu X B, Gao J W, Lu Z X, Zhang Z, Dai J Y, Gao X S, Liu J-M 2017 *J. Mater. Chem. C* **5** 3323
- [40] Gao S, Liu G, Yang H, Hu C, Chen Q, Gong G, Xue W, Yi X, Shang J, Li R W 2019 *ACS Nano* **13** 2634
- [41] Tan H, Ni Z Y, Peng W B, Du S C, Liu X K, Zhao S Y, Li W, Ye Z, Xu M S, Xu Y, Pi X D, Yang D R 2018 *Nano Energy* **52** 422
- [42] Zhao L, Fan Z, Chen S L, Hong L Q, Li Y Q, Tian G, Chen D Y, Hou Z P, Qin M H, Zeng M, Lu X B, Zhou G F, Gao X S, Liu J M 2020 *Adv. Electron. Mater.* **6** 201900858
- [43] Cui B Y, Fan Z, Li W J, Chen Y H, Dong S, Tan Z W, Chen S L, Tian B B, Tao R Q, Tian G, Chen D Y, Hou Z P, Qin M H, Zeng M, Lu X B, Zhou G F, Gao X S, Liu J-M 2022 *Nat. Commun.* **13** 1707
- [44] Li W J, Fan Z, Huang Q C, Rao J J, Cui B Y, Chen Z W, Lin Z S, Yan X B, Tian G, Tao R Q, Chen D Y, Qin M H, Zeng M, Lu X B, Zhou G F, Gao X S, Liu J M 2023 *Phys. Rev. Appl.* **19** 014054
- [45] Chen Z W, Li W J, Fan Z, Dong S, Chen Y H, Qin M H, Zeng M, Lu X B, Zhou G F, Gao S X, Liu J M 2023 *Nat. Commun.* **14** 3585
- [46] Zhang Y, Wang Z R, Zhu J D, Yang Y C, Rao M Y, Song W H, Zhuo Y, Zhang X M, Cui M L, Shen L L, Huang R, Yang J 2020 *Appl. Phys. Rev.* **7** 011308
- [47] Liao F Y, Zhou F C, Chai Y 2021 *J. Semicond.* **42** 013105
- [48] Ma J, Ma J, Zhang Q H, Peng R C, Wang J, Liu C, Wang M, Li N, Chen M F, Chen X X, Gao P, Gu L, Chen L Q, Yu P, Nan C W, Zhang J X 2018 *Nat. Nanotech.* **13** 947
- [49] Han M J, Wang Y J, Tang Y L, Zhu Y L, Ma J Y, Geng W R, Zou M J, Feng Y P, Zhang N B, Ma X L 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 2557
- [50] Wang Y J, Feng Y P, Zhu Y L, Tang Y L, Yang L X, Zou M J, Geng W R, Han M J, Guo X W, Wu B, Ma X L 2020 *Nat. Mater.* **19** 881
- [51] Naumov I I, Bellaiche L, Fu H X 2004 *Nature* **432** 737
- [52] Kalinin S V, Gruverman A 2006 *J. Mater. Sci.* **41** 107
- [53] Tian G, Chen D Y, Fan H, Li P L, Fan Z, Qin M H, Zeng M, Dai J Y, Gao X S, Liu J M 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 37219
- [54] Tian G, Yi X, Song Z Q, et al. 2023 *Appl. Phys. Rev.* **10** 021413
- [55] Chen H Y, Tian G, Yang W D, Mo Z H, Zhang L Y, Chen Y Y, Chen C, Hou Z P, Chen D Y, Fan Z, Gao X S, Liu J-M 2020 *J. Appl. Phys.* **128** 224103
- [56] Yang W D, Tian G, Zhang Y, Xue F, Zheng D F, Zhang L Y, Wang Y D, Chen C, Fan Z, Hou Z P, Chen D Y, Gao J W, Zeng M, Qin M H, Chen L Q, Gao X S, Liu J M 2021 *Nat. Commun.* **12** 1306
- [57] Zhang X C, Chen H Y, Tian Guo, Yang W D, Fan Z, Hou Z P, Chen D Y, Zeng M, Qin M H, Gao J W, Gao X S, Liu J-M 2023 *Journal of Materiomics* **9** 626
- [58] Tian G, Yang W D, Song X, Zheng D F, Zhang L Y, Chen C, Li P L, Fan H, Yao J X, Chen D Y, Fan Z, Hou Z P, Zhang Z, Wu S J, Zeng M, Gao X S, Liu J M 2019 *Adv. Funct. Mater.* **19** 1807276
- [59] Zheng D F, Tian G, Wang Y D, Yang W D, Zhang L Y, Chen Z F, Fan Z, Chen D Y, Hou Z P, Gao X S, Li Q L, Liu J M 2022 *J. Materiomics* **8** 2022
- [60] Yang W D, Tian G, Fan H, Zhao Y, Chen H Y, Zhang L Y, Wang Y D, Fan Z, Hou Z P, Chen D Y, Gao J W, Zeng M, Lu X B, Qin M H, Gao X S, Liu J M 2022 *Adv. Mater.* **34** 2107711
- [61] Bibes M, Barthelemy 2008 *Nat. Mater.* **7** 425
- [62] Amiri P K, Alzate J G, Cai X Q, Ebrahimi F, Hu Q, Wong K, Grezes C, Lee H, Yu G Q, Li X, Akyol M, Shao Q, Katine J A, Langer J, Ocker B, Wang K L 2015 *IEEE Trans. Magn* **51**
- [63] Zhou W, Xiong Y Q, Zhang Z M, Wang D H, Tan W S, Cao Q Q, Qian Z H, Du Y W 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 5424
- [64] Zheng R K, Li X G 2013 *Prog. Phys.* **33** 359 (in Chinese) [郑仁奎, 李晓光 2013 物理学进展 33 359]
- [65] Song X, Gao X S, Liu J-M 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 157512 (in Chinese) [宋晓, 高兴森, 刘俊明 2018 物理学报 **67** 157512]
- [66] Kosub T, Kopte M, Hühne R, Appel P, Shields B, Maletinsky P, Hühne R, Liedke M O, Fassbender J, Schmidt O G, Makarov D 2017 *Nat. Commun.* **8** 13985
- [67] Tian G, Zhang F Y, Yao J X, Fan H, Li P L, Li Z W, Song X, Zhang X Y, Qin M H, Zeng M, Zhang Z, Yao J X, Gao X S, Liu J-M 2016 *ACS Nano* **10** 1025
- [68] Tian G, Ojha S, Ning S, Gao X S, Ross C A 2019 *Adv. Electron. Mater.* **5** 1900012
- [69] Zhong X, Tian G, Song X, Wang Y D, Yang W D, Li P L, Luo Q Y, Hou Z P, Fan Z, Chen D Y, Qin M H, Zeng M, Gao X S, Liu J M 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 012901
- [70] Yao J X, Song X, Gao X S, Tian G, Li P L, Fan H, Huang Z F, Yang W D, Chen D Y, Fan Z, Zeng M, Liu J-M 2018 *ACS Nano* **12** 6767
- [71] Wiesendanger R 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16044
- [72] Zhou Y 2019 *Natl. Sci. Rev.* **6** 210 212
- [73] Fert A, Cros V, Sampaio J 2013 *Nat. Nanotech.* **8** 152
- [74] Rosch A 2013 *Nat. Nanotech.* **8** 160
- [75] Liang D, DeGrave J P, Stolt M J, Tokura Y, Jin S 2015 *Nat. Commun.* **6** 8217
- [76] Hou Z P, Zhang Q, Zhang X C, Xu G Z, et al. 2020 *Adv. Mater.* **32** 1904815
- [77] Iwasaki J, Mochizuki M, Nagaosa N 2013 *Nat. Nanotech.* **8** 742
- [78] Wang Y D, Wang L, Xia J, et al. 2020 *Nat. Commun.* **11** 3577
- [79] Hou Z P, Wang Y D, Lan X M, et al. 2022 *Adv. Mater.* **34** 202107908

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Laboratory experiments based on tip probe — Scanning probe detection and regulation of ferroelectric domains and their microscopic physical properties*

Tian Guo¹⁾ Fan Zhen¹⁾ Chen De-Yang¹⁾ Hou Zhi-Peng¹⁾
Liu Jun-Ming¹⁾²⁾ Gao Xing-Sen^{1)†}

1) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials and Institute for Advanced Materials, South China Academy of Optoelectronics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*National Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

(Received 7 June 2023; revised manuscript received 25 July 2023)

Abstract

Ferroelectric and multiferroic materials have gained significant attention due to their potential applications in investigating emergent cross-coupling phenomena among spin, charge, orbit, and lattice in correlated electron systems, as well as promising candidates for prospective applications in advanced industries, *e.g.* data memory/processing, sensors, actuators, and energy-relevant devices. The structure and dynamic characteristics of ferroelectric domains can significantly affect the physical properties and device functions of materials, such as electrical conductivity, photovoltaics, and magnetoelectric coupling, particularly, novel topological domains can bring many new physical properties. These make it possible to design materials and devices through domain engineering methods. Therefore, exploring the microdomain structures and related physical property is expected to bring new material and device solutions for post-Moore's era information technology.

Accurate understanding of domain structures and their corresponding functionalities pose challenges to characterization techniques. In particular, it remains challenging to investigate the dynamics and cross-coupling behaviors on a nanoscale *in situ*. Nowadays, it is worthwhile to pay more attention to the multifunctional scanning probe microscopy technique, as it serves as a versatile and powerful nanoscale probe capable of exploring multifunctionalities. Multi-field stimulation such as electric field, magnetic field, light illumination, strain field, and thermal field can be combined with the advanced scanning probe microscopy technique, making it an ideal platform for in-situ manipulation of domain structure and its related functional response on a nano-scale.

In this study, we give a brief overview on the recent advances in our research group in detection and manipulation of ferroelectric domains and microscopic physical properties through multifunctional scanning probe microscopy technique. Special attention is paid to those topological domain structures such as vortex, center domain state and bubble domain in size-confined systems (ultrathin films/multilayers and nanodots/nanoislands) and their associated novel physical phenomena. In addition, the controllability of electric field driven magnetic switching in multiferroic heterostructures is also studied through size effect, interfacial coupling and domain engineering. Finally, we present some suggestions for future directions. Most of these studies are conducted by using the tip probe, so it is named the “Laboratory experiments based on tip probe”.

Keywords: scanning probe microscopy, ferroelectric domains, topological domains, electric-field-driven magnetic switching, information storage devices

PACS: 75.85.+t, 75.60.Jk, 77.80.-e, 77.90.+k.

DOI: 10.7498/aps.72.20230954

* Project supported by the National Key Research and Development Programs of China (Grant No. 2022YFB3807603), the Natural Science Foundation of China (Grant Nos. U22A20117, 52002134, 92163210), the Science and Technology Planning Project of Guangdong Province, China (Grant No. 202201000008), and the Hong Kong Scholar Program, China (Grant No. XJ2022004).

† Corresponding author. E-mail: xingsengao@sclu.edu.cn

“针尖下的实验室”——扫描探针探测与调控铁电畴及其微观物性

田国 樊贞 陈德杨 侯志鹏 刘俊明 高兴森

Laboratory experiments based on tip probe – Scanning probe detection and regulation of ferroelectric domains and their microscopic physical properties

Tian Guo Fan Zhen Chen De-Yang Hou Zhi-Peng Liu Jun-Ming Gao Xing-Sen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 207501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230954

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230954>

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

铁电纳米结构中奇异极化拓扑畴的研究新进展

Recent progress in exotic polar topological states in ferroelectric nanostructures

物理学报. 2020, 69(21): 217501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201063>

铁电材料中的极性拓扑结构

Polar topological structures in ferroelectric materials

物理学报. 2020, 69(12): 127702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200311>

铁电材料中的电畴: 形成、结构、动性及相关性能

Domains in ferroelectrics: formation, structure, mobility and related properties

物理学报. 2020, 69(12): 127704 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200312>

相场模拟应变调控 $\text{PbZr}_{(1-x)}\text{Ti}_x\text{O}_3$ 薄膜微观畴结构和宏观铁电性能

Phase field simulation of misfit strain manipulating domain structure and ferroelectric properties in $\text{PbZr}_{(1-x)}\text{Ti}_x\text{O}_3$ thin films

物理学报. 2020, 69(12): 127801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200310>

交变力磁力显微镜: 在三维空间同时观测静态和动态磁畴

Alternating magnetic force microscopy: simultaneous observation of static and dynamic magnetic field in three-dimensional space

物理学报. 2019, 68(16): 168502 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190510>

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>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

机器学习回归不确定性揭示自驱动 活性粒子的群集相变*

郭唯琛 艾保全[†] 贺亮[‡]

(华南师范大学物理学院, 理论物理研究所, 广州 510006)

(2023 年 5 月 30 日收到; 2023 年 7 月 16 日收到修改稿)

本文发展了一种利用逆统计问题中的回归不确定性来自动探索物质相的新方法. 以自驱动活性粒子的群集相变为例, 展示了对于这一类涉及非平衡、非晶格、一阶相变等复杂要素的多体系统, 在训练人工神经网络处理其中的逆统计问题回归任务, 成功重构出系统的噪声强度这一参数之后, 回归结果的不确定性关于实际噪声强度的分布具有非平庸的规律性, 可用于揭示该系统中的群集相变, 并自动提取相变的临界噪声强度. 本文还与两种基于神经网络分类能力的常见方法进行直接对比, 讨论了它们的异同和各自特点. 结果表明, 本文发展的新方法不仅具有使用效率较高和所需预设的物理知识较少等实用优势, 而且更有在理论层面较为自然地与传统物理概念建立联系的可能性, 对于跨领域的不同物理系统都有良好的通用性和有效性.

关键词: 机器学习, 相变, 非平衡多体系统, 逆统计问题**PACS:** 07.05.Mh, 05.70.Fh, 05.70.Ln, 02.30.Zz**DOI:** 10.7498/aps.72.20230896

1 引言

近年来, 基于人工神经网络 (artificial neural network, ANN) 的机器学习技术已越来越多地为凝聚态和统计物理领域的研究提供帮助. 尤其是 2017 年 Melko 和 Carrasquilla^[1] 以及 van Nieuwenburg 等^[2] 分别报道了自动探索物质相的“留白法” (learning with blanking)^[1,2] 和“混淆法” (learning by confusion)^[2] 之后, 这两种利用 ANN 处理分类任务的强大能力的方法以及它们的一些衍生方法^[1-11], 已成功地为许多不同物质相的存在性提供了数据驱动的新证据, 并为对应相变点的参数临界值提供了数据驱动的新估计. 这样的成功案例遍及凝聚态和统计物理领域的各种物理系统, 也包括涉及非平

衡^[3,4]、拓扑缺陷^[5,6]、强关联费米子^[7,8] 等复杂要素的情况. 对于经典系统和量子系统, 这一类机器学习方法不仅能处理由数值模拟产生的原始数据, 还可以协助分析由实验观测得到的原始数据^[9-11]. 然而, 由于 ANN 的底层工作机制至今仍未得到足够清晰的解释, ANN 通过直接拟合原始数据而给出的分“类”结果与被研究的物理系统中的物质“相”的理论联系往往难以捉摸^[12-14].

面对这一困难, 值得注意的是 ANN 除了具有强大的处理分类任务的能力, 还同样具有强大的处理回归任务的能力, 而回归任务的结果通常具有明确的物理意义. 例如, 相应于研究一个物理系统时的正向思维“给定系统参数的取值, 求系统的可能状态”, 所谓的逆统计问题 (inverse statistical problem, ISP)^[15] 指的是“给定一个具体的系统状态,

* 国家自然科学基金 (批准号: 12275089, 12075090)、广东省自然科学基金 (批准号: 2023A1515012800, 2022A1515010449) 和科技部重点研发计划 (批准号: 2022YFA1405304) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: aibq@scau.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: liang.he@scau.edu.cn

求它可能对应的系统参数值”，这就是一种典型的回归任务. 如果用 ANN 处理 ISP 的回归, ANN 的输出值就不再是处理分类任务时难以捉摸的“类”，而是被重构的系统参数值本身. 事实上, ANN 处理回归任务的能力及其与传统物理概念的直接联系, 已经开始被物理学家关注. 尤其是 Tegmark 等^[16–19]探索了其自动构建物理理论的可能性, 发现 ANN 可以在一些相关的回归任务中提取出系统的运动方程^[16]、对称性^[17]、守恒律^[18]等等, 甚至还用 ANN 重建了《费曼物理学讲义》中涉及的 100 公式^[19]. 这些有趣的研究成果体现了 ANN 的回归结果比 ANN 的分类结果更具有联系物理的可能性.

由此, 基于 ANN 回归的自动探索物质相的机器学习方法也逐渐开始出现, 例如最近刚刚出现的利用 ISP 中的回归不确定性的方法 (learning from regression uncertainty, LFRU 方法)^[20]. 这一方法自动探索物质相的能力及其与传统物理概念的直接联系在 Ising 模型和 Clock 模型中已得到了初步验证^[20], 为机器学习在相变研究中的应用提供了新的视角. 然而, 该方法的通用性仍需要进一步检验, 尤其是面对非平衡、非晶格的系统中的一阶相变, LFRU 方法仍然有效吗? 我们知道, 与连续相变不同, 在一阶相变的临界点处, 系统的关联长度不发散, 这带来了更丰富的临界物理现象, 但也使得它们的跨尺度普适性质难以被重整化群^[21]等强大的物理学传统研究方法刻画. 另一方面, 与平衡系统不同, 非平衡多体系统中细致平衡的缺失, 同样带来了更丰富的临界物理现象, 例如湍流的无规律行为^[22], 但这也同样使得相关领域缺乏较为通用的研究方法^[23]. 考虑到 ANN 的数据处理和信息挖掘能力本身是足够普适的, 这类情景正是基于 ANN 的机器学习技术的用武之地. 如果基于 ANN 回归的 LFRU 方法 (以及基于 ANN 分类的“留白法”和“混淆法”) 能在不额外增加针对非平衡、非晶格的系统中的一阶相变的特殊设计的情况下, 有效处理这类复杂多体系统, 实现自动探索其中的物质相, 那么这将为非平衡多体系统中的相变研究提供一个具有较强通用性的工具箱, 有助于更好地揭示这类系统中的丰富的临界物理现象.

本文在一个由 Vicsek 模型描述的自驱动活性粒子系统^[24–27]中具体研究 LFRU 方法的通用性. 这是一个具有外部噪声的随机动力学模型, 最初用于模拟鸟类在较低能见度的恶劣天气下的集群飞

行, 也是统计物理领域关于自驱动活性粒子系统的基础模型之一, 具有丰富的集体动力学行为和自组织现象^[24–27]. 这种非平衡多体系统的噪声强度的改变会引发一个从低噪声的群集相 (flocking phase, 所有粒子的运动方向大致相同) 到高噪声的无序相 (disordered phase, 系统保有旋转对称性) 的一阶相变^[24–27](如图 1 所示). 研究发现, 即使这涉及非平衡、非晶格、一阶相变等复杂要素, ANN 仍可以通用地被直接训练用于处理该系统中的 ISP 回归任务, 成功重构出该系统中的噪声强度, 如图 2(b) 所示. 进一步考察 ANN 在这个任务中的回归不确定性, 发现它关于被重构的实际噪声强度的分布具有规律性, 其曲线呈现 M 字形, 如图 3(a) 所示. 最重要的是, 研究发现由 ANN 自主得到的 M 字形曲线, 可以用于自动探索物质相. M 字形曲线不仅揭示群集相变的存在, 而且其中间的极小值所在的位置, 正对应于该相变的临界噪声强度. 在先前研究^[20]的基础上, 上述新发现清晰展现了 LFRU 方法对于跨领域的不同物理系统具有良好的通用性. 我们也检验了“混淆法”和“留白法”这两种基于 ANN 分类的典型方法, 用于研究自驱动活性粒子的群集相变的效果, 在方法的使用效率、所需预设的物理知识、联系物理的可能性等方面, 对比讨论了 LFRU 方法与它们的异同和各自特点.

2 自驱动活性粒子的群集相变和逆统计问题

2.1 物理系统

本文研究的多体物理系统由 N 个在二维 $L \times L$ 空间中运动的自驱动粒子组成, 这些粒子的集体行为由一组随机动力学方程描述^[24–27]:

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = v_0 \vartheta \left(\eta \mathcal{N}_i \boldsymbol{\xi}_i + \sum_{j \in A_i} \mathbf{v}_j(t) \right), \quad (1)$$

其中, Δt 是离散的时间间隔, v_0 是粒子的速率 (设为常数), ϑ 是矢量的归一化算符, $\vartheta(\mathbf{w}) = \mathbf{w}/|\mathbf{w}|$, A_i 是以 i 粒子所在位置为圆心的半径为 r 的区域, \mathcal{N}_i 是位于 A_i 区域内的粒子数 (包括 i 粒子自身), $\boldsymbol{\xi}_i$ 是随机指向的单位矢量噪声, η 为表征环境扰动影响程度的噪声强度系数. 这是一个标准的由外部噪声影响的 Vicsek 模型. 在系统密度 $\rho = N/L^2$ 取定的情况下, 噪声强度的改变会引发一个从低噪

声的群集相到高噪声的无序相的一阶相变^[24–27]. 通过计算该系统的群速度 $\bar{v} = \left| \sum_{j=1}^N \mathbf{v}_j / (Nv_0) \right|$ 作为序参量, 可看到 \bar{v} 在相变点处发生突变. 为不失一般性, 以 $N = 2048$, $\rho = 2$, $L = 32$, $v_0 = 0.5$, $r = 1$ 的系统为例. 在该参数取值下, 如图 2(a) 所示, \bar{v} 的突变发生于 $\eta_c \approx 0.626$. 本文的具体目标是利用基于 ANN 的机器学习技术, 从图 1 所示的原始数据中自动提取出这一临界噪声强度 η_c .

2.2 机器学习

要利用基于 ANN 的机器学习技术研究该物理系统, 无论是让 ANN 处理分类任务还是回归任务, 都首先需要将数据整理为适合 ANN 进行分析的形式. 这当然有很多不同的做法. 我们选择类似于 ANN 在人脸识别等图像处理领域的用法, 将数

据整理为图像的形式 (如图 1 所示). 每个数据样本图像中的每个圆形标记表示二维空间中的一个自驱动粒子, 其空间分布表示自驱动粒子的瞬时空间分布, 其颜色分布表示自驱动粒子的运动方向的瞬时角度分布. 由于本文将直接使用一个工业界成熟的深度残差网络架构 (residual neural network, ResNet)^[28], 其默认的输入尺寸是 $3 \times 224 \times 224$, 其中的 3 对应于彩色图像的 RGB 三通道, 因而本文数据样本图像的尺寸也为 224×224 像素. 这些样本被分配为 3 组, 构成 3 个不同的数据集: 训练集、验证集、测试集.

所谓 ANN 的训练, 指的是若干次遍历训练集的样本, 每次遍历时, ANN 作为一个 $3 \times 224 \times 224 \rightarrow 1$ (用于 ISP 回归任务) 或 $3 \times 224 \times 224 \rightarrow 2$ (用于二元分类任务) 的映射, 对每个样本都给出

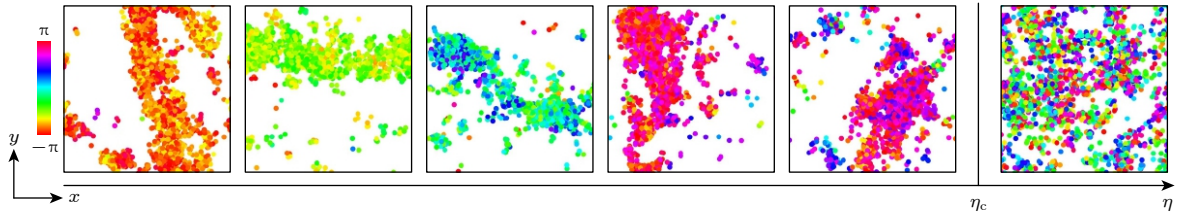


图 1 数值模拟生成的对应于不同噪声强度 η 的典型样本. 样本中的每个圆形标记表示二维空间中的一个自驱动粒子, 其空间分布表示自驱动粒子的瞬时空间分布, 其颜色分布表示自驱动粒子的运动方向的瞬时角度分布. 此处作为示例的样本中, 左边的 5 个样本处于群集相, 最右边的样本处于无序相

Fig. 1. Typical samples corresponding to different noise levels that are generated by numerical simulations. In every sample, each of the circular markers represents a single self-propelled particle in the two-dimensional space, with their spatial distribution representing the instantaneous spatial distribution of self-propelled particles, and their color distribution representing the instantaneous angular distribution of directions of motion of these self-propelled particles. Among the samples shown here for instance, the five samples in the left are in the flocking phase, and the rightmost one is in the disordered phase.

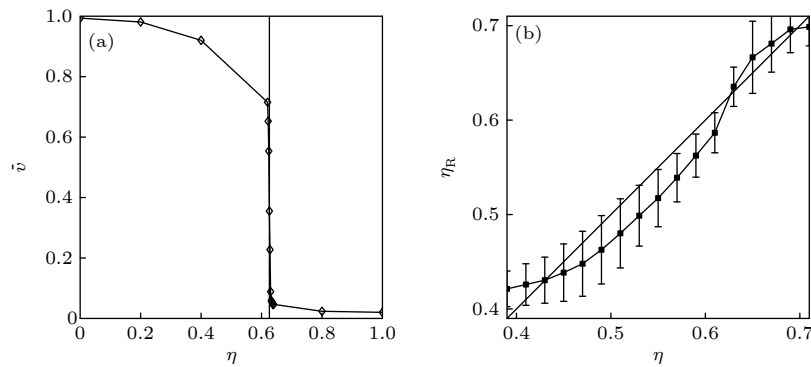


图 2 自驱动活性粒子系统中的 ISP (a) 系统的群速度 \bar{v} 关于噪声强度 η 的依赖关系, \bar{v} 在 $\eta_c = 0.626 \pm 0.006$ 的突变表明系统在该噪声强度处发生一阶相变; (b) 训练完成的 ANN 给出的重构噪声强度 η_R 关于实际噪声强度 η 的依赖关系, 误差棒表示回归不确定性 $U(\eta)$, 对角线表示理想的回归结果 $\eta_R = \eta$.

Fig. 2. Inverse statistical problem in a self-propelled active particle system: (a) Noise level dependence of the system's global group velocity, whose jump at $\eta_c = 0.626 \pm 0.006$ characterizes the first-order flocking phase transition; (b) noise level dependence of the reconstructed noise level predicted by the well-trained ANN. The error bars represent the regression uncertainty $U(\eta)$, and the diagonal line represent the ideal regression result $\eta_R = \eta$.

1 个 (ISP 回归) 或 2 个 (二元分类) 相应的值作为输出结果. 基于 ANN 的输出结果, 计算一个损失函数, 并按照反向传播规则, 以梯度下降等方式优化 ANN 中的大量可训练系数的取值, 从而最小化损失函数, 这就是 ANN 的训练. 对于 ISP 回归任务, 损失函数可以是输出结果与标签之间的均方误差, 其中标签指的是我们为每个样本标注的参考答案, 即实际的噪声强度值 η . 对于二元分类任务, 损失函数可以是输出结果与标签之间的交叉熵函数, 这里标签则是甲类或乙类 (关于二元分类, 详见 3.2 节和 3.3 节). 为了提高 ANN 的泛化能力, 训练后最终采用的可训练系数的取值并不是在训练集实现损失函数最小的那一组, 而是在验证集实现损失函数最小的那一组. 带着这组最终取定的可训练系数, 训练完成的 ANN 将被应用于测试集, 以评估其实际应用效果. 下文首先讨论基于 ANN 的 ISP 回归.

2.3 逆统计问题

LFRU 方法利用的是 ISP 中的回归不确定性. 要使用这一方法研究自驱动活性粒子的群集相变, 首先需要构建一个 ISP 回归任务让 ANN 尝试处理. 在上述的非平衡多体系统中, 相应于正向思维的给定噪声强度 η , 求处于稳态的可能的系统状态 (位置 x, y 分布与速度 v 分布, 如图 1 所示), 一个比较自然的 ISP 是: 给定一个具体的系统状态, 求它可能对应的噪声强度 η . 这是一个统计推断问题, 推断得到的重构噪声强度记为 η_R . 由于原始数据是由随机动力学方程演化得到的, 不可避免在不同的噪声强度下出现极其类似的样本. 这意味着对于在同一噪声强度 η 下生成的不同样本, ANN (或其他方法) 给出的重构噪声强度值 η_R 不会完全一样. 这就带来了回归不确定性 $U(\eta)$. 我们可以用 ANN 回归结果的标准差来刻画这一不确定性, 即

$$U(\eta) = \sqrt{\langle (\eta_R - \langle \eta_R \rangle)^2 \rangle}, \quad (2)$$

其中, $\langle \cdot \rangle$ 表示对测试集所有属于同一噪声强度 η 的样本取平均. 对于 ISP 本身, 回归任务的核心目标之一是尽量减少这个不确定性, 但其存在是系统性的, 因而不可能被真正减少到零. 再考虑到这是一个涉及非平衡、非晶格、一阶相变等复杂要素的情况, 如何有效地实现 Vicsek 模型的 ISP, 本身就

是一个非平庸的问题. 传统方法研究 ISP 主要集中于 Ising 模型等简单情况^[15], 还通常要使用平均场^[29]或最大似然估计^[30]等稍具针对性的方法. 这里直接使用 ANN 进行 ISP 回归.

3 群集相变临界噪声强度的自动提取

3.1 LFRU 方法: 回归不确定性中的相变信号

本文使用的数据集涉及 $\eta \in [0.39, 0.71]$ 范围内以 $\Delta\eta = 0.02$ 为间隔的 17 个不同的噪声强度值, 对于每个噪声强度值, 有 2000 个样本用于训练, 500 个样本用于验证, 2500 个样本用于测试. 17 个 η 的总共 34000 个训练集样本, 在训练过程中被遍历 20 次, 并作相应的验证, 最终得到一个训练完成的 ANN, 在测试集评估其回归结果. 如图 2(b) 所示的回归结果取自 20 个独立训练、独立验证的 ResNet 的平均测试结果. 可以看到, ANN 给出的重构噪声强度 η_R 虽然不能完美贴合于实际噪声强度 η , 但也差得不远. 由于 ISP 仅仅是利用其中的回归不确定性自动探索物质相的一个中间过程, 目标不在于 ISP 本身, 因此这里不讨论图 2(b) 所示的回归结果与传统方法得到的回归结果的对比, 也不评判各种研究 ISP 的方法的优劣. 我们关注的是: 对于这样的具有一阶相变的复杂系统, ANN 可以克服诸如亚稳态等等的对于 ISP 回归的潜在干扰, “学会了”该系统中的噪声强度 η 这一参数. 这意味着其输出值确实可以视为与噪声强度 η 具有直接的物理联系, 使得进一步得到的自动探索物质相的结果也有了联系物理的可能性.

确认了 ANN 可以实现 ISP 回归之后, 考察 ANN 在这个任务中的回归不确定性 $U(\eta)$, 也就是图 2(b) 的误差棒. 这在图 2(b) 中并不明显, 图 3(a) 所示为 $U(\eta)$ 关于噪声强度 η 的依赖关系, 可以清晰地看到 $U(\eta)$ 的分布具有规律性, 其曲线呈现 M 字形, 并且中间的极小值所在的位置 $\tilde{\eta}_c = 0.63 \pm 0.01$, 并不是位于整个参数区域 $\eta \in [0.39, 0.71]$ 的正中间附近, 而是恰好对应于系统的临界噪声强度 $\eta_c \approx 0.626$ (图 3 中的竖线表示由 \bar{v} 的突变位置给出的临界噪声强度 η_c , 即传统方法得到的相变点). 这说明 LFRU 方法能够成功地从如图 1 所示的原始数据中自动提取出自驱动活性粒子的群集相变临界噪声强度 η_c .

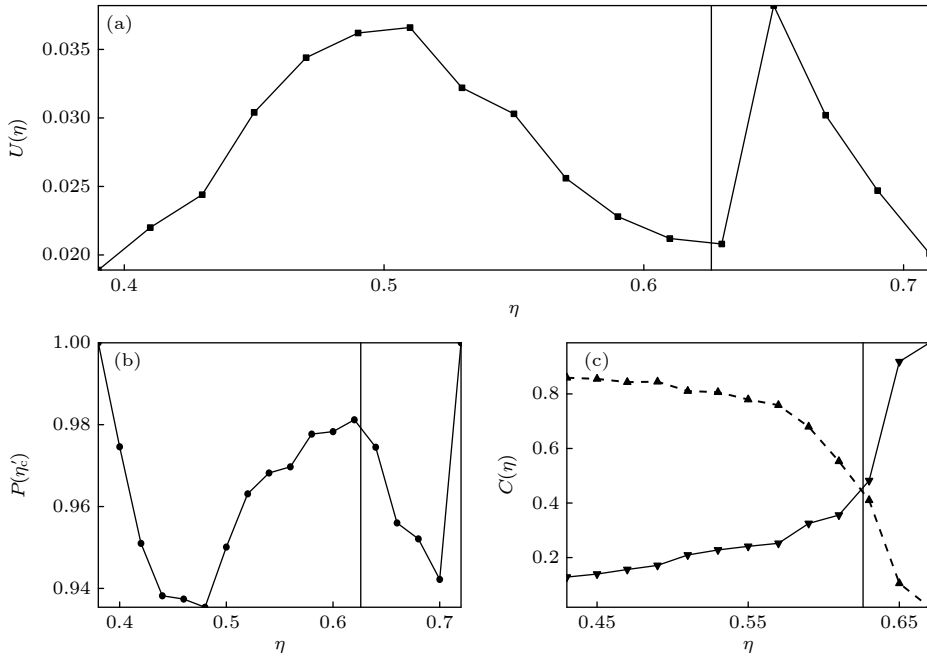


图 3 三种机器学习方法揭示自驱动活性粒子的群集相变 (a) 基于回归不确定性的 LFRU 方法; (b) “混淆法”; (c) “留白法”
 Fig. 3. Revealing the flocking phase transition of self-propelled active particles via applying three different machine learning approaches: (a) The LFRU approach; (b) the “learning by confusion” approach; (c) the “learning with blanking” approach.

这与我们关于 LFRU 方法的研究^[20]中在 Ising 模型和 Clock 模型中发现的情况类似, 说明这一方法对于跨领域的不同物理系统具有良好的通用性. 利用 ANN 处理回归任务的强大能力及其与传统物理概念的直接联系, 研究者只需提供每个样本的实际参数值, 训练 ANN 处理 ISP 回归任务, 训练完成后的回归不确定性就可以用于自动探索物理相. 若 ISP 的参数区间内只有一个相, 回归不确定性的曲线只会呈现一个平庸的单峰^[20]. 当曲线呈现 M 字形, 这就揭示了该参数区间存在相变, 相变临界点可以直接从中间的极小值处提取.

3.2 “混淆法”

作为直接的对比, 使用两个典型的利用了 ANN 处理分类任务的强大能力的机器学习方法, 研究同样的非平衡多体系统中的群集相变. 要将 ANN 训练用于分类任务 (具体来说, 是二元分类任务), 需要将损失函数改换为交叉熵函数, 并且此时 ANN 对每个样本的输出应有 2 个值 (C_1, C_2), 它们具有概率的性质. 甲类和乙类对应的样本标签分别为 (1, 0) 和 (0, 1), 因而这 2 个输出值可以分别理解为 ANN 将一个样本识别为甲类或乙类的信心. 例如, 输出 (0.6, 0.4) 意味着 ANN 有六成的把握认为该样本属于甲类, 有四成的把握认为该样本属于

乙类. 很自然, 当 $C_1 > C_2$, ANN 对于该样本的分类结果即为甲类, $C_1 < C_2$ 则为乙类.

首先检验所谓的“混淆法”^[2]. 这个构思巧妙的方法, 利用的是 ANN 在面对不同程度上背离物理事实的混淆标签时的不同表现. 首先需要假定一个任意的噪声强度值 η'_c , 人为规定满足 $\eta < \eta'_c$ 的样本为甲类, 满足 $\eta > \eta'_c$ 的样本为乙类. 由于 η'_c 是任意假定的, 其对应的二元分类任务 (区分甲、乙两类的样本) 与这个系统中实际的物理相 (群集相、无序相) 不具有明确的理论联系. 训练完成后, 在测试集评估 ANN 针对这一任意假定的二元分类任务的表现. 在测试集的全部 m 个生成于不同噪声强度 η 的样本中, 若 ANN 成功识别了 m' 个, 计算出对应于 η'_c 的识别成功率 $P(\eta'_c) = m'/m$. 然后, 假定一系列不同的 η'_c , 分别重复上述的过程, 就可以得到 $P(\eta'_c)$ 关于 η'_c 取值的依赖关系.

如图 3(b) 所示, $P(\eta'_c)$ 的曲线呈现 W 字形. 考虑到对于任意 η'_c , 只要 η'_c 不符合物理上实际的临界噪声强度 η_c , 总会存在一些令 ANN 感到“混淆”的标签. 以 $\eta'_c > \eta_c$ 的情况为例 ($\eta'_c < \eta_c$ 的情况也类似), 那些满足 $\eta_c < \eta < \eta'_c$ 的样本与满足 $\eta > \eta'_c$ 的样本同处于无序相, 却在这一任意假定的二元分类任务中被贴上了不同标签. ANN 要如何理解二者之间纯属虚构的“不同”呢? 与此同时, 它们与

$\eta < \eta_c$ 的处于有序相的样本在物理上有显著的区别, 却被贴上了相同标签. ANN 又要如何理解二者的“相同”呢? 这些背离物理事实的标签限制了 ANN 的分类表现, 使得 $P(\eta'_c)$ 不会很高. 而对于同样的数据集, 当任意假定的 η'_c 越接近实际的临界噪声强度 η_c , 混淆标签就会越少, $P(\eta'_c)$ 也就越有机会取得更高的值. 这意味着当 $\eta'_c = \eta_c$ 时, $P(\eta'_c)$ 应具有非平庸的极大值. 因此, “混淆法”将 $P(\eta'_c)$ 的 W 形曲线的峰值对应的 η'_c 视为 ANN 给出的临界噪声强度预测值 $\tilde{\eta}_c$. 在图 3(b) 的计算中, 20 个独立训练、独立验证的 ResNet 的平均测试结果给出的预测值为 $\tilde{\eta}_c = 0.62 \pm 0.01$, 与 $\eta_c \approx 0.626$ 基本一致. 即, 该方法也能够成功地从图 1 所示的原始数据中, 自动提取出自驱动活性粒子的群集相变临界噪声强度 η_c .

3.3 “留白法”

现在我们检验所谓的“留白法”^[1,2]. 该方法直接利用 ANN 识别不同物质相的能力. 当所有样本都被贴上符合物理事实的标签 (也就是 3.2 节中提到的 $\eta'_c = \eta_c$ 的情况), 即使仅将极低和极高噪声的样本用于训练, 而将中间噪声“留白”^[1,2], ANN 仍然可以轻松完成相应的二元分类任务. 这里仅将 $\eta = 0.39, 0.41$ (甲类) 和 $\eta = 0.69, 0.71$ (乙类) 的样本用于训练、验证. 训练完成后, 在 $\eta \in [0.43, 0.67]$ 的测试集评估 ANN 识别甲、乙两类的样本的信心.

图 3(c) 的结果取自 20 个独立训练、独立验证的 ResNet 的平均测试结果, 其中虚线、实线分别表示 ANN 将样本识别为甲类、乙类的平均信心 $C(\eta)$ (同一 η 的所有测试样本的平均) 关于样本对应 η 的依赖关系. 两条线在 $\tilde{\eta}_c \approx 0.625$ 交叉. 由于在相变点处, 一个系统的瞬时状态既可能看起来像是处于群集相, 也可能看起来像是处于无序相, 因而“留白法”将 ANN 的平均分类信心取得 $C_1(\eta) = C_2(\eta)$ 的交叉点对应的 η 视为 ANN 给出的临界噪声强度预测值 $\tilde{\eta}_c$. 这个预测值也与传统方法得到的相变点 $\eta_c \approx 0.626$ 基本一致, 说明该方法同样能够从图 1 所示的原始数据中提取 η_c .

4 三种方法对比讨论

图 3 展示了在不额外增加针对非平衡、非晶格的系统中的一阶相变的特殊设计的情况下, 基于 ANN

回归的 LFRU 方法和基于 ANN 分类的“混淆法”“留白法”都能很方便地直接应用于这类复杂多体系统, 提取其中的相变临界值, 这为相关研究提供了一种具有较强通用性的工具箱. 现在进一步讨论三种方法各自的特点.

4.1 使用效率

效率是任何一个实用方法的基本要求. 用于回归和分类任务的 ANN, 其在网络架构上的区别仅在于输出值的个数略有不同 (ISP 回归为 1 个, 二元分类为 2 个), 这导致它们将同样的数据集遍历一次的计算复杂度是几乎相等的. 其训练过程用到的损失函数的计算复杂度也差不多, 且二者的收敛速度接近^[20]. 因此在应用 LFRU 方法和“混淆法”的过程中, 训练每个 ANN 的用时基本相同. 然而“混淆法”训练一个 ANN 只能得到对应于一个 η'_c 取值的识别成功率 $P(\eta'_c)$, LFRU 方法训练一个 ANN 却可以直接得到完整的回归不确定性 $U(\eta)$ 曲线, 这使得前者自动探索物质相的总体用时多于 LFRU 方法. 而“留白法”用于训练、验证的数据集可以远小于另外两种方法, 因此其总体用时是三者中最短的. 但这当然是有代价的, 它需要一些预设的物理知识, 并不能真正实现自动探索物质相.

4.2 预设的物理知识

要想自动探索物质相, 本文机器学习方法不应需要关于物质相和相变的预设的物理知识. 这涉及机器学习的“监督”概念. 在机器学习术语中, “监督学习算法”指的是涉及作为参考答案的标签的机器学习算法. 在这个意义下, 三者作为机器学习算法而言都是有监督的. 然而, 在 2.3 节和 3.1 节可看到, 在将 LFRU 方法应用于揭示自驱动活性粒子的群集相变时, 标签是噪声强度值, 而 LFRU 方法的真正目标是提取临界噪声强度 η_c . 这些标签仅提供关于 ISP 的预设的物理知识, 却完全不涉及物质相和相变. 因此, 对于机器学习在相变研究中的应用而言, LFRU 方法可以被视为一种无监督的方法. 在同样的意义下, 应用“混淆法”时的标签也不是关于临界噪声强度 η_c 的参考答案, 因此该方法通常也被视为一种无监督的方法^[2]. 但值得注意的是, 其二元分类暗含了“系统中最多可能存在两个相”的预先判断, 这使得它需要经过一定的改造之后才可以用于处理具有明显中间相的复杂多体系统^[6].

而“留白法”则将两条线的交叉点视为相变点,这预设了“系统中有且仅有一个相变”,使其在不经改造的情况下,不仅难以处理具有中间相的系统,甚至也无法排除相共存 (phase coexistence) 或平缓过渡 (crossover) 情况的干扰. 无论是相变、相共存、平缓过渡,都会让 ANN 的二元分类信心的曲线相交^[1]. 总之,三种方法之中,“留白法”需要预设的物理知识最多,“混淆法”次之, LFRU 方法则最少.

4.3 联系物理的可能性

自动探索物质相的另一个对机器学习方法的要求是具有可解释性. 由于 ANN 的底层工作机制至今仍未得到足够清晰的解释^[12-14], 这里不考虑机器学习技术本身的可解释性, 三种方法都把 ANN 视为一个黑箱映射. 但在这种情况下, 我们仍希望这些机器学习方法给出的结果能与传统物理概念建立联系. 基于 ANN 分类的“混淆法”在一定程度上就缺乏这样的联系. 该方法提取临界噪声强度 η_c 的最后一步是由研究者而非由 ANN 完成的, 即把甲类与乙类的分界点直接视为群集相与无序相的相变临界点. 这相当于研究者事后向 ANN 补充注入关于该群集相变的物理知识, 事实上削弱了该方法的无监督性. 对于真正待研究系统中的未知相变, 这样的做法缺乏足够的理由. 与之不同的是, 由于 ANN 能够“学会”该系统中的噪声强度 η , 基于 ANN 回归的 LFRU 方法可以较为自然地与传统物理概念建立联系. ANN 处理 ISP 回归时的输出值就是这个被重构的系统参数值 η 本身, 而这些输出值的统计性质 (例如回归不确定性) 则是系统本身的统计性质的体现. 当 ANN 的输出值的统计性质出现特殊的行为, 例如当回归不确定性 $U(\eta)$ 在某个 $\eta = \tilde{\eta}_c$ 处出现非平庸的极小值, 有理由相信系统的统计性质在此处也具有特殊的行为, 这就带来了将该极小值对应的噪声强度 $\tilde{\eta}_c$ 视为群集相变临界噪声强度 η_c 的合理性. 此外, 在关于 LFRU 方法的研究^[20] 中发现 Ising 模型和 Clock 模型的回归不确定性与系统的响应性质具有理论上的联系, 预期在 Vicsek 模型中也存在类似的理论联系. 这种在数值上和理论上联系物理的可能性, 是基于 ANN 分类的方法不容易提供的.

5 结论

在训练 ANN 处理由 Vicsek 模型描述的自驱

动活性粒子系统中的 ISP 回归任务之后, 发现 ANN 的回归不确定性其实隐藏着关于这个非平衡多体系统的群集相变的物理信息. 回归不确定性的 M 字形曲线印证了该一阶相变的存在, 并给出了临界噪声强度值的数据驱动的新估计 $\tilde{\eta}_c = 0.63 \pm 0.01$, 与传统方法得到的相变点 $\eta_c \approx 0.626$ 相符. 这展现了本文发展的利用 ISP 中的回归不确定性的 LFRU 方法用于自动探索物质相的有效性、高效性、对于跨领域的不同物理系统的良好通用性. 该方法与“混淆法”和“留白法”可以相辅相成, 共同构成一个具有较强通用性的工具箱. 对于那些给传统研究方法带来较大挑战的复杂系统, 特别是涉及非平衡、非晶格、一阶相变等复杂要素的情况, 本文讨论的机器学习方法提供了数据驱动实现自动探索物质相的新的视角. ANN 处理 ISP 回归任务的强大能力及其与传统物理概念的直接联系, 这使得我们有机会在接下来的系统性研究中构建回归不确定性与自驱动活性粒子系统的统计性质特别是响应性质的理论联系, 以期在更复杂的相变研究中进一步发挥 LFRU 方法在物理可解释性方面的潜在优势.

参考文献

- [1] Melko R G, Carrasquilla J 2017 *Nat. Phys.* **13** 431
- [2] van Nieuwenburg E P L, Liu Y H, Huber S D 2017 *Nat. Phys.* **13** 435
- [3] Guo W C, Ai B Q, He L 2021 *EPL* **136** 48002
- [4] Venderley J, Khemani V, Kim E A 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 257204
- [5] Beach M J S, Golubeva A, Melko R G 2018 *Phys. Rev. B* **97** 045207
- [6] Lee S S, Kim B J 2019 *Phys. Rev. E* **99** 043308
- [7] Ch'ng K, Carrasquilla J, Melko R G, Khatami E 2017 *Phys. Rev. X* **7** 031038
- [8] Broecker P, Carrasquilla J, Melko R G, Trebst S 2017 *Sci. Rep.* **7** 1
- [9] Carrasquilla J, 2020 *Adv. Phys. X* **5** 1797528
- [10] Yu L W, Zhang S Y, Shen P X, Deng D L 2023 *Fundamental Research* (In Press)
- [11] Rem B S, Käming N, Tarnowski M, Asteria L, Fläschner N, Becker C, Sengstock K, Weitenberg C 2019 *Nat. Phys.* **15** 917
- [12] Gökmen D E, Ringel Z, Huber S D, Koch-Janusz M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 240603
- [13] Gökmen D E, Ringel Z, Huber S D, Koch-Janusz M 2021 *Phys. Rev. E* **104** 064106
- [14] Miles C, Bohrdt A, Wu R, Chiu C, Xu M, Ji G, Greiner M, Weinberger K Q, Demler E, Kim E A 2021 *Nat. Commun.* **12** 3905
- [15] Nguyen H C, Zecchina R, Berg J 2017 *Adv. Phys.* **66** 197
- [16] Udrescu S M, Tegmark M 2021 *Phys. Rev. E* **103** 043307
- [17] Liu Z, Tegmark M 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 180201
- [18] Liu Z, Tegmark M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 180604

- [19] Udrescu S M, Tegmark M 2020 *Sci. Adv.* **6** eaay2631
 [20] Guo W C, He L 2023 *New J. Phys.* **25** 083037
 [21] Binder K 1987 *Rep. Prog. Phys.* **50** 783
 [22] Falkovich G, Gawędzki K, Vergassola M 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 913
 [23] Jarzynski C 2015 *Nat. Phys.* **11** 105
 [24] Vicsek T, Czirók A, Ben-Jacob E, Cohen I, Shochet O 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1226
 [25] Toner J, Tu Y, Ramaswamy S 2005 *Ann. Phys.* **318** 170
 [26] Grégoire G, Chaté H 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 025702
 [27] Chaté H, Ginelli F, Grégoire G, Raynaud F 2008 *Phys. Rev. E* **77** 046113
 [28] He K, Zhang X, Ren S, Sun J 2016 *Proceedings of 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)* Las Vegas, USA, June 27–30, 2016 p770
 [29] Nguyen H C, Berg J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 050602
 [30] Jo J, Hoang D T, Perival V 2020 *Phys. Rev. E* **101** 032107

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Reveal flocking phase transition of self-propelled active particles by machine learning regression uncertainty*

Guo Wei-Chen Ai Bao-Quan[†] He Liang[‡]

(*Institute of Theory Physics, School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 30 May 2023; revised manuscript received 16 July 2023)

Abstract

We develop the neural network based “learning from regression uncertainty” approach for the automatic detection of phases of matter in nonequilibrium active systems. Taking the flocking phase transition of self-propelled active particles described by the Vicsek model for example, we find that after training a neural network for solving the inverse statistical problem, i.e. for performing the regression task of reconstructing the noise level from given samples of such a nonequilibrium many-body complex system’s steady state configurations, the uncertainty of regression results obtained by the well-trained network can actually be utilized to reveal possible phase transitions in the system under study. The noise level dependence of regression uncertainty is assumed to be in a non-trivial M-shape, and its valley appears at the critical point of the flocking phase transition. By directly comparing this regression-based approach with the widely-used classification-based “learning by confusion” and “learning with blanking” approaches, we show that our approach has practical effectiveness, efficiency, good generality for various physical systems across interdisciplinary fields, and a greater possibility of being interpretable via conventional notions of physics. These approaches can complement each other to serve as a promising generic toolbox for investigating rich critical phenomena and providing data-driven evidence on the existence of various phase transitions, especially for those complex scenarios associated with first-order phase transitions or nonequilibrium active systems where traditional research methods in physics could face difficulties.

Keywords: machine learning, phase transition, nonequilibrium many-body system, inverse statistical problem

PACS: 07.05.Mh, 05.70.Fh, 05.70.Ln, 02.30.Zz

DOI: [10.7498/aps.72.20230896](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230896)

* Project supported by the National Science Foundation of China (Grant Nos. 12275089, 12075090), the Basic and Applied Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2023A1515012800, 2022A1515010449), and the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2022YFA1405304).

[†] Corresponding author. E-mail: aibq@sncu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: liang.he@sncu.edu.cn

机器学习回归不确定性揭示自驱动活性粒子的群集相变

郭唯琛 艾保全 贺亮

Reveal flocking phase transition of self-propelled active particles by machine learning regression uncertainty

Guo Wei-Chen Ai Bao-Quan He Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200701 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230896

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230896>

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

基于机器学习 J_1 - J_2 反铁磁海森伯自旋链相变点的识别方法

Identifying phase transition point of J_1 - J_2 antiferromagnetic Heisenberg spin chain by machine learning

物理学报. 2021, 70(23): 230701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210711>

基于波动与扩散物理系统的机器学习

Machine learning based on wave and diffusion physical systems

物理学报. 2021, 70(14): 144204 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210879>

通过机器学习实现基于摩擦纳米发电机的自驱动智能传感及其应用

Self-powered sensing based on triboelectric nanogenerator through machine learning and its application

物理学报. 2022, 71(7): 078702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211632>

铅基钙钛矿铁电晶体高临界转变温度的机器学习研究

High critical transition temperature of lead-based perovskite ferroelectric crystals: A machine learning study

物理学报. 2019, 68(21): 210502 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190942>

机器学习辅助绝热量子算法设计

Machine learning assisted quantum adiabatic algorithm design

物理学报. 2021, 70(14): 140306 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210831>

基于机器学习的非线性局部Lyapunov向量集合预报订正

Machine learning based method of correcting nonlinear local Lyapunov vectors ensemble forecasting

物理学报. 2022, 71(8): 080503 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212260>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

可形变自驱动粒子在不对称周期管中的定向输运*

郭瑞雪 艾保全†

(华南师范大学物理学院, 广州 510006)

(2023 年 5 月 23 日收到; 2023 年 8 月 9 日收到修改稿)

粒子的随机运动被整流为定向运动是非平衡统计物理的重要研究内容. 尽管如此, 在活性粒子整流的研究中, 粒子通常被视为刚性的. 然而, 在软物质中, 粒子通常具有可变形的性质. 本文重点探讨了可形变自驱动粒子在非对称周期通道中的定向运输行为. 由于这些粒子具有可变形的特性, 它们可以通过比自身小的通道. 本文通过数值计算发现, 可形变自驱动粒子能够打破热力学平衡, 在空间不对称的条件下产生定向运动. 粒子的集体运动方向完全由通道的不对称性决定. 本文还发现, 增加自驱动速度和粒子软化都能促进粒子的整流, 而增大密度和旋转扩散则会阻碍粒子的定向运动. 本文的研究成果有助于理解可形变粒子在受限结构中的定向运动行为, 并为相关软物质马达的实验研究提供理论支持.

关键词: 布朗马达, 可形变自驱动粒子, 不对称周期管

PACS: 05.40.-a, 02.50.-r, 05.60.-k

DOI: 10.7498/aps.72.20230825

1 引言

作为生物学和物理学的前沿课题之一, 分子马达的定向运动一直备受关注. 这些微小的分子马达在生物体内能够将 ATP 水解能转化为机械能, 从而产生定向运动^[1-3]. 它们在细胞内的物质定向运输方面发挥着关键作用, 并几乎参与了生物体所有的生命活动, 包括肌肉收缩、细胞运动和基因复制^[4,5]. 因此, 深入研究分子马达的运动特性具有重要意义. 为了更深入地了解分子马达的运动特性, 国内外学者从理论和实验两个方面进行了全面的研究. 其中, 布朗马达作为重要的理论模型为进一步探究分子马达的运动特性提供了理论支持^[6-8].

布朗马达是一种利用时间或空间的不对称性将随机运动转化为定向运输的非平衡系统. 该运输机制在物理学、生物学、纳米技术等领域引起了广泛关注 and 深入研究^[9-13]. 根据非平衡驱动的差异, 布朗马达模型可分为摇摆棘轮^[14-17]、闪烁棘轮^[18-21]

和关联棘轮^[22-24] 3 种主要类型. 摇摆棘轮中无偏向的外力引起系统的瞬态时间不对称, 进而在周期不对称势中发生定向运动. 闪烁棘轮模型中粒子在空间不对称的势场随机在两态或多态间跃迁或者采取势的时间调制来形成定向运动. 关联棘轮模型主要考虑色噪声对整流的影响. 其他类型的布朗马达模型则可视作上述 3 种类型的扩展或组合, 比如驱动蛋白的头部弹性连接, 而势在两态之间闪烁的模型可归为闪烁的棘轮模型^[25]. 研究各类布朗棘轮模型有助于深入理解定向输运行为, 并为优化定向输运提供可能性^[26].

在布朗马达系统中, 以往对于不对称通道中的整流运动的研究已经覆盖了多种类型的粒子, 包括活性粒子^[27-29]、极性粒子^[30] 和手性粒子^[31] 等. 这些研究中粒子都被看作是刚性的. 然而, 在细胞单层、发育中的组织、压缩泡沫和乳剂等软物质系统中, 粒子往往是可形变的. 而且, 软/可形变粒子的形变特性会强烈影响系统的动力学行为^[32-36]. 例如, 可形变粒子可以通过明显小于粒子尺寸的通

* 国家自然科学基金 (批准号: 12075090) 和广东省自然科学基金 (批准号: 2022A1515010449) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: aibq@scnu.edu.cn

道并进行定向输运^[37]. 因此, 在受限结构中可形变粒子如何影响定向运动是一个有趣但尚未解决的问题.

为了解决这一问题, 本文研究了在二维不对称周期管中可形变的自驱动粒子, 并重点考虑了可形变特性对粒子的定向输运的影响. 对于可形变自驱动粒子, 自驱动会破坏热力学平衡, 在空间不对称条件下产生定向输运. 粒子的集体运动方向完全由周期管的不对称性决定. 增大粒子的自驱动速度和粒子软化都会促进粒子的整流, 而增大密度和旋转扩散则会阻碍粒子的整流. 此外, 在大的自驱动速度下, 粒子的可形变特性对定向输运的影响更加显著.

2 模型和方法

考虑 N 个可形变自驱动粒子在二维周期不对称管中的运动. 二维不对称周期通道的形状可以用其半宽度来描述 (如图 1(a) 所示):

$$h(x) = \begin{cases} \frac{H}{L_1}x + \frac{W}{2}, & 0 \leq x < L_1, \\ \frac{H}{L_2}(L-x) + \frac{W}{2}, & L_1 \leq x < L, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $L = L_1 + L_2$ 为通道的周期. 通道的最小宽度和最大宽度分别为 W 和 $2H + W$. 定义一个不对称参数 $\Delta = (L_1 - L_2)/L$ 来描述通道的不对称性, 当 $\Delta = 0$ 时通道是完全对称的. 在通道的 x 方向施

加周期性边界条件, 在 y 方向则施加反射边界条件. 类似的几何结构被广泛地应用于非平衡定向输运的研究中^[38,39].

可形变粒子模型由 N 个具有 N_v 个顶点的多边形组成, 每个多边形具有 $N_v - 1$ 个形状自由度. $\mathbf{l}_{m,i} = \mathbf{r}_{m,i+1} - \mathbf{r}_{m,i} = l_{m,i} \hat{l}_{m,i}$ 表示连接顶点 $i+1$ 和 i 的键矢量. a_m 和 $p_m = \sum_{i=1}^{N_v} l_{m,i}$ 分别表示多边形的面积和周长, 如图 1(b) 所示. 可形变粒子系统的形状-能量函数可以被描述为^[34]

$$E = \frac{k_1 N_v}{2} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^{N_v} (l_{m,i} - l_0)^2 + \frac{k_a}{2} (a_m - a_0)^2 + \frac{k_b}{2N_v} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^{N_v} \left(\frac{2(\hat{l}_{m,i} - \hat{l}_{m,i+1})}{l_{m,i} + l_{m,i+1}} \right)^2, \quad (2)$$

其中, 第 1 项是收缩项, 它将顶点之间的连接视为弹簧常数为 k_1 、平衡长度为 l_0 的弹簧. 第 2 项是粒子面积 a_m 的二次项, 描述其不可压缩性, 其中 k_a 和 a_0 分别表示面积刚度模量和目标面积. 第 3 项是弯曲项, 其中 k_b 表示弯曲刚度. 无量纲的形状参数 $A = (N_v l_0)^2 / (4\pi a_0)$ 控制粒子的形变能力, A 越大则表示粒子越软. 对于具有 N_v 个顶点的规则多边形有 $A_v = N_v \tan(\pi/N_v) / \pi$, 且当 $N_v \rightarrow \infty$ 时, $A_v = 1$, 这意味着顶点可以形成平滑的几何图形. 在几何学中, 标准圆对应于 $A/A_v = 1$, 正五边形对应于 $A/A_v = 1.16$, 正六边形对应于 $A/A_v = 1.1$.

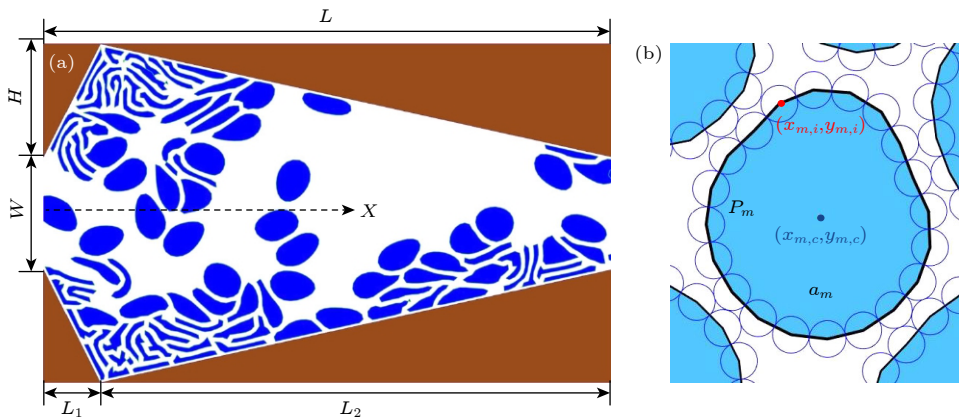


图 1 (a) 可形变粒子在二维不对称周期通道中运动的示意图, 通道的形状利用其半宽度来描述 ((1) 式), x 方向施加周期边界条件, y 方向施加反射边界条件; (b) 由 20 个顶点构成的多边形粒子, $\{x_{m,i}, y_{m,i}\}$ 表示多边形 m 的第 i 顶点的位置

Fig. 1. (a) Scheme of deformable particles moving in a two-dimensional asymmetric periodic channel, the shape of the channel is described by the half width of the channel (Eq. (1)), periodic boundary condition is imposed in the x -direction and reflection boundary condition in the y -direction; (b) the deformable polygonal particles with 20 vertices, $\{x_{m,i}, y_{m,i}\}$ is the position of vertex i in the polygon m and $\{x_{m,c}, y_{m,c}\}$ is the center of mass of the polygon m .

可形变粒子的质心的自驱动速度大小为 v_0 , 方向为 $\mathbf{n}_m = (\cos\theta_m, \sin\theta_m)$, 其中 θ_m 满足如下方程:

$$\frac{d\theta_m}{dt} = \sqrt{2D_\theta}\xi_m(t), \quad (3)$$

其中, D_θ 为旋转扩散系数. 通常情况下, 热扩散可以用高斯白噪声来描述, 因此, 这里的 $\xi_m(t)$ 表示具有单位方差和零均值的高斯白噪声, 满足统计关系: $\langle \xi_m(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_m(t)\xi_m(t') \rangle = \delta(t-t')$.

构成多边形的顶点 i 的运动可以用过阻尼朗之万方程描述:

$$\frac{d\mathbf{r}_{m,i}}{dt} = v_{m,i}\mathbf{n}_i + \mu(\mathbf{F}_i + \mathbf{G}_i), \quad (4)$$

其中

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i E, \quad \mathbf{G}_i = -\nabla_i U,$$

$$\mathbf{n}_i = \left(\frac{dx_{m,i}}{\sqrt{dx_{m,i}^2 + dy_{m,i}^2}}, \frac{dy_{m,i}}{\sqrt{dx_{m,i}^2 + dy_{m,i}^2}} \right),$$

$$dx_{m,i} = x_{m,i} - x_{m,c}, \quad dy_{m,i} = y_{m,i} - y_{m,c},$$

μ 是迁移率, $v_{m,i}$ 表示粒子 m 中第 i 个顶点的自驱动速度. 由于自驱动力作用于粒子的质心, 可以通过下面的步骤将自驱动的速度扩散到每个顶点, 从而得到 $v_{m,i}$: 1) 计算粒子 m 质心和其顶点 i 之间的夹角 $\phi_{m,i} = \arctan\left(\frac{dy_{m,i}}{dx_{m,i}}\right)$; 2) 计算差值 $\Delta\phi_{m,i} = \phi_{m,i} - \theta_m$, 得到 $\Delta\phi_{m,i} = \text{mod}(\Delta\phi_{m,i}, 2\pi)$, 其中 $\text{mod}()$ 是一个取模运算; 3) 计算粒子 m 中第 i 个顶点上的自驱动速度分量为 $v_{m,i} = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta\phi_{m,i}^2}{2D_s^2}\right) + v_{\min}$, 其中 D_s 是速度分布到附近顶点的扩散系数, $v_{\min} = 0.01v_0$ 确保了顶点是活性的.

为了计算粒子之间的排斥相互作用, 将每个顶点都视为直径 $\delta = l_0$ 的圆盘 (如图 1(b) 所示). 通过将接触的多边形上的重叠粒子间的排斥相互作用相加, 从而得到了总的排斥相互作用能为 [34]

$$U = \sum_{m=1}^N \sum_{n>m}^N \sum_{i=1}^{N_v} \sum_{j=1}^{N_v} \frac{k_r}{2} (\delta - |\mathbf{r}_{m,i} - \mathbf{r}_{n,j}|)^2 \times \Theta(\delta - |\mathbf{r}_{m,i} - \mathbf{r}_{n,j}|), \quad (5)$$

式中, k_r 是排斥相互作用的强度, Θ 是 Heaviside 阶跃函数.

由于可形变粒子沿 y 方向的运动受到通道边界的限制, 因此只关注沿 x 方向的集体运动. 在足

够长的时间下, 粒子沿 x 方向的平均速度可以表示为

$$\langle V_x \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} [\Delta X(t)/t], \quad (6)$$

其中 $\Delta X(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_{m,c}(t) - x_{m,c}(0) \rangle$ 是在时刻 t 沿 x 方向的粒子的平均位移, $\langle \dots \rangle$ 表示在不同初始条件下的平均值. 为了便于讨论, 定义 $\langle V_s \rangle = \langle V_x \rangle / v_0$. 此外, 定义通道中粒子所占的面积和总面积的比值 $\varphi = Na_0 / [L(H+W)]$, 用来描述通道中的粒子密度.

模拟中采用随机欧拉算法对方程 (3) 和方程 (4) 进行数值积分, 积分时间步长 $dt = 0.001$, 总积分时间 $t = 10^5$, 以确保系统达到非平衡稳态. 无特殊说明时, 将设置参数为 $\mu = 1, N = 100, N_v = 20, k_l = k_a = 1, k_b = 0, k_c = 10, L = 20, W = 4, H = 4$, 以及 $D_\theta = 0.01$.

3 结果与讨论

3.1 通道不对称性对定向运动的影响

图 2 描述了不同自驱动速度 v_0 的情况下, 粒子的平均速度 V_s 随不对称参数 Δ 的变化关系. 研究表明, 自驱动速度能够使系统远离平衡, 从而发生定向输运, 且定向运动方向完全由通道的不对称性决定的. 当 $\Delta < 0$ 时, 粒子的平均速度为正, $\Delta > 0$ 时, 粒子的平均速度为负, $\Delta = 0$ 时, 定向输运消失. 这种现象可以解释为, 粒子倾向于向斜坡平缓的一侧移动. 当 $\Delta < 0$ 时, 通道的最大宽度的左侧更陡, 因此, 粒子更容易向更平稳的右侧移动, 即 $\langle V_s \rangle > 0$. 同理, 当 $\Delta > 0$ 时, $\langle V_s \rangle < 0$. 当 $\Delta = 0$ 时, 通道是完全对称的, 粒子在两个方向上运动的概率

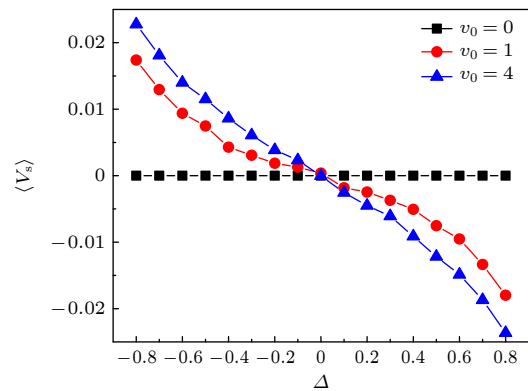


图 2 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随不对称参数 Δ 在不同 v_0 下的变化曲线, $A = 1.16$

Fig. 2. Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the asymmetric parameter Δ for different v_0 at $A = 1.16$.

相同, 因此 $\langle V_s \rangle = 0$. 因此, 定向运动的方向完全由通道的不对称性决定, N, A, v_0 等参数仅影响平均速度的大小, 而不影响运动方向. 因此, 在下文讨论中, 只考虑 $\Delta < 0$ 的情况, 设置 $\Delta = -0.8$, 并通过改变密度 φ 、形状参数 A 、自驱动速度 v_0 和旋转扩散系数 D_θ 来研究可形变粒子的定向输运.

3.2 自驱动速度对定向运动的影响

图 3 为不同 φ 值下, 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随自驱动速度 v_0 的变化曲线. 其中, 可以观察到较大的 v_0 会促进可形变粒子的整流. 当 $v_0 \rightarrow 0$ 时, 系统处于平衡状态, $\langle V_s \rangle \rightarrow 0$. 当 v_0 不断增大时, 非平衡驱动增强, 持续长度 $L_p = v_0/D_\theta \gg L$, 使粒子容易通过熵垒, 便于粒子通过不对称管道. 另外, 发现随着速度的增大, 粒子的拉伸效应会变得更加显著, 拉伸效应也会进一步促进粒子的整流. 然而, 当 φ 较大时, 随着 v_0 的增大, 粒子与瓶颈快速接触会加剧拥堵, 从而会阻碍棘轮输运; 但是当 v_0 足够大时, 粒子有足够的动能跨越瓶颈. 因此当 φ 较大时, $\langle V_s \rangle - v_0$ 曲线中会出现凹值的现象.

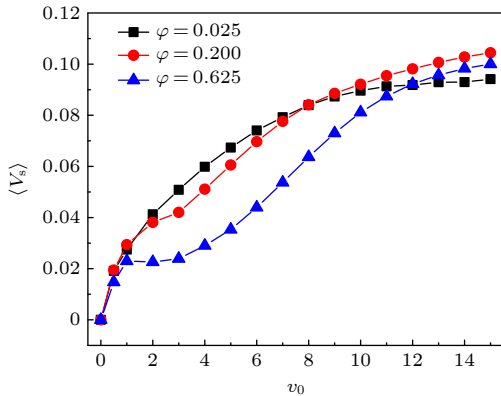


图 3 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随自驱动速度 v_0 在不同 φ 下的变化曲线, $A = 1.16$
 Fig. 3. Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the self-propulsion speed v_0 for different φ at $A = 1.16$.

3.3 旋转扩散对定向运动的影响

图 4 为不同 v_0 时的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随旋转扩散系数 D_θ 的变化曲线, 从图中可发现平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随 D_θ 的增大而逐渐减小. 这是因为持续长度 $L_p (L_p = v_0/D_\theta)$ 在逐渐减小, 导致粒子通过通道更加困难. 当 $D_\theta \rightarrow \infty$ 时, 持续长度 $L_p \rightarrow 0$, 活性粒子变为被动粒子, 系统中没有非平衡驱动, 因此定向输运消失.

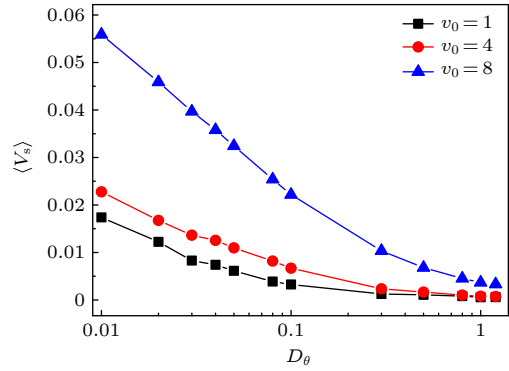


图 4 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随旋转扩散系数 D_θ 在不同 v_0 下的变化曲线, $A = 1.16, \varphi = 0.625$
 Fig. 4. Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the rotational diffusion coefficient D_θ for different v_0 at $A = 1.16$ and $\varphi = 0.625$.

3.4 粒子软化对定向运动的影响

形状参数 A 越大, 粒子越容易变形和变软. 图 5(a) 为不同 v_0 下, 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随形状参数 A 的变化关系. 从图 5(a) 可以观察到在较小的 v_0 下, 形状参数对平均速度的影响很小, 而在较大的 v_0 下, $\langle V_s \rangle$ 随形状参数的增大逐渐增大. 随着 A 的增大, 粒子被软化, 这意味着粒子的面积可以增大, 甚至大于初始面积. 粒子的面积越大, 拉伸效应就越明显. 因此在 v_0 较大时, 形状参数 A 的增大会促进粒子的整流. 而 v_0 较小时, 粒子的拉伸效应不是很明显, 此时 A 对整流的影响较小. 图 5(b) 描述了 $\langle V_s \rangle$ 在 $v_0 - A$ 平面的相图, 从图中能够更清晰地观察 $\langle V_s \rangle$ 随 v_0 和 A 的变化情况. 当固定 A 时, 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随着速度增大而变大. 固定较小 v_0 时, A 对平均速度的影响非常小, 当固定较大 v_0 时, A 对平均速度的影响较大.

3.5 粒子密度对定向运动的影响

图 6 为不同 v_0 下的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随着密度 φ 的变化曲线. 从图 6 可以观察到密度的增大会阻碍粒子的定向运动, 而且这个影响在大 v_0 时比在小 v_0 时更为显著. 因为对于小 v_0 的情况, 粒子有足够的时间变形及调整使其顺利通过瓶颈. 而对于大 v_0 的情况, 粒子会迅速接近瓶颈, 粒子数的增加会加剧粒子的堵塞, 使其通过通道的难度增大, 从而阻碍了棘轮输运.

3.6 多粒子和单粒子的对比

最后, 在 φ 相同的情况下, 将多粒子和单粒子

运动情况进行比较. 在这种情况下, 设置单粒子的面积等于多粒子面积之和. 图 7(a)—(c) 分别描述了多粒子和单粒子的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随 A , v_0 , D_θ 三个参数的变化关系. 结果表明, 虽然多粒子和单粒子都可通过通道瓶颈, 但多粒子更能促进整

流. 事实上, 尽管单个可形变粒子能够通过比其自身尺寸更小的通道瓶颈, 但当它分裂成多个可形变粒子时, 显然更容易通过通道瓶颈, 从而促进粒子的整流.

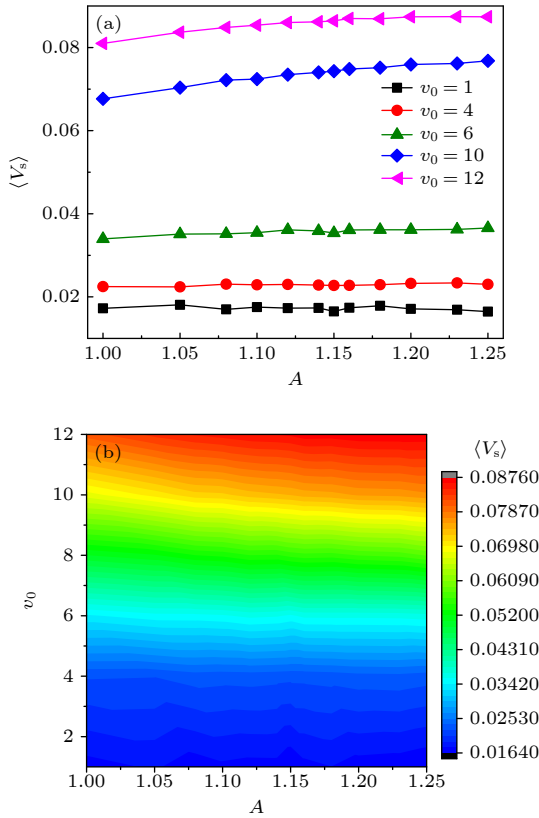


图 5 (a) 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随形状参数 A 在不同 v_0 下的变化曲线; (b) 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 在 v_0 - A 平面的相图, $\varphi = 0.625$
 Fig. 5. (a) Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the shape parameter A for different v_0 at $\varphi = 0.625$; (b) phase diagram of the average velocity $\langle V_s \rangle$ in the v_0 - A representation at $\varphi = 0.625$.

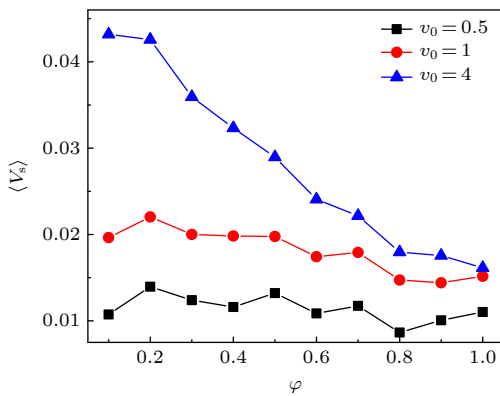


图 6 平均速度 V_s 随密度 φ 在不同 v_0 下的变化曲线, $A = 1.16$
 Fig. 6. Average velocity V_s versus the density φ for different v_0 at $A = 1.16$.

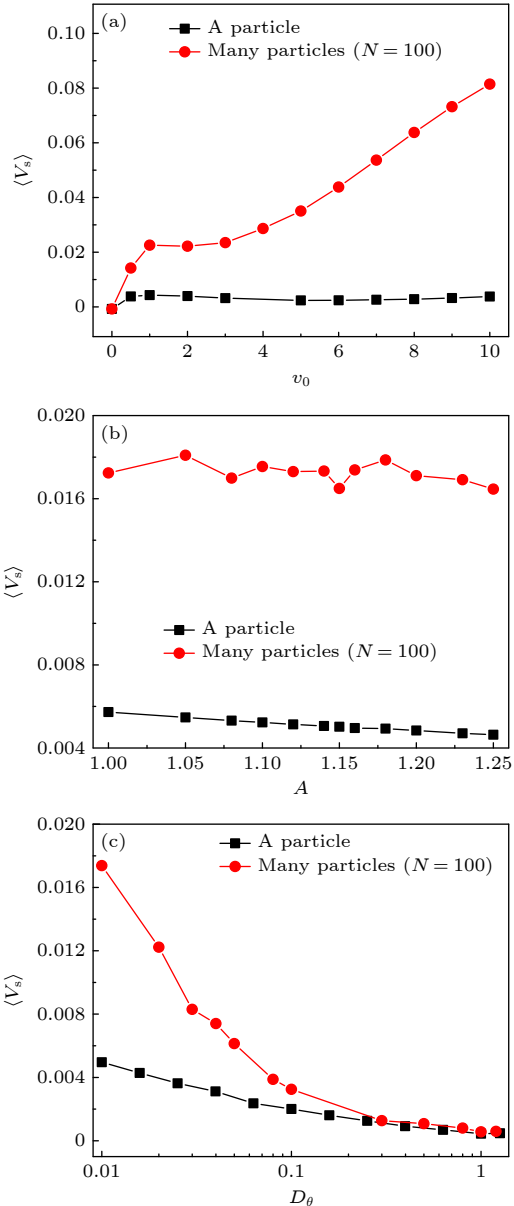


图 7 $\varphi = 0.625$ 时, 单粒子和多粒子的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 分别随 A , v_0 , D_θ 的变化曲线

Fig. 7. The average velocity of single particle and many particles $\langle V_s \rangle$ is taken as a function of A , v_0 , and D_θ at $\varphi = 0.625$.

4 结 论

本文通过数值模拟研究了二维不对称周期通道中的可形变自驱动粒子的定向运输. 粒子的自驱动速度作为非平衡驱动, 打破热力学平衡, 在空间

不对称的条件下产生定向运动. 研究表明, 粒子的定向运动方向完全由通道的不对称参数决定, 粒子更倾向于向较平缓的一侧运动. 粒子自驱动速度的增大和粒子的软化能够促进棘轮输运. 特别是在大自驱动速度下, 粒子的拉伸效应会更加明显, 粒子软化对定向输运的促进会更加显著. 然而, 密度和旋转扩散的增大会阻碍粒子的整流. 密度的增大会导致粒子堵塞, 使其通过通道变得更加困难. 而旋转扩散的增加则会导致粒子运动的持续长度减小, 同样使得粒子通过通道更加困难. 当密度一定时, 相较于单个可形变粒子, 多个可形变粒子总是促进整流的.

细胞的集体运动在组织生长、伤口愈合和免疫反应中起着重要的作用, 这对于理解病理机制, 如癌症和转移的形成也很重要. 在本文中, 粒子的形状可以用多自由度来描述, 这比以往用于描述软/可形变粒子系统的模型更有优势. 从结果来看, 可形变粒子可以通过明显小于自身尺寸的通道瓶颈, 并进行定向输运, 这不同于以往刚性粒子的结果. 本文的研究结果有助于理解可形变粒子在受限结构中的输运行为, 并为相关的软物质实验提供理论支持. 期望这些结果能够促使细胞集体运动的进一步实验研究, 以深入了解与集体细胞运动相关的生物过程.

参考文献

- [1] Xie P 2010 *Int. J. Biol. Sci.* **6** 665
- [2] Browne W, Feringa B 2006 *Nat. Nanotechnol.* **1** 25
- [3] Jülicher F, Ajdari A, Prost J 1997 *Rev. Mod. Phys.* **69** 1269
- [4] Liu Y Y, Sun J M, Fan L M, Gao T F, Zheng Z G 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 040501 (in Chinese) [刘艳艳, 孙佳明, 范黎明, 高天附, 郑志刚 2023 物理学报 **72** 040501]
- [5] Rice S, Lin A W, Safer D, Hart C L, Naber N, Carragher B O, Cain S M, Pechatnikova E, Wilson-Kubalek E M, Whittaker M, Pate E, Cooke R, Taylor E W, Milligan R A, Vale R D 1999 *Nature* **402** 778
- [6] Reimann P 2002 *Phys. Rep.* **361** 57
- [7] Ros A, Eichhorn R, Duong T, Regtmeier J, Reimann P, Anselmetti D 2005 *Nature* **436** 928
- [8] Gao T F, Chen J C 2009 *J. Phys. A Math. Theor.* **42** 065002
- [9] Ai B Q, He Y F, Zhong W R 2011 *Phys. Rev. E* **83** 051106
- [10] Gao T F, Liu F S, Chen J C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 020502
- [11] Zhang H W, Wen S T, Zhang H T, Li Y X, Chen G R 2012 *Chin. Phys. B* **21** 078701
- [12] Parrondo J M R, De Cisneros B J 2002 *Appl. Phys. A* **75** 179
- [13] Luo Y H, Zeng C H, Ai B Q 2020 *Phys. Rev. E* **102** 042114
- [14] He Y F, Ai B Q, Dai C X, Song C, Wang R Q, Sun W T, Liu F C, Feng Y 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 075001
- [15] Li Y Y, Ghosh P K, Marchesoni F, Li B W 2014 *Phys. Rev. E* **90** 062301
- [16] Mateos L J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 258
- [17] Ai B Q 2017 *Phys. Rev. E* **96** 012131
- [18] Lau B, Kedem O, Ratner M A, Weiss E A 2016 *Phys. Rev. E* **93** 062128
- [19] Sandor C, Libal A, Reichhardt C, Olson Reichhardt C J 2017 *Phys. Rev. E* **95** 032606
- [20] Astumian R N, Bier M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1766
- [21] Liao J J, Zhu W J, Ai B Q 2018 *Phys. Rev. E* **97** 062151
- [22] Mei D, Xie C W, Zhang L 2003 *Phys. Rev. E* **68** 051102
- [23] de Souza Silva C C, Van de Vondel J, Morelle M, Moshchalkov V V 2006 *Nature* **440** 651
- [24] Derenyi I, Vicsek T 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 374
- [25] Zhang H W, Wen S T, Chen G R, Li Y X, Cao Z X, Li W 2012 *Chin. Phys. B* **21** 038701
- [26] Lv M T, Yan M Y, Ai B Q, Gao T F, Zheng Z G 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 220501 (in Chinese) [吕明涛, 延明月, 艾保全, 高天附, 郑志刚 2017 物理学报 **66** 220501]
- [27] Wan M B, Reichhardt C J O, Nussinov Z, Reichhardt C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 18102
- [28] Kummel K, ten Hagen B, Wittkowski R, Buttinoni I, Eichhorn R, Volpe G, Löwen H, Bechinger C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 198302
- [29] Ai B Q, He Y F, Zhong W R 2017 *Phys. Rev. E* **95** 012116
- [30] Zhu W J, Li F G, Ai B Q 2017 *Eur. Phys. J. E* **40** 59
- [31] Nourhani A, Crespi V H, Lammert P E 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 118101
- [32] Cardenas-Barrantes M, Cantor D, Barés J, Renouf M, Azéma E 2021 *Phys. Rev. E* **103** 062902
- [33] Wang D, Treado J D, Boromand A, Norwick B, Murrell M P, Shattuck M D, O'Hern C S 2021 *Soft Matter* **17** 9901
- [34] Boromand A, Signoriello A, Ye F, O'Hern C S, Shattuck M D 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 248003
- [35] Ai B Q, Ma J, Zeng C H, He Y F 2023 *Phys. Rev. E* **107** 024406
- [36] Ai B Q, Guo R X 2021 *Phys. Rev. E* **104** 064411
- [37] Li J J, Lin F J, Ai B Q 2022 *New J. Phys.* **24** 073027
- [38] Reichhardt C J O, Reichhardt C 2010 *Phys. Rev. B* **81** 224516
- [39] Bellizotti Souza J C, Vizirim N P, Reichhardt C J O, Reichhardt C, Venegas P A 2021 *Phys. Rev. B* **104** 054434

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Directed transport of deformable self-propulsion particles in an asymmetric periodic channel*

Guo Rui-Xue Ai Bao-Quan †

(School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 23 May 2023; revised manuscript received 9 August 2023)

Abstract

Molecular motor can effectively convert chemical energy into mechanical energy in living organisms, and its research is currently at the forefront of study in biology and physics. The dynamic process of its guided movement, along with the crucial role they play in intra-cellular material transport, has significantly aroused the interest of many researchers. Theoretical and experimental researches have allowed detailed examinations of the motion attributes of these molecular motors. The Brownian ratchet model is important. It provides an illustration of a non-equilibrium system that transforms thermal fluctuation into guided transport by utilizing temporal or spatial asymmetry. The mechanism has been extensively explored and studied across fields including physics, biology and nanotechnology. Investigations into a variety of ratchets and identification of optimum conditions contribute to a deeper understanding of guided Brownian particle transport.

Preceding studies on ratchet systems largely concentrated on the rectification motions of diverse types of particles-active, polar and chiral-in asymmetric structures. However, the transport of deformable particles in asymmetric channel has not been examined relatively. Particles in soft material systems such as cell monolayer, tissue, foam, and emulsion are frequently deformable. The shape deformation of these soft particles significantly affects the system's dynamic behavior. Thus, understanding the guided transport of these deformable particles within a confined structure is crucial.

In order to explain this problem more clearly, we numerically simulate the guided transportation of active, deformable particles within a two-dimensional, periodic, asymmetric channel. We identify the factors that influence the transport of these particles within a confined structure. The main feature of the deformable particle model is that the particle's shape is characterized by multiple degree of freedom. For active deformable particles, self-propulsion speed disrupts thermodynamic equilibrium, leading to guided transport in spatially asymmetric condition. Our findings demonstrate that a particle's direction of movement is entirely determined by the channel's asymmetric parameter, and it tends to be attracted towards increased stability. Augmenting particle self-propulsion speed and particle softness can facilitate ratchet transport. When the self-propulsion speed v_0 is large, the particle's tensile effect becomes more apparent, and particle softening significantly enhances directed transport. In contrast, an increase in density and rotational diffusion can slow particle rectification. Increased density can obstruct particles, making channel passage more difficult. Elevated rotational diffusion reduces persistence length, challenging particle transition through channels. With constant density, a greater number of particles will also encourage rectification. These research findings offer a valuable insight into the transportation behaviors of deformable particles in a confined structure. They also deliver crucial theoretical support for applicable experiments in the field of soft matter.

Keywords: Brownian motor, deformable self-propulsion particles, asymmetric periodic channels**PACS:** 05.40.-a, 02.50.-r, 05.60.-k**DOI:** [10.7498/aps.72.20230825](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230825)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12075090) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2022A1515010449).

† Corresponding author. E-mail: aibq@sclu.edu.cn

可形变自驱动粒子在不对称周期管中的定向运输

郭瑞雪 艾保全

Directed transport of deformable self-propulsion particles in an asymmetric periodic channel

Guo Rui-Xue Ai Bao-Quan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230825

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230825>

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

摩擦不对称耦合布朗马达的定向运输

Investigation on the directional transportation of coupled Brownian motors with asymmetric friction

物理学报. 2020, 69(10): 100503 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191961>

周期性爆沸诱导的液滴自驱动

Self-propulsion droplet induced via periodic explosive boiling

物理学报. 2021, 70(24): 244703 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211386>

粗糙势中耦合布朗粒子的定向运输性能

Transport performance of coupled Brownian particles in rough ratchet

物理学报. 2019, 68(24): 240501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191203>

T型微通道中液滴半阻塞不对称分裂行为研究

Semi-obstructed splitting behaviors of droplet in an asymmetric microfluidic T-junction

物理学报. 2021, 70(7): 074701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201171>

自驱动杆状粒子在半柔性弹性环中的集体行为

Collective behaviors of self-propelled rods under semi-flexible elastic confinement

物理学报. 2020, 69(8): 080507 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200561>

闪电双向先导理论及观测:极性不对称、不稳定及间歇性

Theory and observation of bidirectional leader of lightning: Polarity asymmetry, instability, and intermittency

物理学报. 2018, 67(20): 205201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181079>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

非厄米格点模型的经典电路模拟*

徐灿鸿¹⁾ 许志聪¹⁾ 周子榆¹⁾ 成恩宏^{1)†} 郎利君^{1)2)‡}

1) (华南师范大学物理学院, 广州 510006)

2) (华南师范大学, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 8 月 7 日收到修改稿)

量子模拟是研究和理解量子世界中奇异物理现象的重要手段. 近年来, 人们发现除了量子平台, 经典系统 (如光子晶体、声子晶体和机械振子等) 也能通过类比薛定谔方程的方式模拟量子模型. 其中, 经典电路因具有成本低廉、技术成熟和易于扩展等特点, 成为一个新兴的模拟平台, 并成功模拟了许多重要的量子现象. 与此同时, 非厄米物理突破了传统量子力学中系统哈密顿量的厄米性, 为人们理解量子系统, 尤其是开放量子系统中的物理, 提供了一种新的视角. 非厄米系统由于展现出不同于厄米系统的新奇现象, 在物理学的多个领域中成为新兴的研究对象. 然而, 许多非厄米现象所要求的奇异构型在量子平台上实现的技术门槛相对较高, 例如非厄米趋肤效应通常需要系统具备非互易的格点间跃迁. 因此, 利用操控灵活的经典电路模拟非厄米物理成为一种自然的选择. 本文旨在通过简要介绍非厄米物理的相关知识 (包括数学基础和新奇现象) 以及经典电路的模拟理论 (包括对格点模型的映射理论、非厄米的引入和物理量的测量等), 概述当前经典电路模拟非厄米格点模型的实验进展, 为相关研究工作提供参考, 以推动该领域的进一步发展.

关键词: 非厄米物理, 经典电路模拟, PT 对称破缺, 非厄米趋肤效应, 非厄米拓扑**PACS:** 03.67.Ac, 03.65.Vf, 73.43.Nq**DOI:** 10.7498/aps.72.20230914

1 引言

量子模拟的概念最早由著名物理学家费曼提出^[1], 以解决复杂量子系统无法用经典计算机模拟的问题, 从而更好地理解奇异的量子世界. 随着低温、超导等极端技术的发展, 人造量子平台 (如冷原子^[2-4]、离子阱^[5-7]、超导量子比特^[8-10]等) 表现出系统纯净、可控性强等优势, 成功模拟了许多重要的量子现象. 然而, 量子模拟平台对技术条件要求苛刻且容易受环境影响而发生退相干^[11], 导致实验成本很高. 近些年, 研究者们发现主导经典系统的物态方程在一定条件下可以与量子系统所遵循的薛定谔方程相对应^[12], 因此, 经典系统 (如光

子晶体^[13-18]、声子晶体^[19-24]、机械振子^[25-30]等) 同样可以用来模拟量子现象, 并且具有成本低廉、技术成熟和扩展性强等特点. 尤其是近期兴起的经典电路系统^[31,32], 原则上可以模拟任意维度和任意边界条件下具有任意格点间跃迁的量子紧束缚模型 (即格点模型). 利用经典电路, 人们已经成功模拟了许多量子现象^[33-49], 比如拓扑边缘态^[35,39,46,48]以及高阶拓扑角态^[36,40,43,47]等.

另一方面, 非厄米系统作为量子开放系统的一种有效描述^[12,50,51], 本身带来许多不同于传统厄米系统的独特现象, 比如复能谱的出现、宇称-时间反演对称 (parity-time-reversal symmetry, PT 对称) 破缺^[52-56]、传统体边对应关系 (bulk-boundary correspondence) 的失效^[57-70]、非厄米动力学^[71-73]

* 广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2019A1515111101) 和华南师范大学科研启动基金资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ehcheng@m.scnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: ljlang@scnu.edu.cn

等, 已经成为当下凝聚态领域中一个新兴的研究热点. 鉴于经典电路对量子厄米拓扑系统的成功模拟, 人们自然也希望能用它模拟非厄米系统, 以期更好地研究和理解新奇的非厄米物理现象. 实验上, 研究者在利用经典电路模拟非厄米物理方面已经取得了很大进展^[32], 比如成功模拟具有非互易跃迁的 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型^[41], 观测到由增益/损耗 (gain/loss) 诱导的非厄米拓扑边缘态^[74] 等. 本文将聚焦于经典电路对非厄米格点模型的模拟, 对当前的实验进展进行综述, 为相关研究提供参考, 以推动该领域进一步发展.

本文的剩余部分大致安排如下: 第 2 节简要介绍非厄米物理中的一些数学知识和新奇现象; 第 3 节介绍经典电路模拟的理论基础; 第 4 节概述当下经典电路模拟非厄米格点模型的实验进展; 第 5 节进行总结.

2 非厄米物理简介

非厄米物理的研究对象既可以是量子系统也可以是经典系统, 其特征是系统的性质可以通过有效的非厄米矩阵进行描述^[12]. 系统的非厄米性通常来源于系统与环境之间的耦合, 比如系统与环境之间的能量交换, 对系统的测量等^[50,51].

早期的研究主要关注于 PT 对称的非厄米系统^[52,53], 因为这类系统在特定参数下具有类似厄米系统的纯实数能谱, 以保证态的演化不分散或不消逝. 同时, 此类系统能谱的实复转变对应于本征态的 PT 对称破缺, 其转变点即为异常点 (exceptional point, EP)^[75]. 随后, 人们建立了非厄米系统的一般性理论——非厄米量子力学^[76], 给出了描述非厄米系统的基本数学范式.

近些年, 传统体边对应关系在非厄米拓扑系统的失效引起新一轮对非厄米物理研究的浪潮. 在重建非厄米体边对应关系的过程中, 人们逐渐发现一些非厄米系统所特有的现象, 比如非厄米趋肤效应^[57–59,77–79], 也建立起一些新的非厄米理论, 比如非布洛赫理论^[59,80–88]、非厄米拓扑分类^[89–92] 等. 这些研究在理论上揭示出非厄米系统不同于厄米系统的独特性质^[12,86,92]. 近期随着非厄米领域的不断发展, 人们开始将非厄米理论应用于对开放系统的研究中^[63,93–101].

本节根据理解相关实验的需要, 简要介绍一些

实验中所涉及的非厄米理论的基本数学知识以及非厄米系统所特有的新奇现象.

2.1 非厄米理论的数学基础

2.1.1 非厄米矩阵及双正交基

非厄米系统通常可以用非厄米矩阵 H (相当于传统量子力学中系统的哈密顿量) 来描述, 其非厄米性表现为 $H^\dagger \neq H$. 对于可对角化的非厄米矩阵而言 (不可对角化的情况随后介绍), 其本征值分解如下^[102]:

$$S^{-1}HS = \Lambda, \quad (1)$$

其中, Λ 为对角矩阵, 其对角项 $\{E_n\}$ 为本征值 (相当于传统量子力学中系统的本征能量), 可以为任意复数; S 为相似矩阵, 其中的列向量被称为 H 的右本征矢, 记作 $\{|\psi_n^{(r)}\rangle\}$, 而 S^{-1} 中的行向量被称为 H 的左本征矢, 记作 $\{\langle\psi_n^{(l)}|\}$. 将 (1) 式写成本征方程的形式:

$$H|\psi_n^{(r)}\rangle = E_n|\psi_n^{(r)}\rangle, \quad H^\dagger|\psi_n^{(l)}\rangle = E_n^*|\psi_n^{(l)}\rangle, \quad (2)$$

表示非厄米系统的定态薛定谔方程. 由相似矩阵的性质可知, 左右本征矢之间满足双正交归一关系:

$$\langle\psi_m^{(l)}|\psi_n^{(r)}\rangle = \delta_{mn}, \quad (3)$$

从而具有如下完备性:

$$\sum_n |\psi_n^{(r)}\rangle\langle\psi_n^{(l)}| = 1. \quad (4)$$

因此, 左右矢可构成非厄米矩阵的双正交基 (biorthogonal basis)^[76].

特别地, 对于厄米矩阵 ($H^\dagger = H$) 而言, 其本征值分解中的相似矩阵变为酉矩阵 ($S^{-1} = S^\dagger$), 即左右矢之间满足 $|\psi_n^{(l)}\rangle = |\psi_n^{(r)}\rangle$ 的关系, 因此双正交基退化为大家所熟知的正交基, 相应的本征值 E_n 也变为实数. 不同于厄米矩阵的本征矢, 非厄米矩阵对应不同本征值的右本征矢通常不交 (左本征矢类似), 即 $\langle\psi_m^{(l)}|\psi_n^{(r)}\rangle \neq 0$ ($m \neq n$).

2.1.2 缺陷矩阵及 EP

当非厄米矩阵不可对角化 (被称为缺陷矩阵) 时, 无法对其进行本征值分解, 取而代之的是更一般的约当分解 (Jordan decomposition)^[12,103]:

$$S^{-1}HS = J. \quad (5)$$

其中, S 仍为相似矩阵,

$$J = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & J_s(E) & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \quad (6)$$

是在相似变换下最接近完全对角化的块对角矩阵, 其对角块 $J_s(E)$ 具有如下形式: 对角元均为 E , 上次对角元均为 1, 其他为 0. 具有这样形式的 J 被称为 H 的约当标准型 (Jordan canonical form), 其中 $J_s(E)$ 为第 s 个约当块 (Jordan block). 每个约当块 $J_s(E)$ 都有且仅有一个本征矢 $(1, 0, \dots)^T$, E 为相应的本征值. 因此, 当存在约当块的维度 $p_s(E) = \dim J_s(E) > 1$ 时, H 即为缺陷矩阵. 具有相同本征值 E 的约当块的个数 $\alpha(E)$ 即为缺陷矩阵 H 在 E 处的简并度. 特别地, 当所有约当块的维度均为 1 时, 约当分解则退化为本征值分解, 即 H 不再是缺陷矩阵.

如果调节系统参数, 使描述非厄米系统的非厄米矩阵恰好为缺陷矩阵, 此参数即为非厄米系统的 EP^[75]. 不同于厄米矩阵的简并点, 在 EP 处不仅本征值重合, 本征矢也会部分或全部合并 (coalesce), 即 H 的左右本征矢无法提供完备的双正交基, 此时需要用广义本征矢 (generalized eigenvector) 来补足. 通常大家定义在本征值 E 处的 EP 阶数为 $p(E) = \sum_{s=1}^{\alpha(E)} p_s(E)$, 但此定义只适合对 EP 的粗糙描述, 并不能反映在此系统参数下是否发生了本征矢合并以及合并的细节. 只有给出本征值 E 对应的每一个约当块的维度信息 $p_s(E)$, 才能更好地表征 EP 的性质.

为了度量系统参数离 EP 的远近程度, 可以定义平均的相刚度 (phase rigidity)^[104]:

$$r(z) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\langle \psi_n^{(l)}(z) | \psi_n^{(r)}(z) \rangle}{\sqrt{\langle \psi_n^{(l)}(z) | \psi_n^{(l)}(z) \rangle \langle \psi_n^{(r)}(z) | \psi_n^{(r)}(z) \rangle}}, \quad (7)$$

其中, N 为可对角化矩阵 $H(z)$ 的维度, $|\psi_n^{(l/r)}(z)\rangle$ 为其在参数 z 处的第 n 个左/右本征矢. 当系统参数接近 EP 值 z_0 时, 相刚度 $r(z \rightarrow z_0) \rightarrow 0$; 对于厄米矩阵, 左右本征矢互为复共轭, 所以相刚度 $r(z) = 1$, 即厄米矩阵不存在 EP.

2.2 非厄米系统中的新奇现象

2.2.1 PT 对称破缺及赝厄米

在传统的量子力学中, 系统的哈密顿量为厄米

算符 (对应于厄米矩阵), 其本征谱全为实数, 反映系统能量为实数的物理事实. 1998 年, Bender 和 Boettcher^[52,53] 发现, PT 对称的非厄米哈密顿量 (对应于非厄米矩阵) 同样可以具有全实能谱. 这里的 P 和 T 分别表示空间反演和时间反演. 当非厄米强度 (比如增益/损耗强度) γ 比较弱时, 系统的所有本征态均具有 PT 对称性, 从而具有全实的能谱, 此时系统处于 PT 对称相, 任何量子态在此系统下均具有稳定的动力学. 当非厄米强度很强时, 系统的部分或全部本征态不再具有 PT 对称性, 其能谱也出现复数, 此时系统处于 PT 对称破缺相, 量子态在其中的演化通常会发散或消逝. 因此, 在 PT 对称的非厄米系统里, 存在能谱由全实到复数的转变, 被称为 PT 转变 (PT transition), 如图 1 所示. 在转变点处部分或全部本征态会发生自发性 PT 对称破缺. 此转变点即为前面所提到的 EP. PT 转变是厄米系统所没有的.

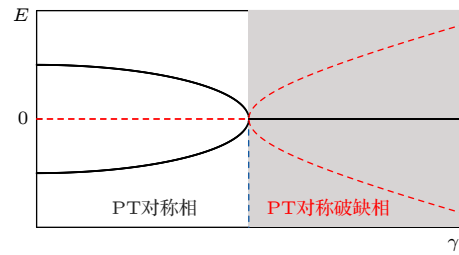


图 1 能量 E 的实部 (实线) 和虚部 (虚线) 随非厄米强度 γ 的变化. 点线处为 PT 转变点, 其左侧为 PT 对称相 (白色区域), 右侧为 PT 对称破缺相 (灰色区域)

Fig. 1. The real (solid lines) and imaginary (dashed lines) parts of the energy E versus the strength γ of the non-Hermiticity. The dotted line indicates the PT transition point, to the left side of which is the PT symmetric phase (white region) and to the right side of which is the PT-broken phase (gray region).

其实, 不只有 PT 对称的非厄米系统可以存在全实能谱. Mostafazadeh^[105] 在 2002 年的研究发现, 每一个具有全实能谱的哈密顿量都是赝厄米的 (pseudo-Hermitian), 而 PT 对称只是赝厄米的一种特殊形式. 如果存在一个厄米的可逆算符 η , 使得系统的哈密顿量 H 满足 $H^\dagger = \eta H \eta^{-1}$, 则称 H 是赝厄米的^[12,105]. 如果 η 可以取单位算符, 则 H 退化为厄米的. 赝厄米哈密顿量的能谱一定具备以下性质之一: 1) 全实能谱; 2) 能谱以复共轭的形式成对出现, 且互为复共轭的能谱的简并度相同.

如果存在 η , 它可以进一步写成 $\eta = OO^\dagger$ 的形式, 其中 O 为线性可逆算符, 则厄米哈密顿量 H 一定具有全实能谱 [12,106]. 这是非厄米哈密顿量具有全实能谱的充分必要条件. 而 PT 对称仅能保证非厄米哈密顿量具有产生全实能谱的可能性, 既不是其具有全实能谱的充分条件, 也不是必要条件.

2.2.2 传统体边对应关系的失效及非厄米趋肤效应

体边对应关系是被体能隙保护的厄米拓扑系统遵循的一个基本原则, 它描述了系统的体态拓扑不变量与拓扑边缘态之间的关联. 然而, 此原则在某些非厄米系统中并不成立, 表现为开边界条件下的能谱和体态与周期边界下有很大的不同 [57,58], 如图 2(a) 所示. 这是因为此类非厄米系统对边界的选择表现出很强的敏感性, 开边界与周期边界的同一系统在热力学极限下并不等价 [57,58,107].

非厄米趋肤效应恰是这种边界敏感性的体现. 它具体表现为非厄米系统的体态在开边界条件下呈指数型地聚集在某一边界, 如图 2(c) 所示. 非厄米趋肤效应使具有体周期性的非厄米系统的体态丢失了布洛赫态的特性, 与厄米系统中体态弥散在全域的情形完全不同.

基于对非厄米趋肤效应的观察, Yao 等 [60] 在一维非厄米 SSH 模型中建立起非布洛赫理论 (non-Bloch theory), 成功重塑了此非厄米系统中的体边对应关系, 引起了后续的广泛研究 [80–88]. 在非布洛赫理论中, 对于热力学极限下的非厄米系统, 周期边界下的哈密顿量 $H(k)$ 被开边界下的 $H(\beta)$ 所取代. 这里, 原先定义在布里渊区上的晶格动量 k 被扩展为一个复变量 $\beta = re^{ik}$, 它在复平面的集合被称为广义布里渊区 (generalized Brillouin zone). 广义布里渊区通常为一个闭合路径, 如图 2(b) 所示, 其与原点的距离 r 反映系统在开边界条件下体态的趋肤性质: $r = 1$ 代表布洛赫态, 即没有非厄米趋肤效应; $r < 1$ 和 $r > 1$ 分别对应趋向于不同边界的体趋肤态 [60,81]. 类比厄米情形 [108], 可以用非布洛赫态在广义布里渊区中定义非布洛赫的拓扑不变量, 从而重构非厄米拓扑系统的体边对应关系, 即非布洛赫拓扑不变量与非厄米拓扑边缘态之间的关联: 拓扑不变量为 0 表示不存在拓扑边缘态的拓扑平庸相, 非 0 表示存在拓扑边缘态的非厄米

拓扑相.

例如, 对于具有手征对称性的一维非厄米系统, 其非布洛赫缠绕数可定义为 [59]

$$w = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\text{GBZ}} \text{tr}[q^{-1}(\beta)dq(\beta)], \quad (8)$$

其中, 矩阵 $q(\beta)$ 由哈密顿量 $H(\beta)$ 的 Q -矩阵来定义:

$$\begin{aligned} Q(\beta) &= \sum_{n \in N_-} \left[\Gamma |u_n^{(r)}(\beta)\rangle \langle u_n^{(l)}(\beta)| \Gamma \right. \\ &\quad \left. - |u_n^{(r)}(\beta)\rangle \langle u_n^{(l)}(\beta)| \right] \\ &= \begin{pmatrix} 0 & q(\beta) \\ q^{-1}(\beta) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9)$$

由于系统具有手征对称性 $\{H(\beta), \Gamma\} = 0$ (Γ 为相应的手征算符), 导致能谱关于零点对称, 因此可以将 $H(\beta)$ 的本征态 $\{|u_n^{(r,l)}(\beta)\rangle\}$ (n 为能带指标) 按本征能量 $\{E_n(\beta), -E_n(\beta)\}$ 划分成两个子空间 N_+ 和 N_- . 以手征算符 Γ 的本征态为基, 手征对称的 Q -矩阵便可写成 (9) 式中第 2 行的反对角形式.

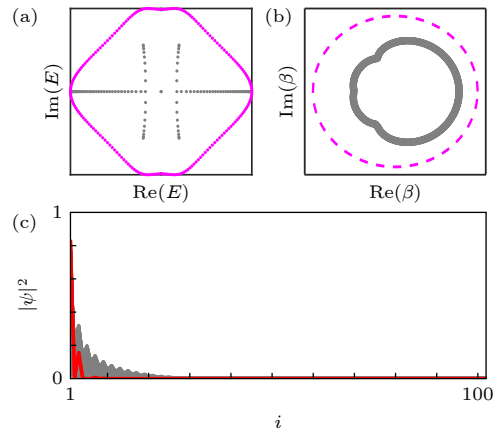


图 2 (a) 非厄米 SSH 模型 [59] 分别在开边界 (粉色) 和周期边界 (灰色) 条件下的能谱 E 在复平面的示意图; (b) 与 (a) 中能谱相对应的布里渊区 (灰色) 和广义布里渊区 (粉色) 的示意图, 其中 β 的定义见正文; (c) 开边界条件下拓扑边缘态 (红色) 和趋肤态 (灰色) 的在实空间的几率分布 $|\psi_i|^2$ 示意图, i 为格点标记

Fig. 2. (a) The sketch of the energy spectra in complex plane for the non-Hermitian SSH model in Ref. [59] respectively under open (pink) and periodic (gray) boundary conditions; (b) the sketch of the Brillouin zone (black) and the generalized Brillouin zone (pink) corresponding to the spectra with the same colors in (a), where the definition of β can be referred to in the main text; (c) the sketch of probability distribution $|\psi_i|^2$ of the topological end state (red) and the skin bulk states (gray) in real space under open boundary conditions, where i is the site index.

又如, 二维非厄米系统的非布洛赫陈数可定义为^[60,109]

$$C = \frac{1}{2\pi} \oint_{\text{GBZ}} \text{tr}[F_{xy}(\boldsymbol{\beta})] d\beta_x d\beta_y, \quad (10)$$

其中 ($\partial_{\mu=x,y} \equiv \partial/\partial\beta_{\mu}$),

$$F_{xy}(\boldsymbol{\beta}) = \partial_x A_y(\boldsymbol{\beta}) - \partial_y A_x(\boldsymbol{\beta}) - i[A_x(\boldsymbol{\beta}), A_y(\boldsymbol{\beta})], \quad (11)$$

$$A_{\mu}^{nm}(\boldsymbol{\beta}) = i\langle u_n^{(l)}(\boldsymbol{\beta}) | \partial_{\mu} u_m^{(r)}(\boldsymbol{\beta}) \rangle \quad (12)$$

分别为非布洛赫贝里曲率 (Berry curvature) 和贝里联络 (Berry connection).

以上用非布洛赫本征态定义的拓扑不变量, 虽然能很好地反映非厄米系统在开边界条件下的拓扑相变, 包括能隙的关闭以及拓扑边缘态的产生, 但并没有体现出非厄米趋肤态本身的拓扑性质. 借助于非厄米系统的能谱一般为复数的特性, 可以定义能量缠绕数^[12,67]:

$$w_{C,E_b} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{d}{dz} \ln \det [H(z) - E_b] dz, \quad (13)$$

其中, C 为积分回路, 可以是布里渊区 (BZ) 或广义布里渊区 (GBZ), 也可以是其他周期参数空间; E_b 是能量复平面内的基准能量. 对于一维单带非厄米系统, 周期边界下的能量缠绕数 w_{BZ,E_b} 可以反映相应开边界下趋肤态的性质: $w_{\text{BZ},E_b} \neq 0$ 表明存在非厄米趋肤效应, 其正负反映趋肤态的趋肤方向^[67]. 这种周期边界下能谱的拓扑性质与开边界下非厄米趋肤态的对应关系是非厄米拓扑系统所独有的.

2.2.3 EP 诱导的高灵敏度及分数级数展开

与传统的简并点 (此处仅是能量重合而态并不合并) 不同, EP 能使非厄米系统的能量对微扰产生更灵敏的响应. 对于一个 p 阶 EP, 能谱对微扰 z 的响应 ε 在一定条件下最大可以达到 $\varepsilon \propto z^{1/p}$ 的量级, 而传统的简并点仅为 $\varepsilon \propto z$ ^[110], 如图 3 所示. 基于这一特性, EP 可以用于制造高灵敏度的传感器, 其最早方案由 Wiersig^[111] 于 2014 年提出.

EP 产生高灵敏度的原因可以通过数学上的皮瑟级数 (Puiseux series) 来理解. 已知非厄米系统 $H(z)$ (参数 $z \in \mathbb{C}$) 在 $z = 0$ 处有一个能量为 E_0 的 p 阶 EP. 当系统偏离 EP 时, 假设能量完全劈裂为 p 支不同的能量函数 $E_h(z)$ ($h = 0, \dots, p-1$) 且它们恰好构成以 $z = 0$ 为 $p-1$ 阶支点的 p 叶黎曼面 (即这 p 支能量函数之间在 $z = 0$ 附近是连续解析

的, 且函数值绕 p 圈才能回到初始值), 则能量函数在 EP 附近展开有如下皮瑟级数^[92,112]:

$$E_h(z) = E_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n e^{i2\pi n h/p} z^{n/p}, \quad (14)$$

其中 α_n 是展开系数. 因为 $|z| \ll 1$, 所以能量在 EP 附近的劈裂由领头项 $z^{1/p}$ 主导. 皮瑟级数是分数级数, 当 EP 阶数 $p > 1$ 时, 能量劈裂对参数偏离的响应比传统的简并点 (对应于泰勒级数) 要大. 这就是 EP 能导致高灵敏度的来源.

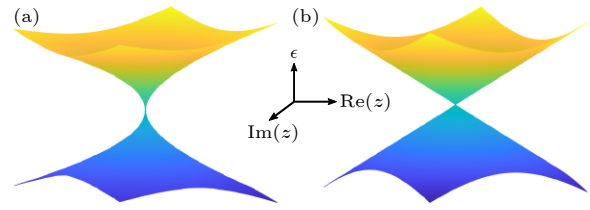


图 3 (a) 能谱 ε 随微扰 z 在二阶 EP 附近劈裂的示意图, 具有 $\varepsilon \propto z^{1/2}$ 的形式^[110]; (b) 能谱 ε 随微扰 z 在传统的二重简并点附近劈裂的示意图, 具有 $\varepsilon \propto z$ 的形式^[110]

Fig. 3. (a) The sketch of energy spectra ε versus the perturbation z around a two-order EP, satisfying $\varepsilon \propto z^{1/2}$ ^[110]; (b) the sketch of energy spectra ε versus the perturbation z around a traditional two-fold degenerate point, satisfying $\varepsilon \propto z$ ^[110].

值得注意的是, 展开式 (14) 假设了 p 阶 EP 恰好是其附近能量函数的 $p-1$ 阶支点, 但这些能量函数也可以形成 α 个各自连续解析的函数族, 每族函数以 p 阶 EP 作为其 p_s-1 阶支点 (满足 $\sum_{s=1}^{\alpha} p_s = p$). 此时, 每一族能量函数的展开式都具有 (14) 式的形式, 只是将 p 换成 p_s , 这会导致能量对参数偏离的响应相对较弱^[103]. 因此, 能谱对微扰的响应并非只由 EP 的阶数决定, 还跟具体的微扰形式有关.

3 经典电路模拟的理论基础

3.1 经典电路对格点模型的映射

利用经典电路模拟物理现象的基本逻辑为, 基于电路的基尔霍夫定律, 通过合理近似, 建立起电路中描述某物理量的运动方程与模拟对象所遵循的运动方程之间的映射关系, 以达到通过观测此物理量在电路中的行为从而获知模拟对象相关性质的目的. 由于基尔霍夫方程的离散属性, 经典电路主要用于模拟量子力学中的紧束缚模型 (即格点模

型). 所以, 本节主要介绍用于映射格点模型薛定谔方程的 3 种电路理论: 拉普拉斯形式 (Laplacian formalism)^[35]、刘维尔形式 (Liouvillian formalism)^[113] 以及耦合模理论 (coupled mode theory)^[114–116].

3.1.1 拉普拉斯形式

对于任意线性电路构成的网络, 元件从节点 i 到节点 j (有方向性) 的特性可以通过线性的等效电阻 R_{ij} 、等效电感 L_{ij} 和等效电容 C_{ij} 来描述. 如果元件的等效值依赖于节点 i 与 j 之间的方向, 则称此元件为非互易的 (nonreciprocal). 定义节点的外部输入电流 $I_i(t)$ 和对地电压 $V_i(t)$, 根据基尔霍夫定律可得矩阵形式的线性微分方程^[117]:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{I}(t) = \mathcal{C}_C \frac{d^2}{dt^2}\mathcal{V}(t) + \mathcal{C}_R \frac{d}{dt}\mathcal{V}(t) + \mathcal{C}_L \mathcal{V}(t), \quad (15)$$

其中, $\mathcal{I}(t)$ 和 $\mathcal{V}(t)$ 分别为 $I_i(t)$ 和 $V_i(t)$ 的矢量形式, 系数矩阵:

$$\begin{aligned} (\mathcal{C}_C)_{ii} &= C_{ig} + \sum_{k \neq i} C_{ik}, & (\mathcal{C}_C)_{ij} &= -C_{ij} \quad (i \neq j), \\ (\mathcal{C}_R)_{ii} &= R_{ig}^{-1} + \sum_{l \neq i} R_{il}^{-1}, & (\mathcal{C}_R)_{ij} &= -R_{ij}^{-1} \quad (i \neq j), \\ (\mathcal{C}_L)_{ii} &= L_{ig}^{-1} + \sum_{k \neq i} L_{ik}^{-1}, & (\mathcal{C}_L)_{ij} &= -L_{ij}^{-1} \quad (i \neq j), \end{aligned} \quad (16)$$

分别具有 [电容]、[电阻]⁻¹ 和 [电感]⁻¹ 的量纲, g 表示对地.

对电路注入驱动频率为 $\omega \in \mathbb{R}$ 的交变电流 $\mathcal{I}(t) = \mathcal{I}e^{i\omega t}$, 电路节点将具有稳定的电压响应 $\mathcal{V}(t) = \mathcal{V}e^{i\omega t}$, 其电流幅 \mathcal{I} 和电压幅 \mathcal{V} 之间满足如下关系:

$$\mathcal{I} = (i\omega\mathcal{C}_C + \mathcal{C}_R - i\mathcal{C}_L/\omega)\mathcal{V} \equiv \mathcal{J}(\omega)\mathcal{V}. \quad (17)$$

式中 $\mathcal{J}(\omega)$ 具有 [导纳] 的量纲, 被称为导纳矩阵 (admittance matrix) 或电路拉普拉斯量 (circuit Laplacian)^[35]. 它是驱动频率 ω 的函数, 其矩阵元 \mathcal{J}_{ij} 表示节点 i 到 j 的导纳. 其逆矩阵 $\mathcal{G} = \mathcal{J}^{-1}$ 被称为电路格林函数 (circuit Green function), 具有 [阻抗] 的量纲, 反映了节点电压 \mathcal{V} 对节点输入电流 \mathcal{I} 的响应. 有时为了方便起见, 也可将导纳矩阵分解为三部分:

$$\mathcal{J} = \mathcal{A} + \mathcal{D} + \mathcal{W}, \quad (18)$$

其中, \mathcal{A} 代表导纳矩阵的非对角部分, \mathcal{D} 和 \mathcal{W} 分

别代表对角部分中的节点间耦合部分和对地部分, 其矩阵元分别为

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij} &= (1 - \delta_{ij}) [-i\omega C_{ij} - R_{ij}^{-1} - (i\omega L_{ij})^{-1}], \\ \mathcal{D}_{ij} &= \delta_{ij} \sum_{k \neq i} [i\omega C_{ik} + R_{ik}^{-1} + (i\omega L_{ik})^{-1}], \\ \mathcal{W}_{ij} &= \delta_{ij} [i\omega C_{ig} + R_{ig}^{-1} + (i\omega L_{ig})^{-1}], \end{aligned} \quad (19)$$

其中 δ_{ij} 为 Kronecker 函数.

如果将导纳矩阵 \mathcal{J} 看作格点模型的哈密顿量, 则电路节点对应格点的位置, \mathcal{J} 的对角元和非对角元分别对应格点上的在位势能和格点间的跃迁振幅, 而导纳矩阵的本征方程,

$$\mathcal{J}v_n^{(r)} = j_n v_n^{(r)}, \quad \mathcal{J}^\dagger v_n^{(l)} = j_n^* v_n^{(l)}, \quad (20)$$

便可用于模拟格点模型的定态薛定谔方程 (2) 式. 这里的 j_n 表示导纳矩阵 \mathcal{J} 的第 n 个本征值, $v_n^{(l,r)}$ 为相应的左右本征矢. 因此, j_n 对应格点模型的本征能量 E_n , 而 $v_n^{(l,r)}$ 对应格点模型的本征态 $|\psi_n^{(l,r)}\rangle$. 需要注意的是, 在此对应关系中, 驱动频率 ω 是作为模拟参数而存在的, 并非直接对应于格点模型的本征能量.

特别地, 当无外界输入电流 (即 $\mathcal{I} = 0$) 时, (17) 式变为本征方程 $\mathcal{J}(\omega)\mathcal{V} = 0$, 其存在非平庸解的条件为

$$\det[\mathcal{J}(\tilde{\omega})] = \prod_n j_n(\tilde{\omega}) = 0, \quad (21)$$

其中使条件成立的 $\tilde{\omega}$ 即为电路的本征频率, 非平庸解 $\mathcal{V}(\tilde{\omega})$ 为本征频率 $\tilde{\omega}$ 所对应的电路的本征电压. 条件 (21) 式说明本征频率 $\tilde{\omega}$ 至少使一个导纳矩阵的本征值为零, 即存在 n 使 $j_n(\tilde{\omega}) = 0$. 换言之, 导纳矩阵 $\mathcal{J}(\omega)$ 的本征值 $j_n(\omega)$ 作为 ω 的连续函数族, 与 $j = 0$ 的交点所对应的频率即为电路的本征频率 $\tilde{\omega}$, 而相应的右本征矢 $v_n^{(r)}(\tilde{\omega})$ 即为电路的本征电压. 注意以上结论并不限于本征频率是实数, 对于复本征频率同样适用.

由 (17) 式可知, 当电路中仅含有被动 (passive) 电阻时 (即纯耗散电路), \mathcal{J} 是厄米的, 而仅含有被动电容和电感时 (即纯振荡电路), \mathcal{J} 是反厄米的, 即 $\mathcal{J}^\dagger = -\mathcal{J}$. 因此, 通常用 $i\mathcal{J}$ 建立与格点模型哈密顿量 H 的映射, 用仅含有被动电容和电感的电路模拟厄米格点模型^[33,35,45], 而通过引入被动电阻以及主动 (active) 元件来模拟非厄米格点模型^[41,74,118–129]. 只要对电路元件及排布进行合理的

设计并采取合适的驱动频率,原则上可以用导纳矩阵模拟任意格点模型的稳态性质,包括本征能和态以及由它们定义的各种物理量.

3.1.2 刘维尔形式

如果要模拟格点模型的动力学,需要将描述电路动力学的 (15) 式与描述格点模型动力学的含时薛定谔方程 $i\partial_t|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ ($\hbar = 1$) 相联系. 由于含时薛定谔方程是齐次方程,所以这里考虑无外界电流输入的情况,即 $\mathcal{I}(t) = 0$. 此时, (15) 式变为关于时间的二阶齐次微分方程而含时薛定谔方程是一阶的,因此,需要通过变量替换将 (15) 式降为一阶:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{V}(t) &\equiv \mathcal{W}(t), \\ \frac{d}{dt} \mathcal{W}(t) &= -\mathcal{C}_C^{-1} \mathcal{C}_R \mathcal{W}(t) - \mathcal{C}_C^{-1} \mathcal{C}_L \mathcal{V}(t). \end{aligned} \quad (22)$$

定义新变量 $\Phi(t) = [\mathcal{V}(t), \mathcal{W}(t)]^T$, (22) 式可改写为如下刘维尔方程的形式^[113]:

$$\frac{d}{dt} \Phi(t) = \mathcal{L} \Phi(t), \quad \mathcal{L} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{E} \\ -\mathcal{C}_C^{-1} \mathcal{C}_L & -\mathcal{C}_C^{-1} \mathcal{C}_R \end{pmatrix}. \quad (23)$$

这里的 \mathcal{L} 被称为电路刘维尔量 (circuit Liouvillian), \mathcal{E} 为单位矩阵. 刘维尔方程将微分方程 (15) 从二阶降为一阶,但变量的个数扩大为原来的 2 倍.

显然,电路的刘维尔方程类似含时薛定谔方程, $i\mathcal{L}$ 具有哈密顿量的地位. 此方程具有形为 $\Phi(t) = \Phi e^{-i\tilde{\omega}t}$ 的稳态解,其中 $i\mathcal{L}$ 的本征值 $\tilde{\omega}$ 即为电路的本征频率,模拟格点模型的本征能 E_n ^[122,130]; 矢量 $\Phi(t)$ 反映电路中电压随时间的演化情况,模拟格点模型中量子态的动力学^[131].

3.1.3 耦合模理论

因为格点模型直接来源于凝聚态物理中的紧束缚近似 (即将不同的原子轨道弱耦合在一起),所以同样可以用电路重构类似的近似过程: 将多个具有独自振荡频率的 RLC 电路,通过某种形式的弱耦合连接起来,从而模拟格点模型. 这种近似方法被称为耦合模理论^[114–116].

为了清楚地展示耦合模理论的近似过程,这里选取通过电感元件间的互感 M 耦合的两个 RLC 回路作为例子^[115],如图 4 所示. 根据基尔霍夫电压定律,可得

$$i\omega(LI_{l,r} + MI_{r,l}) + R_{l,r}I_{l,r} + \frac{I_{l,r}}{i\omega C} = 0, \quad (24)$$

其中,电阻 $R_{l,r} = \mp R$ (关于负电阻的实现可参见 3.2 节),且设参数 R, L, C, M 均为正数. 定义特征量 $\omega_0 = 1/\sqrt{LC}$, $\gamma = R\sqrt{C/L}$ 和 $\mu = M/L$, 则 (24) 式可改写为

$$\begin{pmatrix} 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} + i\frac{\gamma\omega_0}{\omega} & \mu \\ \mu & 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} - i\frac{\gamma\omega_0}{\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_l \\ I_r \end{pmatrix} = 0. \quad (25)$$

当考虑弱耦合的情况时,即

$$\mu \ll 1, \quad \gamma \ll 1, \quad \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \ll 1, \quad (26)$$

(25) 式可化为

$$\begin{pmatrix} \omega - \omega_0 + i\frac{\gamma\omega_0}{2} & \frac{\mu\omega_0}{2} \\ \frac{\mu\omega_0}{2} & \omega - \omega_0 - i\frac{\gamma\omega_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_l \\ I_r \end{pmatrix} = 0. \quad (27)$$

此方程等价于振荡电流 $I_{l,r}(t) = I_{l,r}e^{i\omega t}$ 所满足的耦合模方程:

$$i\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} I_l(t) \\ I_r(t) \end{pmatrix} = \mathcal{H} \begin{pmatrix} I_l(t) \\ I_r(t) \end{pmatrix}, \quad (28)$$

其中,

$$\mathcal{H} = \omega_0 \begin{pmatrix} -1 + i\gamma/2 & \mu/2 \\ \mu/2 & -1 - i\gamma/2 \end{pmatrix}. \quad (29)$$

显然, (28) 式与含时薛定谔方程形式一致,可以用来模拟相应的动力学以及稳态性质.

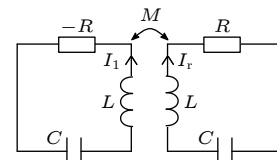


图 4 二聚体电路示意图^[132]. 由电感耦合的两个 RLC 回路构成,其中 M 为互感, $-R$ 代表负电阻

Fig. 4. The sketch of the dimer circuit consisting of two inductively coupled RLC tanks^[132], where M is the mutual inductance and $-R$ represents a negative resistance.

值得注意的是,电路的耦合模方程 (28) 与刘维尔方程 (23) 的形式相同,但却没有增加变量的个数,这是因为耦合模理论在弱耦合近似下将 (25) 式中 ω 的平方项降成了 (27) 式中的线性项,等价于将基尔霍夫方程 (15) 中关于时间的二阶导数降到了一阶. 这便是耦合模理论能直接模拟含时

薛定谔方程的原因. 由于弱耦合近似 (26) 式的限制, 耦合模理论适用范围较窄. 目前在电路系统中主要用于高灵敏 EP 传感器的设计 [114–116,130].

3.2 非厄米在经典电路中的引入

为了用经典电路模拟非厄米格点模型, 需要在以上电路理论中引入等效的非厄米项, 主要包括格点上的复在位势和格点间的非互易跃迁, 分别对应于哈密顿量矩阵中的复对角元和不满足复共轭关系的非对角元, 它们均可以使描述系统的矩阵失去厄米性.

3.2.1 损耗和增益

由于电阻天然的耗散属性, 在电路中引入非厄米最自然且最简单的方式就是加入电阻. 根据电路的拉普拉斯形式, 在电路中添加电阻或等效的负电阻可以模拟非厄米格点模型中的损耗或增益, 使得 $i\mathcal{J} \neq (i\mathcal{J})^\dagger$. 具体地, 由 (16) 式和 (17) 式可知, 节点对地的电阻 R_{ng} 使 $i\mathcal{J}$ 的对角元产生虚部, 可以模拟格点的复在位势; 节点间的电阻 R_{nm} 则会在对角元和非对角元上同时引入虚部, 额外模拟格点间的复跃迁 [118].

由此可知, 电阻的引入产生损耗, 但如要产生增益, 需引入等效的负电阻. 文献 [133] 给出了利用运算放大器 (简称运放) 实现一般负阻抗 (负电阻是其特殊情况) 的方案, 如图 5(a) 所示, 其中包括对地端口 (上) 和两端口间 (下) 的负阻抗方案,

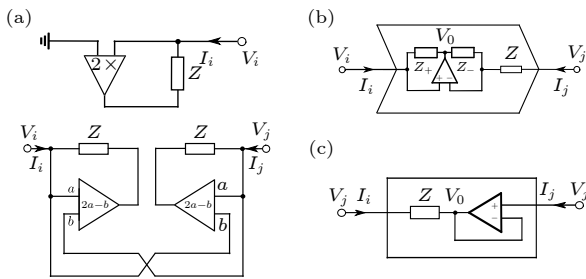


图 5 (a) 负阻抗的电路原理图 [133], 上下图分别表示对地端口和自由双端口的情况; (b) INIC 的电路原理图 [137]; (c) 电压跟随器的电路原理图 [136]. 以上所用运放的等效增益函数可用加法器和乘法器实现

Fig. 5. (a) The schematic circuit for negative impedance [133], where the upper and lower panels represent the one-port and two-port cases, respectively; (b) the schematic circuit for INIC [137]; (c) the schematic circuit for a voltage follower [136]. The equivalent gain functions of the operational amplifiers used above can be implemented using adders and multipliers.

其阻抗值可由基尔霍夫电流定律分别求得

$$Z_{ig} \equiv \frac{V_i}{I_i} = -Z, \quad Z_{ij} \equiv \frac{V_i - V_j}{I_i} = -Z = Z_{ji}, \quad (30)$$

其中, Z 为需要变负值的目标阻抗. 图中运放的等效增益函数可用简单的加法器和乘法器实现. 应用负电阻的典型实例是对 PT 对称破缺的电路模拟 [113,134,135].

3.2.2 非互易跃迁

相比于增益/损耗, 非互易跃迁的实现更具有挑战性. 在交流源的驱动下, 被动元件 (如电阻、电容和电感) 的阻抗/导纳值都与测量方向无关, 即被动元件是互易的 (reciprocal). 为了使电路元件具有非互易性, 从而实现对格点间非互易跃迁的模拟, 必须引入主动元件打破其互易性.

实验上常见的方案是使用电流型负阻抗变换器 (negative impedance converter with current inversion, INIC) [136], 它由运放和若干线性元件组成, 其原理如图 5(b) 所示. 由基尔霍夫定律易得

$$\begin{pmatrix} I_i \\ I_j \end{pmatrix} = Z^{-1} \begin{pmatrix} -\beta & \beta \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_i \\ V_j \end{pmatrix}, \quad (31)$$

其中 $\beta = Z_-/Z_+$. 当 $\beta = 1$ 时, 不同端口测量的导纳反号, 即 $Y_{ij} \equiv Z_{ij}^{-1} = I_i/(V_i - V_j) = -Z^{-1} = -Y_{ji}$. 将此 INIC 与被动元件 X (设导纳为 Y_X) 并联后再置于节点间, 便实现非互易跃迁的效果, 即 $Y'_{ij} = Y_X - Z^{-1}$ 和 $Y'_{ji} = Y_X + Z^{-1}$. 在用经典电路模拟格点模型方面, INIC 最早用于打破时间反演对称性 [137], 之后被应用到模拟具有非互易跃迁的非厄米格点模型的实验中, 观测到了与非厄米趋肤效应相关的现象 [41,119,121,123,125,128,138]. 当 INIC 对地连接时, 其效果与负电阻类似, 也常被用作模拟具有复在位势能的非厄米模型 [74,114,122].

此外, 电压跟随器 (voltage follower) [136] 也可以用来实现非互易跃迁, 如图 5(c) 所示. 根据理想运放正负两输入端口的电压相同的特点, 当负输入端口与输出端口相连时, 输出端口的电压 V_o 则与正输入端口的电压 V_j 相同, 从而实现电压跟随. 由此可得, $Y_{ij} = I_i/(V_i - V_j) = Z^{-1}$. 又由于理想运放的输入阻抗趋于无穷大, 导致 $I_j \sim 0$, 所以 $Y_{ji} = I_j/(V_j - V_i) \sim 0$. 显然, $Y_{ij} \neq Y_{ji}$. 将电压跟随器与被动元件并联同样能实现非互易跃迁的效果 [124,139], 尤其是对单向跃迁 (unidirectional hopping) 的实现 [129], 相比 INIC 更为简单.

3.3 经典电路中物理量的测量与表征

建立好经典电路对非厄米格点模型的映射后,则需要考虑如何通过电路测量反映模型中的物理性质.在非厄米系统中,大家主要关心的是复能谱和本征态以及由它们所构造的各种物理量等静态性质,或者是量子态演化等动力学性质.因此,本节将概述经典电路实验中常用的测量方法与物理量之间的对应.

3.3.1 导纳矩阵

根据电路的拉普拉斯形式,测量出导纳谱 $\{j_n\}$ 便可得到相应格点模型能谱 $\{E_n\}$ 的信息.但导纳谱通常无法被直接测量,因为根据导纳矩阵的定义 (17) 式,节点电压 \mathcal{V} 对节点输入电流 \mathcal{I} 的响应直接反映的是电路格林函数 \mathcal{G} .所以,可以先测出电路格林函数,再根据 $\mathcal{J} = \mathcal{G}^{-1}$ 得到导纳矩阵,进而将其对角化得到导纳谱.

下面介绍如何测量电路格林函数.假设电路有 N 个节点,如果仅在第 j 节点注入频率为 ω 的交变电流 $I_j e^{i\omega t}$,由 $\mathcal{V} = \mathcal{G}\mathcal{I}$ 可得稳态响应电压的幅矢量为

$$\mathcal{V} = \mathcal{G} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ I_j \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{1j} \\ \vdots \\ \mathcal{G}_{Nj} \end{pmatrix} I_j. \quad (32)$$

于是通过测量每个节点的稳态电压幅 V_i ,便可得到电路格林函数第 j 列的矩阵元 $\mathcal{G}_{ij} = V_i/I_j$.当以相同的频率对电路中所有节点遍历上述电流驱动,利用频谱分析仪测量每次驱动下所有节点的稳态电压幅,即可完全重构电路格林函数,进而得到导纳矩阵 [38].这个过程所需要的总的测量次数为 N^2 .而对于具有平移不变性的周期性电路而言,仅需遍历一个电路原胞即可,测量次数可以减少到 N^2/N_c ,其中 N_c 表示原胞数 [41].将得到的导纳矩阵 \mathcal{J} 对角化,便可得到本征值 j_n 和左右本征矢 $v_n^{(l,r)}$ 以及由它们所构成的其他静态物理量;本征频率 $\tilde{\omega}$ 也可以通过 $\det[\mathcal{J}(\tilde{\omega})] = 0$ 得到.

在实验中更高效的方法是,利用矢量网络分析仪 (vector network analyzer, VNA) 对电路各节点的散射信号进行扫描,再将包含散射信息的 S 参数矩

阵 (S-parameter matrix) 变换到导纳矩阵,便可计算出电路的导纳谱和本征频率谱 [114,115,130,132,134,139–142].

另外,如果仅是定性地表征导纳矩阵本征矢的特性,也可以直接测量各个节点对交变电流的电压响应 [41].根据下式

$$\mathcal{V} = \mathcal{G}\mathcal{I} = \sum_n j_n^{-1} v_n^{(r)} \left[v_n^{(l)*} \mathcal{I} \right] \quad (33)$$

可知,电压响应 \mathcal{V} 是所有导纳矩阵右本征矢的某种线性叠加.据此可以从电压在节点间的分布粗略判断系统是否发生类似非厄米趋肤效应或安德森局域化的现象 [117].

3.3.2 两点间阻抗

电路实验中也经常通过测量两点间阻抗 (two-point impedance) 来表征所关心的模拟量的性质.节点 i 到 j 的阻抗 Z_{ij} 可以通过输入交变电流 $I_i e^{i\omega t}$ 并测量两节点的响应电压 $V_i e^{i\omega t}$ 和 $V_j e^{i\omega t}$ 得到.利用 (20) 式中导纳矩阵 \mathcal{J} 的本征值 j_n 和本征矢 $v_n^{(l,r)}$,可以将两点间阻抗表示为 [143]

$$\begin{aligned} Z_{ij} &\equiv \frac{V_i - V_j}{I_i} = \sum_k \frac{\mathcal{G}_{ik} I_k - \mathcal{G}_{jk} I_k}{I_i} \\ &= \sum_n \frac{[v_{ni}^{(l)*} + v_{nj}^{(l)*} I_j/I_i] [v_{ni}^{(r)} - v_{nj}^{(r)}]}{j_n}. \end{aligned} \quad (34)$$

其中, $v_{ni}^{(l,r)}$ 代表 $v_n^{(l,r)}$ 的第 i 个矩阵元. (34) 式说明,当驱动频率 ω 接近电路的某个本征频率 $\tilde{\omega}$ 时,阻抗 Z_{ij} 将由值很小的 $j_n(\omega \sim \tilde{\omega})$ 项主导从而趋于发散,即 $Z_{ij}(\omega)$ 在 $\tilde{\omega}$ 处出现共振峰.更简单的方案是测量对地阻抗,即令 (34) 式中的 $v_{ng}^{(l,r)} = 0$,可得

$$Z_{ig} \equiv \frac{V_i}{I_i} = \sum_n j_n^{-1} v_{ni}^{(l)*} v_{ni}^{(r)}. \quad (35)$$

这样可以通过对每个节点扫频测得两点间阻抗的共振峰的位置,从而确定电路的本征频率谱.固定本征频率 $\tilde{\omega}$,测量对地阻抗 $Z_{ig}(\tilde{\omega})$ 随节点 i 的变化也反映了导纳本征矢 $v_{ni}^{(l,r)}(\tilde{\omega})$ (即电路的本征电压) 在节点间的分布特点,常被应用于拓扑边缘态和非厄米趋肤效应 [35,74,119,128,144,145] 以及高阶拓角态 [126,127,146] 的测量.不过需要注意的是,本方法只适用于本征频率谱为近实谱 (即本征频率的虚部很小) 的情况,因为扫描频率 ω 只能是实数.

3.3.3 动力学

前两种测量主要模拟的是格点模型的静态性

质, 对于动力学性质的模拟, 可直接利用电路的刘维尔方程 (23)^[131,137,147] 或耦合模方程 (28)^[114,115,130], 类比格点模型的含时薛定谔方程. 此类测量非常简单, 只要按模拟需求给电路各节点注入相应的初始电压或电流, 随后测量其随时间的变化即可.

利用动力学也能验证格点模型的部分静态性质. 比如利用导纳矩阵根据 $\det[\mathcal{J}(\tilde{\omega})] = 0$ 已得到了系统的本征频率 $\tilde{\omega}$ (一般为复数), 通过动力学的办法可以观测到此本征频率且判断其正确性. 方法是, 将与本征频率 $\tilde{\omega}$ 相应的本征电压 v_0 设为电路的初态, 随后撤掉外部源, 则初态将会按照刘维尔方程 (23) 进行演化, 其任意时刻的电压应满足:

$$V(t) = v_0 e^{i\tilde{\omega}t} = v_0 e^{-\text{Im}(\tilde{\omega})t} e^{i\text{Re}(\tilde{\omega})t}. \quad (36)$$

因此, 可根据电压随时间的振荡频率和幅值的放大/衰减程度分别拟合出本征频率 $\tilde{\omega}$ 的实部和虚部, 与理论相比较^[122,135,148].

虽然电压的动力学行为并不是遵从于导纳矩阵 $\mathcal{J}(\tilde{\omega})$ 的本征值 $j_n(\tilde{\omega})$, 而是依赖于本征频率 $\tilde{\omega}$, 但是由于本征频率谱与导纳谱结构上的相似性, 可以用本征电压的动力学定性的反映导纳矩阵本征矢的动力学, 进而模拟相关的行为, 例如拓扑边缘态和非厄米趋肤效应的动力学行为^[137,147] 以及场相干的演化^[127] 等.

4 经典电路模拟非厄米格点模型的实验进展

目前, 人们利用经典电路在实验上已经成功模拟和观测了非厄米格点模型的许多性质. 本节将

从 PT 对称破缺、多种非厄米趋肤效应、其他非厄米拓扑态以及 EP 在传感器上的应用这 4 个方面介绍相关的实验进展.

4.1 PT 对称破缺

PT 对称破缺是非厄米系统所独有的现象. 在经典电路实验中, 人们将增益电路与损耗电路耦合形成二聚体 (dimer) 电路^[113,133,135,148] 或者在二聚体电路中进一步添加一个中性电路构成的三聚体 (trimer) 电路^[130,141], 观测电路的本征频率谱随增益/损耗强度的变化, 从而对 PT 对称破缺进行研究. 本节将从不同的电路模型出发对相关实验进展进行介绍.

最早在电路平台上研究 PT 对称破缺的是 Schindler 等^[113]. 他们在 2011 年设计了一个由一对 RLC 电路耦合形成的二聚体电路 [图 6(a)]^[133], 其中增益和损耗部分分别由接地运放和电阻实现. 他们根据基尔霍夫定律写出描述电量和电流变化的刘维尔方程 (23) 式, 建立起与含时薛定谔方程的对应关系, 在实验上观测本征频率随增益/损耗强度的变化. 如图 6(b) 所示, 在 $\gamma/\gamma_{PT} > 1$ 时, 观测到复本征频率出现, 对应于 PT 对称破缺. 2017 年, 该研究组^[148] 基于 Floquet 理论对一系列由 EP 分隔开的 PT 对称相与 PT 对称破缺相进行了研究. 他们在增益电路中用光电池 (photocell) 连接金属-氧化物场效应晶体管 (MOSFET) 的源极与电感, 并将 MOSFET 的漏极接入振荡电路. 当光电池两端的电压降低时, 其电流会流入电路, 从而实现增益. 在损耗电路中使用接地的光电池连接电感,

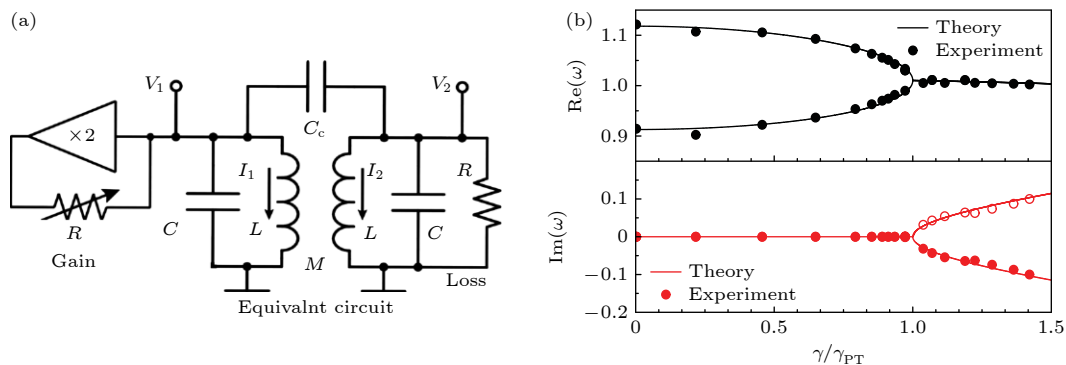


图 6 (a) PT 对称的二聚体电路, 电路中的增益和损耗部分通过电容或互感耦合; (b) 实验测量的本征频率随着增益/损耗参数 γ/γ_{PT} 的变换, 在 $\gamma/\gamma_{PT} = 1$ 时发生 PT 对称破缺. 图来源于文献 [113], 版权属于美国物理学会

Fig. 6. (a) Circuit diagram of a PT-symmetric dimer, where the gain and loss parts are capacitively or inductively coupled; (b) experimentally measured eigenfrequencies versus the gain/loss parameter γ/γ_{PT} , where the PT symmetry breaking occurs at $\gamma/\gamma_{PT} = 1$. All figures are adapted from Ref.[113] with the copyright © 2011 by the American Physical Society.

其电流由于接地会耗散, 从而实现损耗. 利用变容二极管 (varactor diode) 耦合增益电路与损耗电路, 实现对电路耦合强度的控制.

2020年, Wang等^[135]利用接地的 INIC 实现等效负阻抗, 搭建了由两个 RLC 回路组成的对称二聚体电路, 在频谱中观测到一阶和二阶 EP 以及 PT 对称相和 PT 对称破缺相. 次年, Zhou等^[115]同样搭建了由两个 RLC 回路耦合的二聚体电路, 基于耦合模理论 (25) 式对格点模型进行模拟, 研究了微扰对 PT 对称系统的影响. 实验将 VNA 的输入端连接到电路实现等效的负阻抗, 同时将另一端连接到读取器 (reader) 中测量频率. VNA 自身带有阻抗, 连接输入源端口到闭合回路中可以输入电能, 在电路中可以起到增益的作用.

随着人们对于 PT 对称认识的加深, 对其模拟的电路平台不仅局限于二聚体电路. 三聚体电路由于中性电路的加入具有更强的可扩展性, 同样重要的模拟平台. 2019年, Sakhdari等^[141]在原来的二聚体电路之间添加了一个 LC 振荡电路, 并利用 VNA 实现等效负阻抗并同时进行频率测量. 他们比较了二聚体与三聚体电路的实验结果, 观测到三聚体频谱中接近发散 EP (divergent exceptional points, DEP) 的频率偏移程度较二聚体更大. 2023年, Yin等^[130]采用了与 Zhou等^[115]类似的方法, 利用 VNA 同时实现负阻抗与测量, 构建了一个由 3 个 RLC 回路耦合的三聚体电路, 并观测到环绕周期为 3 的三阶 EP.

除了二聚体或三聚体电路之外, 2021年, Stegmaier等^[120]构建了一个类 SSH 模型的电路来研究 PT 对称性. 他们根据电路的拉普拉斯形式 (17) 式, 利用导纳矩阵建立起电路与格点模型之间的对应关系. 他们在电路的每个节点上添加接地电阻以实现格点上的增益和损耗, 并测量了不同增益和损耗强度下的导纳谱. 通过这些测量, 他们观察到了 PT 对称、PT 对称破缺和反 PT 对称这 3 种情况. 该实验为研究 PT 对称破缺提供了一个新的平台, 并为进一步将 EP 应用在传感器上提供了新的思路.

4.2 多种非厄米趋肤效应

非互易跃迁往往可以诱导出非厄米趋肤效应, 从而导致传统体边对应关系的失效. 在经典电路的实验中, 研究者们通常在电路节点间加入 INIC^[41,74,121,123,127,138,145,146] 或电压跟随器^[119,124,129]

等主动元件实现对非互易跃迁的模拟, 通过电路中电压响应的分布观测非厄米趋肤效应. 目前, 利用经典电路已实现对非厄米系统中多种非厄米趋肤效应及相关奇异现象的研究和模拟, 包括一维非厄米趋肤效应和传统体边对应关系的失效^[41,119]、非布洛赫波的演化和广义布里渊区^[127]、高维非厄米趋肤效应^[118]、高阶非厄米趋肤效应^[121,124,128]、多体非厄米趋肤效应^[123]、临界非厄米趋肤效应^[125]以及尺寸依赖的非厄米趋肤效应^[129]等.

2020年, Helbig等^[41]首次在电路实验中观测到传统体边对应关系的失效与非厄米趋肤效应的出现. 他们研究了一维非厄米 SSH 模型, 在电路节点间加入 INIC 实现对等效的非互易跃迁的模拟, 并通过电路的拉普拉斯形式 (17) 式建立起导纳矩阵与 SSH 模型的对应关系. 他们利用测量节点电压响应的方法 (33) 式, 对电路中所有节点施加了电流驱动, 测量各节点上的电压响应, 观测到节点上的电压响应局域在电路的一侧边界, 即在该电路中实现了非厄米趋肤效应. 次年, Liu等^[119]利用电压跟随器构建了具有非互易跃迁的 SSH 电路. 他们观察到由传统体边对应关系失效引起的电路本征频率谱的变化. 与此同时, 他们基于广义布里渊区的理论对能量缠绕数 (13) 式进行了计算, 验证了这种新的体边对应关系.

非厄米趋肤效应本质上是一种非布洛赫效应. 在经典电路平台上研究者们已经实现了非布洛赫波的演化及对广义布里渊区的验证. 2023年, Wu等^[127]构建了如图 7(a) 所示的二维电路来观测非布洛赫动力学. 实验中, 他们利用 INIC 实现了格点间等效的非互易跃迁, 利用傅里叶变换场扫描 (Fourier-transformed field scan) 的方法对节点的电压分布进行测量, 将其进行拉普拉斯变换 (Laplace transform) 后得到在广义布里渊区的分布 [图 7(b)], 结果与理论一致. 由此验证了广义布里渊区在描述非布洛赫动力学上的有效性.

人们在经典电路实验里还研究了更多影响非厄米趋肤效应的因素. 2022年, Zhang等^[125]研究了一个由两条 Hatano-Nelson 链耦合成的类梯子模型. 他们在实验中测量了在开边界和周期边界条件下各节点的阻抗, 发现当节点数增多到一定程度时, 周期边界的阻抗与开边界的阻抗比值明显大于 1, 进一步表明边界连接对远距离的阻抗响应应具有非局域的影响, 即具有临界非厄米趋肤效应.

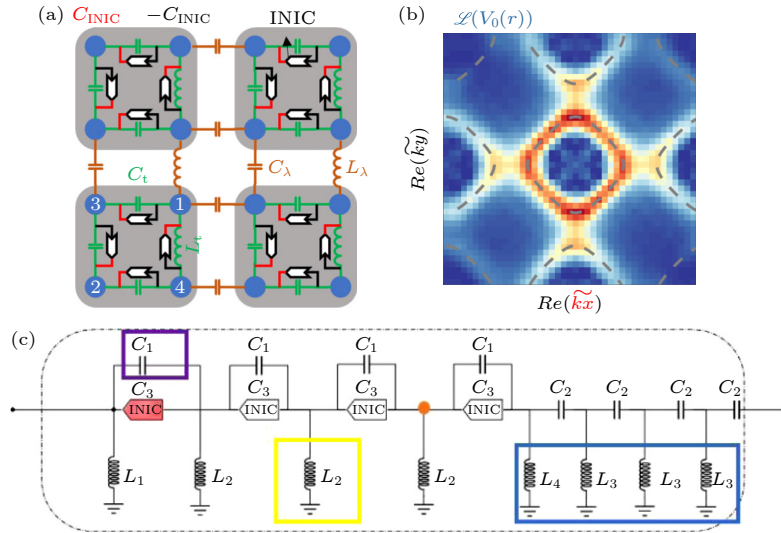


图 7 (a) 非布洛赫演化的拓扑电路; (b) 实验测得的电压分布经拉普拉斯变换后在广义布里渊区中的等频分布; (c) 四次方根非厄米 SSH 模型的电路图. 图 (a) 和 (b) 来源于文献 [127], 图 (c) 来源于文献 [145]. 版权属于美国物理学会

Fig. 7. (a) Topological circuit for the non-Bloch dynamics; (b) the isofrequency contour of the measured voltage distribution through the Laplace transform in the GBZ; (c) circuit diagram of a 4th-root non-Hermitian SSH model. Subfigures (a) and (b) are adapted from Ref. [127], and Figure (c) from Ref. [145]. Copyright © 2023 and 2022 by the American Physical Society.

2023 年, Su 等^[129]在电路平台上对单向跃迁的格点模型进行了研究. 他们利用电压跟随器在电路中模拟单向跃迁, 并在不同的节点数量下测量了导纳谱研究发现随着节点数目的增多, 集中在一侧的局域化程度会降低, 实现了对尺寸依赖的非厄米趋肤效应的观测. 同年, 他们也非厄米趋肤效应与安德森局域化之间的竞争进行了研究^[149]. 实验仅采用了线性元件, 通过赋予元件幂指数变化的参数值以模拟格点间的非互易跃迁, 成功实现了非厄米趋肤效应. 在引入准无序后成功观测到非厄米趋肤效应与安德森局域化的竞争, 发现当无序强度足够大时, 本征态从非厄米趋肤相转变为局域相. 类似地, Tang 等^[146]基于二维非互易蜂窝 (honeycomb) 电路对非厄米趋肤效应与角态之间的竞争关系进行了研究. 实验中, 他们通过调整 INIC 里电容的大小以改变非互易强度, 并对电路节点的电压响应进行测量, 发现随着非互易强度的增强, 节点电压会从电路两端逐渐转移到同一端, 呈现出角态的特征.

随着对非厄米趋肤效应研究的不断深入以及经典电路模拟方法的不断发展, 研究者们开始将对非厄米趋肤效应的经典电路模拟推向高维、高阶以及多体等更为复杂的系统. 2021 年, Zou 等^[121]基于电路的拉普拉斯形式 (17) 式, 分别建立了电路的导纳矩阵与二维格点模型以及三维格点模型之间

的对应关系. 对杂化高阶拓扑趋肤效应 (hybrid higher-order topological skin effect) 进行了研究. 杂化高阶拓扑趋肤效应是在高维系统中, 由非厄米趋肤效应以及拓扑局域态相互影响所形成的一种拓扑现象^[150]. 实验中, 他们在电路耦合处引入 INIC 实现等效的非互易跃迁, 继而测量各节点上的电压响应分布, 通过调整 INIC 的连接方向实现不同的杂化方式, 观测到二阶杂化趋肤-拓扑效应 (即电压集中分布在二维平面中的一组对角节点)、二阶杂化趋肤-趋肤效应 (即电压分布在二维平面中的其中一个角节点上)、三阶杂化趋肤-趋肤-趋肤效应 (即电压集中分布在三维立体中的角节点上) 以及三阶杂化趋肤-拓扑-拓扑效应 (即电压分布在一对平面上的对角节点上). 2022 年, Deng 等^[145]研究了一个一维 N 次方根非厄米 SSH 模型 [图 7(c)], 其中 N 的大小可以通过调整原胞内电容电感等元器件的数目实现. 实验中, 他们选择了不同的 N 对节点电压进行测量, 观测到电压分布集中在电路节点的一侧, 即出现了非厄米趋肤效应, 并发现非厄米趋肤效应随 N 的增大变得更加明显. 同年, 他们还对一个一维三粒子 Bose-Hubbard 模型进行了研究^[123]. 他们将此模型的本征态在希尔伯特空间中重新表示为 Fock 态的形式后, 写出系统的薛定谔方程, 并根据基尔霍夫定律直接构造电路模拟该薛定谔方程. 该团队测量了节点上的阻抗分布, 发现

阻抗值集中在一个节点上, 观察到了多体系统中由阻抗表征的非厄米趋肤效应, 这被称为非厄米聚集效应 (non-Hermitian aggregation effect). 2023 年, 他们在三维电路系统中基于 INIC 设计了一个拓扑开关, 也可以用于研究非厄米趋肤效应^[138].

2022 年, Shang 等^[124] 研究了一个二维的非互易格点模型, 他们在实验中计算了二维的非布洛赫能量缠绕数, 发现由其表征的二阶非厄米趋肤效应. 2023 年, Zhu 等^[126] 构建了一个具有二阶手性的二维电路. 他们利用标准电阻引入非厄米项, 重构电路格林函数以测量每个节点的电压响应, 观测到阻抗的响应集中在边界局域态上, 展示了二维二阶非厄米趋肤效应.

基于经典电路平台同样可以实现互易非厄米趋肤效应. 2020 年, Hofmann 等^[118] 通过在二维电路中的对角节点连接电阻引入非厄米, 研究了一个具有 π -通量的格点模型. 实验中, 他们测量并计算了导纳矩阵本征矢 [由 (20) 式定义] 的倒参与率 (inverse participation ratio), 对动量空间中 k_y 方向上的局域态进行了研究, 观察到在 $k_y = \pi/2$, $k_y = 3\pi/2$ 处的局域化程度最高, 与理论预测的非厄米 π -通量模型呈现出互易趋肤效应时的特征相同.

4.3 其他非厄米拓扑态

在用经典电路模拟非厄米趋肤效应的同时, 人们也对其他非厄米拓扑物态进行了模拟, 包括单纯由增益/耗损诱导的非厄米拓扑态^[74]、非厄米连续谱中的束缚态 (bound state in the continuum)^[144]、杂化高阶趋肤拓扑态^[121]、高阶拓扑角态^[122,127]、 N 次方根拓扑相^[145]、二阶手性系统中的拓扑态及动力学^[126]、非厄米拓扑开关^[138] 以及非厄米 Hopf 束^[128] 等.

2020 年, Liu 等^[74] 首次实现了单纯由增益/损耗诱导的一维非厄米拓扑模型 [图 8(a)]. 他们在电路 [图 8(b)] 中引入 INIC 实现等效负电阻, 通过调控接地电阻 R_0 以及代表增益 (损耗) 的正 (负) 电阻 R_1 (R_2), 可观测到不同的拓扑相. 同年, Li 等^[144] 利用电路研究了一个由两条 SSH 链耦合构成的梯子模型, 在两条链之间引入耦合电阻使其变成非厄米模型. 实验中, 他们测量了特定节点上的阻抗随输入频率的变化, 发现阻抗的峰值处于特定频率, 对应于非厄米连续谱中的束缚态.

2021 年, Zou 等^[121] 设计了一个二维格点模型, 对杂化二阶趋肤-拓扑态进行了研究. 实验中, 他们设计了 3 种不同的 INIC, 并通过改变节点间 INIC 的连接方向实现对趋肤-趋肤和趋肤-拓扑两种态的模拟. 通过测量不同输入频率下电路节点的电压响应, 观测到在杂化二阶趋肤-拓扑或趋肤-趋肤情况下的角态、边缘态以及体态. 杂化趋肤-拓扑态可被用于拓扑开关的设计上^[151], 可以通过控制电路内的能量传递实现对趋肤效应的“开关”^[121]. 2023 年, Zhang 等^[138] 在电路实验中实现拓扑开关. 他们在节点间连接 INIC 实现对非互易跃迁的模拟, 观测到在三维系统中趋肤-拓扑-趋肤效应以及趋肤-拓扑-拓扑效应之间的转变, 表明利用 INIC 设计拓扑开关的可行性.

2022 年, Wu 等^[43] 在研究非厄米二维电路的基础上, 设计了一个模拟二阶拓扑绝缘体的二维拓扑电路 [图 9(a)]^[122]. 实验中, 他们通过电阻引入非厄米项, 并调整两种电阻的大小关系以诱导不同的拓扑态. 通过对电路本征频率以及节点电压响应的测量, 他们观察到带隙中的一维边缘态 [图 9(b)] 以及零维角态 [图 9(c)]. 此外, 他们还测量了在电路的角态、边缘态和体态的阻抗响应随驱动频率的变化 [图 9(d)].

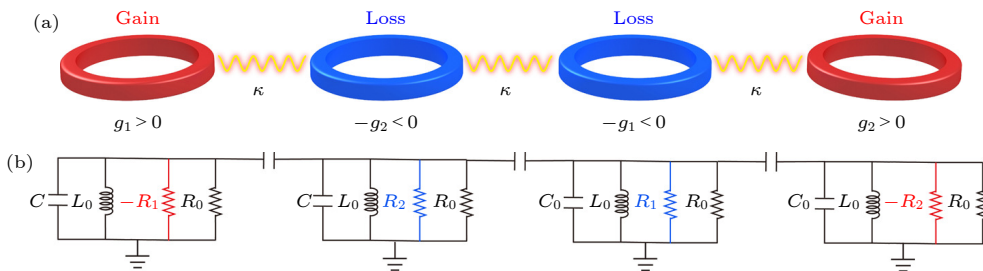


图 8 (a) 单纯由增益/损耗诱导的非厄米拓扑模型; (b) 实现 (a) 中模型的电路图. 图均来源于文献 [74], 版权属于美国物理学会 Fig. 8. (a) A non-Hermitian topological model whose topology is purely induced by gain/loss; (b) circuit diagram for the realization of the model in (a). All figures are adapted from Ref.[74] with the copyright © 2020 by the American Physical Society.

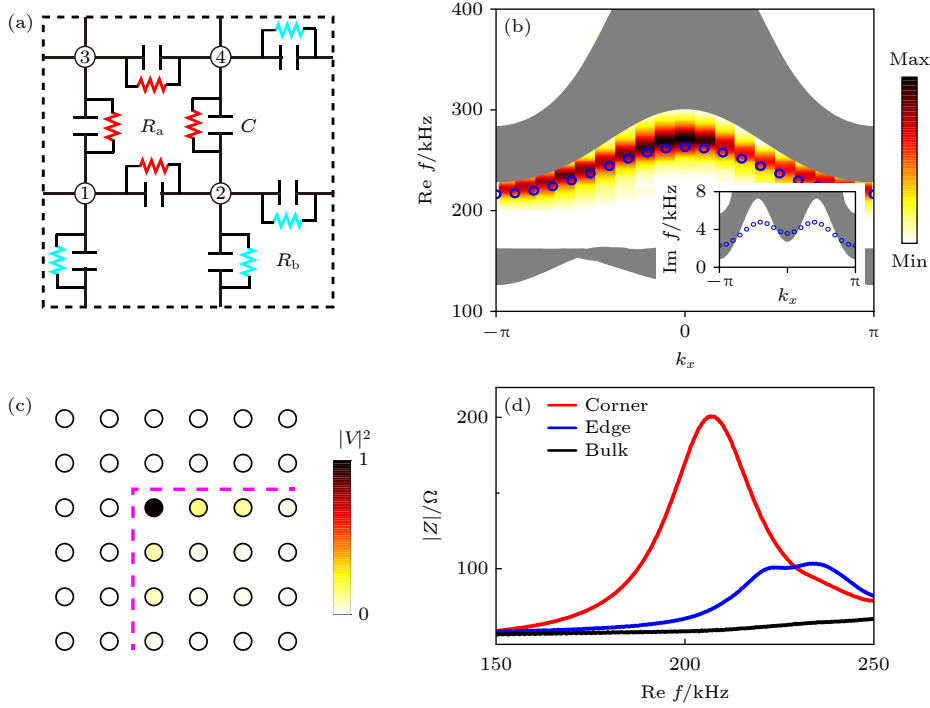


图 9 (a) 非厄米二阶拓扑电路的原胞示意图; (b) 能隙间的一维边缘态, 彩色和圆圈分别表示实验测量和理论计算的结果; (c) 实验测量的零维角态的电压分布; (d) 实验测量的角态、边缘态和体态的阻抗响应随驱动频率的变化. 图均来源于文献 [122], 版权属于美国物理学会

Fig. 9. (a) Circuit diagram of a unit cell of the non-Hermitian second-order topological electric circuit; (b) one-dimensional gapped edge states, where the color map and the blue circles represent the data from the experiment and the theoretical calculation, respectively; (c) experimental voltage distributions of the zeroth dimensional corner states; (d) experimental impedance responses of corner states, edge states, and bulk states to the driving frequency. All figures are adapted from Ref. [122] with the copyright © 2022 by the American Physical Society.

2023 年, Zhu 等 [126] 构建了一个具有二阶手性的二维电路. 他们利用标准电阻引入非厄米项, 观测到阻抗响应局域在电路节点平面的角、边和体三种情况, 分别表征二阶手性二维格点模型中的角态、边缘态和体态.

4.4 EP 在传感器上的应用

EP 在传感器上的应用与 PT 对称破缺的实验研究密切相关. 实现 EP 传感器的电路一般也采取 PT 对称二聚体电路 [114,115,132,140,142] 或三聚体电路 [116,152] 的结构. 实验中通常采用测得的反射谱 (reflection spectra) 来对传感器的灵敏度进行表征 [116,132,140,142,152], 反射谱的响应越大, 即反射谱曲线中波谷所处位置越深 [图 10(b)], 传感器越灵敏.

2018 年, Chen 等 [140] 成功将 EP 应用于无线压力传感器 (wireless pressure sensor) 中, 该传感器通过电容的阻值对压力进行表征. 在增益电路中, 他们改用了可以调参的电感与损耗电路进行耦合, 由此实现了更一般情况下的 PTX 对称电路,

这里的 X 表示一种互易的标度操作 (reciprocal-scaling operation). 实验中, 他们选择 EP 附近和非 EP 处的多个不同耦合强度来对反射谱进行测量与对比, 观测到在相同频段内, 选在 EP 附近的耦合强度, 反射会更强, 由此表明 EP 可以增强传感器的灵敏度. 在实际压力传感测试中, 实验人员利用 VNA 分别对 PTX 电路、PT 电路以及未应用 EP 的普通传感器的反射谱进行了测量, 在相同的频段内, PTX 电路和 PT 电路都可以增强反射. 由于 PTX 电路相比于 PT 电路具有不同的电路特征模式, 可以放大特定频率的反射系数, 具有更大的操作空间.

2019 年, Dong 等 [114] 在动物表皮层植入用于测量生物体征 (压力, 温度等) 的传感器, 并利用读取器对感应频率的偏移进行了测量, 通过频率偏移变化曲线对测量的物理量进行表征. 实验观测到, 随耦合强度变化的频率偏移在 EP 附近明显增高. 该团队将基于 EP 设计的传感器的灵敏度提升至当时极限的 3.2 倍. 2020 年, Zhou 等 [132] 比较了传

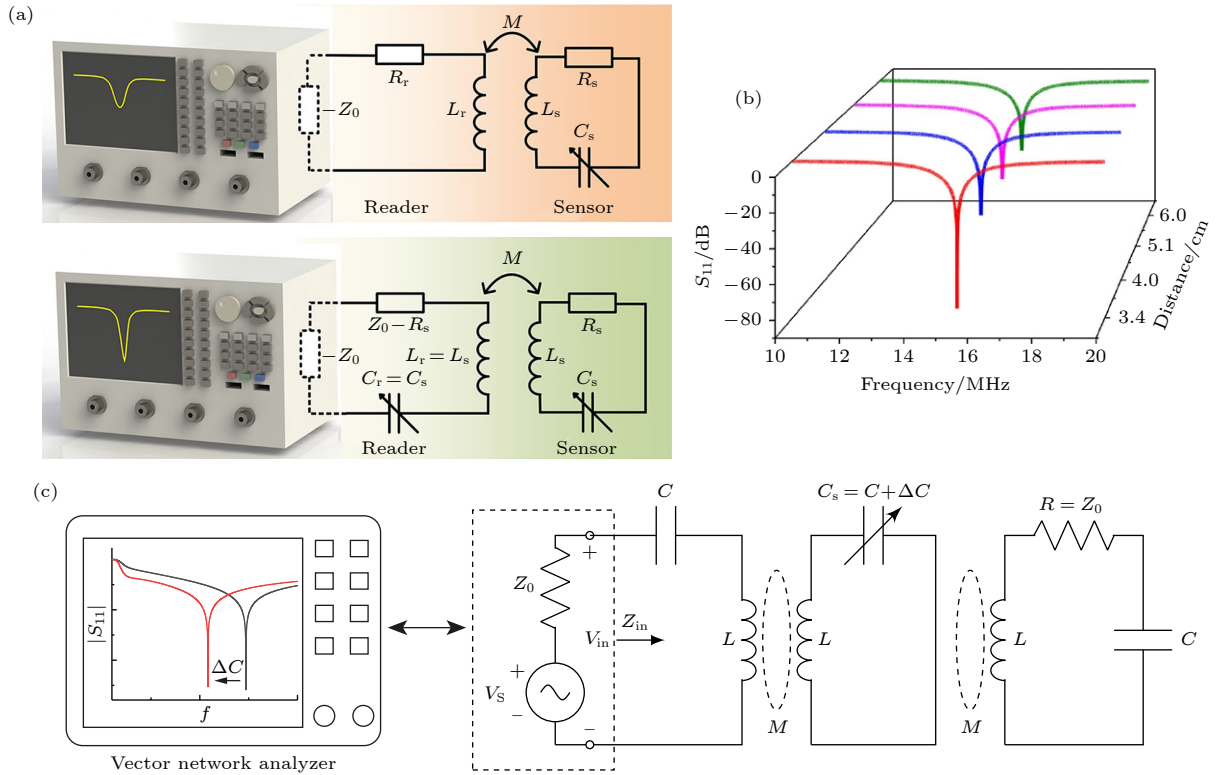


图 10 (a) 传统的被动无线传感器与基于 PT 对称性的被动无线传感器的电路图; (b) 基于 PT 对称性的被动无线传感器的反射谱的测量结果; (c) 具有 PT 对称性的三阶无线传感器的电路图. 图 (a) 和 (b) 来源于文献 [132], 图 (c) 来源于文献 [152], 版权属于美国物理学会

Fig. 10. (a) Circuit diagrams of a conventional passive wireless sensor and a PT-symmetry-based passive wireless sensor; (b) measured reflection spectra for the PT-symmetry-based passive wireless sensor; (c) circuit diagram of a PT symmetric third-order wireless sensing system. Subfigures (a) and (b) are adapted from Ref. [132] and subfigure (c) from Ref. [152], with copyright © 2020 and 2022 by the American Physical Society.

统的被动无线传感器与基于 PT 对称性的被动无线传感器在灵敏度上的差别 [图 10(a)], 根据实验中 VNA 测得的反射谱 [图 10(b)], 在增大传感器距离的同时, 响应仍然能够保持在较强的范围内, 即 EP 可提升传感器的控制距离. 2021 年, Zeng 等 [116] 将三阶 EP 应用到传感器中, 设计了一个三线圈耦合的电路. 与二阶 EP 传感器相比, 实验测得的反射谱反映出高阶 EP 对灵敏度的增强更为显著. 2022 年, Yin 等 [142] 利用运放在增益侧实现了等效的负阻抗, 进而设计了一个不需要引入 VNA 的无线传感器. 得益于运放的非线性饱和效应, 该传感器可以通过观测读取器对电容的阻值进行实时读出. 同年, 他们在二聚体电路的基础上加入了一个由电感与可变电容构成的振荡电路, 设计了一个三聚体电路 [图 10(c)] [152]. 相比于二聚体电路, 三聚体电路测得的反射谱具有更强的响应. 选取多组阻值的电容进行实验, 三聚体电路测得的反射谱稳定在较强的响应区间, 比二聚体电路具有更高的品质

因子 (Q factor).

SSH 电路同样可应用在 EP 传感器上. 2023 年, Yuan 等 [139] 在实验上采用具有非互易跃迁的 SSH 模型作为平台设计传感器, 原胞内通过电压跟随器实现格点间的非互易跃迁. 该传感器根据电容的阻值以及测得的频率偏移可以对位置、角度以及水位变化高度等物理量进行表征.

非厄米系统中的增益和损耗不可避免地会引入噪声 [153]. 最近, 研究者们注意到在利用 EP 传感器进行信号放大的过程中往往伴随着噪声的增强, 因此亟待解决的问题是如何提高 EP 传感器的信噪比. 噪声增强的来源可分为两种: 一是物理上的, 来源于产生 EP 过程中本征矢的重合; 另一种是技术上的, 来源于 EP 传感器实现中的放大机制 [154]. 物理学家尝试从多个角度解决噪声对 EP 传感器的影响. 理论上, Langbein [155] 在 2018 年讨论了 EP 传感器的量子有限信噪比与扰动, Zhang 等 [153] 在 2019 年提出计算 EP 传感器信噪比的量子噪声

理论; 实验上, Kononchuk 等^[154]在 2022 年设计了 PT 对称式的机电 EP 传感器等.

5 总结

本文通过简单介绍非厄米物理的基本理论和新奇现象, 结合经典电路模拟的理论基础, 概述了当下经典电路模拟非厄米格点模型的实验进展. 目前的实验进展主要涵盖对 PT 对称破缺、非厄米趋肤效应以及各类新奇非厄米拓扑物态的经典电路模拟. 实验的模拟对象也从简单的一维单体格点模型逐渐推广至高维多体等更复杂的格点模型. 此外, 基于经典电路对非厄米新奇效应的应用也是重要的研究方向, 比如高灵敏度的 EP 传感器等. 相比于量子模拟平台的高技术门槛, 经典电路的低成本、易扩展等特点使其成为模拟和研究丰富的非厄米新奇现象的首选平台, 表现出广阔的研究和应用前景.

参考文献

- [1] Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys.* **21** 467
- [2] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Bloch I 2002 *Nature* **415** 39
- [3] Billy J, Josse V, Zuo Z, Bernard A, Hambrecht B, Lugan P, Clement D, Sanchez-Palencia L, Bouyer P, Aspect A 2008 *Nature* **453** 891
- [4] Zhang D W, Zhu Y Q, Zhao Y X, Yan H, Zhu S L 2018 *Adv. Phys.* **67** 253
- [5] Friedenauer A, Schmitz H, Glueckert J T, Porras D, Schaetz T 2008 *Nat. Phys.* **4** 757
- [6] Barreiro J T, Müller M, Schindler P, Nigg D, Monz T, Chwalla M, Hennrich M, Roos C F, Zoller P, Blatt R 2011 *Nature* **470** 486
- [7] Blatt R, Roos C F 2012 *Nat. Phys.* **8** 277
- [8] You J Q, Shi X F, Hu X, Nori F 2010 *Phys. Rev. B* **81** 014505
- [9] Georgescu I, Ashhab S, Nori F 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 153
- [10] Barends R, Kelly J, Megrant A, Veitia A, Sank D, Jeffrey E, White T C, Mutus J, Fowler A G, Campbell B, Chen Y, Chen Z, Chiaro B, Dunsworth A, Neill C, O'Malley P, Roushan P, Vainsencher A, Wenner J, Korotkov A N, Cleland A N, Martinis J M 2014 *Nature* **508** 500
- [11] Buluta I, Nori F 2009 *Science* **326** 108
- [12] Ashida Y, Gong Z P, Ueda M 2020 *Adv. Phys.* **69** 249
- [13] Raghu S, Haldane F D M 2008 *Phys. Rev. A* **78** 033834
- [14] Wang Z, Chong Y, Joannopoulos J D, Soljačić M 2009 *Nature* **461** 772
- [15] Rechtsman M C, Zeuner J M, Plotnik Y, Lumer Y, Podolsky D, Dreisow F, Nolte S, Segev M, Szameit A 2013 *Nature* **496** 196
- [16] Hafezi M, Mittal S, Fan J, Migdall A, Taylor J M 2013 *Nat. Photonics* **7** 1001
- [17] Yan Q, Liu R, Yan Z, Liu B, Chen H, Wang Z, Lu L 2018 *Nat. Phys.* **14** 461
- [18] Ozawa T, Price H M, Amo A, Goldman N, Hafezi M, Lu L, Rechtsman M C, Schuster D, Simon J, Zilberberg O, Carusotto I 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 015006
- [19] Hussein M I, Leamy M J, Ruzzene M 2014 *Appl. Mech. Rev.* **66** 040802
- [20] Wang P, Lu L, Bertoldi K 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 104302
- [21] Xiao Y X, Ma G, Zhang Z Q, Chan C T 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 166803
- [22] Li F, Huang X, Lu J, Ma J, Liu Z 2018 *Nat. Phys.* **14** 30
- [23] Li X X, Li B, Li P B 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013121
- [24] Li X X, Li P B, Li H R, Gao H, Li F L 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 013025
- [25] Kane C L, Lubensky T C 2014 *Nat. Phys.* **10** 39
- [26] Chen B G, Upadhyaya N, Vitelli V 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **111** 13004
- [27] Nash L M, Kleckner D, Read A, Vitelli V, Turner A M, Irvine W T M 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112** 14495
- [28] Chaunsali R, Kim E, Thakkar A, Kevrekidis P G, Yang J 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 024301
- [29] Brandenbourger M, Locsin X, Lerner E, Coulais C 2019 *Nat. Commun.* **10** 4608
- [30] Ghatak A, Brandenbourger M, van Wezel J, Coulais C 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **117** 29561
- [31] Luo K F, Yu R 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 220305 (in Chinese) [罗开发, 余睿 2019 物理学报 **68** 220305]
- [32] Liu S, Zhang S, Cui T J 2021 *Chinese Optics* **14** 736 (in Chinese) [刘硕, 张霜, 崔铁军 2021 中国光学 **14** 736]
- [33] Albert V V, Glazman L I, Jiang L 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 173902
- [34] Ningyuan J, Owens C, Sommer A, Schuster D, Simon J 2015 *Phys. Rev. X* **5** 021031
- [35] Lee C H, Imhof S, Berger C, Bayer F, Brehm J, Molenkamp L W, Kiessling T, Thomale R 2018 *Commun. Phys.* **1** 39
- [36] Imhof S, Berger C, Bayer F, Brehm J, Molenkamp L W, Kiessling T, Schindler F, Lee C H, Greiter M, Neupert T, Thomale R 2018 *Nat. Phys.* **14** 925
- [37] Ezawa M 2018 *Phys. Rev. B* **98** 201402
- [38] Helbig T, Hofmann T, Lee C H, Thomale R, Imhof S, Molenkamp L W, Kiessling T 2019 *Phys. Rev. B* **99** 161114
- [39] Liu S, Gao W, Zhang Q, Ma S, Zhang L, Liu C, Xiang Y J, Cui T J, Zhang S 2019 *Research* **2019** 8609875
- [40] Bao J, Zou D, Zhang W, He W, Sun H, Zhang X 2019 *Phys. Rev. B* **100** 201406
- [41] Helbig T, Hofmann T, Imhof S, Abdelghany M, Kiessling T, Molenkamp L W, Lee C H, Szameit A, Greiter M, Thomale R 2020 *Nat. Phys.* **16** 747
- [42] Lee C H, Sutrisno A, Hofmann T, Helbig T, Liu Y, Ang Y S, Ang L K, Zhang X, Greiter M, Thomale R 2020 *Nat. Commun.* **11** 4385
- [43] Wu J, Huang X, Lu J, Wu Y, Deng W, Li F, Liu Z 2020 *Phys. Rev. B* **102** 104109
- [44] Kotwal T, Moseley F, Stegmaier A, Imhof S, Brand H, Kießling T, Thomale R, Ronellenfitsch H, Dunkel J 2021 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **118** e2106411118
- [45] Dong J, Juričić V, Roy B 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 023056
- [46] Yang Y, Zhu D, Hang Z, Chong Y 2021 *Sci. China: Phys., Mech. Astron.* **64** 257011
- [47] Zhang W, Zou D, Pei Q, He W, Bao J, Sun H, Zhang X 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 146802
- [48] Wu J, Wang Z, Biao Y, Fei F, Zhang S, Yin Z, Hu Y, Song Z, Wu T, Song F, Yu R 2022 *Nat. Electron.* **5** 635
- [49] Wang Z, Zeng X T, Biao Y, Yan Z, Yu R 2023 *Phys. Rev.*

- Lett.* **130** 057201
- [50] Breuer H P, Petruccione F 2002 *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford: Oxford University Press)
- [51] Daley A J 2014 *Adv. Phys.* **63** 77
- [52] Bender C M, Boettcher S 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5243
- [53] Bender C M 2007 *Rep. Prog. Phys.* **70** 947
- [54] Longhi S 2019 *Opt. Lett.* **44** 5804
- [55] Pan J S, Yi W, Gong J 2021 *Commun. Phys.* **4** 261
- [56] Moca C P, Sticlet D, Dóra B, Zaránd G 2023 *Phys. Rev. B* **107** 115111
- [57] Lee T E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 133903
- [58] Kunst F K, Edvardsson E, Budich J C, Bergholtz E J 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 026808
- [59] Yao S, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 086803
- [60] Yao S, Song F, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 136802
- [61] Edvardsson E, Kunst F K, Bergholtz E J 2019 *Phys. Rev. B* **99** 081302
- [62] Ghatak A, Das T 2019 *J. Phys.: Condens. Matter* **31** 263001
- [63] Song F, Yao S, Wang Z 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 170401
- [64] Song F, Yao S, Wang Z 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 246801
- [65] Borgnia D S, Kruchkov A J, Slager R J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 056802
- [66] Xiao L, Deng T, Wang K, Zhu G, Wang Z, Yi W, Xue P 2020 *Nat. Phys.* **16** 761
- [67] Zhang K, Yang Z, Fang C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 126402
- [68] Yang Z, Zhang K, Fang C, Hu J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 226402
- [69] Okuma N, Sato M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 176601
- [70] Liang Q, Xie D, Dong Z, Li H, Li H, Gadway B, Yi W, Yan B 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 070401
- [71] Milburn T J, Doppler J, Holmes C A, Portolan S, Rotter S, Rabl P 2015 *Phys. Rev. A* **92** 052124
- [72] Zhong Q, Christodoulides D N, Khajavikhan M, Makris K G, El-Ganainy R 2018 *Phys. Rev. A* **97** 020105
- [73] Zhang K L, Wang P, Song Z 2019 *Phys. Rev. A* **99** 042111
- [74] Liu S, Ma S, Yang C, Zhang L, Gao W, Xiang Y J, Cui T J, Zhang S 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 014047
- [75] Heiss W D 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 2455
- [76] Moiseyev N 2011 *Non-Hermitian Quantum Mechanics* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [77] Okugawa R, Takahashi R, Yokomizo K 2020 *Phys. Rev. B* **102** 241202
- [78] Zhang X, Tian Y, Jiang J H, Lu M H, Chen Y F 2021 *Nat. Commun.* **12** 5377
- [79] Zhang X, Zhang T, Lu M H, Chen Y F 2022 *Adv. Phys.: X* **7** 2109431
- [80] Deng T S, Yi W 2019 *Phys. Rev. B* **100** 035102
- [81] Yokomizo K, Murakami S 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 066404
- [82] Zhu X, Wang H, Gupta S K, Zhang H, Xie B, Lu M, Chen Y 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013280
- [83] Yokomizo K, Murakami S 2020 *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2020** 12A102
- [84] Xiao L, Deng T, Wang K, Wang Z, Yi W, Xue P 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 230402
- [85] Wang K, Li T, Xiao L, Han Y, Yi W, Xue P 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 270602
- [86] Yokomizo K 2022 *Non-Bloch Band Theory of Non Hermitian Systems* (Singapore: Springer Nature)
- [87] Yokomizo K, Murakami S 2023 *Phys. Rev. B* **107** 195112
- [88] Shi K, Tian M, Sun F X, Zhang W 2023 *Phys. Rev. B* **107** 205154
- [89] Zhou H, Lee J Y 2019 *Phys. Rev. B* **99** 235112
- [90] Kawabata K, Shiozaki K, Ueda M, Sato M 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041015
- [91] Kawabata K, Okuma N, Sato M 2020 *Phys. Rev. B* **101** 195147
- [92] Bergholtz E J, Budich J C, Kunst F K 2021 *Rev. Mod. Phys.* **93** 015005
- [93] Liu C H, Zhang K, Yang Z, Chen S 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 043167
- [94] He P, Liu Y G, Wang J T, Zhu S L 2022 *Phys. Rev. A* **105** 023311
- [95] Niu X, Li J, Wu S L, Yi X X 2023 *Phys. Rev. A* **108** 032214
- [96] Nakanishi Y, Sasamoto T 2022 *Phys. Rev. A* **105** 022219
- [97] Li T, Zhang Y S, Yi W 2022 *Phys. Rev. B* **105** 125111
- [98] Purkayastha A 2022 *Phys. Rev. A* **105** 062204
- [99] Roccati F, Palma G M, Ciccarello F, Bagarello F 2022 *Open Syst. Inf. Dyn.* **29** 2250004
- [100] Niu X, Wang J 2023 arXiv: 2211.04233 [quant-ph]
- [101] Liu Y G, Chen S 2023 *Phys. Rev. B* **107** 134307
- [102] Strang G 2023 *Introduction to Linear Algebra* (6th Ed.) (Wellesley-Cambridge Press)
- [103] Demange G, Graefe E M 2011 *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** 025303
- [104] Rotter I 2009 *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 153001
- [105] Mostafazadeh A 2002 *J. Math. Phys.* **43** 205
- [106] Mostafazadeh A 2002 *J. Math. Phys.* **43** 3944
- [107] Xiong Y 2018 *J. Phys. Commun.* **2** 035043
- [108] Ryu S, Schnyder A P, Furusaki A, Ludwig A W W 2010 *New J. Phys.* **12** 065010
- [109] Xu Z C, Zhou Z, Cheng E, Lang L J, Zhu S L 2022 *Sci. China: Phys., Mech. Astron.* **65** 283011
- [110] Chen W, Kaya Özdemir Ş, Zhao G, Wiersig J, Yang L 2017 *Nature* **548** 192
- [111] Wiersig J 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 203901
- [112] Kato T 1995 *Perturbation Theory for Linear Operators* (Berlin, Heidelberg: Springer)
- [113] Schindler J, Li A, Zheng M C, Ellis F M, Kottos T 2011 *Phys. Rev. A* **84** 040101
- [114] Dong Z, Li Z, Yang F, Qiu C W, Ho J S 2019 *Nat. Electron.* **2** 335
- [115] Zhou B B, Wang L F, Dong L, Huang Q A 2021 *J. Phys. Commun.* **5** 045010
- [116] Zeng C, Zhu K, Sun Y, Li G, Guo Z, Jiang J, Li Y, Jiang H, Yang Y, Chen H 2021 *New J. Phys.* **23** 063008
- [117] Cheng E H, Lang L J 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 160301 (in Chinese) [成恩宏, 郎利君 2022 物理学报 **71** 160301]
- [118] Hofmann T, Helbig T, Schindler F, Salgo N, Brzezińska M, Greiter M, Kiessling T, Wolf D, Vollhardt A, Kabaši A, Lee C H, Bilušić A, Thomale R, Neupert T 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 023265
- [119] Liu S, Shao R, Ma S, Zhang L, You O, Wu H, Xiang Y J, Cui T J, Zhang S 2021 *Research* **2** 5608038
- [120] Stegmaier A, Imhof S, Helbig T, Hofmann T, Lee C H, Kremer M, Fritzsche A, Feichtner T, Klembt S, Höfling S, Boettcher I, Fulga I C, Ma L, Schmidt O G, Greiter M, Kiessling T, Szameit A, Thomale R 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 215302
- [121] Zou D, Chen T, He W, Bao J, Lee C H, Sun H, Zhang X 2021 *Nat. Commun.* **12** 7201
- [122] Wu J, Huang X, Yang Y, Deng W, Lu J, Deng W, Liu Z 2022 *Phys. Rev. B* **105** 195127
- [123] Zhang W, Di F, Yuan H, Wang H, Zheng X, He L, Sun H, Zhang X 2022 *Phys. Rev. B* **105** 195131
- [124] Shang C, Liu S, Shao R, Han P, Zang X, Zhang X, Salama K N, Gao W, Lee C H, Thomale R, Manchon A, Zhang S,

- Cui T J, Schwingenschlögl U 2022 *Adv. Sci.* **9** 2202922
- [125] Zhang X, Zhang B, Zhao W, Lee C H 2022 arXiv: 2211.09152 [cond-mat.mes-hall]
- [126] Zhu P, Sun X Q, Hughes T L, Bahl G 2023 *Nat. Commun.* **14** 720
- [127] Wu M, Zhao Q, Kang L, Weng M, Chi Z, Peng R, Liu J, Werner D H, Meng Y, Zhou J 2023 *Phys. Rev. B* **107** 064307
- [128] Kim Y, Park H C, Kyung M, Lee K, Ryu J W, You O, Zhang S, Min B, Park M J 2023 arXiv: 2303.13721 [cond-mat.mes-hall]
- [129] Su L, Guo C X, Wang Y, Li L, Ruan X, Du Y, Chen S, Zheng D 2023 *Chin. Phys. B* **32** 038401
- [130] Yin K, Hao X, Huang Y, Zou J, Ma X, Dong T 2023 *Phys. Rev. Applied* **20** L021003
- [131] Ezawa M 2019 *Phys. Rev. B* **99** 121411
- [132] Zhou B B, Deng W J, Wang L F, Dong L, Huang Q A 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 064022
- [133] Schindler J, Lin Z, Lee J M, Ramezani H, Ellis F M, Kottos T 2012 *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** 444029
- [134] Ramezani H, Schindler J, Ellis F M, Günther U, Kottos T 2012 *Phys. Rev. A* **85** 062122
- [135] Wang T, Fang J, Xie Z, Dong N, Joglekar Y N, Wang Z, Li J, Luo L 2020 *Eur. Phys. J. D* **74** 167
- [136] Chen W K 2002 *The Circuits and Filters Handbook* (CRC Press)
- [137] Hofmann T, Helbig T, Lee C H, Greiter M, Thomale R 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 247702
- [138] Zhang H, Chen T, Li L, Lee C H, Zhang X 2023 *Phys. Rev. B* **107** 085426
- [139] Yuan H, Zhang W, Zhou Z, Wang W, Pan N, Feng Y, Sun H, Zhang X 2023 *Adv. Sci.* 2301128
- [140] Chen P Y, Sakhdari M, Hajizadegan M, Cui Q, Cheng M M C, El-Ganainy R, Alù A 2018 *Nat. Electron.* **1** 297
- [141] Sakhdari M, Hajizadegan M, Zhong Q, Christodoulides D N, El-Ganainy R, Chen P Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 193901
- [142] Yin K, Huang Y, Ma C, Hao X, Gao X, Ma X, Dong T 2022 *Appl. Phys. Lett.* **120** 194101
- [143] Wu F Y 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** 6653
- [144] Li Z, Wu J, Huang X, Lu J, Li F, Deng W, Liu Z 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 263501
- [145] Deng W, Chen T, Zhang X 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 033109
- [146] Tang C, Yang H, Song L, Yao X, Yan P, Cao Y 2023 *Phys. Rev. B* **108** 035410
- [147] Lang L J, Weng Y, Zhang Y, Cheng E, Liang Q 2021 *Phys. Rev. B* **103** 014302
- [148] Chitsazi M, Li H, Ellis F M, Kottos T 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 093901
- [149] Su L, Jiang H, Wang Z, Chen S, Zheng D 2023 *Phys. Rev. B* **107** 184108
- [150] Lee C H, Li L, Gong J 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 016805
- [151] Li L, Lee C H, Gong J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 250402
- [152] Yin K, Huang Y, Yin W, Hao X, Ma X, Dong T 2022 *Phys. Rev. Appl.* **18** 064020
- [153] Zhang M, Sweeney W, Hsu C W, Yang L, Stone A D, Jiang L 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 180501
- [154] Kononchuk R, Cai J, Ellis F, Thevamaran R, Kottos T 2022 *Nature* **607** 697
- [155] Langbein W 2018 *Phys. Rev. A* **98** 023805

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Electrical circuit simulation of non-Hermitian lattice models*Xu Can-Hong¹⁾ Xu Zhi-Cong¹⁾ Zhou Zi-Yu¹⁾Cheng En-Hong^{1)†} Lang Li-Jun^{1)2)‡}1) (*School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 1 June 2023; revised manuscript received 7 August 2023)

Abstract

Quantum simulation serves as a significant tool for studying and understanding novel phenomena in the quantum world. In recent years, it has been realized that apart from quantum platforms, classical systems like photonic crystals, phononic crystals, and mechanical oscillators can also be used to simulate quantum models by analogizing the Schrödinger equation. Among these systems, electrical circuits have emerged as a promising simulation platform owing to their low cost, technological maturity, and ease of scalability, successfully simulating numerous important quantum phenomena. Meanwhile, non-Hermitian physics breaks the Hermiticity of systems' Hamiltonians in traditional quantum mechanics, providing a fresh perspective for understanding the physics of quantum systems, particularly open quantum systems. Non-Hermitian systems, owing to their manifestation of unique phenomena absent in Hermitian systems, have become emerging research subjects in various fields of physics. However, many non-Hermitian phenomena require specialized configurations that pose relatively high technical thresholds on quantum platforms. For instance, the non-Hermitian skin effect typically requires systems to possess non-reciprocal hopping between lattice sites. Therefore, utilizing flexible electrical circuits to simulate non-Hermitian physics becomes a natural choice.

This paper provides a short review of the current experimental progress in simulating non-Hermitian lattice models by using electrical circuits. It offers a brief introduction to the relevant knowledge of non-Hermitian physics, including mathematical concepts and novel phenomena, as well as the simulation theory of electrical circuits, including the mapping theory of the lattice models, the introduction of non-Hermiticity, and the measurement of physical quantities. The aim is to provide readers with a reference for better understanding or engagement in related researches, thus promoting further development in this field.

Keywords: non-Hermitian physics, electrical circuit simulation, PT symmetry breaking, non-Hermitian skin effect, non-Hermitian topology

PACS: 03.67.Ac, 03.65.Vf, 73.43.Nq**DOI:** [10.7498/aps.72.20230914](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230914)

* Project supported by the Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation, China (Grant No. 2019A1515111101) and the Startup Funding from South China Normal University, China.

† Corresponding author. E-mail: ehcheng@m.scnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: ljiang@scnu.edu.cn



非厄米格点模型的经典电路模拟

徐灿鸿 许志聪 周子榆 成恩宏 郎利君

Electrical circuit simulation of non-Hermitian lattice models

Xu Can-Hong Xu Zhi-Cong Zhou Zi-Yu Cheng En-Hong Lang Li-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230914

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230914>

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

畴壁系统中的非厄米趋肤效应

Non-Hermitian skin effect in a domain-wall system

物理学报. 2022, 71(17): 170306 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221087>

无序非厄米Su-Schrieffer-Heeger中的趋肤效应

Skin effect in disordered non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger

物理学报. 2022, 71(22): 227402 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221151>

非厄米镶嵌型二聚化晶格

Non-Hermitian mosaic dimerized lattices

物理学报. 2022, 71(13): 130302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220890>

非厄米局域拓扑指标的动力学特性

Dynamics of non-Hermitian local topological marker

物理学报. 2021, 70(23): 230309 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211576>

基于Aharonov-Bohm笼的非厄米趋肤效应抑制现象

Suppression of non-Hermitian skin effect via Aharonov-Bohm cage

物理学报. 2022, 71(17): 174201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220978>

广义布里渊区与非厄米能带理论

Generalized Brillouin zone and non-Hermitian band theory

物理学报. 2021, 70(23): 230307 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211908>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

量子存储性能及应用分析*

王云飞^{1)2)3)†} 周颖¹⁾ 王英¹⁾ 颜辉¹⁾²⁾³⁾ 朱诗亮¹⁾²⁾³⁾

1) (华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (华南师范大学, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

3) (华南师范大学, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 8 月 7 日收到修改稿)

在量子网络体系中, 光是信息的最好载体. 通过探讨光与物质的相互作用, 可以进一步发展量子存储技术. 这种技术能同步接收和按需获取光量子信息, 是建立大规模量子计算和远距离量子通信的基础. 但是, 量子存储的性能直接影响了其实际应用价值和量子信息技术的进步. 在过去的二十多年里, 多种物理体系和量子信息协议中的量子存储已经得到了深入的研究, 其存储性能也得到了显著的提升, 而且其相关的应用也有了广泛的展示. 本文系统梳理了最近十年来关于量子存储的所有性能指标的研究进展, 并根据冷原子体系和固态掺杂离子晶体系的特性, 详细探讨了存储效率、存储寿命、存储保真度和模式容量等方面的发展情况. 同时, 对近期量子存储在量子纠缠、存储辅助增强的多光子过程以及不同粒子量子干涉等方面的典型应用进行了介绍. 最后, 对量子存储的未来发展进行了展望和总结.

关键词: 量子存储, 量子中继, 冷原子, 固态掺杂离子晶体**PACS:** 67.85.-d, 03.67.-a, 42.50.-p, 03.67.Hk**DOI:** 10.7498/aps.72.20231203

1 引言

在量子信息领域, 光子扮演着重要的角色, 主要因其具有传播速度快、抗干扰能力强和信息容量大的特点. 这些优点使其被科学界誉为量子信息的理想载体^[1]. 单光子, 作为光的最小能量单元, 能携带的信息无法复制, 因而被誉为实现量子通信的理想工具^[2-6]. 然而, 光子的强抗干扰性让其难以被控制. 因此, 需通过光与物质的相互作用及非线性过程来操控光子^[7-9]. 在量子通信和量子网络等领域, 利用光与物质的相互作用进行量子信息交换, 具有重要的科学意义^[10-16]. 其中, 由光与物质相互作用派生出来的量子存储技术引起了科研领域的广泛关注. 研究者们致力于将光子携带的量子信息

非破坏性地转移至介质, 并在需要的时候提取出来^[17-20]. 量子存储在量子通信和量子网络等相关领域发挥着重要作用. 例如, 在远距离量子通信研究中, 利用量子中继器可以克服远距离传输带来的光子损耗问题, 而量子存储器是量子中继器的核心组件^[4,5,21,22]. 在量子网络中, 节点间的量子态传递和纠缠分发也需借助于量子存储^[11,12,23,24]. 并且在多光子产生、多光子干涉以及纠缠交换等实验中, 使用量子存储器可以显著提高单位时间内的成功率^[25,26], 从而节约时间成本.

量子存储主要分为吸收型与 DLCZ 型两类, 如图 1 所示^[5]. 吸收型存储能对外部量子信息实现存储, 物理过程是先将外来的光子信息转移到存储介质, 即通过控制介质把光携带的信息存储到介质. 存储一定时间后, 再利用控制场把量子信息恢

* 国家自然科学基金 (批准号: 12004120)、广东省自然科学基金 (批准号: 2022A1515011327, 2020A1515110848) 和广东省重点领域研发计划 (批准号: 2019B030330001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yunfei.wang2014@126.com

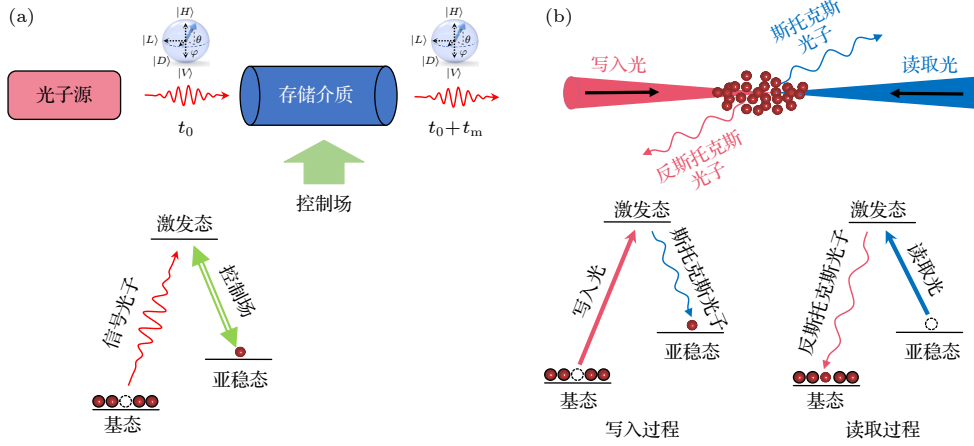


图 1 (a) 吸收型量子存储过程及能级方案. 单光子源产生的光子编码量子信息后, 输入进存储介质中. 待光子完全进入介质, 通过调控控制场将光子信息转化成原子自旋信息, 随后再次调控控制光场恢复光子信息并读取出来. (b) DLCZ 型量子存储过程及能级方案. 一束写入激光对原子系综进行单激发, 同时释放一个斯托克斯光子, 随后一束读取激光再次作用到单激发介质上, 释放一个反斯托克斯光子. 两个光子之间的时间延迟可以通过操控写入和读取光的相对时间来控制

Fig. 1. The absorptive quantum memory and energy level scheme. The photons generated by the single photon source encode quantum information and are input into the storage medium. After the photons have completely entered the medium, the light quantum information is converted into atomic spin wave by manipulating the control field, and then the light quantum information is read out again by manipulating the control field. (b) DLCZ quantum memory and energy level scheme. A writing laser beam couple the atomic ensemble and simultaneously releases a Stokes photon, and then a reading laser beam couple the medium again to release an anti-Stokes photon. The time delay between two photons can be controlled by manipulating the relative timing of writing and reading laser.

复到光子并释放, 实现信息的完整存储过程. 吸收型存储不仅可在原子系综、固态掺杂离子晶体和单粒子体系中实现, 也可以同时实现相干光和单光子的存储. 然而, 真正的量子存储需要具备存储单光子并维持良好量子态的能力. 在此, 我们将相干光或单光子水平的存储称为光存储, 对实现真正的单光子存储则称为量子存储. DLCZ 型量子存储是只读存储, 其物理过程是首先通过一束写入激光来激发存储介质, 在介质内建立单激发状态的同时释放一个单光子. 存储一定时间后, 再利用读取激光将介质中的激发状态转化为光子释放, 同时保证先后释放的两个光子具有关联性. DLCZ 型量子存储器既可以作为光子源, 也可以提供时间同步.

本文介绍了不同类型和体系的量子存储在存储效率、存储寿命、存储保真度和存储模式容量 4 个关键指标的研究进展, 这些指标直接影响量子存储是否能实现实用化. 随后, 介绍了近期量子存储的一些典型应用, 包括量子纠缠、存储辅助增强的多光子过程、以及不同单粒子的量子干涉等. 最后, 对量子存储的研究发展前景进行了总结与展望.

2 量子存储指标

量子存储的主要指标包括存储效率、存储寿

命、存储保真度、存储模式容量、存储带宽及工作波长等. 不同存储协议和物理体系在应用时要求到达的指标存在差异, 即每个协议和体系都具有独特的指标特性. 以下将介绍在量子中继应用中最关键的几项存储指标的研究进展.

2.1 存储效率

存储效率是量子存储器非常重要的指标, 高效率量子存储是各个研究组都在追求的目标. 2011 年 Sangouard 等 [21] 通过计算发现, 利用量子中继实现远距离纠缠分发, 所需的时间成本会随着存储效率的降低而大大增加, 例如存储效率从 90% 降到 89% 将造成时间成本增加 10%—14%.

量子存储类型不同, 存储效率定义不一样. 因此, 不同定义下的效率无法进行比较. 对于吸收型量子存储来说, 相干光条件下的存储效率是指读出和存入的光场强度比值. 对于量子存储, 存储效率是单光子存入并读取出来的概率, 或者读出与存入的光子个数比.

$$\eta_m = \frac{\int |\psi_{\text{out}}(\tau)|^2 d\tau}{\int |\psi_{\text{in}}(\tau)|^2 d\tau} = \frac{N_{\text{out}}}{N_{\text{in}}}, \quad (1)$$

其中, ψ_{out} 和 ψ_{in} 分别是读出和输入光场的时域波函数, N_{out} 和 N_{in} 分别是读出和输入的光子个数. 对于 DLCZ 型量子存储, 存储效率定义的是有斯托克斯光子宣布的情况下能探测到反斯托克斯光子的概率:

$$\eta_{\text{DLCZ}} = p_{r|w} - p_{\text{noise}}, \quad (2)$$

其中, $p_{r|w}$ 表示探测到一个写入光子后能符合到读出光子的概率. 由于读取过程会伴随着散射噪声, 因此还要除掉探测到噪声的概率 p_{noise} .

存储效率的决定因素是光与介质的耦合强度, 耦合强度越大效率就越高. 原子系综因其具有集体增强效应, 与光的耦合可以得到增强, 因此基于原子系综的光存储可以获得较高的存储效率. 反映耦合强弱的指标是介质的光学厚度, 即光学厚度越大存储效率就越高. 基于原子系综的高效率相干光存储已经被若干研究小组利用不同的存储协议实现. 英国 Walmsley 研究小组 [27–29] 采用热原子拉曼存储方案实现了 GHz 的宽带光存储, 其存储效率达到 30%. 2019 年, 华东师范大学张卫平研究组 [30] 在热原子系综里面实现了效率 82.6% 的宽带光存储, 存储带宽 77 MHz. 2016 年, 澳大利亚国立大学 Lam 研究组 [31] 在获得光学厚度 488 的冷原子系综基础上, 利用光子回波存储方案实现了效率 87%, 寿命 1 ms 的高性能光存储. 2018 年, 台湾省陈应诚研究小组 [32] 在获得光学厚度超过 1000 的冷原子系综基础上, 利用电磁诱导透明存储方案实现了效率 92% 的光存储. 在 2019 年之前, 大部分研究工作集中于利用相干光或衰减至单光子水平的相干光提升存储的效率和寿命等指标, 而单光子存储的效率始终低于 50% 的非克隆阈值, 最高的单光子存储效率只达到了 49% [33]. 直到 2019 年, 华南师范大学朱诗亮、颜辉研究组 [34] 采用冷原子电磁诱导透明方案实现了量子存储效率的突破, 单光子存储效率最高达到了 90.6%, 对单光子进行任意量子态编码后获得了效率高于 85% 的单光子偏振量子比特存储, 存储保真度高达 99%, 该存储效率目前仍是世界最好水平, 如图 2 所示. 随后, 2020 年法国巴黎第六大学 Laraut 研究组 [35] 利用冷原子量子存储实现了高效率的可逆量子纠缠态转移, 存储效率达到 85%.

采用固态掺杂晶体实现高效率存储一般采用加谐振腔或者多次穿过的方案来提升 OD, 再进一

步提升存储效率 [36–40]. 2013 年, 瑞典隆德大学 Rippe 研究组 [39,41] 采用强增强原子频率梳技术提升了光存储效率, 存储效率达到 56%. 2016 年, 德国达姆施塔特工业大学 Halfmann 研究组 [40] 设计了一种多次穿过的方案, 利用 $\text{Pr}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ 晶体实现了 76% 的高效率光存储. 2022 年, 该研究组采用电磁诱导透明方案, 在最高效率 42% 的前提下, 通过 ZEFOZ (zero first order Zeeman shifts) 技术将存储寿命延长至秒量级 [42].

2.2 存储寿命

存储寿命决定着量子存储对量子态的同步能力, 将直接影响量子中继网络中量子态的传输距离. 受存储介质的退相干效应影响, 存储效率会随着存储时间的延长而降低, 图 3 汇总了近 10 年存储效率与存储寿命两个关键指标的总体情况, 并与光纤延迟进行了比较. 2013 年, 美国佐治亚理工学院 Kuzmich 研究组 [43] 利用超冷原子, 通过实施一维光晶格、魔幻磁场和动力学解耦技术, 实现了 16 s 的光存储. 同年, 德国达姆施塔特工业大学 Halfmann 研究组 [44] 通过实施动力学解耦和自学习光学制备优化技术, 实现了 1 min 量级的光存储. 2015 年, 澳大利亚国立大学 Sellars 研究组 [45] 采用动力学解耦和 ZEFOZ 的方法, 将 $\text{Eu}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ 晶体基态超精细分裂能级间的相干时间提升到 6 h, 这一结果展示了掺杂离子晶体在存储寿命方面的优势和潜力. 2016 年, 中国科学技术大学潘建伟研究组 [46,47] 通过实施三维光晶格技术, 结合环形腔技术实现了高效率长寿命 DLCZ 型量子存储, 存储效率达到了 75%, 存储寿命 0.22 s. 2021 年, 中国科学技术大学李传锋研究组 [48] 采用 ZEFOZ 和动力学解耦技术, 在 $\text{Eu}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$ 晶体中实现了超过 1 h 的光存储.

2.3 存储保真度

存储保真度定义为读取后和存储之前量子态的重合度 (内积):

$$F = \frac{|\langle \varphi_{\text{in}} | \varphi_{\text{out}} \rangle|^2}{|\langle \varphi_{\text{in}} | \varphi_{\text{in}} \rangle| |\langle \varphi_{\text{out}} | \varphi_{\text{out}} \rangle|}. \quad (3)$$

对于量子存储而言, 存储保真度一定要超过相关的阈值要求. 例如, 对于自旋 1/2 的自旋态, 阈值要求是 2/3, 而对于连续变量, 如相位和振

幅等维度, 阈值要求是 $1/2$ ^[64], 尽管分离变量量子比特和连续变量都能为量子信息提供纠缠态资源, 但迄今为止, 大多数量子存储的实验都是基于

分离变量量子比特存储^[17]. 目前, 各研究组在量子存储保真度这一指标均能达到较高的水平, 甚至超过 99%^[34,58,59,65].

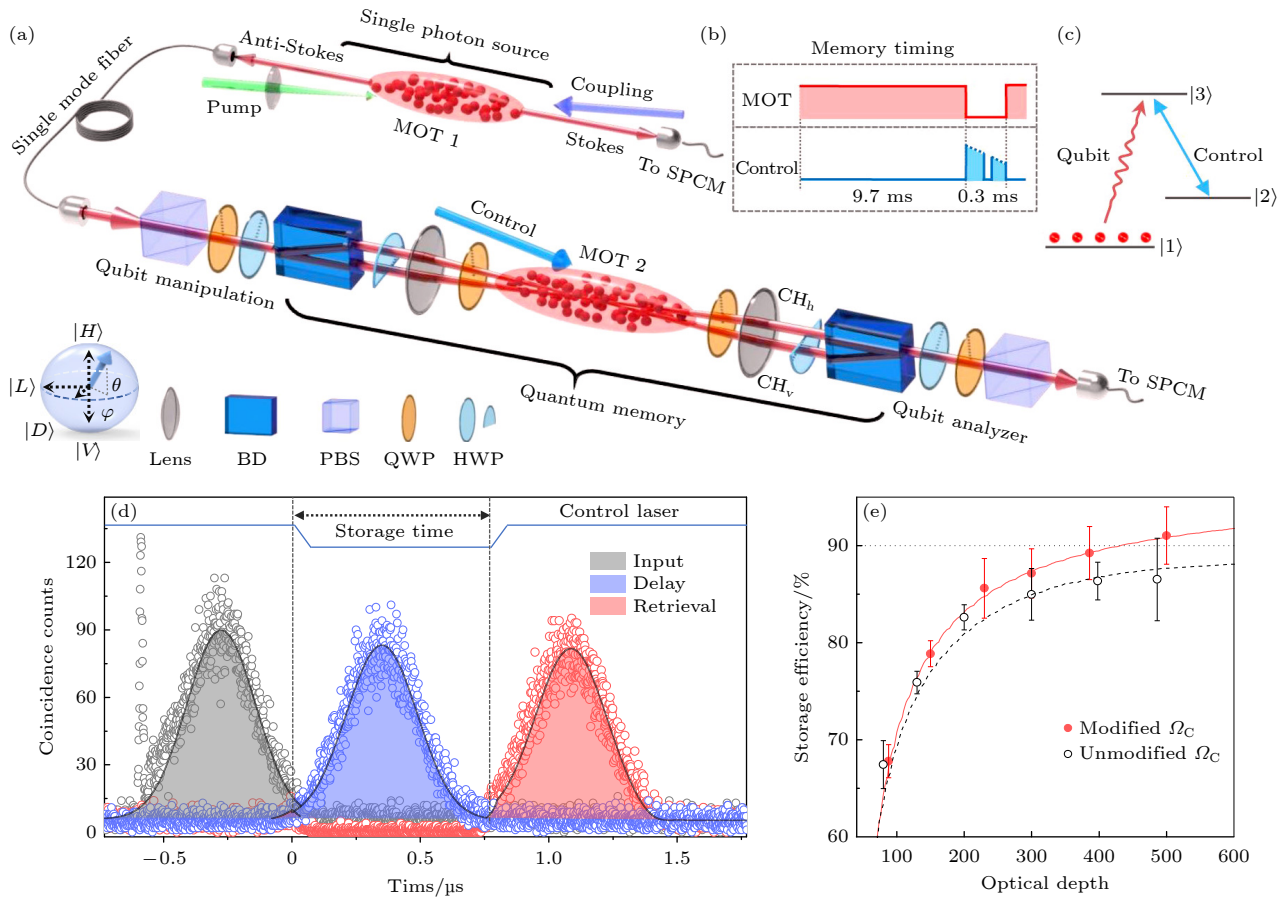


图 2 单光子量子存储的实验装置和能级方案 (a) 实验方案. 磁光阱 1 制备的冷原子系综用于制备时间-频率纠缠光子对, 磁光阱 2 制备的冷原子系综用于进行光量子态存储. 磁光阱 1 中产生的反斯托克斯光子经半波片和四分之一波片编码成任意偏振态, 然后经过一个偏振光束位移器将其偏振态的两个正交分量 H 偏振和 V 偏振分别转换成两条路径信息 CH_H 和 CH_V . 读取后的光子再次经过反置的偏振光束位移器重构出偏振态, 随后进行偏振量子态层析. (b) 存储过程中的时序及优化后的控制光调制示意. (c) 基于电磁诱导透明量子存储的原子能级方案. (d) 当水平偏振的输入通道 $|H\rangle$ 具有最优存储效率时, 其输入、EIT 慢光以及读取单光子的时域波形情况. (e) 光学厚度对存储效率的影响情况. 图中的线均是基于实验采集数据进行的理论拟合, 理论拟合采用的波形为高斯函数. 红色实线表示在存储窗口期间修改控制光的强度以匹配光学深度变化的存储数据, 黑色虚线表示控制光的强度恒定时的数据^[34]

Fig. 2. Experimental set-up and energy level scheme of the single-photon quantum memory. (a) Schematic of the experimental optical set-up. The cold atoms in the first magneto-optical trap (MOT₁) serve as a nonlinear optical medium for producing time-frequency entangled photon pairs, while the cold atoms in the second magneto-optical trap (MOT₂) are the medium for the quantum memory. The anti-Stokes photon is coded with an arbitrary polarization state through the qubit manipulation unit (QMU) consisting of a QWP and HWP. After the QMU, the two orthogonal linear polarizations are separated into two beams by a polarization beam displacer (BD) that are coupled into the two balanced spatial channels CH_H and CH_V of the quantum memory. The memory read-outs are recombined at the second BD and the polarization state is measured by the qubit analyser. (b) The memory operation timing shows the MOT sequence and the optimized control laser intensity time-varying profile in each experimental cycle. (c) The atomic energy level scheme of the quantum memory based on EIT. (d) The input, EIT delayed and retrieved temporal waveforms of the heralded single photons when the quantum memory is optimized for the horizontally polarized input optical channel $|H\rangle$. (e) The storage efficiency as a function of the optical depth of the quantum memory. The solid lines are the best fitted theoretical waveforms by fitting the input waveform using a Gaussian function and then numerically calculating the retrieved waveform based on the measured experimental parameters of the quantum memory. The red line denotes the situation when the intensity of the control light is modified to match the optical depth change during the storage window and the black line denotes the result when the intensity of the control light is constant^[34].

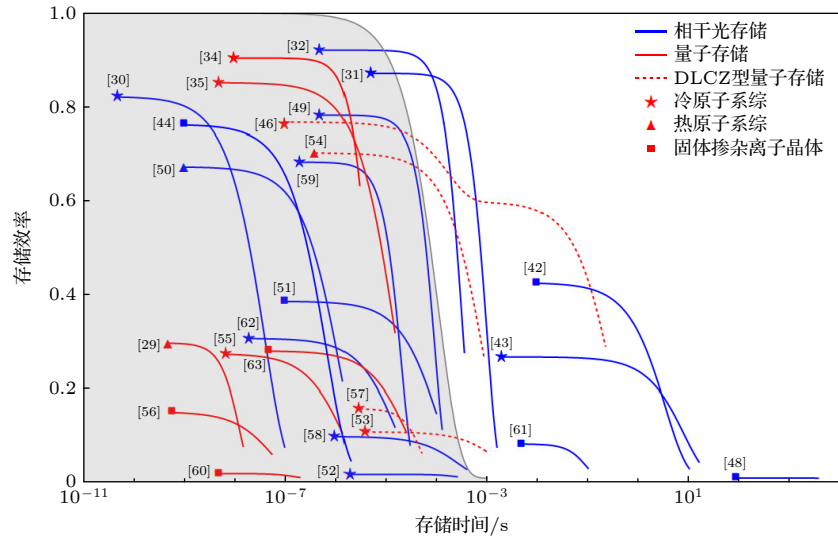


图 3 存储效率与存储时间的调研与统计. 图中不同形状的起始点代表不同的存储介质, 其中五角星代表冷原子系综, 三角形代表热原子系综, 正方形代表固体掺杂离子体系. 图中数字对应参考文献序号. 不同线形代表着不同的存储方式, 其中蓝色实线代表相干光存储, 红色实线代表单光子存储, 红色虚线代表 DLCZ 型量子存储. 作为对比, 图中用灰色实线以及灰色阴影区域标出了 1550 nm 波长光纤的时间延迟效率, 这里光纤损耗按 0.2 dB/km

Fig. 3. Statistics on the storage efficiency and storage time. Different storage medium are distinguished by symbols. The star represents the cold atoms, the triangle represents the warm atoms, and the square represents the doped ion crystal. The numbers before the symbols is the reference of the corresponding works. Blue solid line represents coherent light memory, red solid line represents single photon memory, and red dotted line represents DLCZ quantum memory. The transmission of 1550 nm fiber delay line is plotted using solid gray lines with the loss of 0.2 dB/km.

2.4 模式容量

存储模式有空间、时间和频率等, 这三种模式的复用均可以用于提升量子计算或量子通信的性能. 2007 年, 日内瓦大学的 Simon 等^[22]提出采用多时间模式量子存储器实现量子中继可以显著提升量子中继中纠缠建立的概率, 量子存储的模式数量与量子纠缠成功的概率呈线性关系, 方案如图 4(a). 此后, 复用量子存储与中继的研究变得火热起来. 在量子计算方面, 2021 年, Gouzien 等^[66]指出在解决 2048 位 RSA (Rivest-Shamir-Adleman) 质因数分解这个问题上, 如果将多模量子存储器整合进量子计算机, 对量子比特资源需求量将降低 3 个数量级, 方案如图 4(b). 该方案硬件上可通过整合超导量子计算单元和微波光子量子存储单元来实现^[67–69], 另外也可以借助微波-光波转换接口来整合超导量子计算单元与光子量子存储单元^[70–74].

基于稀土离子掺杂晶体的固态存储器因具有存储带宽大和相干寿命长的特点, 在时间和频率及多自由度复用存储能力方面优势明显^[61,75–81]. 中国科学技术大学李传锋研究组^[82,83]首次在 Pr^{3+} : Y_2SiO_5 晶体中实现了空间、频率和时间三个自由度的复用光存储. 2022 年, Businger 等^[84]在 Yb^{3+} :

Y_2SiO_5 晶体中, 基于原子频率梳方案实现了 1250 个时间模式的存储. 近期, 电子科技大学周强研究组^[60]将 10 m 掺钕石英光纤置于 10 mK 的低温环境中, 采用时域-频域复用的方式将光存储模式数量提升至 1650, 并且该存储器的工作波长处在通信波段, 非常适用于远距离多模量子中继^[85].

冷原子系综凭借着其系综尺寸大和耦合强度高特点, 在空间复用上具有明显优势, 可以保证较高的效率同时提高空间模式的存储能力. 冷原子空间模式存储的研究主要集中在两方面, 分别是光子轨道角动量 (orbital angular momentum, OAM) 信息存储和光学通道复用存储. 2013 年, 法国巴黎第六大学 Laurat 研究组^[86,87]利用相干光编码了 OAM 信息, 首次实现了冷原子的涡旋光存储. 随后 2015 年, 中国科学技术大学史保森研究组基于冷原子系综首次实现了 OAM 纠缠态的量子存储^[88], 并进一步实现了高维量子存储纠缠^[89]以及多自由度量子纠缠^[90]. 对编码 OAM 信息的光子进行量子存储相比于单纯的时域波形存储在保真度、效率和寿命等性能提升上有很大的挑战. 例如原子的热运动和环境磁场会导致存储过程中 OAM 拓扑荷态之间的串扰从而降低保真度, 而绝对静止不

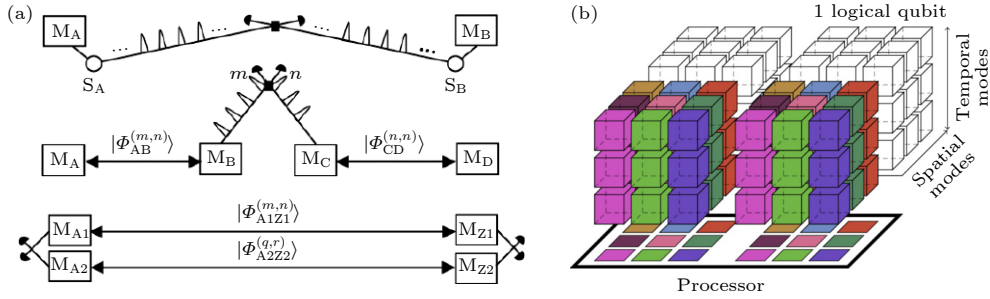


图 4 (a) 利用纠缠光子源和多模量子存储器实现量子中继的方案. 由于量子存储器可以支持同时存储多个光子脉冲, 因此量子纠缠源可以陆续地产生光子, 以节省量子纠缠建立的时间成本. 这里的源和多模量子存储器的组合相当于 DLCZ 型量子存储器, 但该中继方案具有多模式的功能优势^[22]. (b) 利用多模量子存储器和量子处理器分解 2048 位 RSA 整数的量子计算机体系结构. 研究表明, 在量子存储器支持 2800 万个空间模式和 45 个时间模式, 并且存储时间覆盖到 2 h 的情况下, 处理器只需要 13436 个物理量子位即可在 177 天内即可完成任务^[66].

Fig. 4. (a) Quantum repeater scheme using pair sources and multimode memories. The sources S_i can each emit a photon pair into a sequence of time bins. The multimode memories M_i can store the sequential photons simultaneously. The combination of source and multimode quantum memory is equivalent to the DLCZ scheme, but with multimode functionality^[22]. (b) The quantum computer architecture for factoring a 2048-bit RSA integer with multimode quantum memories and quantum processors. It is shown to be possible in 177 days with 13436 physical qubits and a memory that can store 28 million spatial modes and 45 temporal modes with 2 hours' storage time^[66].

动的原子是无法实现的, 绝对干净的磁场环境也是非常大的技术挑战. 编码的 OAM 信息拓扑荷数越高, 原子系综的有效光学厚度就会越低, 从而严重影响存储效率. 因此实现高维信息的高性能量子存储也是该领域的研究重点之一. 2020 年, 西安交通大学高宏研究组^[91]利用冷原子系综实现了高维、高效率光存储, 存储效率最高 65%, 存储光的轨道角动量最高拓扑荷数为 5, 存储保真度高于 98%. 2022 年, 中国科学技术大学史保森研究组^[92]通过延长自旋波波长和进行原子钟态制备来抑制原子横向和纵向的退相干, 实现了高维长寿命光存储, 将高维存储寿命提升 2 个数量级. 在通道复用上, 主流的方法是借助光学元器件来实现, 例如采用光束位移器 (beam displacer, BD) 实现双通道的复用可以编码偏振量子态, 双 BD 构建的干涉仪系统具有自稳定的特性, 在量子态保真度的保持上有明显优势^[55,59,90,93]. 法国巴黎第六大学 Laurat 研究组利用 BD 先后研究了矢量光存储^[93]及高效率任意偏振态存储^[59]. 采用声光移位器 (acoustic optical deflectors, AOD) 可以通过声光控制的方法实现通道的复用和寻址, 能够大大提升存储的通道数量. 2009 年, Kuzmich 研究组^[94]首次利用 AOD 实现了 DLCZ 型量子存储的多通道空间复用, 当时只是利用单个 AOD 实现了一维的多路复用. 2017 年, 清华大学段路明研究组^[95]利用交叉的 AOD 方案实现了二维的多路复用 DLCZ 型量子存储, 空间

复用的模式数量提升到了 225. 此后, 进一步将该复用结构拓展到普适型量子存储方案上, 进行了 49 个空间模式的偏振量子比特存储, 实现了通信光子与复用量子存储的远距离纠缠^[96]. 此外, 也有研究者基于 DLCZ 方案直接采用多路收集的办法, 提升量子存储的复用容量或实现多通道光子纠缠源^[57,97,98].

3 量子存储典型应用

3.1 量子纠缠

量子纠缠是量子中继的核心思想, 远距离量子中继网络的实现需解决的首要问题是将最小纠缠单元的距离拉远. 目前, 两个静态量子比特的纠缠已经在多种物理体系实现, 如原子系综^[23,99–101]、单原子^[102,103]、NV 色心^[104–106]、量子点^[107]以及囚禁离子^[108]等. 实现远距离量子纠缠需克服的问题包括: 提升物理体系的相干时间, 降低各种光子损耗, 提升系统稳定度以及信噪比等. 2020 年, 中国科学技术大学潘建伟研究组^[109]在改善以上问题的基础上, 实现了 50 km 的量子存储节点纠缠, 如图 5(a). 该工作中, 潘建伟等^[46,47]采用了三维光晶格和腔增强技术提升了存储效率和存储寿命, 存储效率最高达到 76%, 存储寿命 0.22 s. 同时, 利用高效率波长转换器将量子存储释放的 795 nm 信号光子转换成 1342 nm 光子来降低信道的光子传输损耗.

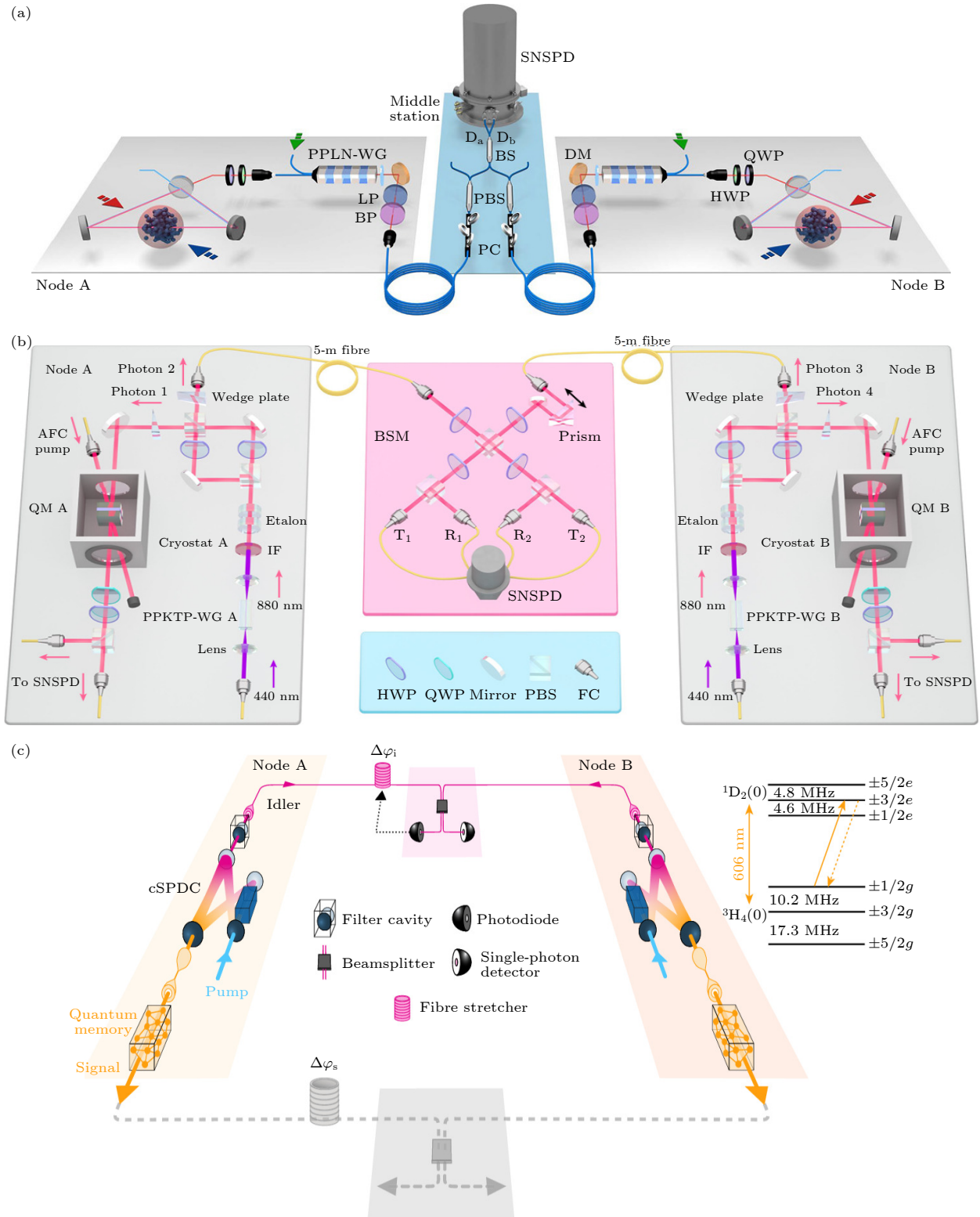


图 5 (a) 潘建伟等^[109]借助高效率波长转换器实现了 50 km 光纤连接的两个 DLCZ 量子存储纠缠; (b) 李传锋等^[56]首次实验演示吸收型量子存储之间的量子纠缠; (c) Riedmatten 等^[63]实现了两个多模固态量子存储之间的纠缠

Fig. 5. (a) 50 km fiber length entanglement of two quantum memories via efficient quantum wavelength converter demonstrated by Pan et al.^[109]; (b) experimental demonstration of quantum entanglement between absorbing quantum memories for the first time by Li et al.^[56]; (c) experimental demonstration of quantum entanglement between multimode quantum memories by Riedmatten et al.^[63]

此前实现量子纠缠都是基于发射型物理体系,即物理体系本身既能发射出光子,又具有时间同步功能. 2007年,日内瓦大学的Simon等^[22]首次提出利用纠缠光子源和吸收型量子存储实现量子中继的方案,科学家可以自由配置不同特性的光子源和存储器来满足不同的需求,尤其是在多模量子存储方面具有明显优势.此外,该方案还可以借助纠缠源作为波长转换接口,弥补一些量子存储工作波长处于非通信波段的短板.2021年,中国科学技术大学李传锋研究组^[56]首次实现了两个吸收型量子存储的纠缠,如图5(b).该工作中,李传锋等^[110]利用一种三明治结构的 $\text{Nd}^{3+}:\text{YVO}_4$ 晶体实现了偏振量子比特存储,同时采用自发参量下转换(SPDC)技术搭配一种干涉仪结构产生了偏振纠缠光子对.实验中分别将两个光子源产生的信号光子存储到两个量子存储器中,将闲置光子同时输送到中间站进行联合贝尔态探测,最终实现了间隔3.5 m的两个固态量子存储纠缠.同一时间,西班牙

巴塞罗那科学技术学院 Riedmatten 研究组^[63]采用同样的方案实现了 $\text{Pr}^{3+}:\text{Y}_2\text{SiO}_4$ 晶体多模量子存储之间的纠缠,如图5(c).该工作中研究者还利用 SPDC光子源同时产生可存储波长的 606 nm 光子和通信波长的 1436 nm 光子,以光子源作为波长转换接口克服了存储器的工作波长短板^[111].

3.2 存储辅助增强的多光子过程

量子存储器最主要的功能是实现光子或量子信息的同步,在量子安全通信、量子中继以及多光子产生等方面展现出了明显的优势.2013年,英国牛津大学 Numm 等^[25]分析了利用多个光子源产生多光子态的过程,发现借助存储器的时间同步功能辅助实现多光子态产生,比随机产生所耗费的时间成本可降低 12 个数量级.如 12 个光子随机同步的时间需要 30 年才能实现一次,而在有存储器辅助的情况下只需要 100 μs 即可完成.后续多个工作也验证了量子存储在多光子同步或多光子纠缠态产

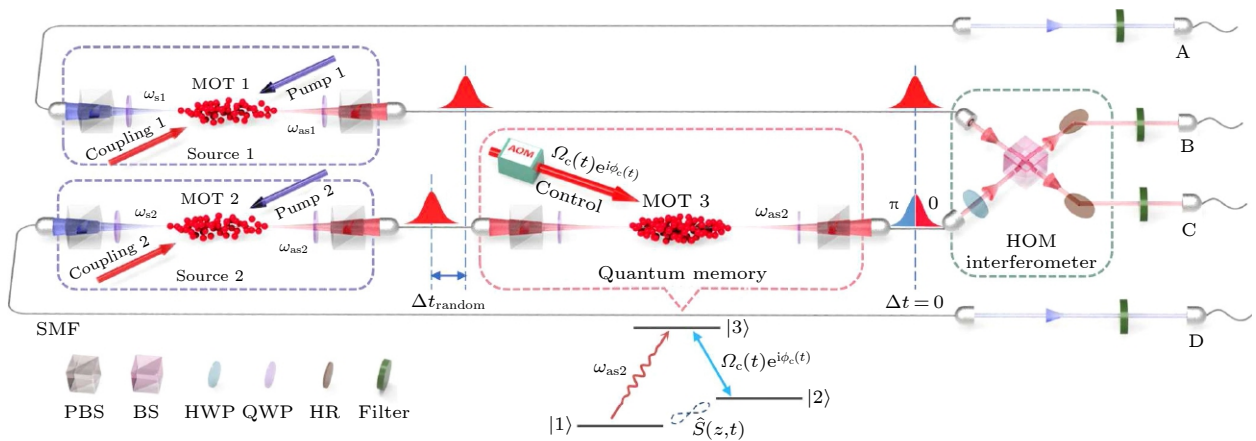


图 6 光子同步干涉与相位调制实验方案. 采用暗线磁光阱技术制备三个雪茄形高密度铷 85 冷原子系综. 在泵浦光和耦合光共同作用下,于磁光阱 1 (2) 中采用四波混频的方法产生斯托克斯光子 ω_{s1} (ω_{s2}) 和反斯托克斯光子 ω_{as1} (ω_{as2}) 纠缠光子对. Δt_{random} 表示反斯托克斯光子 ω_{as1} 和 ω_{as2} 之间的时间差. 磁光阱 3 是电磁诱导透明存储器,用于控制 ω_{as2} 光子的时间延迟,实现 ω_{as1} 和 ω_{as2} 光子的时间同步. 如电磁诱导透明过程能级示意图所示,光子的存储、读取及相位调制过程完全由控制光决定,实验上利用声光调制器 (AOM) 来实现. 同步后的 ω_{as1} 和 ω_{as2} 光子通过单模光纤传输到由分束器组成的 HOM 干涉仪中进行干涉,最终被单光子计数模块 A, B, C 和 D 检测. PBS, 偏振分束器; HWP, 半波片; QWP, 四分之一波片; HR, 高反射镜^[113]

Fig. 6. Three cigar-shape dense cold atomic ensembles are prepared by dark-line magneto-optical traps (MOT) of 85 Rb atoms. Single photons ω_{as1} (ω_{as2}) heralded by its counterpart ω_{s1} (ω_{s2}) are generated from MOT 1 (MOT 2) with the existence of pump1-coupling1 (pump2-coupling2) laser beams via the spontaneous four-wave-mixing process. Therefore, the timing differences between ω_{as1} and ω_{as2} are random and denoted by Δt_{random} . MOT₃ acts as an efficient QM based on EIT that can synchronize the readout single photon ω_{as2} to ω_{as1} ($\Delta t = 0$). As shown by the energy level schematics of EIT two-photon process, a control laser manipulates the storage and readout of single photons ω_{as2} . The amplitude and phase of the control laser pulse with a complex envelope of Rabi frequency $\Omega_c(t)e^{-i\phi_c(t)}$ is controlled by an acousto-optic modulator (AOM), by which the readout single photons ω_{as2} can be phase modulated accordingly. Single photons ω_{as1} and ω_{as2} are delivered to a HOM interferometer consisting of a beam splitter (BS) via single mode fibers (SMFs). Photons ω_{s1} and ω_{s2} are also collected and sent to detectors via SMFs. The generated photons are eventually detected by single photon counting modules (SPCMs) A, B, C and D. Filters are inserted before SPCMs to filter out noisy photons. PBS, polarization beam splitter; HWP, half wave plate; QWP, quarter wave plate; HR, high reflection mirror^[113].

生方面的增强效果^[112–114]. 2020年, 美国哈佛大学 Lukin 研究组^[115] 基于金刚石纳米腔硅空色心实现了存储辅助增强的量子通信. 2021年, 清华大学段路明研究组^[116] 实验验证了量子存储对于量子中继过程中纠缠交换的增强效果, 探索了量子存储性能的提升对于纠缠交换能力的影响. 随后基于同样的实验方案, 展示了量子存储对于多光子非局域图态产生的增强效果^[117]. 同年, 华南师范大学朱诗亮、颜辉研究组^[113] 利用高效率量子存储展示了存储增强的双光子同步, 利用概率性的光子源实现了确定性双光子干涉, 如图 6. 此外该工作还借助存储中的电磁诱导透明过程, 实现了高效率单光子任意相位调制, 展示了一种同步与相位调制集成的量子存储器.

3.3 不同粒子的量子干涉

多粒子量子干涉, 如 HOM (Hong-Ou-Mandel)

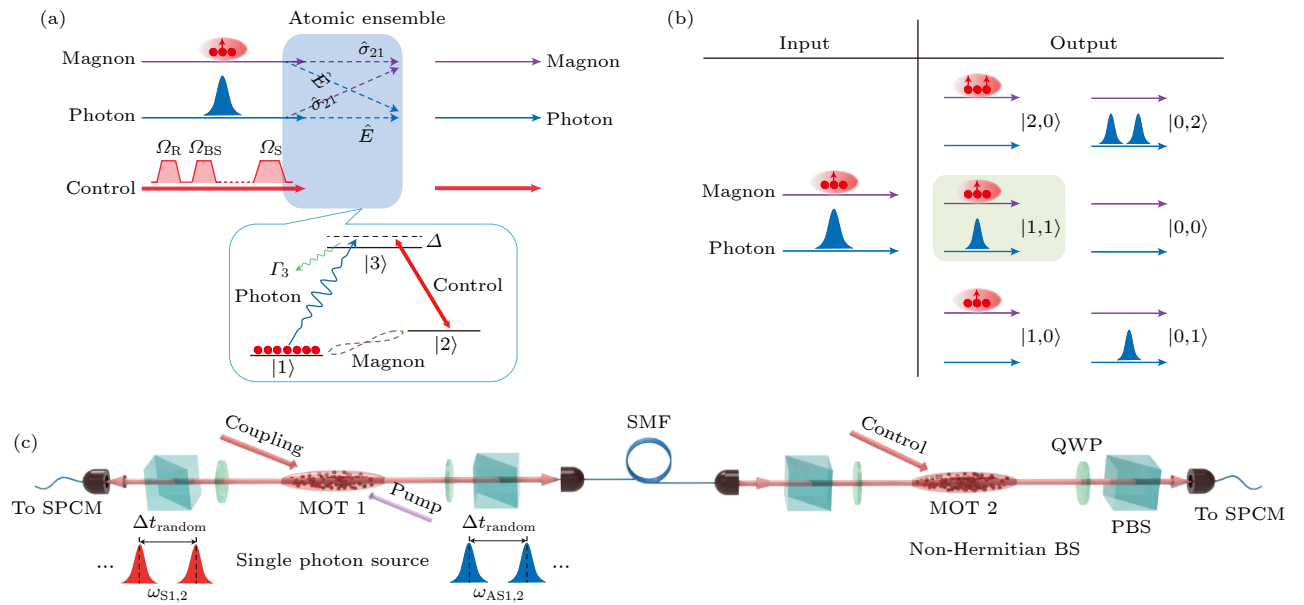


图 7 单磁子与单光子干涉实验方案 (a) 磁子-光子 HOM 干涉仪的理论模型. 磁子 $\hat{\sigma}_{21}$ 和光子 \hat{E} 在电磁诱导透明介质中都以暗态极化子的形式存在. 控制光上方的红线显示了实验的时序, 包括磁子的制备 Ω_S 、磁子与光子的干涉 Ω_{BS} 和磁子的读取 Ω_R 三个过程. 该电磁诱导透明过程的铷 85 能级方案: $|1\rangle = |5S_{1/2}, F = 2, m_F = 2\rangle$, $|2\rangle = |5S_{1/2}, F = 3, m_F = 2\rangle$, $|3\rangle = |5P_{1/2}, F = 3, m_F = 3\rangle$, Γ_3 是 $|3\rangle$ 态的自发辐射率, Δ 是单光子失谐. (b) 磁子和光子 HOM 干涉的输入和输出态. (c) 实验方案. 磁光阱 1 作为单光子源连续产生单光子, 通过探测斯托克斯光子可宣布反斯托克斯光子的产生. 磁光阱 2 作为非厄米分束器用于实现光子-磁子的分束及干涉. PBS, 偏振分束器; QWP, 四分之一波片; SPCM, 单光子计数模块; SMF, 单模光纤^[129]

Fig. 7. Theoretical and experimental schemes: (a) Theoretical scheme of magnon-photon HOM interferometer. The magnon ($\hat{\sigma}$) and photon (\hat{E}) are both in the form of a dark-state polariton (DSP) in an electromagnetically induced transparency (EIT) medium. The red line above the control laser shows the experimental timing sequences: storage of a magnon (Ω_S), interference between two DSPs (Ω_{BS}) and reading out of the magnon (Ω_R). The insert is a Λ -type EIT energy diagram: $|1\rangle = |5S_{1/2}, F = 2, m_F = 2\rangle$, $|2\rangle = |5S_{1/2}, F = 3, m_F = 2\rangle$, $|3\rangle = |5P_{1/2}, F = 3, m_F = 3\rangle$, Γ_3 is the spontaneous decay rate of $|3\rangle$, and Δ is single photon detuning. (b) The input and output states of the magnon-photon HOM interferometer. (c) Experimental setup. MOT 1 is a single photon source. The detection of a Stokes photon (ω_{si}) heralded the generation of an anti-Stokes photon (ω_{asi}). MOT 2 is the non-Hermitian beam splitter. PBS, polarization beam splitter; QWP, quarter wave plate; SPCM, single photon counting module; SMF, single mode fibre^[129].

干涉, 揭示了粒子的量子统计性质^[118]. 研究玻色子和费米子量子干涉效应的独特物理现象引起了科研人员的极大兴趣^[26]. 分束器是进行量子干涉研究的基本元件, 它在不同输出端口中创建粒子的叠加状态, 并实现每个端口中粒子的振幅干涉. 量子干涉为多比特量子门提供的单光子非线性过程, 是量子信息处理和量子通信的核心^[119–121]. 此前量子干涉的研究均是在同类型粒子上取得的, 如双光子^[118,122]、双磁子^[123]、双原子等^[124–126], 然而量子干涉的原理并不局限于同质粒子, 只要能够实现单个粒子之间的相干态叠加或转换即可^[127,128]. 因此, 将量子干涉扩展到广义的分束器具有重要的研究意义. 最近, 华南师范大学朱诗亮、颜辉研究组^[129] 借助电磁诱导透明存储过程实现了广义的光子与磁子非厄密分束器, 其厄密性可以实现从厄密到非厄密的连续可调, 如图 7. 基于该磁子-光子分束器

实现了不同单粒子, 即单磁子与单光子之间的量子干涉, 并观察到了干涉后两种不同类型粒子从玻色子到费米子量子统计特性的转变.

4 总 结

本文综合考察了量子存储的一系列关键指标, 如存储效率、存储寿命、存储保真度和模式容量, 并对近期与量子存储相关的典型研究进行了详细介绍. 在过去十年里, 量子存储的各项指标都取得了显著提升. 例如, 存储效率已经超过了 90%, 存储寿命最长可达 1 h, 保真度更是超过 99%, 同时模式容量也达到了 10^3 量级. 然而, 尽管取得了这些成果, 但是目前还没有任何体系能够在所有指标上实现全面突破. 各研究组正在努力通过物理创新或技术迭代找到解决方案. 根据 2011 年 Sangouard 等^[21]的计算分析, 只有在量子存储的效率、寿命和保真度同时满足确定的标准 (如效率超过 90%, 寿命达到百秒量级, 保真度超过 90%) 时, 才能实现量子中继的优势. 在存储模式容量较高的情况下, 其他指标的实际要求可以降低, 如当模式数达到 100 时, 存储寿命的需求可以降到秒级. 然而, 至今尚未有任何方案能实现这一全面性能目标. 因此, 作为未来量子存储重点发展方向之一, 实现量子存储性能的全面突破将是未来的关键任务.

参考文献

- [1] Walmsley I A 2015 *Science* **348** 525
- [2] Wootters W K, Zurek W H 1982 *Nature* **299** 802
- [3] Gisin N, Thew R 2007 *Nat. Photonics* **1** 165
- [4] Briegel H J, Dür W, Cirac J I, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5932
- [5] Duan L M, Lukin M D, Cirac J I, Zoller P 2001 *Nature* **414** 413
- [6] Gisin N, Ribordy G, Tittel W, Zbinden H 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 145
- [7] Foot C J 2005 *Atomic Physics* (Oxford: Oxford University Press) pp123–214
- [8] Scully M O, Zubairy M S 1999 *Quantum Optics* (New York: Cambridge University Press) pp145–217
- [9] Nielsen, Michael A, I L Chuang 2011 *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (New York: Cambridge University Press) pp277–343
- [10] Hammerer K, Sørensen A S, Polzik E S 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1041
- [11] Kimble H J 2008 *Nature* **453** 1023
- [12] Wehner S, Elkouss D, Hanson R 2018 *Science* **362** eaam9288
- [13] Guo G C 2020 *Sci. Sin. Inform.* **50** 1395 (in Chinese) [郭光灿 2020 *中国科学: 信息科学* **50** 1395]
- [14] Simon C 2017 *Nat. Photonics* **11** 678
- [15] Duan L M, Monroe C 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1209
- [16] Yan Z H, Wu L, Jia X J, Xie C D, Peng K C 2021 *Adv. Quantum Technol.* **4** 2100071
- [17] Afzelius M, Gisin N, De Riedmatten H 2015 *Phys. Today* **68** 42
- [18] Lvovsky A I, Sanders B C, Tittel W 2009 *Nat. Photonics* **3** 706
- [19] Bussières F, Sangouard N, Afzelius M, De Riedmatten H, Simon C, Tittel W 2013 *J. Mod. Opt.* **60** 1519
- [20] Guo M C, Liu S P, Sun W Y, Ren M M, Wang F D, Zhong M J 2023 *Front. Phys.* **18** 21303
- [21] Sangouard N, Simon C, De Riedmatten H, Gisin N 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 33
- [22] Simon C, De Riedmatten H, Afzelius M, Sangouard N, Zbinden H, Gisin N 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 190503
- [23] Chou C W, Laurat J, Deng H, Choi K, De Riedmatten H, Felinto D, Kimble H J 2007 *Science* **316** 1316
- [24] Wei S H, Jing B, Zhang X Y, Liao J Y, Yuan C Z, Fan B Y, Lyu C, Zhou D L, Wang Y, Deng G W, Song H Z, Oblak D, Guo G C, Zhou Q 2022 *Laser Photon. Rev.* **16** 2100219
- [25] Nunn J, Langford N K, Kolthammer W S, Champion T F M, Sprague M R, Michelberger P S, Walmsley I A 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 133601
- [26] Pan J W, Chen Z B, Lu C Y, Weinfurter H, Zeilinger A, Zukowski M 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 777
- [27] Reim K F, Nunn J, Lorenz V O, Sussman B J, Lee K C, Langford N K, Walmsley I A 2010 *Nat. Photonics* **4** 218
- [28] Reim K F, Michelberger P, Lee K C, Nunn J, Langford N K, Walmsley I A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 053603
- [29] Michelberger P S, Champion T F M, Sprague M R, Kaczmarek K T, Barbieri M, Jin X M, Walmsley I A 2015 *New J. Phys.* **17** 043006
- [30] Guo J, Feng X, Yang P, Yu Z, Chen L Q, Yuan C H, Zhang W 2019 *Nat. Commun.* **10** 148
- [31] Cho Y W, Campbell G T, Everett J L, Bernu J, Higginsbottom D B, Cao M T, Geng J, Robins N P, Lam P K, Buchler B C 2016 *Optica* **3** 100
- [32] Hsiao Y F, Tsai P J, Chen H S, Lin S X, Hung C C, Lee C H, Chen Y C 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 183602
- [33] Zhou S, Zhang S, Liu C, Chen J F, Wen J, Loy M M T, Du S 2012 *Opt. Express* **20** 24124
- [34] Wang Y F, Li J F, Zhang S C, Su K Y, Zhou Y R, Liao K Y, Du S W, Yan H, Zhu S L 2019 *Nat. Photonics* **13** 346
- [35] Cao M, Hoffet F, Qi S, Sheremet A S, Laurat J 2020 *Optica* **7** 1440
- [36] Davidson J H, Lefebvre P, Zhang J, Oblak D, Tittel W 2020 *Phys. Rev. A* **101** 042333
- [37] Akhmedzhanov R A, Gushchin L A, Kalachev A A, Nizov N A, Nizov V A, Sobgayda D A, Zelensky I V 2016 *Laser Phys. Lett.* **13** 115203
- [38] Jobez P, Usmani I, Timoney N, Laplane C, Gisin N, Afzelius M 2014 *New J. Phys.* **16** 083005
- [39] Sabooni M, Li Q, Kröll S, Rippe L 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 133604
- [40] Schraft D, Hain M, Lorenz N, Halfmann T 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 073602
- [41] Sabooni M, Kometa S T, Thuresson A, Kröll S, Rippe L 2013 *New J. Phys.* **15** 035025
- [42] Hain M, Stabel M, Halfmann T 2022 *New J. Phys.* **24** 023012
- [43] Dudin Y O, Li L, Kuzmich A 2013 *Phys. Rev. A* **87** 031801
- [44] Heinze G, Hubrich C, Halfmann T 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111**

- 033601
- [45] Zhong M, Hedges M P, Ahlefeldt R L, Bartholomew J G, Beavan S E, Wittig S M, Sellars M J 2015 *Nature* **517** 177
- [46] Yang S J, Wang X J, Bao X H, Pan J W 2016 *Nat. Photonics* **10** 381
- [47] Wang X J, Yang S J, Sun P F, Jing B, Li J, Zhou M T, Pan J W 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 090501
- [48] Ma Y, Ma Y Z, Zhou Z Q, Li C F, Guo G C 2021 *Nat. Commun.* **12** 2381
- [49] Chen Y H, Lee M J, Wang I C, Du S W, Chen Y F, Chen Y C, Yu I A 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 083601
- [50] Ma L X, Lei X, Yan J L, Li R Y, Chai T, Yan Z H, Jia X J, Xie C D, Peng K C 2022 *Nat. Commun.* **13** 2368
- [51] Horvath S P, Alqedra M K, Kinos A, Walther A, Dahlström J M, Stefan Kröll, Rippe L 2021 *Phys. Rev. Research* **3** 023099
- [52] Mazelanik M, Leszczyński A, Parniak M 2022 *Nat. Commun.* **13** 691
- [53] Li C, Zhang S, Wu Y K, Jiang N, Pu Y F, Duan L M 2021 *Phys. Rev. X* **2** 040307
- [54] Dideriksen K B, Schmiegel R, Zugenmaier M, Polzik E S 2021 *Nat. Commun.* **12** 3699
- [55] Ding D S, Zhang W, Zhou Z Y, Shi S, Shi B S, Guo G C 2015 *Nat. Photonics* **9** 332
- [56] Liu X, Hu J, Li Z F, Li X, Li P Y, Liang P J, Zhou Z Q, Li C F, Guo G C 2021 *Nature* **594** 41
- [57] Tian L, Xu Z, Chen L, Ge W, Yuan H, Wen Y, Wang H 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 130505
- [58] Zhu T X, Liu C, Jin M, Su M X, Liu Y P, Li W J, Guo G C 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 180501
- [59] Vernaz-Gris P, Huang K, Cao M, Sheremet A S, Laurat J 2018 *Nat. Commun.* **9** 363
- [60] Wei S H, Jing B, Zhang X Y, Liao J Y, Li H, You L X, Zhou Q 2022 arXiv: 2209.00802[quant-ph]
- [61] Ortu A, Holzäpfel A, Etesse J, Afzelius M 2022 *npj Quantum Inform.* **8** 29
- [62] Saglamyurek E, Hrushevskiy T, Rastogi A, Cooke L W, Smith B D, LeBlanc L J 2021 *New J. Phys.* **23** 043028
- [63] Lago-Rivera D, Grandi S, Rakonjac J V, Seri A, de Riedmatten H 2021 *Nature* **594** 37
- [64] Grosshans F, Grangier P 2001 *Phys. Rev. A* **64** 010301
- [65] Liu C, Zhu T X, Su M X, Ma Y Z, Zhou Z Q, Li C F, Guo G C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 260504
- [66] Gouzien É, Sangouard N 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 140503
- [67] Afzelius M, Sangouard N, Johansson G, Staudt M U, Wilson C M 2013 *New J. Phys.* **15** 065008
- [68] Ma Y Z, Jin M, Chen D L, Zhou Z Q, Li C F, Guo G C 2021 *Nat. Commun.* **12** 4378
- [69] Zhou Z Q 2022 *Acta. Phys. Sin.* **71** 070305 (in Chinese) [周宗权 2022 物理学报 **71** 070305]
- [70] Mirhosseini M, Sipahigil A, Kalaei M, Painter O 2020 *Nature* **588** 599
- [71] Tu H T, Liao K Y, Zhang Z X, Liu X H, Zheng S Y, Yang S Z, Zhu S L 2022 *Nat. Photonics* **16** 291
- [72] Brubaker B M, Kindem J M, Urmey M D, Mittal S, Delaney R D, Burns P S, Regal C A 2022 *Phys. Rev. X* **12** 021062
- [73] Kumar A, Suleymanzade A, Stone M, Taneja L, Anferov A, Schuster D I, Simon J 2023 *Nature* **615** 614
- [74] Xu Y, Sayem A A, Fan L, Zou C L, Wang S, Cheng R, Tang H X 2021 *Nat. Commun.* **12** 4453
- [75] Gündoğan M, Ledingham P M, Kutluer K, Mazzera M, De Riedmatten H 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 230501
- [76] Askarani M F, Das A, Davidson J H, Amaral G C, Sinclair N, Slater J A, Tittel W 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 220502
- [77] Tiranov A, Strassmann P C, Lavoie J, Brunner N, Huber M, Verma V B, Gisin N 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 240506
- [78] Saglamyurek E, Grimau Puigibert M, Zhou Q, Giner L, Marsili F, Verma V B, Tittel W 2016 *Nat. Commun.* **7** 11202
- [79] Kutluer K, Distanti E, Casabone B, Duranti S, Mazzera M, de Riedmatten H 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 030501
- [80] Seri A, Lago-Rivera D, Lenhard A, Corrielli G, Osellame R, Mazzera M, de Riedmatten H 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 080502
- [81] Tu Y, Zhang G, Zhai Z, Xu J 2009 *Phys. Rev. A* **80** 033816
- [82] Yang T S, Zhou Z Q, Hua Y L, Liu X, Li Z F, Li P Y, Liu C, Liang P J, Li X, Xiao Y X, Hu J, Li C F, Guo G C 2018 *Nat. Commun.* **9** 3407
- [83] Li X, Liu X, Zhou Z Q, Li C F, Guo G C 2020 *Phys. Rev. A* **101** 052330
- [84] Businger M, Nicolas L, Mejia T S, Ferrier A, Goldner P, Afzelius M 2022 *Nat. Commun.* **13** 6438
- [85] Zhang X, Zhang B, Wei S, Li H, Liao J, Li C, Deng G, Wang Y, Song H, You L, Jing B, Chen F, Guo G, Zhou Q 2023 *Sci. Adv.* **9** eadf4587
- [86] Veissier L, Nicolas A, Giner L, Maxein D, Sheremet A S, Giacobino E, Laurat J 2013 *Opt. Lett.* **38** 712
- [87] Nicolas A, Veissier L, Giner L, Giacobino E, Maxein D, Laurat J 2014 *Nat. Photonics* **8** 234
- [88] Ding D S, Zhang W, Zhou Z Y, Shi S, Xiang G Y, Wang X S, Guo G C 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 050502
- [89] Ding D S, Zhang W, Shi S, Zhou Z Y, Li Y, Shi B S, Guo G C 2016 *Light: Science & Applications* **5** e16157
- [90] Zhang W, Ding D S, Dong M X, Shi S, Wang K, Liu S L, Guo G C 2016 *Nat. Commun.* **7** 13514
- [91] Wang C, Yu Y, Chen Y, Cao M, Wang J, Yang X, Li F 2021 *Quantum Sci. Technol.* **6** 045008
- [92] Ye Y H, Zeng L, Dong M X, Zhang W H, Li E Z, Li D C, Guo G C, Ding D S, Shi B S 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 193601
- [93] Parigi V, D'Ambrosio V, Arnold C, Marrucci L, Sciarrino F, Laurat J 2015 *Nat. Commun.* **6** 7706
- [94] Lan S Y, Radnaev A G, Collins O A, Matsukevich D N, Kennedy T A B, Kuzmich A 2009 *Opt. Express* **17** 13639
- [95] Pu Y F, Jiang N, Chang W, Yang H X, Li C, Duan L M 2017 *Nat. Commun.* **8** 15359
- [96] Chang W, Li C, Wu Y K, Jiang N, Zhang S, Pu Y F, Duan L M 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041033
- [97] Chrapkiewicz R, Dabrowski M, Wasilewski W 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 063603
- [98] Wen Y, Zhou P, Xu Z, Yuan L, Zhang H, Wang S, Wang H 2019 *Phys. Rev. A* **100** 012342
- [99] Julsgaard B, Kozhokin A, Polzik E S 2001 *Nature* **413** 400
- [100] Chou C W, De Riedmatten H, Felinto D, Polyakov S V, Van Enk S J, Kimble H J 2005 *Nature* **438** 828
- [101] Yuan Z S, Chen Y A, Zhao B, Chen S, Schmiedmayer J, Pan J W 2008 *Nature* **454** 1098
- [102] Hofmann J, Krug M, Ortegell N, Gérard L, Weber M, Rosenfeld W, Weinfurter H 2012 *Science* **337** 72
- [103] van Leent T, Bock M, Fertig F, Garthoff R, Eppelt S, Zhou Y, Weinfurter H 2022 *Nature* **607** 69
- [104] Enien H, Hensen B, Pfaff W, Koolstra G, Blok M S, Robledo L, Taminiou T H, Markham M, Twitchen D J, Childress L, Hanson R 2013 *Nature* **497** 86
- [105] Hensen B, Bernien H, Dréau A E, Reiserer A, Kalb N, Blok M S, Ruitenberg J, Vermeulen R F L, Schouten R N,

- Abellán C, Amaya W, Pruneri V, Mitchell M W, Markham M, Twitchen D J, Elkouss D, Wehner S, Tamirniau T H, Hanson R 2015 *Nature* **526** 682
- [106] Humphreys P C, Kalb N, Morits J P J, Schouten R N, Vermeulen R F L, Twitchen D J 2018 *Nature* **558** 268
- [107] Delteil A, Sun Z, Gao W, Togan E, Faelt S, Imamoğlu A 2016 *Nat. Phys.* **12** 218
- [108] Moehring D L, Maunz P, Olmschenk S, Younge K C, Matsukevich D N, Duan L M, Monroe C 2007 *Nature* **449** 68
- [109] Yu Y, Ma F, Luo X Y, Jing B, Sun P F, Fang R Z, Pan J W 2020 *Nature* **578** 240
- [110] Zhou Z Q, Lin W B, Yang M, Li C F, Guo G C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 190505
- [111] Seri A, Lenhard A, Rieländer D, Gündoğan M, Ledingham P M, Mazzera M, de Riedmatten H 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021028
- [112] Kaneda F, Xu F, Chapman J, Kwiat P G 2017 *Optica* **4** 1034
- [113] Su K, Wang Y, Zhang S, Kong Z, Zhong Y, Li J, Zhu S L 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 094202
- [114] Meyer-Scott E, Prasannan N, Dhand I, Eigner C, Quiring V, Barkhofen S, Silberhorn C 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 150501
- [115] Bhaskar M K, Riedinger R, Machiels B, Levonian D S, Nguyen C T, Knall E N, Lukin M D 2020 *Nature* **580** 60
- [116] Pu Y F, Zhang S, Wu Y K, Jiang N, Chang W, Li C, Duan L M 2021 *Nat. Photonics* **15** 374
- [117] Zhang S, Wu Y K, Li C, Jiang N, Pu Y F, Duan L M 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 080501
- [118] Hong C K, Ou Z Y, Mandel L 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2044
- [119] Knill E, Laflamme R, Milburn G J 2001 *Nature* **409** 46
- [120] Kok P, Munro W J, Nemoto K, Ralph T C, Dowling J P, Milburn G J 2007 *Rev. Mod. Phys.* **79** 135
- [121] Okamoto R, O'Brien J L, Hofmann H F, Takeuchi S 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **108** 10067
- [122] Bouchard F, Sit A, Zhang Y W, Fickler R, Miatto F M, Yao Y, Sciarrino F, Karimi E 2021 *Rep. Prog. Phys.* **84** 012402
- [123] Li J, Zhou M T, Jing B, Wang X J, Yang S J, Jiang X, Molmer K, Bao X H, Pan J W 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 180501
- [124] Fakonas J S, Lee H, Kelaita Y A, Atwater H A 2014 *Nat. Photonics* **8** 317
- [125] Lopes R, Imanaliev A, Aspect A, Cheneau M, Boiron D, Westbrook C I 2015 *Nature* **520** 66
- [126] Kaufman A M, Lester B J, Reynolds C M, Wall M L, Foss-Feig M, Hazzard K R A, Rey A M, Regal C A 2014 *Science* **345** 306
- [127] Wen R, Zou C L, Zhu X, Chen P, Ou Z Y, Chen J F, Zhang W 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 253602
- [128] Wang X, Wang J, Ren Z, Wen R, Zou C L, Siviloglou G A, Chen J F 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 083605
- [129] Su K Y, Zhong Y, Zhang S C, Li J F, Zou C L, Wang Y F, Yan H, Zhu S L 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 093604

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Performance and application analysis of quantum memory^{*}

Wang Yun-Fei^{1)2)3)†} Zhou Ying¹⁾ Wang Ying¹⁾

Yan Hui¹⁾²⁾³⁾ Zhu Shi-Liang¹⁾²⁾³⁾

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

3) (*Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 1 June 2023; revised manuscript received 7 August 2023)

Abstract

Light is the best carrier of information in quantum network. By exploring the interaction of light with matter, quantum memory technology can be further developed. Quantum memory can simultaneously receive and obtain optical quantum information on demand, which is the basis for establishing large-scale quantum computing and long-distance quantum communication. However, the performance of quantum memory directly affects its practical application process and the progress of quantum information technology. In the past two decades, quantum memory in various physical systems and quantum information protocols has been intensively studied, its performance has been significantly improved, and its relevant applications have been widely demonstrated. In this paper, we firstly sort the research progress of quantum memory metrics in the past ten years, and discuss the development of efficiency, lifetime, fidelity and mode capacity in detail according to the characteristics of cold atom systems and solid-state doped ion crystal systems. Secondly, the recent typical applications of quantum memory in quantum entanglement, memory-enhanced multi-photon processes, and quantum interference of different particles are introduced. Finally, the future development of quantum storage is prospected and summarized.

Keywords: quantum memory, quantum repeater, cold atoms, solid-state doped ionic crystal

PACS: 67.85.-d, 03.67.-a, 42.50.-p, 03.67.Hk

DOI: [10.7498/aps.72.20231203](https://doi.org/10.7498/aps.72.20231203)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12004120), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2022A1515011327, 2020A1515110848), and the Key-Area Research and Development Program of Guangdong Province, China (Grant No. 2019B030330001).

[†] Corresponding author. E-mail: yunfeiwang2014@126.com



量子存储性能及应用分析

王云飞 周颖 王英 颜辉 朱诗亮

Performance and application analysis of quantum memory

Wang Yun-Fei Zhou Ying Wang Ying Yan Hui Zhu Shi-Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 206701 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20231203

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231203>

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

多模式固态量子存储

Multimode solid-state quantum memory

物理学报. 2019, 68(3): 030303 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182207>

量子中继过程中纠缠态的选择

Selection of entanglement state in quantum repeater process

物理学报. 2021, 70(23): 230303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211211>

量子存储研究进展

Research progress of quantum memory

物理学报. 2019, 68(3): 030307 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190039>

基于掺铒晶体的光量子存储和调控

Quantum memory and manipulation based on erbium doped crystals

物理学报. 2022, 71(6): 064203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211803>

量子存储式量子计算机与无噪声光子回波

“Quantum memory” quantum computers and noiseless photon echoes

物理学报. 2022, 71(7): 070305 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212245>

基于光子晶体微腔的回波光量子存储

Optical echo memory based on photonic crystal cavities

物理学报. 2022, 71(11): 114201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220083>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

非厄米哈密顿量中的量子 Fisher 信息与参数估计*

李竞¹⁾ 丁海涛²⁾ 张丹伟^{1)†}

1) (华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (南京大学物理学院, 固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

(2023 年 5 月 26 日收到; 2023 年 7 月 7 日收到修改稿)

量子 Fisher 信息给出参数估计的最优精度极限, 在量子度量学中有重要的应用. 近年来, 在量子系统中实现非厄米哈密顿量的理论与实验研究受到广泛关注. 本文研究基于非厄米哈密顿量本征态的参数估计, 给出其中单参数与两参数估计的量子 Fisher 信息及其量子 Cramér-Rao 下界, 计算与分析非互易、具有增益-耗散的 Su-Schrieffer-Heeger 模型, 非厄米量子 Ising 链、拓扑陈绝缘体模型和二能级系统中动量及外场参数估计的量子 Fisher 信息. 结果表明: 在这几个非厄米模型中, 对于单参数估计, 量子 Fisher 信息在能隙闭合区域和例外点附近显著增大, 从而提高参数估计的精度极限; 对于两参数估计, 量子 Fisher 信息矩阵的行列式在能隙闭合和例外点附近同样明显增大, 拓扑区域比平庸区域的整体评估精度更高, 且由陈数确定两参数估计误差的拓扑下界.

关键词: 量子 Fisher 信息, 参数估计, 非厄米系统, 拓扑态

PACS: 06.20.-f, 06.20.Dk, 03.65.Yz, 03.65.Vf

DOI: 10.7498/aps.72.20230862

1 引言

1969 年, Helstrom^[1] 提出量子系统中未知参数的测量精度受不确定性原理的影响, 确定了基于量子参数估计的量子度量学的理论基础. 在量子参数估计理论中, 从给定量子态中提取未知参数的最小误差由量子 Fisher 信息描述, 最佳测量精度满足所谓的量子 Cramér-Rao 下界 (quantum Cramér-Rao bound, QCRB)^[2-5]. 因此, 如何增大量子 Fisher 信息从而提高未知参数的估计精度是量子度量学领域的一个重要问题. 研究发现, 可以通过量子 Fisher 信息与量子几何的内在联系, 特别是刻画参量空间中两量子态间距的量子度规^[6-11], 寻找最优化的测量轨迹和评估策略^[12-15]. 利用量子系统特有的量子纠缠性质, 用一个初态为纠缠态的探针提取系统的参数信息, 也可以提高量子态的量子

Fisher 信息^[16-18]. 在具有临界性质的物理系统, 当系统靠近临界点时, 物理参数的微小变化会导致量子态性质的明显响应, 因此可以利用这种临界增强效应来提高参数评估精度^[19-21]. 此外, 近期研究表明选取合适初态以及权衡不同参数的测量误差可以提高参数估计的精度^[22,23].

另一方面, 近年来在经典或量子系统中实现非厄米有效哈密顿量的实验技术蓬勃发展^[24-28], 引发研究人员对非厄米物理及其应用的广泛兴趣. 理论与实验研究表明非厄米系统具有许多重要的物理性质^[29,30]. 例如, 在非厄米系统特有的例外点 (exceptional point, EP) 附近, 本征态能量发生实复或虚复转变, 此时系统对参数微扰有强烈的响应, 因此可以利用 EP 点实现高精度传感^[31-33]. 另外, 拓扑物态及其量子模拟^[34] 也从厄米系统推广到非厄米系统^[35-44], 并涌现系列新奇非厄米拓扑物理及其应用, 包括非厄米 Bloch 能带^[38] 与非

* 国家自然科学基金 (批准号: 12174126) 和广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2021A1515010315) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: danweizhang@m.scnu.edu.cn

厄米趋肤效应^[39]、非厄米拓扑安德森局域化^[40–42]等, 以及利用非厄米拓扑边缘态可以实现高精度的量子传感^[43,44]. 因此, 基于量子 Fisher 信息, 研究非厄米哈密顿量中的参数估计及其与非厄米拓扑的内在联系, 是当前量子精密测量与非厄米物理交叉研究领域的一个重要课题.

本文研究非厄米哈密顿量本征态的量子参数估计. 首先证明在定态条件下, 传统量子 Fisher 信息的表达式以及单参数估计和两参数估计的 QCRB 对于非厄米哈密顿量依然成立. 其次结合一维非互易 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型、具有增益-耗散的 SSH 模型, 以及一维非厄米量子 Ising 链研究单参数估计, 分别计算这 3 个非厄米模型中量子 Fisher 信息随动量或单个外场参数的变化. 结果表明量子 Fisher 信息在能隙闭合点和 EP 点附近呈现尖峰, 其动量空间积分也显著增大, 从而提高单参数估计的精度. 最后研究二维非厄米拓扑陈绝缘体模型和二能级系统中的两参数估计, 此时量子 Fisher 信息矩阵的行列式及其动量空间积分在能隙闭合和例外点附近也明显增大, 拓扑区域整体评估精度大于平庸区域. 结合贝里曲率及其积分给出的陈数, 进一步给出两参数估计误差的拓扑下界.

2 非厄米系统中量子态的量子 Fisher 信息

考虑量子态 $|\psi_\mu\rangle$ 依赖待评估参数 μ , 通常采用正定算符测量的方法进行参数估计. 具体过程是将量子态投影到一组正定的完备基底 $\{\Pi_x | \sum_x \Pi_x = \mathbb{I}\}$ (\mathbb{I} 为单位算符), 使评估 μ 转化为测量量子态在一系列 x 方向上的概率分布 $P_\mu(x) = \text{Tr}(\rho_\mu \Pi_x)$, 其中密度矩阵 $\rho_\mu = |\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu|$. 选择不同的正定算符测量会得到不同的评估精度, 由测量值和实际值之间的方差 $\Delta\mu$ 刻画, 而方差的下界只由量子态的几何性质确定, 即 QCRB^[2–5]: $(\Delta\mu)^2 \geq 1/F_\mu$, 其中 $F_\mu = \text{Tr}(L_\mu^2 \rho_\mu)$ 是评估 μ 的量子 Fisher 信息, $L_\mu = 2(|\partial_\mu\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu| + |\psi_\mu\rangle\langle\partial_\mu\psi_\mu|)$ 是对称对数导数算符. 对于厄米系统中的量子态, F_μ 的表达式可记为^[2]:

$$F_\mu = 4(\langle\partial_\mu\psi_\mu|\partial_\mu\psi_\mu\rangle - \langle\partial_\mu\psi_\mu|\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu|\partial_\mu\psi_\mu\rangle). \quad (1)$$

本质上, 评估一个参数的精度正比于参数发生微小变化前后两量子态的“距离”^[6], 即相邻两个量子态的可分辨度, 因此可以从几何的角度理解量子

Fisher 信息. 定义一个线微元 $ds(|\psi_\mu\rangle, |\psi_{\mu+d\mu}\rangle) = ||D_\mu\psi_\mu||d\mu$, 其中 $|D_\mu\psi_\mu\rangle = (1 - |\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu|)\frac{d}{d\mu}|\psi_\mu\rangle$, 其模方给出参量空间中量子态的量子度规^[6], 而 $F_\mu = 4||D_\mu\psi_\mu||^2$ 等于量子度规的 4 倍. 因此, F_μ 刻画相邻两个量子态 $|\psi_\mu\rangle$ 与 $|\psi_{\mu+d\mu}\rangle$ 之间的可分辨度, 即越大的 F_μ 表示两量子态之间有越高的分辨度, 意味着对未知参数 μ 的估计精度越高.

本文考虑定态情况下非厄米哈密顿量本征态的量子 Fisher 信息及其参数估计. 对于非厄米哈密顿量 $\hat{H} \neq \hat{H}^\dagger$, 其本征方程为 $\hat{H}|\psi_\mu^{(n)}\rangle = E_n|\psi_\mu^{(n)}\rangle$, 其中 E_n 是第 n 个本征态 $|\psi_\mu^{(n)}\rangle$ 的能量, 本征态之间通常没有正交性, 即 $\langle\psi_\mu^{(m)}|\psi_\mu^{(n)}\rangle \neq \delta_{mn}$. 在定态情况下满足归一化条件 $\langle\psi_\mu^{(n)}|\psi_\mu^{(n)}\rangle = 1$, 可证明其量子 Fisher 信息仍然满足方程 (1). 简单起见, 本文以下省略本征态指标, 仍记非厄米哈密顿量本征态为 $|\psi_\mu\rangle$. 对于可观测量算符 \hat{A} , 未知参数 μ 的测量方差由误差传递公式得到, 即 $(\Delta\mu)^2 = \frac{(\Delta\hat{A})^2}{|\partial_\mu\langle\hat{A}\rangle_\mu|^2}$. 定义非厄米导数算符 $\hat{B} = \nabla_\mu$, 其不确定度为 $(\Delta\hat{B})^2 = \langle\hat{B}^\dagger\hat{B}\rangle_\mu - \langle\hat{B}^\dagger\rangle_\mu\langle\hat{B}\rangle_\mu = F_\mu/4$. 根据非厄米算符的不确定性关系^[45] $(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \geq |\langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle_\mu - \langle\hat{A}^\dagger\rangle_\mu\langle\hat{B}\rangle_\mu|^2$, 可得:

$$\begin{aligned} & (\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \\ & \geq \langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu + \langle\hat{A}\rangle_\mu^2\langle\hat{B}^\dagger\rangle_\mu\langle\hat{B}\rangle_\mu \\ & \quad - \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu\langle\hat{A}\rangle_\mu\langle\hat{B}\rangle_\mu - \langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu\langle\hat{A}\rangle_\mu\langle\hat{B}^\dagger\rangle_\mu. \quad (2) \end{aligned}$$

定义 $|f\rangle = \hat{A}|\psi_\mu\rangle - \langle\hat{A}\rangle_\mu|\psi_\mu\rangle$, $|g\rangle = \hat{B}|\psi_\mu\rangle - \langle\hat{B}\rangle_\mu|\psi_\mu\rangle$, 利用 $\langle\hat{B}\rangle_\mu = -\langle\hat{B}^\dagger\rangle_\mu$, 可得:

$$\begin{aligned} & | \langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle |^2 \\ & = -\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu^2 - \langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu^2 + 2\langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu \\ & \quad + 4\langle\hat{A}\rangle_\mu^2\langle\hat{B}^\dagger\rangle_\mu\langle\hat{B}\rangle_\mu \\ & \quad - 4\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu\langle\hat{A}\rangle_\mu\langle\hat{B}\rangle_\mu - 4\langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu\langle\hat{A}\rangle_\mu\langle\hat{B}^\dagger\rangle_\mu. \quad (3) \end{aligned}$$

比较 (2) 式和 (3) 式, 可得不等式:

$$\begin{aligned} & 4(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 \\ & \geq | \langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle |^2 + |\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu + \langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu|^2 \\ & \geq |\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu + \langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu|^2. \quad (4) \end{aligned}$$

由 $|\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle_\mu + \langle\hat{A}\hat{B}\rangle_\mu|^2 = |\partial_\mu\langle\hat{A}\rangle_\mu|^2$ 和 $F_\mu = 4(\Delta\hat{B})^2$, 可得到非厄米哈密顿量本征态 $|\psi_\mu\rangle$ 的量子 Fisher 信息 F_μ 对应的 QCRB 依然满足不等式: $(\Delta\mu)^2 \geq$

$\frac{(\Delta\hat{A})^2}{4(\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2} = \frac{1}{F_\mu}$, 其中 F_μ 由 (1) 式给定. 注意这里只利用非厄米系统中特定本征态做参数评估, 不考虑多个本征态之间非正交性以及非么正动力学演化的影响. 值得指出的是, 以上推导过程对非厄米哈密顿量以及本征态的具体形式没有要求. 对于满足本征方程 $H^\dagger|\psi_n^L\rangle = E_n^*|\psi_n^L\rangle$ 的归一化左本征矢 $|\psi_n^L\rangle$, 量子 Fisher 信息表达式及其 QCRB 关系式保持不变, 只需将 (1) 式中的 $|\psi_\mu\rangle$ 替换成 $|\psi_\mu^L\rangle$ 即可.

以上结论可推广到多参数评估情况. 以两参数 $\{\mu, \nu\}$ 为例, 评估误差为 2×2 的协方差矩阵 $\Sigma_{\mu\nu}$, 相应的评估精度极限由 2×2 的量子 Fisher 信息矩阵 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 刻画. 相应的对称对数导数算符 $L_{\mu,\nu}$ [1] 由 $\partial_{\mu(\nu)}\rho = (L_{\mu(\nu)}\rho + \rho L_{\mu(\nu)})/2$ 定义, 可证明非厄米哈密顿量归一化本征态下, $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 的矩阵元表达式为 (推导过程见附录 A)

$$F_{\mu\nu} = 4\text{Re}(\langle\partial_\mu\psi|\partial_\nu\psi\rangle - \langle\partial_\mu\psi|\psi\rangle\langle\psi|\partial_\nu\psi\rangle), \quad (5)$$

与厄米情况一致. 这里和后文相应两参数本征态 $|\psi\rangle$ 都省略了下标 μ, ν . 在无偏估计条件下, 非厄米系统本征态的两参数估计的 QCRB 仍为 $\Sigma_{\mu\nu} \geq \frac{1}{\mathcal{F}_{\mu\nu}}$, 即 $\Sigma_{\mu\nu} - \frac{1}{\mathcal{F}_{\mu\nu}}$ 是一个半正定矩阵, 且 $\det(\Sigma_{\mu\nu}) \geq \det\left(\frac{1}{\mathcal{F}_{\mu\nu}}\right)$. 此外, 利用 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 和贝里曲率 $\Omega_{\mu\nu}$ 的关系, 附录 A 中进一步证明不等式: $\det(\mathcal{F}_{\mu\nu}) \geq 4\Omega_{\mu\nu}^2$, 从而可以给出非厄米系统的两参数估计不确定度的拓扑下界, 具体例子将在下文讨论.

3 基于非厄米系统的量子参数估计

本节研究几个典型的非厄米模型中量子态的量子 Fisher 信息及其参数估计. 3.1 节讨论一维非厄米模型中的单参数估计, 3.2 节讨论二维非厄米模型中的两参数估计.

3.1 单参数估计

首先考虑一维非互易 SSH 模型 [39,46,47], 其原胞内非互易跳跃强度为 $t \pm \delta$, 原胞间跳跃强度为 t' . 在周期边界条件下, 该模型的动量空间哈密顿量为 [47]

$$\mathcal{H}_{\text{SSH-1}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t - \delta + t'e^{-ik} \\ t + \delta + t'e^{ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

令 $t' = 1$ 为能量单位, 两能带为

$$E_\pm(k) = \pm\sqrt{1 + t^2 - \delta^2 + 2t \cos k - 2i\delta \sin k},$$

其中准动量 $k \in [0, 2\pi]$, 则能隙可定义为 $\Delta E \equiv \min_k |E_+(k) - E_-(k)|$. 如图 1(a) 所示, 该模型中能隙闭合 ($\Delta E = 0$) 对应能带中出现 EP 点以及拓扑转变 [47].

考虑实部能量较小的归一化本征态 $|\psi_-\rangle \doteq |\psi\rangle$ (无特别说明时默认为右本征矢 $|\psi^R\rangle$), 首先对参数 $\mu = k$ 进行评估, 其量子 Fisher 信息为 $F_k = 4(\langle\partial_k\psi|\partial_k\psi\rangle - \langle\partial_k\psi|\psi\rangle\langle\psi|\partial_k\psi\rangle)$. 选取 $\delta = 0.2$ 而改变 $t \geq 0$, 可以发现当 $t = 0.8, 1.2$ 时, 在 $k = \pi$ 处出现 EP 点, 对应本征态能量发生虚复转变. 在这两处 EP 点附近, F_k 呈指数增长的趋势, 如图 1(b) 中的上图所示. 为表征 F_μ 在整个动量空间的大小,

定义积分 $M_\mu = \int_0^{2\pi} dk F_\mu$. 对于 $\mu = k$ 情况, M_k 随 t 的变化如图 1(b) 下图中的实线所示. 可以看出, M_k 在 $t = 0.8, 1.2$ 处出现峰值, 说明在能隙闭合点附近对参数 k 的估计具有最高精度. 考虑评估参数 $\mu = \delta$, 量子 Fisher 信息及其积分分别为 F_δ 和 M_δ . 图 1(c) 实线给出 $t = 0$ 和 $t = 0.2$ 时 M_δ 随参数 δ 的变化. 当 $t = 0$ 时, 在 $\delta \geq 0$ 的区域中只有一个能隙闭合点, 对应 M_δ 在 $\delta = 1$ 附近出现尖峰. 当 $t = 0.2$ 时, 在 $\delta = 0.8, 1.2$ 处能隙闭合, 则 M_δ 出现两个尖峰. 考虑评估参数 $\mu = t$ 时, 图 1(d) 中的实线给出 M_t 随参数 t 的变化. 类似地, 当 $\delta = 0$ 和 $\delta = 0.2$ 时, M_t 分别在 $t = 1$ 和 $t = 0.8, 1.2$ 的能隙闭合点附近呈现峰值, 表明量子 Fisher 信息在非厄米和厄米 ($\delta = 0$) 系统中的能隙闭合点附近都会指数增大. 非厄米系统具有独特的 EP 点, 其附近量子 Fisher 信息也会指数增大, 从而提供额外的提高参数估计精度的策略. 在图 1(b)–(d) 中, 进一步数值验证了对于归一化左本征矢 $|\psi^L\rangle$, 其量子 Fisher 信息和整体评估精度具有与右本征矢 $|\psi^R\rangle$ 相同的特征. 原因在于当靠近能隙闭合点或 EP 点时, 无论对于左本征矢还是右本征矢, 系统性质都会随参数的变化而显著变化. 图 1 结果表明, 非厄米系统中本征态在 EP 点或能隙闭合点附近的量子 Fisher 信息显著增大, 从而可以提高未知参数的估计精度.

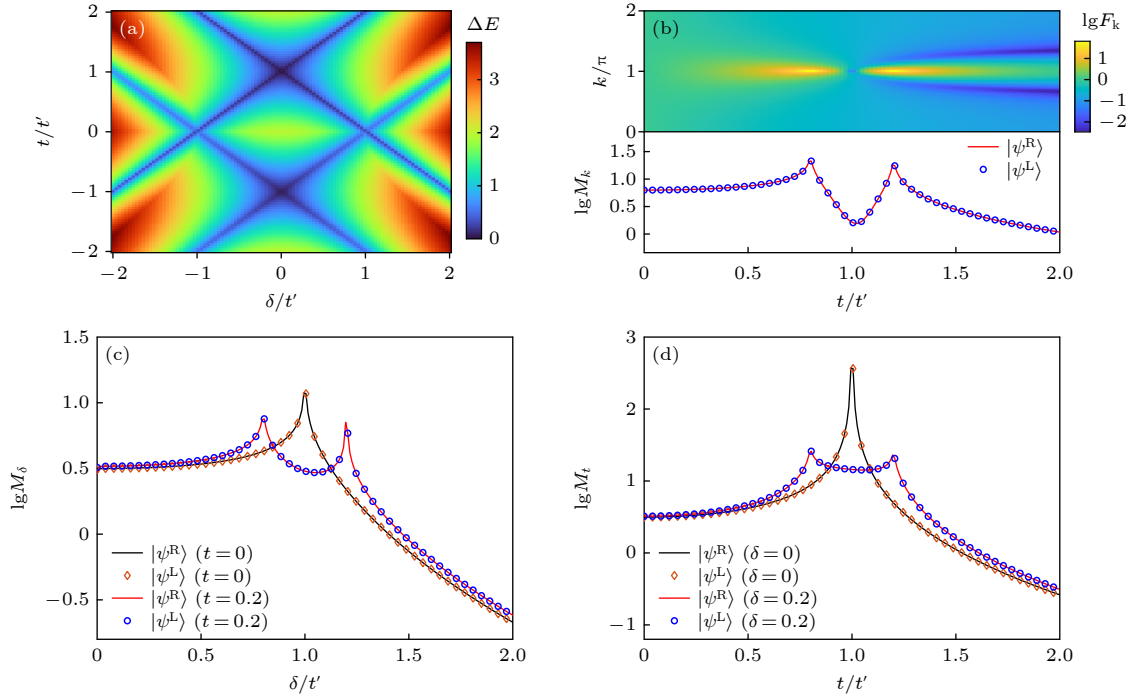


图 1 基于非互易 SSH 模型的单参数估计 (a) 能隙 ΔE 随 t 和 δ 的变化; (b) $\delta = 0.2$ 时利用右本征矢 $|\psi^R\rangle$ 评估 k 的量子 Fisher 信息 F_k 随 k 和 t 的变化 (上图) 及其积分 M_k 随 t 的变化 (下图实线); (c) 利用 $|\psi^R\rangle$ 评估 δ 时 M_δ 随 δ 的变化 (实线); (d) 利用 $|\psi^R\rangle$ 评估 t 时 M_t 随 t 的变化 (实线). 图 (b)—(d) 中的数据点表示利用左本征矢 $|\psi^L\rangle$ 评估 k , t 或 δ 时相应的数值结果. 图中 $t' = 1$, F_k 和 M_μ 做对数处理

Fig. 1. Single-parameter estimation based on the non-reciprocal SSH model: (a) Energy gap ΔE as functions of t and δ ; (b) F_k by the right eigenstate $|\psi^R\rangle$ as functions of k and t for estimating k (top) and the integration M_k by $|\psi^R\rangle$ as a function of t (solid line in the bottom) with $\delta = 0.2$; (c) the integration M_δ by using $|\psi^R\rangle$ (solid line) as a function of δ for estimating δ ; (d) the integration M_t by using $|\psi^R\rangle$ (solid line) as a function of t for estimating t . The data points in panels (b)—(d) denote the corresponding numerical results for estimating k , t or δ by using the left eigenstate $|\psi^L\rangle$. $t' = 1$ is set and F_k and M_μ are logarithmically plotted in the picture.

非互易 SSH 模型在开边界和周期边界条件下具有不同的能谱特征^[39], 因此进一步考虑开边界系统中的参数估计. 实空间中 N 个原胞的非互易 SSH 模型的哈密顿量为

$$H_{\text{SSH-1}} = \sum_{j=1}^N [(t - \delta)a_j^\dagger b_j + (t + \delta)b_j^\dagger a_j] + \sum_{j=1}^{N-1} t'(a_{j+1}^\dagger b_j + \text{H.c.}) + \Gamma(a_1^\dagger b_N + b_N^\dagger a_1), \quad (7)$$

其中 $a_j^\dagger, b_j^\dagger (a_j, b_j)$ 分别代表第 j 个原胞中 A, B 格点的产生 (湮灭) 算符, Γ 表示第一个和最后一个格点之间的耦合参数, 当 $\Gamma = 0$ 时系统处于完全开边界情况. 令 $t' = 1, \delta = 2/3$ 和 $N = 20$, 对角化 $H_{\text{SSH-1}}$ 可得开边界条件下本征能量 E 的实部与虚部随 t 的变化, 分别如图 2(a), (b) 所示. 从图 2(a) 可看出, 带隙间的零能模出现在 $t = \pm\sqrt{t'^2 + \delta^2} \approx \pm 1.20$, 意味着在这两处能隙关闭点发生拓扑相变^[39]. 从

图 2(b) 可以看出, 能谱在 $t \approx \pm 0.66$ 时发生实复转变, 则出现 EP 点. 分别考虑利用中间态 $|\psi_{\text{mid}}\rangle$ 和基态 $|\psi_{\text{ground}}\rangle$ 计算评估参数 t 时的量子 Fisher 信息 F_t , 结果如图 2(c) 所示. 选择 $|\psi_{\text{mid}}\rangle$ 进行评估, 当 $t \approx \pm 1.20$ 时本征能量变为零, 与其他能级之间的能隙闭合, 此时 F_t 出现峰值. 此外, F_t 在 $t = 0$ 附近也呈指数增大, 这是由两个 EP 点在 $\Gamma \rightarrow 0$ 时合并于此所导致, 如图 2(g) 所示. 选择 $|\psi_{\text{ground}}\rangle$ 进行评估, 则 $t \approx \pm 0.66$ 为其 EP 点, 此时 F_t 呈指数增大. 总而言之, 开边界非互易 SSH 模型在不同参数 t 下出现拓扑相变的能隙闭合点和实复转变的 EP 点, 分别对应中间态和非中间态 (如基态) 的量子 Fisher 信息显著增大, 可提高参数评估精度. 在 $\Gamma = 0$ 的开边界条件下, 能隙闭合点和 EP 的位置不依赖于 N , 因此上述结论与原胞数无关.

进一步考虑边界耦合参数 Γ 对能谱和量子 Fisher 信息 F_t 的影响. 选取 $\Gamma = 0.1, 0.6$, 相应本征能谱的实部分别如图 2(d) 和图 2(e) 所示. 可以

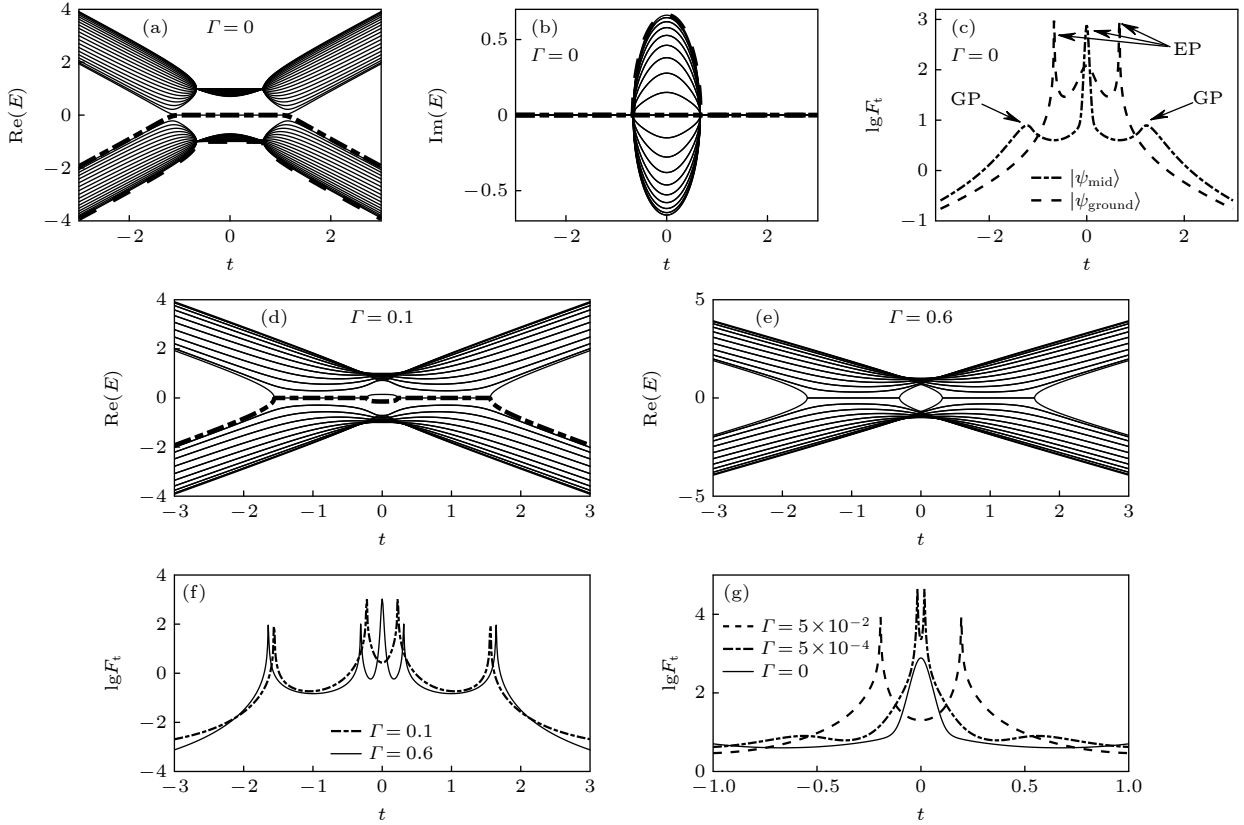


图 2 原胞数 $N = 20$ 的非互易 SSH 模型在不同边界耦合常数 Γ 下的单参数估计 (a) 和 (b) 分别是开边界情况 $\Gamma = 0$ 时本征能量的实部与虚部随参数 t 的变化; (c) 为开边界条件下利用中间态 $|\psi_{\text{mid}}\rangle$ 和基态 $|\psi_{\text{ground}}\rangle$ 评估参数 t 的量子 Fisher 信息 F_t 随 t 的变化, 图中 EP 表示例外点, GP 表示能隙闭合点; (d) 和 (e) 分别是 $\Gamma = 0.1, 0.6$ 时本征能量实部随 t 的变化; (f) 和 (g) 为不同边界耦合常数 Γ 下 F_t 随 t 的变化. 图中 $t' = 1$, $\delta = 2/3$, F_t 做对数处理

Fig. 2. Single-parameter estimation based on the non-reciprocal SSH model with different boundary coupling coefficients Γ and the unit cell of $N = 20$: (a) The real part and (b) the imaginary part of the eigen-spectrum as functions of t under open boundary condition with $\Gamma = 0$; (c) F_t as a function of t by the mid-spectrum eigenstate $|\psi_{\text{mid}}\rangle$ and the ground state $|\psi_{\text{ground}}\rangle$ for estimating t with $\Gamma = 0$. Here EP and GP denote exceptional point and gapless point, respectively; (d) and (e) the real part of energy as a function of t with $\Gamma = 0.1, 0.6$, respectively; (f) and (g) F_t as a function of t different values of Γ . In the figure, $t' = 1$, $\delta = 2/3$, and F_t is logarithmically plotted.

看出, 增大 Γ 对跳跃强度 $t = 0$ 附近的能谱影响比较明显. 从图 2(f) 进一步看出, 对于中间态 $|\psi_{\text{mid}}\rangle$, 增大 Γ 除了移动能谱中 4 个 EP 点的位置, 还会使得 $t = 0$ 处出现能隙闭合点. 当 Γ 较大时 (如 $\Gamma = 0.6$), F_t 会在 $t = 0$ 处出现峰值. 相反地, 如图 2(g) 所示, 随着 Γ 的减小, 能谱中心两侧的 EP 相互靠拢; 当 $\Gamma = 0$ 时合并于 $t = 0$ 处, 此时 F_t 在 $t = 0$ 附近指数增大. 因此, 该非互易模型中边界条件的变化可以通过能谱和量子 Fisher 信息反映出来.

接下来考虑具有增益-耗散的非厄米 SSH 模型 [48,49], 其动量空间哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{SSH-2}}(k) = \begin{pmatrix} i\gamma & t + t'e^{-ik} \\ t + t'e^{ik} & -i\gamma \end{pmatrix}. \quad (8)$$

令 $t' = 1$, 两能带为

$$E_{\pm}(k) = \pm\sqrt{1 + t^2 + 2t \cos k - \gamma^2},$$

能隙 ΔE 随 t 和 γ 的变化如图 3(a) 所示. 在 $\Delta E > 0$ 和 $\Delta E = 0$ 区域, 本征态能量分别为实数和复数, 能隙闭合对应能带出现 EP 点. 考虑本征态 $|\psi_{-}\rangle$ 评估参数 $\mu = k$, 主要结果如图 3(b) 所示. 选取 $\gamma = 0.5$, 当 $t = 0.3$ 和 $t = 1.7$ 时, 即图 3(a) 中的实能量区域, 量子 Fisher 信息 F_k 随参数 k 的变化较为平缓. 当 $t = 1$ 时, 复能谱中 $k \approx 0.84\pi, 1.16\pi$ 两处有 EP 点, 对应 F_k 在这两点附近呈现尖峰. 而且 M_k 也反映了在具有 EP 点的复能量区域, k 的整体估计精度更高.

本节最后考虑一维非厄米量子 Ising 模型 [50,51], 其近邻格点自旋耦合强度为 J , 外加横场为复数场

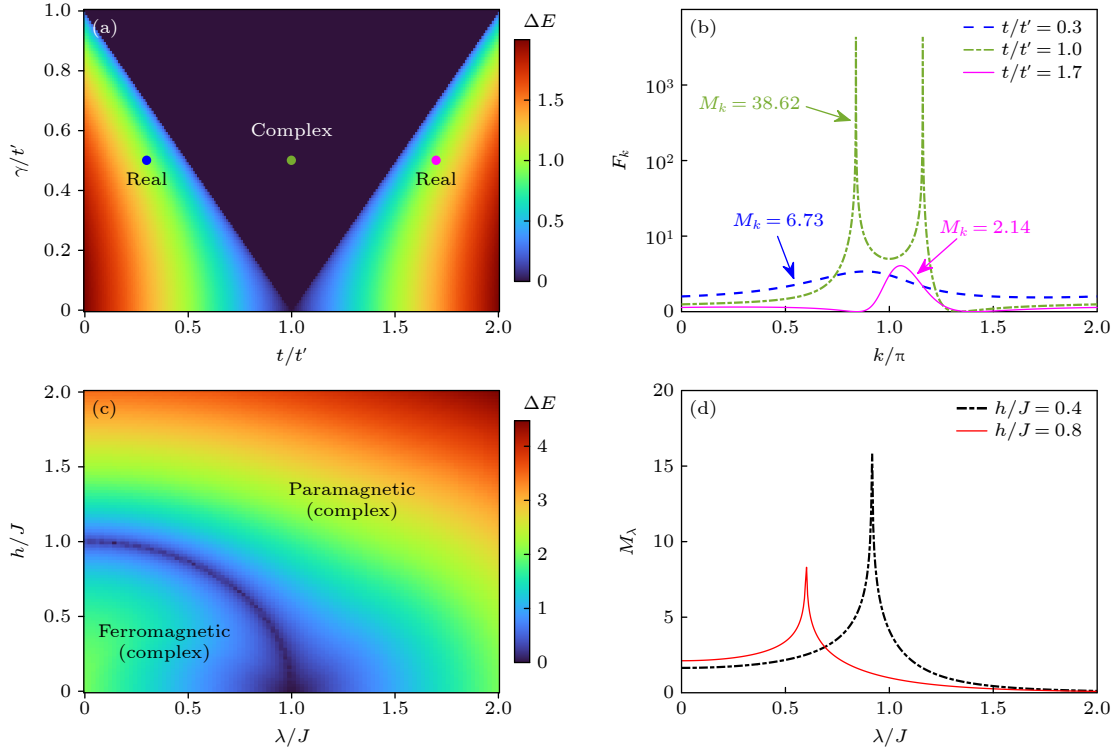


图 3 基于具有增益-耗散的 SSH 模型 ((a), (b)) 和非厄米量子 Ising 链 ((c), (d)) 的单参数估计 (a) 能隙 ΔE 随 t 和 γ 的变化, 有能隙区域能谱为实, 无能隙区域能谱为复且存在 EP 点; (b) $\gamma = 0.5$ 和 $t = \{0.3, 1, 1.7\}$ 时评估 k 的量子 Fisher 信息 F_k 随 k 的变化; (c) 能隙 ΔE 随 λ 和 h 的变化, 能隙关闭处为复能量的铁磁态和顺磁态的相边界; (d) 评估 λ 时的 M_λ 随 λ 的变化. 图中 $t' = 1$ 和 $J = 1$

Fig. 3. Single-parameter estimation based on the gain-and-loss SSH model ((a), (b)) and the non-Hermitian quantum Ising chain ((c), (d)): (a) Energy gap ΔE as functions of t and γ , and the gapped (gapless) region contains real (complex) eigen-spectrum (with exceptional points); (b) F_k as a function of k for estimating k with $\gamma = 0.5$ and $t = \{0.3, 1, 1.7\}$; (c) energy gap ΔE as functions of λ and h , and the gapless line denotes the phase boundary between the ferromagnetic and paramagnetic states with complex energies; (d) M_λ as a function of λ for estimating λ . $t' = 1$ and $J = 1$ are set.

$\lambda + ih$ (λ 和 h 均为实数), 模型哈密顿量为

$$H_{\text{Ising}} = -\sum_j [J\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + (\lambda + ih)\sigma_j^x], \quad (9)$$

其中 σ_j^z 和 σ_j^x 是第 j 个格点的泡利算符. 对此实空间哈密顿量进行 Jordan-Wigner 变换^[52] 和 Fourier 变换, 可得动量空间自由哈密顿量:

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}}(k) = \begin{pmatrix} \lambda + ih - J\cos k & Js\sin k \\ Js\sin k & -\lambda - ih + J\cos k \end{pmatrix}, \quad (10)$$

其中准动量 $k \in [0, \pi]$. 令 $J = 1$, 本征能量为

$$E_{\pm}(k) = \pm\sqrt{1 + \lambda^2 - h^2 - 2\lambda\cos k + 2ih(\lambda - \cos k)}.$$

能隙 ΔE 随参数 λ 和 h 变化如图 3(c) 所示. 考虑能量为 E_- 的本征态, 在参量空间 λ - h 中可分为铁磁态和顺磁态^[50,51], 其能量均为复数, 但两者之间的转变伴随能隙的闭合. 类似地, 可利用此能量闭合特性提高参数估计的精度. 如图 3(d) 所示, 考虑参数 $\mu = \lambda$, 选取 $h = 0.4, 0.8$, 计算积分 $M_\lambda =$

$\int_0^\pi dk F_\lambda$ 随 λ 的变化, 可见 M_λ 分别在 $\lambda \approx 0.92$ 和 $\lambda = 0.6$ 的能隙闭合点附近形成尖峰.

3.2 两参数估计

对于两参数估计, 首先考虑二维非厄米陈绝缘体模型^[38,53,54], 其动量空间哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{Chem}}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} t + \cos k_x + \cos k_y & \sin k_x - \delta - i\sin k_y \\ \sin k_x + \delta + i\sin k_y & -t - \cos k_x - \cos k_y \end{pmatrix}, \quad (11)$$

其中准动量 $k_x, k_y \in [0, 2\pi]$, δ 是非厄米强度. 两能带记为 $E_{\pm}(k_x, k_y)$, 当能隙 $\Delta E = \min_{k_x, k_y} |E_+(k_x, k_y) - E_-(k_x, k_y)| > 0$ 时, 该非厄米模型的能带拓扑性质仍可用陈数 C 刻画^[38,54]:

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} dk_x dk_y \Omega_{k_x k_y}, \quad (12)$$

其中 $\Omega_{k_x k_y} = i(\langle \partial_{k_x} \psi_- | \partial_{k_y} \psi_- \rangle - \langle \partial_{k_y} \psi_- | \partial_{k_x} \psi_- \rangle)$ 为 $|\psi_- \rangle$ 在动量空间中的贝里曲率. 由 C 刻画的拓扑

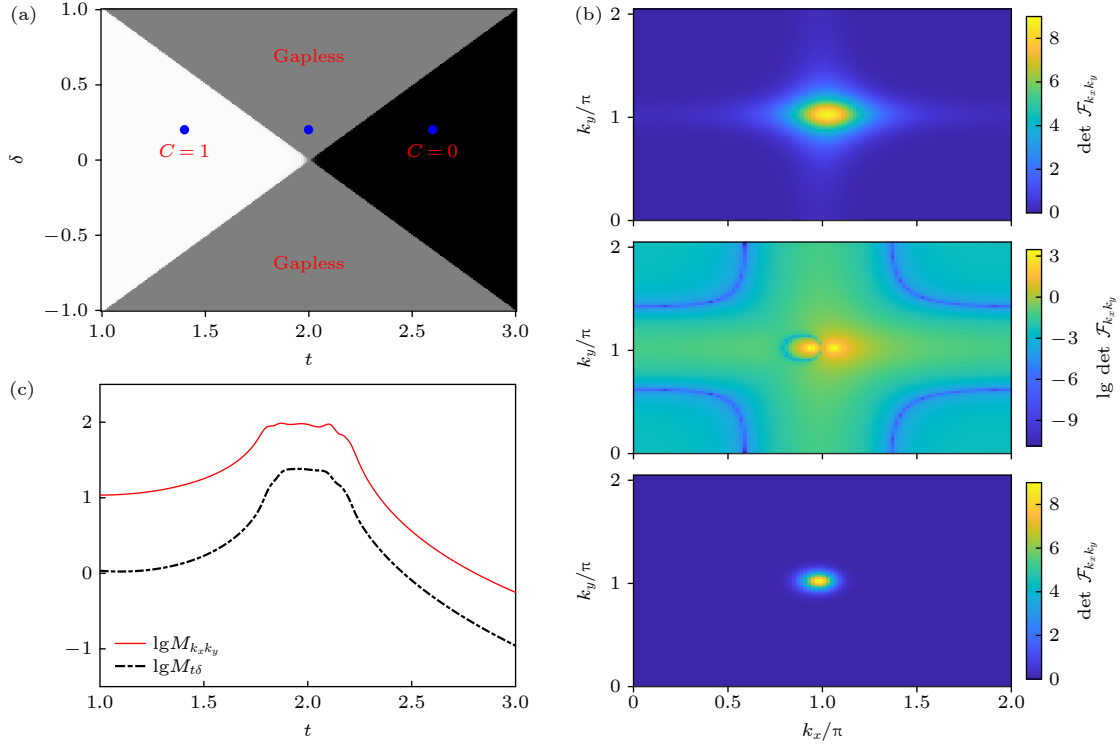


图 4 基于非厄米陈绝缘体模型的两参数估计 (a) 拓扑相图, 包括有能隙的拓扑和平庸区域, 分别对应陈数 $C = 1$ 和 $C = 0$, 以及无能隙区域; (b) $\delta = 0.2$ 和 $t = \{1.4, 2, 2.6\}$ (依次从上到下) 时评估 $\{k_x, k_y\}$ 的量子 Fisher 信息矩阵行列式 $\det \mathcal{F}_{k_x, k_y}$ 随 k_x, k_y 的变化; (c) $\delta = 0.2$ 时评估 $\{k_x, k_y\}$ 的 M_{k_x, k_y} 和评估 $\{t, \delta\}$ 的 $M_{t, \delta}$ 随 t 的变化. 图 (c) 中 $M_{\mu\nu}$ 和图 (b) 中间图 $\det \mathcal{F}_{k_x, k_y}$ 做对数处理

Fig. 4. Two-parameter estimation based on the non-Hermitian Chern-insulator model: (a) Topological phase diagram with gapped topological ($C = 1$), trivial ($C = 0$), and gapless regions; (b) determinant of quantum Fisher information matrix $\det \mathcal{F}_{k_x, k_y}$ as functions of k_x and k_y for estimating $\{k_x, k_y\}$ with $\delta = 0.2$ and $t = \{1.4, 2, 2.6\}$ (from top to bottom); (c) the integration M_{k_x, k_y} for estimating $\{k_x, k_y\}$ and $M_{t, \delta}$ for estimating $\{t, \delta\}$ as a function of t with $\delta = 0.2$. $M_{\mu\nu}$ in panel (c) and $\det \mathcal{F}_{k_x, k_y}$ in the middle of panels (b) are logarithmically plotted.

相图如图 4(a) 所示, 在 δ - t 参量平面中, 拓扑区域 ($C = 1$) 与平庸区域 ($C = 0$) 之间存在无能隙区域 $\Delta E = 0$. 在无能隙区域内, 能谱 $E_-(k_x, k_y)$ 存在 EP 点, 有利于提高参数估计的精度.

考虑两评估参数为 $\mu = k_x, \nu = k_y$, 对应的量子 Fisher 信息矩阵 \mathcal{F}_{k_x, k_y} 由方程 (5) 给出. 图 4(b) 从上至下分别给出了 $t = \{1.4, 2, 2.6\}$ 和 $\delta = 0.2$ 时, \mathcal{F}_{k_x, k_y} 行列式在动量空间中的分布. 当 $t = 1.4$ 和 $t = 2.6$ 时, 分别对应有能隙的 $C = 1$ 和 $C = 0$ 情况, $\det(\mathcal{F}_{k_x, k_y})$ 在整个动量空间中变化较为平缓. 当 $t = 2$ 时, $\det(\mathcal{F}_{k_x, k_y})$ 在两个 EP 点 $k_y = \pi$ 和 $k_x \approx 0.94\pi, 1.06\pi$ 附近呈指数增大. 为表征整体评估精度, 定义二维动量空间的积分

$$M_{\mu\nu} = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \det(\mathcal{F}_{\mu\nu}) dk_x dk_y.$$

图 4(c) 给出了评估参数 $\mu = k_x, \nu = k_y$ 和 $\mu = t, \nu = \delta$ 两种情况下, $M_{\mu\nu}$ 随 t 的变化. 可看出 M_{k_x, k_y}

和 $M_{t, \delta}$ 都在 $1.8 \lesssim t \lesssim 2.2$ 的无能隙区域取得更大值, 表明此时两参数估计的整体精度更高. 此外, 相较于平庸区域, 在拓扑区域的整体评估精度更高.

最后考虑具有等效增益-耗散项的非厄米二能级系统^[26-28], 其哈密顿量表达式为

$$\mathcal{H}_{\text{qubit}}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos\theta + r + i\delta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta - r - i\delta \end{pmatrix}, \quad (13)$$

其中仰角 $\theta \in [0, \pi]$ 和方位角 $\varphi \in [0, 2\pi]$ 给出归一化量子态在 Bloch 球面上的位置, r 代表沿 z 方向的偏置场强度, δ 是非厄米强度. 考虑实部能量较小的本征态, 可定义陈数 $C = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \Omega_{\theta\varphi}$ 刻画系统的拓扑性质^[10,11]. 如图 5(a) 所示, 当 $r^2 + \delta^2 < 1$ 时 $C = 1$, 对应拓扑区域, 而 $r^2 + \delta^2 > 1$ 对应 $C = 0$ 的平庸区域. 考虑评估参数 $\mu = \theta, \nu = \varphi$, 从 $M_{\theta\varphi}$ 在 r - δ 参量平面中的变化可看出, 相比平庸

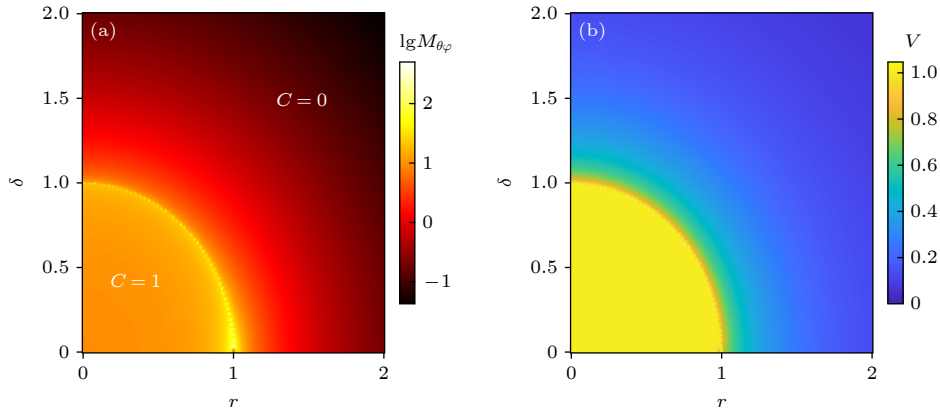


图 5 基于非厄米二能级系统的两参数估计评估 $\{k_x, k_y\}$ 时, (a) M_{k_x, k_y} 和 (b) V 随 r 和 δ 的变化. 图 (a) 中 M_{k_x, k_y} 做对数处理
 Fig. 5. Two-parameter estimation based on the non-Hermitian two-level system. (a) M_{k_x, k_y} and (b) V as functions of r and δ for estimating $\{k_x, k_y\}$. M_{k_x, k_y} in panel (a) is logarithmically plotted.

区域, 拓扑区域的整体评估精度更高. 由于拓扑转变伴随能隙关闭, 因此 $M_{\theta\varphi}$ 的分布在 $r^2 + \delta^2 = 1$ 附近出现尖峰.

此外 $|\psi_{\pm}\rangle$ 满足关系 $\det(\mathcal{F}_{\theta\varphi}) = 4\Omega_{\theta\varphi}^2$, 从而给出此非厄米两能级系统中两参数估计的拓扑下界. 为进一步讨论拓扑下界, 可定义量子 Fisher 信息矩阵行列式的积分:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi \sqrt{\det(\mathcal{F}_{\theta\varphi})} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\varphi |\Omega_{\theta\varphi}|. \end{aligned} \quad (14)$$

结果如图 5(b) 所示, 在拓扑区域中, 贝里曲率 $\Omega_{\theta\varphi}$ 在整个 Bloch 球面上同号, 可得 $V = C = 1$. 在平庸区域, $\Omega_{\theta\varphi}$ 不满足同号条件, 则 $1 > V > C = 0$. 因此, 量子 Fisher 信息矩阵行列式可表征非厄米系统的拓扑转变. 类似 $M_{\theta\varphi}$, V 的结果也表明在拓扑区域中进行参数估计具有更高的精度, 相应的量子 Fisher 信息矩阵给出两参数估计误差的拓扑下界为陈数 C .

4 结论与展望

本文基于量子估计理论, 首先证明了对于非厄米哈密顿量归一化本征态, 量子 Fisher 信息 (矩阵) 的表达式以及单参数估计和两参数估计的 QCRB 关系依然成立. 在此基础上, 计算了一维非互易、具有增益-耗散的 SSH 模型和非厄米量子 Ising 链中, 量子 Fisher 信息随动量或单个外场参

数的变化. 结果表明, 基于这 3 个非厄米模型的单参数估计, 量子 Fisher 信息在能隙闭合区域和 EP 点附近呈现峰值, 其动量空间积分也显著增大, 因此可用于提高参数估计的精度. 最后基于二维非厄米拓扑陈绝缘体模型和二能级系统进行两参数估计, 同样地, 量子 Fisher 信息矩阵行列式及其动量空间积分在能隙闭合或 EP 附近也明显增大. 此外, 量子 Fisher 信息矩阵行列式在拓扑区域整体大于平庸区域, 说明利用非厄米拓扑态进行参数估计的精度比平庸态更高, 同时确定了两参数估计误差的拓扑下界. 这些结果揭示了非厄米 EP 点和拓扑特性在量子参数估计中的应用, 有助于开展基于非厄米系统的量子精密测量研究.

目前已经有多个量子系统实验实现了非厄米有效哈密顿量, 如单光子 [24,25]、冷原子 [26]、金刚石 NV 色心 [27] 和超导量子比特 [28] 等. 与此同时, 最近已有实验报道了厄米系统量子 Fisher 信息或量子度规的测量, 如在金刚石 NV 色心中测量单参数估计 [12] 和多参数估计 [13–15] 的量子 Fisher 信息 (矩阵), 在核磁共振系统 [18] 中测量量子 Fisher 信息, 在超导量子比特系统 [9–11] 中测量量子度规等; 甚至通过光子系统实验测量了非厄米有效哈密顿量中 EP 点附近的量子度规 [32]. 结合这些实验进展, 本文基于非厄米系统的量子参数估计方案有望在实验中实现. 最后需要指出的是, 本文研究局限于非厄米哈密顿量本征态, 如何基于非么正演化动力学和开放系统中的混合态进行最优化参数估计需要进一步探索. 另外, 利用非厄米量子多体效应进行量子精密测量也是值得深入研究的课题.

附录 A

考虑量子系统密度矩阵 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, 对于未知参数 μ, ν 的评估误差为 2×2 的协方差矩阵 $\Sigma_{\mu\nu}$, 相应的评估精度由 2×2 的量子 Fisher 信息矩阵 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 刻画. 对于厄米系统中的量子态 $|\psi\rangle$, 量子 Fisher 信息矩阵元为

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= \frac{1}{2} \text{Tr}(\rho\{L_\mu, L_\nu\}) \\ &= 4\text{Re}(\langle\partial_\mu\psi|\partial_\nu\psi\rangle - \langle\partial_\mu\psi|\psi\rangle\langle\psi|\partial_\nu\psi\rangle), \end{aligned}$$

其中 $\{, \}$ 表示反对易关系, 对称对数导数算符 $L_{\mu(\nu)}$ 由 $\partial_{\mu(\nu)}\rho = (L_{\mu(\nu)}\rho + \rho L_{\mu(\nu)})/2$ 定义. 考虑定态情况中非厄米系统量子态 $|\psi\rangle$, 满足归一化条件 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 以及相同的保留对称对数导数算符, 其量子 Fisher 信息矩阵元为

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= \frac{1}{2} \text{Tr}(\rho\{L_\mu, L_\nu\}) \\ &= 4[\langle\psi|\partial_\mu\psi\rangle\langle\psi|\partial_\nu\psi\rangle + \langle\partial_\mu\psi|\psi\rangle\langle\partial_\nu\psi|\psi\rangle \\ &\quad + \langle\psi|\partial_\mu\psi\rangle\langle\partial_\nu\psi|\psi\rangle + \text{Re}(\langle\partial_\mu\psi|\partial_\nu\psi\rangle)] \\ &= 4\text{Re}(\langle\partial_\mu\psi|\partial_\nu\psi\rangle - \langle\partial_\mu\psi|\psi\rangle\langle\psi|\partial_\nu\psi\rangle), \quad (\text{A1}) \end{aligned}$$

其中用到了关系 $\langle\partial\psi|\psi\rangle = -\langle\psi|\partial\psi\rangle$. 这里只利用非厄米系统特定本征态做参数评估, 因此不受本征态的非正交性以及非么正演化的影响. 此时两参数估计的 QCRB 仍满足 $\Sigma_{\mu\nu} \geq 1/\mathcal{F}_{\mu\nu}$, 可以由矩阵的迹的柯西不等式得到:

$$\text{Tr}(\mathbf{X}^\dagger \mathbf{X})\text{Tr}(\mathbf{Y}^\dagger \mathbf{Y}) \geq \frac{1}{4} |\text{Tr}(\mathbf{X}^\dagger \mathbf{Y} + \mathbf{Y}^\dagger \mathbf{X})|^2, \quad (\text{A2})$$

由于 $\Sigma_{\mu\nu}$ 和 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 都是实矩阵, 定义两个实数集合 $\{f_\mu, f_\nu\}$, $\{g_\mu, g_\nu\}$ 以及实向量 $\mathbf{f} = (f_\mu, f_\nu)^\text{T}$, $\mathbf{g} = (g_\mu, g_\nu)^\text{T}$. 同时定义 $X = f_\mu L_\mu \sqrt{\rho} + f_\nu L_\nu \sqrt{\rho}$, $Y = g_\mu (\hat{O}_\mu - \langle\hat{O}_\mu\rangle) \sqrt{\rho} + g_\nu (\hat{O}_\nu - \langle\hat{O}_\nu\rangle) \sqrt{\rho}$, 其中 \hat{O}_μ, \hat{O}_ν 是未知参数 μ, ν 的测量算符, 可以得到

$$\text{Tr}(\mathbf{X}^\dagger \mathbf{X}) = \mathbf{f}^\text{T} \mathcal{F}_{\mu\nu} \mathbf{f}, \quad \text{Tr}(\mathbf{Y}^\dagger \mathbf{Y}) = \mathbf{g}^\text{T} \Sigma_{\mu\nu} \mathbf{g}, \quad (\text{A3})$$

其中 $\Sigma_{\mu\nu}$ 矩阵元 $Cov_{\mu\nu} = \text{Tr}\left[\rho\left(\frac{1}{2}\{\hat{O}_\mu, \hat{O}_\nu\} - \langle\hat{O}_\mu\rangle\langle\hat{O}_\nu\rangle\right)\right]$. 考虑无偏估计条件 $\text{Tr}(\rho\hat{O}_l) = l$, 对其求偏导可得 $\text{Tr}[(\partial_m \rho)\hat{O}_l] = \delta_{ml}$, 其中 $m, l \in \{\mu, \nu\}$. 结合 $\frac{1}{2}\{\rho, L_m\} = \partial_m \rho$, $\text{Tr}(\partial_m \rho) = 0$, (A2) 式右边化简为

$$\left|\frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbf{X}^\dagger \mathbf{Y} + \mathbf{Y}^\dagger \mathbf{X})\right|^2 = (\mathbf{f}^\text{T} \mathbf{g})^2, \quad (\text{A4})$$

当矩阵 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 可逆, 令向量满足关系式 $\mathbf{f} = \mathcal{F}_{\mu\nu}^{-1} \mathbf{g}$, 联合 (A2) 式—(A4) 式, 可得 $\Sigma_{\mu\nu} \geq 1/\mathcal{F}_{\mu\nu}$.

此外, 量子 Fisher 信息矩阵 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 和贝里曲率 $\Omega_{\mu\nu}$ 的

关系可以由非厄米算符的不确定关系导出. 定义非厄米算符 $\hat{A} = \nabla_\mu, \hat{B} = \nabla_\nu$, 则量子 Fisher 信息矩阵 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 的矩阵元可简化为 $F_{\mu\mu} = 4(\Delta\hat{A})^2, F_{\nu\nu} = 4(\Delta\hat{B})^2, F_{\mu\nu} = 4\text{Re}(\langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}^\dagger\rangle\langle\hat{B}\rangle) = F_{\nu\mu}$, 贝里曲率为 $\Omega_{\mu\nu} = i(\langle\partial_\mu\psi|\partial_\nu\psi\rangle - \langle\partial_\nu\psi|\partial_\mu\psi\rangle) = i(\langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle)$. 同时, 非厄米算符的不确定关系为

$$\begin{aligned} (\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 &\geq |\langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}^\dagger\rangle\langle\hat{B}\rangle|^2 \\ &= \langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle - \langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle\langle\hat{B}^\dagger\rangle\langle\hat{A}\rangle \\ &\quad - \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle\langle\hat{A}^\dagger\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}^\dagger\rangle\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}^\dagger\rangle\langle\hat{B}\rangle, \quad (\text{A5}) \end{aligned}$$

而 $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ 的非对角元与贝里曲率满足关系式

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}F_{\nu\mu} + 4\Omega_{\mu\nu}^2 \\ &= 16(\langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle\langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle - \langle\hat{A}^\dagger\hat{B}\rangle\langle\hat{B}^\dagger\rangle\langle\hat{A}\rangle \\ &\quad - \langle\hat{B}^\dagger\hat{A}\rangle\langle\hat{A}^\dagger\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}^\dagger\rangle\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}^\dagger\rangle\langle\hat{B}\rangle), \quad (\text{A6}) \end{aligned}$$

因此, $\det(\mathcal{F}_{\mu\nu}) \geq 4\Omega_{\mu\nu}^2$. 等号成立条件为非厄米算符不确定关系的等号条件, 即 $|f\rangle = N|g\rangle$, N 是一个复数即可, 其中 $|f\rangle = \hat{A}|\psi\rangle - \langle\hat{A}\rangle|\psi\rangle$, $|g\rangle = \hat{B}|\psi\rangle - \langle\hat{B}\rangle|\psi\rangle$.

参考文献

- [1] Helstrom C W 1969 *J. Stat. Phys.* **1** 231
- [2] Braunstein S L, Caves C M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3439
- [3] Liu J, Yuan H D, Lu X M, Wang X G 2020 *J. Phys. A: Math. Theor.* **53** 023001
- [4] Sidhu J S, Kok P 2020 *AVS Quantum Sci.* **2** 014701
- [5] Ren Z H, Li Y, Li Y N, Li W D 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 040601 (in Chinese) [任志红, 李岩, 李艳娜, 李卫东 2019 物理学报 **68** 040601]
- [6] Provost J P, Vallee G 1980 *Commun. Math. Phys.* **76** 289
- [7] Mera B, Zhang A W, Goldman N 2022 *SciPost Phys.* **12** 018
- [8] Guo W, Zhong W, Jing X X, Fu L B, Wang X G 2016 *Phys. Rev. A* **93** 042115
- [9] Tan X S, Zhang D W, Yang Z, Chu J, Zhu Y Q, Li D Y, Yang X P, Song S Q, Han Z K, Li Z Y, Dong Y Q, Yu H F, Yan H, Zhu S L, Yu Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 210401
- [10] Tan X S, Zhang D W, Zheng W, Yang X P, Song S Q, Han Z K, Dong Y Q, Wang Z M, Lan D, Yan H, Zhu S L, Yu Y 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 017702
- [11] Ding H T, Zhu Y Q, He P, Liu Y G, Wang J T, Zhang D W, Zhu S L 2022 *Phys. Rev. A* **105** 012210
- [12] Yu M, Liu Y, Yang P C, Gong M S, Cao Q Y, Zhang S L, Liu H B, Heyl M, Ozawa T, Goldman N, Cai J M 2022 *npj Quantum Inf.* **8** 56
- [13] Yu M, Li X B, Chu Y M, Mera B, Únal F N, Yang P C, Liu Y, Goldman N, Cai J M 2022 arXiv: 2206.00546[quant-ph]
- [14] Li C H, Chen M, Cappellaro P 2022 arXiv: 2204.13777[quant-ph]
- [15] Zhang X Y, Lu X M, Liu J, Ding W K, Wang X G 2023 *Phys. Rev. A* **107** 012414
- [16] Boixo S, Flammaria S T, Caves C M, Geremia J M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 090401
- [17] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L 2011 *Nat. Photonics* **5**

222

- [18] Liu R, Wu Z, Li Y C, Chen Y Q, Peng X H 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 110305 (in Chinese) [刘然, 吴泽, 李宇晨, 陈显全, 彭新华 2023 物理学报 **72** 110305]
- [19] Di Candia R, Minganti F, Petrovniin K V, Paraoanu G S, Felicetti S 2023 *npj Quantum Inf.* **9** 23
- [20] Liang H B, Su Y G, Xiao X, Che Y M, Sanders B C, Wang X G 2020 *Phys. Rev. A* **102** 013722
- [21] He W T, Lu C W, Yao Y X, Zhu H Y, Ai Q 2023 *Front. Phys.* **18** 31304
- [22] Niu M L, Wang Y M, Li Z J 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 090601 (in Chinese) [牛明丽, 王月明, 李志坚 2022 物理学报 **71** 090601]
- [23] Lu X M, Wang X G 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 120503
- [24] Lin Q, Li T Y, Xiao L, Wang K K, Yi W, Xue P 2022 *Nat. Commun.* **13** 3229
- [25] Xiao L, Deng T S, Wang K K, Zhu G Y, Wang Z, Yi W, Xue P 2020 *Nat. Phys.* **16** 761
- [26] Li J M, Harter A K, Liu J, Leonardo D M, Joglekar Y N, Luo L 2019 *Nat. Commun.* **10** 855
- [27] Wu Y, Liu W Q, Geng J P, Song X R, Ye X Y, Duan C K, Rong X, Du J F 2019 *Science* **364** 878
- [28] Naghiloo M, Abbasi M, Joglekar Y N, Murch K W 2019 *Nat. Phys.* **15** 1232
- [29] Gao X E, Li D L, Liu Z H, Zheng C 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 240303 (in Chinese) [高雪儿, 李代莉, 刘志航, 郑超 2022 物理学报 **71** 240303]
- [30] Zhang X Z, Wang P, Zhang K L, Yang X M, Song Z 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 174501 (in Chinese) [张禧征, 王鹏, 张坤亮, 杨学敏, 宋智 2022 物理学报 **71** 174501]
- [31] Solnyshkov D D, Leblanc C, Bessonart L, Nalitov A, Ren J H, Liao Q, Li F, Malpuech G 2021 *Phys. Rev. B* **103** 125302
- [32] Liao Q, Leblanc C, Ren J H, Li F, Li Y M, Solnyshkov D, Malpuech G, Yao J N, Fu H B 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 107402
- [33] Wiersig J 2020 *Photonics Res.* **8** 1457
- [34] Zhang D W, Zhu Y Q, Zhao Y X, Yan H, Zhu S L 2018 *Adv. Phys.* **67** 253
- [35] Lang L J, Zhu S L, Chong Y D 2021 *Phys. Rev. B* **104** L020303
- [36] Zhang D W, Chen Y L, Zhang G Q, Lang L J, Li Z, Zhu S L 2020 *Phys. Rev. B* **101** 235150
- [37] Xu Z C, Zhou Z Y, Cheng E H, Lang L J, Zhu S L 2022 *Sci. China: Phys., Mech. Astron.* **65** 283011
- [38] Shen H T, Zhen B, Fu L 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 146402
- [39] Yao S Y, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 086803
- [40] Zhang D W, Tang L Z, Lang L J, Yan H, Zhu S L 2020 *Sci. China: Phys., Mech. Astron.* **63** 267062
- [41] Tang L Z, Zhang L F, Zhang G Q, Zhang D W 2020 *Phys. Rev. A* **101** 063612
- [42] Jiang H, Lang L J, Yang C, Zhu S L, Chen S 2019 *Phys. Rev. B* **100** 054301
- [43] Budich J C, Bergholtz E J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 180403
- [44] Koch F, Budich J C 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 013113
- [45] Pati A K, Singh U, Sinha U 2015 *Phys. Rev. A* **92** 052120
- [46] Heeger A J, Kivelson S, Schrieffer J R, Su W P 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 781
- [47] Yin C H, Jiang H, Li L H, Lü R, Chen S 2018 *Phys. Rev. A* **97** 052115
- [48] Zhu B G, Lü R, Chen S 2014 *Phys. Rev. A* **89** 062102
- [49] Yuce C 2018 *Phys. Rev. A* **97** 042118
- [50] Li C, Zhang G, Zhang X Z, Song Z 2014 *Phys. Rev. A* **90** 012103
- [51] Guo Z X, Yu X J, Hu X D, Li Z 2022 *Phys. Rev. A* **105** 053311
- [52] Jordan P, Wigner E 1928 *Z. Physik* **47** 631
- [53] Qi X L, Wu Y S, Zhang S C 2006 *Phys. Rev. B* **74** 085308
- [54] Kawabata K, Shiozaki K, Ueda M 2018 *Phys. Rev. B* **98** 165148

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Quantum Fisher information and parameter estimation in non-Hermitian Hamiltonians*

Li Jing¹⁾ Ding Hai-Tao²⁾ Zhang Dan-Wei^{1)†}

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control, Ministry of Education,*

School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

2) (*National Key Laboratory of Solid State Microstructures, School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

(Received 26 May 2023; revised manuscript received 7 July 2023)

Abstract

Quantum Fisher information bounds the ultimate precision limit in the parameter estimation and has important applications in quantum metrology. In recent years, the theoretical and experimental studies of non-Hermitian Hamiltonians realized in quantum systems have attracted wide attention. Here, the parameter estimation based on eigenstates of non-Hermitian Hamiltonians is investigated, and the corresponding quantum Fisher information and quantum Cramér-Rao bound for the single-parameter and two-parameter estimations are given. In particular, the quantum Fisher information about estimating intrinsic momentum and external parameters in the non-reciprocal and gain-and-loss Su-Schrieffer-Heeger models, and non-Hermitian versions of the quantum Ising chain, Chern-insulator model and two-level system are calculated and analyzed. For these non-Hermitian models, the results show that in the case of single-parameter estimation in these non-Hermitian models, the quantum Fisher information increases significantly in the gapless regime and near the exceptional points, which can improve the accuracy limit of parameter estimation. For the two-parameter estimation, the determinant of the quantum Fisher information matrix also increases obviously near the gapless and exceptional points. In addition, a higher overall accuracy can be achieved in the topological regime than in the trivial regime, and the topological bound in two-parameter estimation can be determined by the Chern number.

Keywords: quantum Fisher information, parameter estimation, non-Hermitian systems, topological states

PACS: 06.20.-f, 06.20.Dk, 03.65.Yz, 03.65.Vf

DOI: [10.7498/aps.72.20230862](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230862)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12174126) and the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2021A1515010315).

† Corresponding author. E-mail: danweizhang@m.scnu.edu.cn

非厄米哈密顿量中的量子Fisher信息与参数估计

李竞 丁海涛 张丹伟

Quantum Fisher information and parameter estimation in non-Hermitian Hamiltonians

Li Jing Ding Hai-Tao Zhang Dan-Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200601 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230862

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230862>

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

基于量子Fisher信息的耗散相互作用光-物质耦合常数的估计

Estimation of light-matter coupling constant under dispersive interaction based on quantum Fisher information

物理学报. 2022, 71(9): 090601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212029>

非厄米系统的量子模拟新进展

Recent progress of quantum simulation of non-Hermitian systems

物理学报. 2022, 71(24): 240303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221825>

非厄米临界动力学及其在量子多体系统中的应用

Non-Hermitian critical dynamics and its application to quantum many-body systems

物理学报. 2022, 71(17): 174501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220914>

实验观测非厄米系统奇异点的手性翻转现象

Experimental observation of chiral inversion at exceptional points of non-Hermitian systems

物理学报. 2022, 71(13): 131101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220842>

非厄米镶嵌型二聚化晶格

Non-Hermitian mosaic dimerized lattices

物理学报. 2022, 71(13): 130302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220890>

纳米机械谐振器耦合量子比特非厄米哈密顿量诱导的声子阻塞

Phonon blockade induced by a non-Hermitian Hamiltonian in a nanomechanical resonator coupled with a qubit

物理学报. 2019, 68(11): 114203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182263>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

路径积分传播子测量的研究进展*

田礼漫¹⁾²⁾ 温永立^{1)2)†} 王云飞¹⁾²⁾ 张善超¹⁾²⁾ 李建锋¹⁾²⁾
杜镜松¹⁾²⁾ 颜辉¹⁾²⁾³⁾ 朱诗亮¹⁾²⁾³⁾

1) (华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (华南师范大学, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

3) (华南师范大学物理前沿科学研究院, 粤港量子物质联合实验室, 广州 510006)

(2023 年 5 月 31 日收到; 2023 年 9 月 19 日收到修改稿)

传播子在路径积分理论中扮演着核心角色, 因此在路径积分理论可使用的多个现代量子物理领域中有重要价值. 然而, 由于其一直未能在实验中被直接测量, 基于路径积分表述研究量子系统的实验进展受到了严重制约. 最近, 基于波函数直接测量方法, 我们提出了传播子测量方案, 并利用单光子实验首次成功实现了传播子的实验测量. 此外, 在这项研究中还首次演示了量子力学的最小作用量原理. 该研究成功解决了路径积分实验研究中的技术难题. 本文综述了此领域的研究进展, 具体为简述波函数直接测量的基本概念和研究进展, 并详细介绍传播子测量的理论模型、实验设计和实验结果. 最后, 介绍了一个重要的应用范例, 即通过传播子测量实现最小作用量原理的实验演示. 本文综述的传播子测量研究进展, 将为今后使用该方法开展相关实验研究提供重要的参考.

关键词: 量子测量, 传播子, 路径积分, 最小作用量原理**PACS:** 03.65. Ta, 03.65.-w**DOI:** 10.7498/aps.72.20230902

1 引言

1948 年, 费曼根据最小作用量原理提出了量子力学的路径积分表述^[1-3], 这是继薛定谔的波动力学和海森伯的矩阵力学之后的第三种量子力学表述方式. 路径积分对现代量子物理学的发展发挥了巨大作用, 是量子场论、量子统计、量子引力等多个领域的基础. 传播子是路径积分理论的核心物理量, 它是获取量子系统重要信息 (如波函数、量子态演化、作用量、拓扑不变量和配分函数) 的重要工具. 然而, 自从提出路径积分以来, 其主要作为研究量子系统的理论工具, 实验研究基本空缺. 基于路径积分表述的量子实验需要对传播子进行

测量, 但在我们的工作^[4]之前, 国际上未有关于传播子测量的实验报告, 这是限制路径积分实验研究推进的主要原因.

传播子描述了量子系统从初态演化到末态的概率幅, 与波函数一样, 都是复值. 而传统的正交投影量子测量模型^[5]仅能对实数物理量进行测量. 1988 年 Aharonov 等^[6]提出了弱测量概念, 他们发现在该测量框架下, 弱值可以把测量信号显著放大, 这种放大效应后来被广泛应用于量子精密测量和微小量测量中. 2011 年 Lundeen 等^[7]巧妙利用弱值是复值这个性质, 把弱值与波函数进行关联, 最终把波函数的实部和虚部分别对应到实验可探测测量中, 实现了对单光子空间波函数的直接测量. 这种测量方法具有简洁、直接的优势, 也被称为

* 广东省基础与应用基础研究基金区域联合基金-青年基金项目 (批准号: 2022A1515110921) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ylwen@m.scnu.edu.cn

直接测量法, 被广泛应用到各类量子态测量实验中, 也有不少研究对这种测量技术进行了重要的推广和优化. 由于传播子和波函数在数学形式和物理性质方面具有相似性, 我们自然可以问一个重要科学问题: 是否可以基于波函数的直接测量方法来研究传播子的实验测量方法? 我们研究组^[4]于2017年开展了此问题的研究, 并于2023年发表了研究结果: 基于波函数的直接测量方法, 提出了实现路径积分传播子测量的理论模型; 类似波函数的直接测量方法, 传播子的实部和虚部分别从可测量算符的期望值得到. 根据这个理论模型, 我们基于单光子设计了传播子的实验测量系统, 成功测量了单光子在自由空间及谐振势中的传播子, 这是传播子的首次实验测量, 为基于路径积分的实验研究解决了关键的技术问题. 此外, 该研究基于传播子的测量对路径积分中的最小作用量原理进行了演示, 通过测量所得的传播子进行分析, 得到了单光子的经典路径, 首次实现了量子力学中的最小作用量原理实验演示. 传播子是现代量子物理中的重要物理量之一, 对其进行实验测量为未来基于路径积分的量子系统实验研究提供了方法, 是推动路径积分从理论研究逐步走向实验研究的途径.

本文旨在综述传播子测量方法的相关研究进展. 第2节概述弱值的概念、波函数直接测量法及其进展, 重点介绍该方法实现复值物理量测量的主要思想. 第3节简要介绍最小作用量原理的沿革以及路径积分理论和传播子的基本概念. 第4节先介绍传播子测量的理论模型, 然后以光学系统为例介绍实现传播子测量的实验设计, 并展示测量所得传播子实验数据. 第5节介绍基于传播子的测量实现最小作用量原理实验演示, 这是传播子测量的重要应用范例. 最后, 对传播子测量的研究进行总结并展望未来的研究方向.

2 波函数的直接测量法

波函数是描述量子系统状态的复值函数, 通过波函数可得出量子系统的各种性质, 是量子理论的核心. 一般而言, 量子可测量的算符是厄密算符, 测量结果也必为实数, 而波函数是复数, 通过传统的正交投影测量方法难以对其直接测量, 量子态层析^[8,9]是测量波函数较成熟和常用的方法, 它通过对一系列算符的投影测量结果重构出系统的密度

矩阵或波函数. 然而, 量子态层析有局限性, 由于它需要大量的测量次数和复杂的重构算法, 在高维量子态测量中复杂度较高. 近年来, 一种基于弱值来直接测量波函数的方法被提出. 弱值是弱测量模型中的概念, 一开始研究者们主要关注弱值的信号放大效应. 后来, 弱值是复值的这个特性被应用到波函数的测量中, 这种测量方法因为具有简洁和直接的优势而受到广泛的关注, 其测量方案和技术也在后续很多研究工作中得到了优化与推广. 本节先介绍弱值与弱测量的基本概念, 然后介绍基于它们发展出来的波函数直接测量方法的研究进展.

2.1 量子弱测量

量子弱测量最早是1988年由Aharonov等^[6]提出的, 在该模型中, 测量可看作是待测系统和指针的相互作用过程, 由哈密顿量 $H = -g(t)\hat{q}\hat{A}$ 描述, 其中 \hat{A} 为待测量的算符, \hat{q} 为指针态的位置算符, $g(t)$ 表示耦合的强度. 待测系统和指针的预选态分别为 $|\phi_m\rangle = \sum_j a_j |j\rangle$ 和 $|\psi\rangle = e^{-\Delta^2 p^2}$, 这里的 Δ 是动量空间中高斯型波包的宽度. 将相互作用演化算符 $\hat{U} = e^{-i\int \hat{H} dt}$ 作用在系统和指针初态上, 假设耦合强度很小, 只保留演化算符级数展开的一阶项, 再将系统投影到后选择态 $|\phi_f\rangle$ 上:

$$\begin{aligned} |f\rangle &= \langle \phi_f | (1 + i\hat{q}\hat{A}) | \phi_m \rangle e^{-\Delta^2 p^2} \\ &\approx \langle \phi_f | \phi_m \rangle e^{i\theta\hat{q} \frac{\langle \phi_f | \hat{A} | \phi_m \rangle}{\langle \phi_f | \phi_m \rangle}} e^{-\Delta^2 p^2} \\ &= \langle \phi_f | \phi_m \rangle e^{-\Delta^2 (p - \theta \langle \hat{A} \rangle_w)^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

对于一个可观测量 \hat{A} 的弱值由 $\langle \hat{A} \rangle_w = \frac{\langle \phi_f | \hat{A} | \phi_m \rangle}{\langle \phi_f | \phi_m \rangle}$ 定义. 观察(1)式可知, 指针态的偏移量正比于弱值, 而当预选态和后选择态接近正交时, 弱值就是一个很大的值, 可以超越 \hat{A} 的本征值取值范围, 这个效应也被称作弱值放大效应, 这个理论模型之后在光子偏振态的测量中被首次验证^[10]. 放大效应后来主要应用于一些微小量的测量中, 弱值可以让待测量在测量仪器上的信号显著放大, 进而提高测量的精度, 这种放大效应在光的自旋霍尔效应^[11]、光束的偏转^[12-14]、角度的偏移^[15,16]、相位的偏移^[17,18]、频率的偏移^[19]、时间的偏移^[20,21]、单光子非线性效应^[22]以及其他各领域^[23,24]的实验中得到了应用, 此外研究者们也对弱值放大效应本身进行了深入的讨论^[25-28].

除放大效应的性质以外,弱值是复值这个性质也逐渐被研究者们关注,并将其应用到波函数的测量中. Lundeen 和 Resch^[29] 研究发现弱测量中湮灭算符(或自旋下降算符)在指针态下的期望值与弱值是正比关系,湮灭算符(或自旋下降算符)的期望值则可以分解成两个可测量算符期望值的叠加,如此,弱值的虚部和实部也可被分别测出. 其后,这个理论研究结果应用到了光子的空间波函数的测量中^[7],在此实验研究中,待测量算符为光子的空间位置投影算符 $\hat{\pi}_x = |x\rangle\langle x|$, 指针为光子的偏振态,相互作用中指针态用 $\hat{\sigma}_y$ 描述,弱测量的相互作用演化算符为 $U = e^{-i\theta\hat{\pi}_x\hat{\sigma}_y} \approx \hat{I} - i\sin\theta\hat{\pi}_x\hat{\sigma}_y$, 选取后选择态为动量空间的本征态 $|p\rangle$, 这时的弱值可表示为 $\langle\hat{\pi}_x\rangle_w = \frac{\langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle}{\langle p|\psi\rangle} = \frac{e^{ipx/\hbar}\psi(x)}{\phi(p)}$, $\psi(x)$ 和 $\phi(p)$ 分别是 x 位置的波函数和动量空间 p 的波函数. 可以取 $p=0$ 使 $e^{ipx/\hbar} = 1$, $|p=0\rangle$ 与任意本征态 $|x\rangle$ 的内积均为常数,上式便简化为

$$\langle\hat{\pi}_x\rangle_w = \frac{\psi(x)}{\phi(0)} = k\psi(x), \quad (2)$$

这里 k 是一个与 x 无关的常数,因此便得到了波函数 $\psi(x)$ 与弱值 $\langle\hat{\pi}_x\rangle_w$ 的正比关系,只要测量出弱值便能得到波函数. 而弱值则可以由指针态的湮灭算符期望值得出:

$$\langle\hat{\pi}_x\rangle_w = \frac{2}{\sin\theta}\langle f|\hat{\sigma}^-|f\rangle = \frac{1}{\sin\theta}(\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle - i\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle). \quad (3)$$

在实验中,指针在 $\hat{\sigma}_x$ 和 $\hat{\sigma}_y$ 的期望值可分别通过测量光子在 $\pm 45^\circ$ 斜偏振和左/右旋偏振态的投影概率差求得,因此光子的空间波函数的实部和虚部就可以分别直接从实验测量结果中得到:

$$\begin{aligned} \text{Re}[\psi(x)] &= \frac{1}{\phi(0)\sin\theta}\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle, \\ \text{Im}[\psi(x)] &= \frac{1}{\phi(0)\sin\theta}\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

这种测量方法具有简便性和直接性,待测波函数直接正比于实验可观测量,不需要大量的投影测量次数和复杂的重构算法,因此称为直接测量法. 随后,直接测量法得到了广泛的应用和推广,例如,它在光子偏振态^[30]、光子轨道角动量态^[31]、密度矩阵^[32]、Bohmian 轨迹^[33–35]、高维量子态^[36]、纠缠量子态^[37]、多粒子量子态^[38]、几何相位^[39] 等多个领域的测量中得到应用,也有研究提出了免扫描的直接

测量法^[40],大大提升了高维量子态的测量效率,此外,研究者们也对这种方法进行了深入讨论以及推广^[41–51].

2.2 任意耦合强度的直接测量法

基于弱值对波函数直接测量的方法要求待测系统与指针的耦合足够小,这样会导致从指针提取待测系统信息的信号强度很弱,在一些噪声较大的系统中难以获得较好的信噪比. 2016年 Vallone 和 Dequal^[52] 的研究发现,波函数直接测量法中弱耦合并不是必要的,这个耦合可以是任意强度. 特别是,当系统和测量仪器之间的耦合最大时,这种强测量的测量精度优于弱测量,同时还保留了弱测量方案中的简洁性和直接性. 这里以空间波函数测量的模型为例,在没有弱耦合近似的情况下,待测系统和指针相互作用的演化算符可表示为

$$\hat{U} = e^{-i\theta\hat{\pi}_x\hat{\sigma}_y} = \hat{I}_\pi\hat{I}_\sigma - 2\sin^2\frac{\theta}{2}\hat{\pi}_x\hat{I}_\sigma - i\sin\theta\hat{\pi}_x\hat{\sigma}_y, \quad (5)$$

其中, $\hat{\sigma}_y$ 为光子偏振对应的泡利算符,待测空间波函数为 $|\psi\rangle$, 系统与指针的联合初态为 $|\Psi_{in}\rangle = |\psi\rangle \otimes |0\rangle_P$, 其中指针态为二维量子比特 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. 在弱测量中 θ 要求足够小,现在让耦合强度最大 $\theta = \pi/2$. 经过测量过程演化后将系统投影到零横向动量的态 $|p_0\rangle$ 上,波函数的实部和虚部就能分别表示为

$$\begin{aligned} \text{Re}[\psi(x)] &= \frac{1}{2\phi(0)}(\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle + 2\langle f|\hat{P}_1|f\rangle), \\ \text{Im}[\psi(x)] &= -\frac{1}{2\phi(0)}\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $\phi(0)$ 是与 x 无关的常数, $\hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|$ 是指针态 $|1\rangle$ 的投影算符. 对比 (4) 式和 (6) 式,实验观测结果和待测波函数之间少了 $1/\sin\theta$ 这个系数,由于在弱测量情况下 $\sin\theta$ 是一个小量,强测量方案的信号强度比弱测量方案有着 $1/\sin\theta$ 倍的放大,因此强测量方案的测量精度也就相应得到了显著提升. 由于强测量方案具备明显的优势,后来也被广泛地应用,例如,应用在光子时域波函数的测量^[53]、光子二维横向空间波函数测量^[54]、高维波函数^[42,55–57] 以及混合态的测量^[58,59],也有研究者在离子系统中观察到从弱测量到强测量的过渡^[60].

3 最小作用量原理和费曼路径积分

3.1 最小作用量原理沿革

最小作用量原理被科学家看作是物理学,甚至

是自然界中最具普适性的基本原理,它具备简洁和统一的科学美学特征,在物理学乃至科学发展史中有着极其重要的地位.自然界总是以最节省的方式达到它的目的,这就是最小作用量原理的核心思想.这个原理以及其变体几乎渗透到物理学中的每个角落.

最小作用量原理在物理学中的应用可追溯到费马原理.17世纪,费马在研究光的折射现象时提出,“光的传播总是沿着花费时间最小的路线”,这是最小作用量原理思想研究自然界问题的第一个成功范例.其后,科学家莫培督(Maupertuis)对这种极值思想进一步推广和总结,他认为,“自然界总是以一种最节省的方式运行”,并提出了作用量的概念,为最小作用量原理的数学形式构建了一个雏形.几乎同一时期,欧拉也基于这种极值思想提出了物体运动的变分方程,拉格朗日受欧拉的启发,得出了分析力学的核心方程——欧拉-拉格朗日方程,后来数学家哈密顿将其总结成为哈密顿原理:

$$\delta S = \delta \int_0^t L dt = 0, \quad (7)$$

这是后来物理学中最小作用量原理常用的数学形式.

19世纪末,著名物理学家亥姆霍兹(Helmholtz)把最小作用量原理应用于热力学和电动力学,并证明据此可以推导出麦克斯韦方程组.他进一步把该原理看作是支配整个物理学领域统一的基本原理,即试图把这一原理推广到物理学的所有领域中,他提出,“最小作用量原理很可能是关于一切自然过程的普遍性原理……它作为具有启发性和指导性的原理,在我们寻求新现象的规律时将具有极高的价值”.此后,普朗克、诺特、希尔伯特、薛定谔、费曼等众多物理学家或数学家在亥姆霍兹指引的方向上不懈努力,取得了丰硕的成果,极大地推动了现代物理学的发展.历史上有一个故事,数学家希尔伯特知道了爱因斯坦关于广义相对论研究的初步思想后,利用最小作用量原理,比爱因斯坦还早十几天推导出广义相对论场方程,即现在称为爱因斯坦-希尔伯特场方程的广义相对论场方程.另一方面,数学家诺特把该原理和对称性结合,推导出诺特定理,给出了物理学中的另一块基石——对称性和守恒律的关系.因此,最小作用量原理担当着物理学的核心角色,它可以推导出物理学中几乎全部关键的物质运动方程.

3.2 路径积分与传播子

路径积分^[3]是量子力学的一种表述方法,其完整方法框架由理查德·费曼^[1]于1948年提出,它以最小作用量原理^[61]为核心,通过传播子和路径的泛函积分来描述量子系统的运动和演化.路径积分在量子物理的发展中具有承前启后的作用,一方面,它通过最小作用量原理形象地描述了经典力学和量子力学的关联,另一方面,它把时间和空间同等化处理,更易于从非相对论推广到相对论的协变形式,因此极大地推动了现代量子场论的发展.

在路径积分理论中,一个粒子从初始时刻 t_a 的起始位置 x_a 到末时刻 t_b 的末位置 x_b 的概率幅由传播子描述: $K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | \hat{T}(t_b - t_a) | x_a \rangle$,其中 $\hat{T}(t_b - t_a)$ 是时间演化算符.在量子力学中,粒子并不会以特定的一条路径运动,而是同时沿着所有可能的路径运动至终点,路径积分的提出基于两个基本假设:1)所有可能的路径概率都相等;2)虽然路径的概率相等,但其相位不同,其相位角等于作用量 S 和 \hbar 的比值.任意的一条路径 $x(t)$ 的贡献可以用一个复振幅表示: $\varphi[x(t)] = C e^{(i/\hbar)S[x(t)]}$,其中 $S[x(t)]$ 为路径 $x(t)$ 的作用量,它是路径拉格朗日量的时间积分: $S[x(t)] = \int L[\dot{x}(t), x(t), t] dt$.传播子则可对所有路径的贡献进行积分求得:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \mathcal{N} \int_{x_a}^{x_b} e^{(i/\hbar)S[x(t)]} \mathcal{D}x(t). \quad (8)$$

对于那些作用量 S 远大于 \hbar 的路径,它们的概率相等,但是相位变化剧烈,在叠加之后其贡献相干相消.当一条路径与其临近路径在一级近似上全都给出相同相位时,这些路线不会相互抵消,而是干涉相长,这就是最小作用量原理 $\delta S = 0$ 确定的路径.在宏观世界中, \hbar 是一个趋近于0的微小量,作用量与它的比值 S/\hbar 便趋近于无穷大,路径很容易相消,只有满足 $\delta S = 0$ 的路径才是稳定的路径,因此宏观世界中物体运动轨迹就是唯一确定的.路径积分以一种简洁、图像化的方式重新诠释了量子力学,它通过最小作用量原理解释了经典力学与量子力学之间的“过渡”^[62].路径积分在提出以后,在物理学的多个关键领域有着重要的影响^[63–74].

4 传播子的直接测量

4.1 传播子测量理论方案

传播子测量的理论方案如图 1 所示, 设粒子在 t 时刻的横向位置波函数可以表示为 $|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^d \psi(x_j, t)|x_j\rangle$, 选取一个量子比特为指针, 指针两个本征态为 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$. 系统与指针的联合初态为 $|\phi_{in}\rangle = |\psi\rangle|0\rangle$. 在初始时刻 t_a , 利用一个相互作用过程将待测系统和指针进行耦合, 这个耦合操作可以用一个演化算符表示: $\hat{U}(\theta) = e^{-i\theta\hat{\pi}_x\hat{\sigma}_y}$, 这里 $\hat{\pi}_x = |x\rangle\langle x|$ 和 $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ 分别是空间位置 x 的投影算符和作用在指针态上的泡利矩阵, θ 表示耦合强度. 这里选取 $\theta = \pi/2$, 也就是强测量的情况. 经过耦合后, 系统的联合态可写为

$$\begin{aligned} |\phi_a\rangle &= e^{-i\theta\hat{\pi}_x\hat{\sigma}_y}|\phi_{in}\rangle \\ &= [|\psi\rangle - \psi(x_a, t_a)|x_a\rangle]|0\rangle - \psi(x_a, t_a)|x_a\rangle|1\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

然后, 系统进入势场 $V(x)$ 的演化区域, 粒子从 t_a 时刻演化到 t 时刻的演化算符为: $\hat{T}(t-t_a) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^t \hat{H}dt'\right)$, 其中哈密顿量为 $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + V(x)$, 经演化后的系统状态为

$$\begin{aligned} |\phi_t\rangle &= [\hat{T}(t-t_a)|\psi\rangle - \psi(x_a, t_a)\hat{T}(t-t_a)|x_a\rangle]|0\rangle \\ &\quad - \psi(x_a, t_a)\hat{T}(t-t_a)|x_a\rangle|1\rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

此时, 对系统进行后选择, 将系统投影到空间位置的本征态 $\langle x_m|$, 这样指针末态 $|f\rangle = \langle x_m|\phi_t\rangle$ 便可以

写为

$$\begin{aligned} |f\rangle &= [\langle x_m|\hat{T}(t-t_a)|\psi\rangle \\ &\quad - \psi(x_a, t_a)\langle x_m|\hat{T}(t-t_a)|x_a\rangle]|0\rangle \\ &\quad - \psi(x_a, t_a)\langle x_m|\hat{T}(t-t_a)|x_a\rangle|1\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

利用传播子的定义式 $K(x_m, t; x_a, t_a) = \langle x_m|\hat{T}(t-t_a)|x_a\rangle$ 将 (11) 式简化为

$$\begin{aligned} |f\rangle &= [\psi(x_m, t) - \psi(x_a, t_a)K(x_m, t; x_a, t_a)]|0\rangle \\ &\quad - \psi(x_a, t_a)K(x_m, t; x_a, t_a)|1\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

这样传播子的信息就相当于存储到了指针中, 传播子的提取方法类似于波函数的直接测量法, 测量出末态 $|f\rangle$ 在 $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|$ 这些算符的期望值:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}[\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle - i\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle - \langle f|\hat{P}_1|f\rangle] \\ &= -\psi^*(x_m, t)\psi(x_a, t_a)K(x_m, t; x_a, t_a), \end{aligned} \quad (13)$$

最后就能得到传播子:

$$K(x_m, t; x_a, t_a) = \frac{K'(x_m, t; x_a, t_a)}{\psi^*(x_m, t)\psi(x_a, t_a)}, \quad (14)$$

其中 $K'(x_m, t; x_a, t_a) = \frac{1}{2}[-\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle + i\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle] + \langle f|\hat{P}_1|f\rangle$. 从 (14) 式可知, 如果要测量出传播子, 还需要对波函数 $\psi(x_m, t)$ 和 $\psi(x_a, t_a)$ 进行测量, 此处可以直接采用波函数直接测量法对其进行测量. 然而, 由于 $\psi(x_m, t)$ 是经过 $\hat{T}(t-t_a)$ 的波函数, 而 $\hat{T}(t-t_a)$ 是未知的, $\psi(x_m, t)$ 有可能等于零, 在此情况下, 上述的测量方法就无法测出传播子

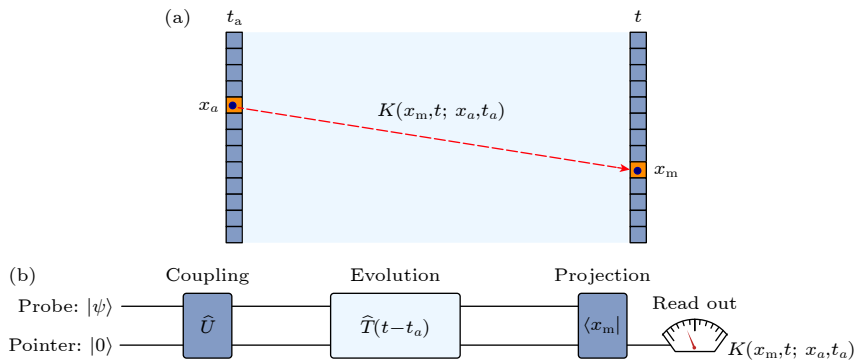


图 1 路径积分示意图及测量方法 (a) 传播子, 粒子从 (x_a, t_a) 传播到 (x_m, t) ; (b) 测量传播子的量子线路. 为了测量 $K(x_m, t; x_a, t_a)$, 首先需要制备量子态 $|\psi\rangle$ 和指针 $|0\rangle$. 然后, 在 t_a 时刻, 耦合操作 \hat{U} 将系统的位置波函数与指针进行耦合. 演化之后, 将系统投影到 t 时刻的位置 x_m 上, 从指针读出 $K(x_m, t; x_a, t_a)$

Fig. 1. Path integration diagram and measurement method: (a) Propagators: the propagation from (x_a, t_a) to (x_m, t) ; (b) protocol to measure the propagators. To measure $K(x_m, t; x_a, t_a)$, the quantum state $|\psi\rangle$ and pointer $|0\rangle$ are prepared first. Then, at time t_a , a coupling operation \hat{U} couples the positional wave function of the probe system with the pointer. After the evolution, the system is projected to position x_m at t , and $K(x_m, t; x_a, t_a)$ can be read out from the pointer.

$K(x_m, t; x_a, t_a)$, 但传播子是反映哈密顿量的信息, 与波函数无关. 为了解决这个问题, 在 t_a 时将系统分为两部分 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$, 这两部分经过不同的演化, 演化算符 $\hat{T}_1(t-t_a) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^t \left[\frac{p^2}{2m} + V(x, t')\right] dt'\right\}$, 对应需要测量的传播子 $K(x_m, t; x_a, t_a) = \langle x_m | \hat{T}_1(t-t_a) | x_a \rangle$. 对于 $|\phi_2\rangle$ 这一部分的演化可以认为是缓慢的, 经过 $\hat{T}_2(t-t_a) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^t \frac{p^2}{2m} dt'\right)$ 演化后的系统变化非常微小, 可以近似为 $\hat{T}_2(t-t_a) |\psi\rangle \approx |\psi\rangle$. 在 t_b 时刻对态 $|\phi_2\rangle$ 的指针执行一个旋转操作, 其演化算符为 $e^{i\frac{\pi}{4}\hat{\sigma}_y} |\phi_2\rangle$, 然后投影至 $|0\rangle$ 态, 而 $|\phi_1\rangle$ 将投影到 $|1\rangle$ 态, 最后得到:

$$\begin{aligned} |\phi'_1\rangle &= |1\rangle \langle 1 | \phi_1 \rangle = -\psi(x_a, t_a) \hat{T}_1(t-t_a) |x_a\rangle |1\rangle, \\ |\phi'_2\rangle &= |0\rangle \langle 0 | e^{i\frac{\pi}{4}\hat{\sigma}_y} | \phi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{T}_2(t-t_a) |\psi(x_a, t_a)\rangle |0\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

合并这两个态 $|\phi'\rangle = |\phi'_1\rangle + |\phi'_2\rangle$. 将合并后的态 $|\phi'\rangle$ 投影到后选择态 $\langle x_m |$ 上得到指针末态并利用近似条件 $\langle x_m | \hat{T}_2(t-t_a) |\psi\rangle \approx \psi(x_m, t_a)$ 得:

$$\begin{aligned} |f'\rangle &= \langle x_m | \phi' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi(x_m, t_a) |0\rangle \\ &\quad - \psi(x_a, t_a) K(x_m, t; x_a, t_a) |1\rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

通过测量处于位置 x_m 和时间 $t = z/c$ (c 为真空中光速) 处的指针态结束演化. 最终得到传播子的表达式为

$$K(x_m, t; x_a, t_a) = \frac{K''(x_m, t; x_a, t_a)}{\sqrt{2}\psi^*(x_m, t_a)\psi(x_a, t_a)}, \quad (17)$$

其中, $K''(x_m, t; x_a, t_a) = -\langle f' | \hat{\sigma}_x | f' \rangle + i \langle f' | \hat{\sigma}_y | f' \rangle$, $\psi^*(x_m, t_a)$ 和 $\psi(x_a, t_a)$ 都是 t_a 时刻的空间波函数, 可认为是按需制备的初态波函数, 保证其在所需探测位置不为零.

4.2 直接测量传播子的实验设计

根据 4.1 节的传播子测量方案, 可设计测量传播子的实验. 在 4.1 节的传播子测量方案中, 需要对待测系统的空间模式和一个二维指针进行耦合, 并且还需要对待测系统进行位置后选择, 由于光子的空间模式调控和测量的技术和设备相对较成熟, 且光子的传播与演化受到环境的影响较小, 因此比较适合用于演示上述传播子的测量方案. 下面基于光学系统介绍实现传播子测量的实验设计.

光子是无静止质量的相对论性粒子, 而 4.1 节

中的传播子是基于有静止质量粒子的哈密顿量讨论的, 所以这里需要先对光子在垂直于传播方向上的空间波函数演化做一个近似. 光子的哈密顿量可以写为 $H = c|\mathbf{p}| = c\sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$, x, y 是光子的横向空间坐标, z 为光子的传播方向, 动量 p_z 与光子的波长有关, $p_z = \hbar k_z = 2\pi\hbar/\lambda$. 选取光子的高斯波包为横向空间波函数 $|\psi(x, y)|^2 = \mathcal{N}_G e^{-(x^2+y^2)/(a_x^2+a_y^2)}$, 其中 \mathcal{N}_G 是归一化常数. 动量不确定度 p_x (p_y) 是 \hbar/a_x (\hbar/a_y), 这里选取光子的波长为 $\lambda = 795$ nm 并且 $a_x = a_y \approx 0.4$ mm, 在此条件下, 光子在传播方向上的动量远大于横向的动量不确定度, 也就是 $p_z \gg p_x, p_y$, 此时哈密顿量可以近似为

$$H \approx \frac{cp_x^2}{2p_z} + \frac{cp_y^2}{2p_z} + cp_z. \quad (18)$$

把 p_z 看成一个常数, 演化时间就与 z 方向的位置成正比: $t = z/c$, c 为真空中光速. 这里仅考虑 x 方向的演化, 波函数 $\psi(x, t)$ 可以用类薛定谔方程描述:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{cp_x^2}{2p_z} \psi(x, t). \quad (19)$$

将 $\frac{cp_x^2}{2p_z}$ 类比于 $\frac{\hat{p}_x^2}{2m}$ 就能得到光子等效质量 $m = \frac{p_z}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda c}$, 光子便能看作是有质量的非相对论性粒子.

测量传播子 $K(x, t; x_a, t_a)$ 的实验方案示意图如图 2 所示. 波长为 795 nm、横向为高斯模的相干光从单模光纤中出射, 经过半波片 (HWP) 和偏振分束器 (PBS) 将光的偏振变成垂直偏振 $|0\rangle$. D 型反射镜将光反射到空间光调制器 (SLM) 上, 中途经过一个半波片将垂直偏振光旋转成斜偏振光, 其偏振态可以写为 $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. 利用 SLM 对空间位置 x_a 的光产生一个相移, 经过调制后的偏振态就变为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\pi}|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0\rangle + |1\rangle) = -|-\rangle$, 这个调制相当于么正演化 $\hat{U} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{\pi}_{x_a}\hat{\sigma}_y}$. SLM 反射出的光再次经过 HWP 对偏振进行一个逆变换, 没有经过 SLM 调制的光偏振从 $|+\rangle$ 被还原为 $|0\rangle$, 经过 SLM 调制的光偏振从 $|-\rangle$ 变成了 $|1\rangle$, 这样就利用半波片和空间光调制器 (SLM) 将横向空间波函数与指针耦合在一起了, 假设在 SLM 上调制完成的瞬间为时刻 t_a .

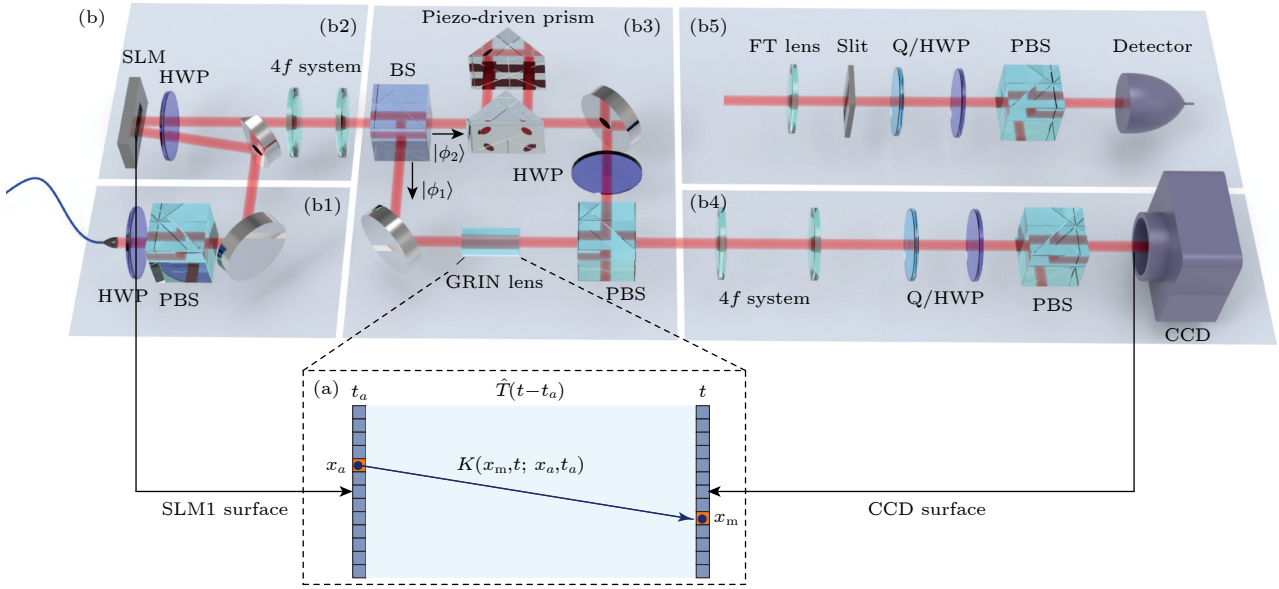


图 2 实验示意图 (a) 演化和探测区域; (b1) 初态制备; (b2) 系统位置波函数与指针耦合; (b3) 态的演化; (b4) 位置的后选择与指针的读出; (b5) 波函数的测量

Fig. 2. Schematic diagram of the experiment: (a) The evolution and detection region; (b1) initial state preparation; (b2) coupling of wave function and pointer; (b3) state evolution; (b4) post-selection of position and the readout of the pointer; (b5) measurement of the wave function.

调制完成的光经过 $4f$ 成像系统 (焦距分别为 450, 150 mm) 将位于 SLM 表面位置的光子的波前投影到演化区域的起点. $50:50$ 的 BS 将光路分成两路 $|\phi_1\rangle$ 和 $|\phi_2\rangle$, $|\phi_1\rangle$ 这一部分会进入演化区域, 其演化算符为 $\hat{T}(t-t_a)$, 设计一个与折射率成正比的有效势场 $V(x)$, 使用变折射率 (GRIN) 透镜就能实现产生谐振势, GRIN 的入射端到出射端就是 t_a 时刻的位置到 t 时刻的位置, 光在折射率均匀的空气中的演化就相当于光在自由空间的演化. 演化后, 光通过 PBS 将 $|\phi_1\rangle$ 态投影到指针态 $|1\rangle$, 只有透射端出来的光会被探测. $|\phi_2\rangle$ 这部分通过 HWP 和 PBS, 反射端的光投影到 $|-\rangle$ 态并与 $|\phi_1\rangle$ 这部分透射的光合并. 压电驱动棱镜用于稳定这两个光路之间的光程差. 图 2(b4) 中的 $4f$ 成像系统 (焦距分别为 50, 100 mm) 将 t 处的波前投影到电荷耦合元件 (CCD) 相机成像表面, 通过调节 CCD 的纵向位置就可以测量不同 t 时刻的光的空间分布, CCD 上像素的位置表示 x 的投影位置. 用四分之一波片或半波片 (Q/HWP) 和 PBS 得到的两个线偏振 ($|+\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$, $|-\rangle = 1/\sqrt{2} \times (|0\rangle - |1\rangle)$) 和两个圆偏振 ($|R\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle + i|1\rangle)$, $|L\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle - i|1\rangle)$) 来读取指针的期望值 $\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle$, $\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle$, CCD 测到的 4 个基矢强度量表示为 $\{P_+, P_-, P_R, P_L\}$, 把得到的期望值

$\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle = P_+ - P_-$, $\langle f|\hat{\sigma}_y|f\rangle = P_R - P_L$ 代入到方程 (17) 中就可以得到 $K''(x_m, t; x_a, t_a)$. 由于 $K''(x_m, t; x_a, t_a)$ 包含 t_a 时刻的波函数, 因此要进一步提取出 $K(x_m, t; x_a, t_a)$ 需要测量出波函数 $\psi(x_j, t_a)$. 图 2(b5) 是综合 Vallone^[52] 和 Lundeen^[7] 的研究方法设计的波函数测量系统. 当测量波函数时, 图 2(b3) 出射的光子直接进入图 2(b5) 所示的系统, 然后光子通过一个傅里叶变换透镜 (FT lens), 这个透镜的焦平面为光子的动量分布函数, 在透镜光轴位置放置一个狭缝, 这样就可以仅让横向动量为零的光子通过, 这个操作相当于把系统投影到了动量后选择态 $|p_0\rangle$. 在狭缝后面放置 HWP/QWP 和 PBS 用于偏振态的投影, 然后用光电探测器 (Detector) 探测光功率, 将其在偏振态 $\{|+\rangle, |-\rangle, |R\rangle, |L\rangle, |1\rangle\}$ 测得的光功率代入 (6) 式, 便可以求得波函数 $\psi(x_j, t_a)$. 最后, 再利用 (17) 式就得到了传播子 $K(x_m, t; x_a, t_a)$.

4.3 传播子实验测量结果

本节介绍传播子实验测量结果. 对比文献 [4] 中的单光子实验结果, 本文中的数据是之前未发表的相干光数据, 在实验设计上也稍有不同. 原则上本文介绍的实验由光的一阶关联函数确定, 相干光和单光子的实验现象一样, 但单光子的实验难度更大.

对于光子的传播而言, 势能函数与折射率相关. 测量自由空间中的传播子, 可以让光子在空气中传播, 对应于图 2 所示的实验系统, 仅需要把图 2(b3) 中的渐变折射率透镜移除即可. 在此情况下, 光子自由演化的哈密顿量为 $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m)$. 自由空间中, 光子从起点 (x_a, t_a) 传播至 (x, t) 的传播子表达式为

$$K_f(x, t; x_a, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left(\frac{im(x - x_a)^2}{2\hbar \Delta t}\right), \quad (20)$$

其中 $\Delta t = t - t_a$. 假设 $t_a = 0$ 为初始时刻, 选择 $x_a = 0$ 的位置作为固定的初始点, 通过调整图 2 中 CCD 的纵向位置可以调节 t . CCD 在 4 个不同偏振态 ($|+\rangle, |-\rangle, |R\rangle, |L\rangle$) 的成像可测得 $K''(x, t; x_a, t_a) = \psi^*(x, t_a)\psi(x, t_a)K(x, t; x_a, t_a)$, 图 3 给出了 $t = 20 \text{ mm}/c$ 时 $K''(x, t; x_a, t_a)$ 和 $\psi(x, t_a)$ 的实验结果. 因为传播子类似于波函数, 不同的全局相位并不改变其物理实质, 因此对于固定的起点而言, $\psi(x_a, t_a)$ 可看作是一个常数, 通过对传播子进行归一化便可忽略此项, 无需额外对其进行测量. 通过 $K''(x, t; x_a, t_a)$ 和 $\psi(x, t_a)$ 便能得到 $K(x, t; x_a, t_a)$.

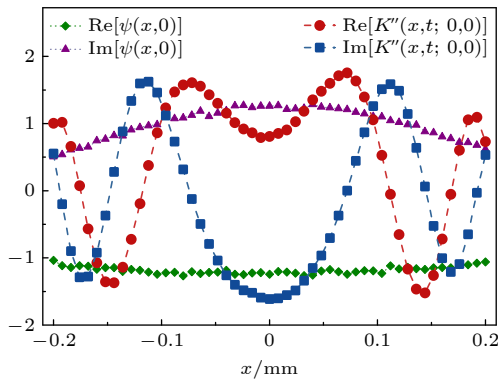


图 3 $t = 20 \text{ mm}/c$ (c 为真空中的光速) 的 $K''(x, t; 0, 0)$ 和波函数 $\psi(x, 0)$ 的实验测量结果. 蓝色方块和红色圆点分别展示了 $K''(x, t; 0, 0)$ 的实部和虚部. 绿色菱形和紫色三角形分别展示了 $\psi(x, 0)$ 的实部与虚部

Fig. 3. Measured wave function of single photon and $K''(x, t = 20 \text{ mm}/c; 0, 0)$. The green diamond and purple triangle represent the real and imaginary parts of the wave function, respectively. The red dot and the blue square show the real and imaginary parts of the $K''(x, t = 20 \text{ mm}/c; 0, 0)$ at $t = 20 \text{ mm}/c$.

图 4 给出了在固定初始位置 $x_a = 0$ 和初始时刻 $t_a = 0$ 的情况下, $K_f(x, t; x_a, t_a)$ 以 x 和 t 为变量的理论和实验的结果对比. 实验中通过改变探测

器 CCD 的位置来改变演化时间 t , 从 $t = 0 \text{ mm}/c$ 到 $t = 30 \text{ mm}/c$ 每隔 $1 \text{ mm}/c$ 测量出 $K_f(x, t; x_a, t_a)$ 以 x 为变量的曲线, 图 4(a) 和图 4(b) 分别是通过 (20) 式计算得到的 $K_f(x, t; x_a, t_a)$ 的实部和虚部的理论结果, 图 4(c) 和图 4(d) 分别是实验测得的 $K_f(x, t; x_a, t_a)$ 的实部和虚部.

图 5 所示为图 4 中选取 $t = \{10 \text{ mm}/c, 20 \text{ mm}/c, 30 \text{ mm}/c\}$ 这 3 个特定时刻的 $K_f(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 的理论和实验结果, 红色和蓝色的实线表示传播子实部和虚部的理论曲线, 红色的圆点和蓝色的方块是实验测到的数据, 误差棒是 3 次重复测量得到的标准差. 为了更准确地对比理论和实验的结果, 以实验测量的传播子在 $x = 0$ 位置的相位为准, 图 4 和图 5 的理论计算结果都整体乘以一个相位因子, 使得理论结果和实验结果的全局相位统一. 从图 4 和图 5 可以看出, $K_f(x, t; x_a, t_a)$ 的实验测量结果与理论计算结果高度吻合, 这说明 4.1 节和 4.2 节所述的理论和实验方案可以准确地测量出传播子.

5 最小作用量原理的实验演示

传播子是路径积分理论中的关键物理量, 实现了对传播子的测量为对路径积分的基本概念进行实验研究提供了可能性. 其中最小作用量原理是路径积分中的核心原理, 因此基于传播子的测量演示最小作用量原理是对路径积分基本概念的最直观、最接近本质的实验研究. 本节将介绍如何通过传播子的实验结果实现对最小作用量原理的实验演示.

根据路径积分公式 (8), 传播子可以通过对所有可能路径的贡献进行积分求得, 而所有路径叠加的结果等同于振幅相位最稳定的路径, 该路径是满足最小作用量原理的经典路径. 通过对实验所得的路径振幅进行分析, 找出满足 $\delta S/\delta x(t) = 0$ 的路径, 然后将其与通过拉格朗日方程计算出来的经典路径进行对比, 若两者结果相符合, 则验证了路径积分中的最小作用量原理. 然而, 由于 $\delta S/\delta x(t) = 0$ 是变分方程, 对于离散且有限的实验数据而言, 寻找满足这个方程的实验结果比较困难, 因此有必要把它转化为更加直观的微分方程. 参考文献 [1], 路径可以离散化为相继发生的事件, 在起点 (x_a, t_a) 和终点 (x_b, t_b) 设置一个途径点 (x, t) , 在此情况下, 路径的振幅可以表示为传播子的连乘:

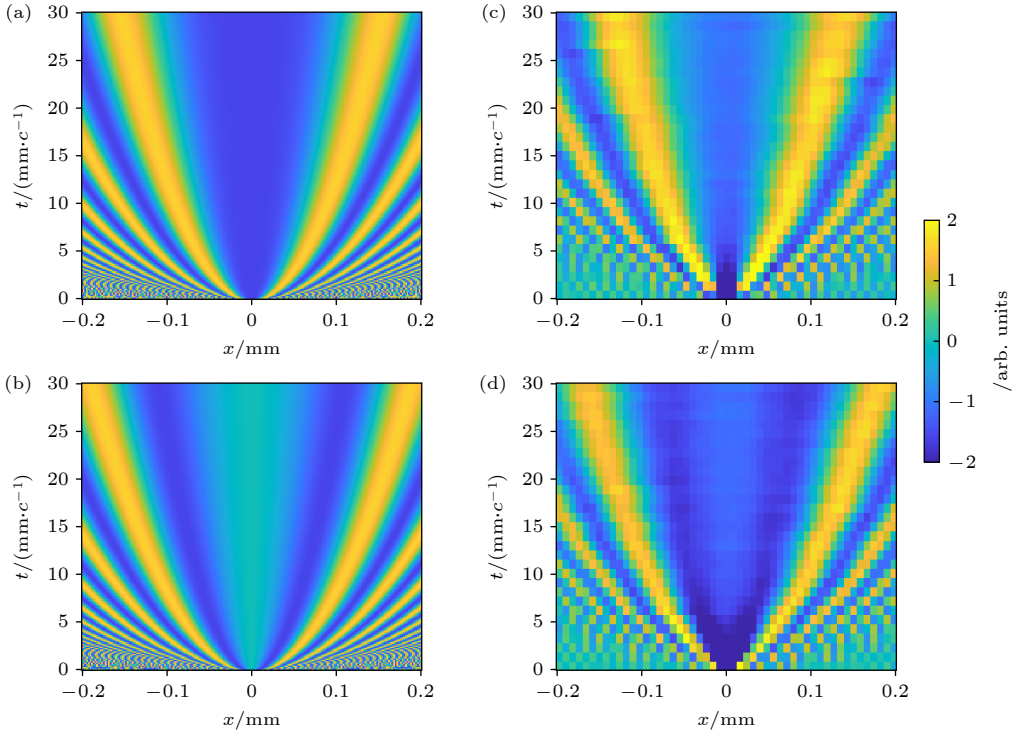


图 4 $K_f(x, t; x_a, t_a)$ 以 x 和 t 为变量的理论与实验结果. 纵轴是演化时间 t , 横轴是横向位置 x , 颜色代表实部或者虚部的幅度大小. 对演化时间 t 每间隔 $1 \text{ mm}/c$ 从 0 测量到 $30 \text{ mm}/c$, 横向位置每间隔 $8 \mu\text{m}$ 从 -0.2 mm 测量到 0.2 mm

Fig. 4. Theoretical and experimental results of $K_f(x, t; x_a, t_a)$ over time. The vertical axis is the evolution time t , the horizontal axis is the transverse position x . The colormaps represent the magnitude of the real or imaginary part of $K_f(x, t; x_a, t_a)$. Evolution time is measured from 0 to $30 \text{ mm}/c$ at $1 \text{ mm}/c$ interval. Transverse positions are measured from -0.2 mm to 0.2 mm at $8 \mu\text{m}$ intervals.

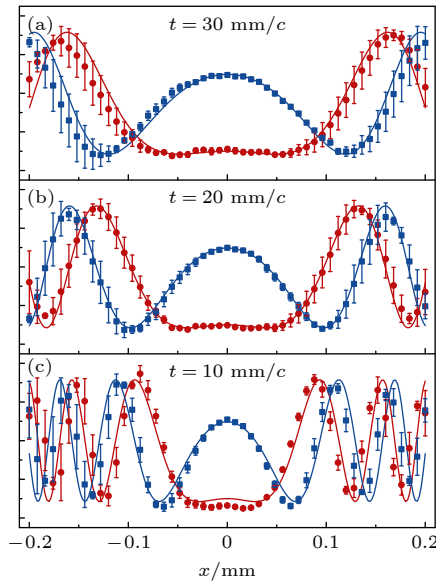


图 5 在自由空间中测到的传播子. 红线和蓝线是理论计算的传播子实部和虚部的结果, 红色圆圈和蓝色方块是实验测到的数据

Fig. 5. Measured propagators of photons in free space. The red and blue lines are the results of theoretical calculations of the real and imaginary parts of the propagators, and the red circles and blue squares are experimentally measured data.

$$\varphi(x, t) = K(x_b, t_b; x, t)K(x, t; x_a, t_a) = \mathcal{N}e^{(i/\hbar)S(x, t)}. \quad (21)$$

这样路径振幅便转化为关于 x 和 t 函数. φ 对变量 x 求偏导可得:

$$\frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} = \mathcal{N} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial S(x, t)}{\partial x} e^{i/\hbar S(x, t)}. \quad (22)$$

由于 $\mathcal{N} \frac{\hbar}{i} e^{i/\hbar S}$ 始终不为零, 因此当 $\partial \varphi(x, t)/\partial x = 0$ 时, $\partial S(x, t)/\partial x = 0$. 可以把 $\delta S/\delta x(t) = 0$ 表述为: 对于任意时刻 t 都满足 $\partial S(x, t)/\partial x = 0$. 最小作用量原理的判别条件便可转化为

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{Re}[\varphi(x, t)] = 0, \quad \frac{\partial}{\partial x} \text{Im}[\varphi(x, t)] = 0. \quad (23)$$

因此, 在实验中, 只需要测量出传播子 $K(x_b, t_b; x, t)$ 和 $K(x, t; x_a, t_a)$, 然后再通过 (21) 式和 (23) 式就能确定经典路径在 t 时刻经过的 x 方向位置. 不断改变 t 进行测量, 就能最终描绘出经典路径 $x_{cl}(t)$. 事实上, 在实验中这个判别条件还可以进一步优化^[4], 仅需用 $K''(x_b, t_b; x, t)$ 和 $K''(x, t; x_a, t_a)$ 的实验数据便能求出经典路径, 这样可以省略波函数测量的步骤. 在这个优化后的方案中, 假设 $\mathcal{M} =$

$\frac{K''(x_b, t_b; x, t)K''(x, t; x_a, t_a)}{|K''(x_b, t_b; x, t)K''(x, t; x_a, t_a)|}$, 最小作用量原理的判别条件便可表示为

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{Re}[\mathcal{M}(x, t)] = 0, \quad \frac{\partial}{\partial x} \text{Im}[\mathcal{M}(x, t)] = 0. \quad (24)$$

在图 2 所示的实验中, 通过选择在 SLM 上相位调制位置来确定初始位置 x_a , 将初始位置 x_a 固定, 移动 CCD 相机的纵向位置来调节 t , 就可测得 $K''(x, t; x_a, t_a)$. 调整 SLM 后 $4f$ 透镜系统的成像位置, 使得 t 时刻变成 \hat{U} 的初始时刻, 然后通过改变 SLM 的相位调节位置 x , 此时 x 就是变化的起点, 终点 x_b 固定, 在 CCD 上读取终点 x_b 的测量结果, 便可以测量出 $K''(x_b, t_b; x, t)$. 测到 $K''(x, t; x_a, t_a)$ 和 $K''(x_b, t_b; x, t)$ 之后, 利用 (24) 式求 $\mathcal{M}(x, t)$ 在 x 方向上的极值, 就可以得到经典路径 $x_{cl}(t)$.

光子在自由空间中的经典路径如图 6 所示. 选取初始位置 $x_a = 0$ 作为固定起点, 选取 $x_b = \{-0.08 \text{ mm}, 0, 0.08 \text{ mm}\}$ 这 3 个终点位置. 图 6 中的实线是根据拉格朗日方程计算出自由空间中光子传播的经典路径, 可见在经典力学中, 自由传播粒子的经典路径是直线. 其中离散的点是通过实验测量的传播子通过 (23) 式计算得到不同中间时刻的经典路径所在位置, 实验中选取了 7 个中间时刻进行测量, x 方向的测量间隔为 $2.66 \mu\text{m}$, 误差棒表示 3 次重复实验的标准差. 从图 6 可以看出, 实验结果与理论结果高度一致, 这意味着通过传播子的实验数据准确地得到了光子自由空间中的经典路径.

对于光子的传播而言, 势能函数与折射率相关, 选取横向折射率为二次型函数分部的光学材料 (GRIN 透镜) 放置于图 2(b3) 所示的相应位置中, 那么光子传播的哈密顿量就变为 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, 其中 $\omega \approx 0.208 \text{ (c/mm)}$. 在此情况下, 可测量光子在谐振势中演化的传播子, 然后再利用 (24) 式得到光子在谐振势场中的经典路径, 实验结果如图 7 所示. 选取 3 个起点位置 $x_a = \{-0.053 \text{ mm}, 0, 0.053 \text{ mm}\}$ 和一个固定终点位置 $x_b = 0$, 通过拉格朗日方程可以求出相应的 3 条经典路径, 如图 7 中的实线所示, 而图中的离散点则为实验结果, 实验中路径演化的总时长为 $1.5 \pi/\omega$, 其中每隔 $0.1 \pi/\omega$ 选取一个中间时刻点测量得出对应的经典位置, 误差棒表示 3 次重复实验的标准差. 从结果可看出, 通过实验所测的传播子数据准确地得到了光子在谐振势中的经典路径.

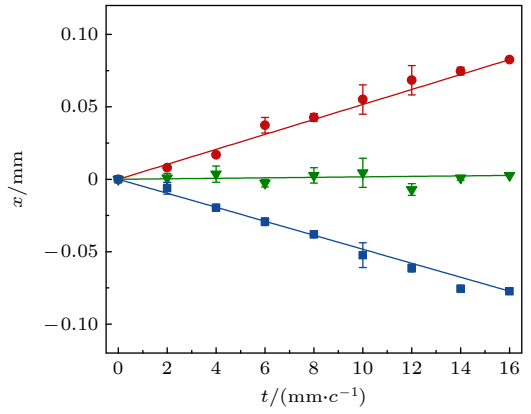


图 6 由最小作用量原理得到的光子自由演化时的经典路径. 实线展示的是理论计算所得的自由演化的经典路径, 离散点为通过传播子的实验数据求得的自由演化的经典路径位置

Fig. 6. The classical path of photons in free evolution derived from the principle of least action. The solid line shows the classical path in free evolution obtained from the theoretical calculation, and the discrete point is the classical path position in free evolution obtained from the experimental data of the propagator.

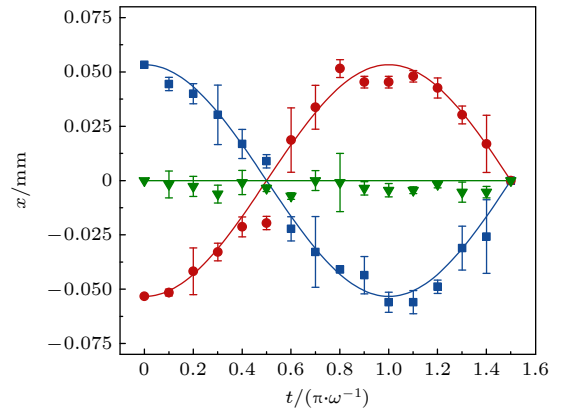


图 7 在谐振子势场中的经典路径. 实线展示的是理论计算所得的在谐振势中的经典路径, 离散点为通过传播子的实验数据求得的在谐振势中的经典路径位置

Fig. 7. Classical trajectories in the harmonic potential. The solid line shows the classical path in the harmonic potential obtained by theoretical calculation, and the discrete point is the classical path position in the harmonic potential obtained by the experimental data of the propagator.

图 6 和图 7 的结果表明, 通过传播子测量技术, 可以在路径积分的框架下演示最小作用量原理. 最小作用量原理是物理学中的普适性原理, 路径积分把这一原理引入到量子力学中, 对量子理论做了一个全新的阐述. 实验演示最小作用量原理是传播子测量的一个重要的应用范例, 它有望为此后基于路径积分表述探索量子-经典、量子-广义相对论等交叉领域的研究提供新的思路.

6 总结与展望

本文综述了传播子测量的理论和实验进展,介绍了传播子测量在量子力学中最小作用量原理演示中的应用. 传播子是费曼路径积分的关键物理量,实现传播子的实验测量有重要的科学意义,它为路径积分相关的量子现象的实验研究铺平了道路. 在当今物理学界,路径积分是多个研究领域中的重要理论基础,它在描述量子场论、量子多体、量子引力、凝聚态物理等多个方向的物理现象中有着独特的优势,因此传播子的测量技术有望在日后应用到这些基础物理问题的观测和量子模拟的研究中. 此外,本文介绍的基于传播子测量得出光子经典路径的方法,也有望为一些经典-量子交叉领域的研究提供新的思路. 在光学实验中,已经首次成功测量了传播子. 当前,物理学界对多种不同类型的量子系统的操控和测量技术正在快速发展. 因此,将传播子的测量技术推广至其他热门量子实验系统中,也是一个有意义的研究方向. 路径积分传播子具有广泛的应用,本综述对将来进行传播子测量技术的研究有参考价值.

参考文献

- [1] Feynman R P 1948 *Rev. Mod. Phys.* **20** 367
- [2] Feynman R P 2005 *Feynman's Thesis—A New Approach to Quantum Theory* (Singapore: World Scientific Publishing Co Pte Ltd) pp1–69
- [3] Feynman R P, Hibbs A R, Styer D F 2010 *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Chelmsford: Courier Corporation) pp1–384
- [4] Wen Y L, Wang Y F, Tian L M, Zhang S C, Li J F, Du J S, Yan H, Zhu S L 2023 *Nat. Photonics* **17** 717
- [5] Von Neumann J 2018 *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (New Edition) (Princeton: Princeton university press) pp271–288
- [6] Aharonov Y, Albert D Z, Vaidman L 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 1351
- [7] Lundeen J S, Sutherland B, Patel A, Stewart C, Bamber C 2011 *Nature* **474** 188
- [8] Hofheinz M, Wang H, Ansmann M, Bialczak R C, Lucero E, Neeley M, O'Connell A D, Sank D, Wenner J, Martinis J M, Cleland A N 2009 *Nature* **459** 546
- [9] Cramer M, Plenio M B, Flamnia S T, Somma R, Gross D, Bartlett S D, Landon-Cardinal O, Poulin D, Liu Y K 2010 *Nat. Commun.* **1** 149
- [10] Ritchie N W M, Story J G, Hulet R G 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1107
- [11] Hosten O, Kwiat P 2008 *Science* **319** 787
- [12] Starling D J, Dixon P B, Jordan A N, Howell J C 2009 *Phys. Rev. A* **80** 041803
- [13] Zhou L, Turek Y, Sun C P, Nori F 2013 *Phys. Rev. A* **88** 053815
- [14] Zhou X X, Xiao Z C, Luo H L, Wen S C 2012 *Phys. Rev. A* **85** 043809
- [15] Rodenburg B, Mirhosseini M, Magaña-Loaiza O S, Boyd R W 2014 *JOSA B* **31**
- [16] Magaña-Loaiza O S, Mirhosseini M, Rodenburg B, Boyd R W 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 200401
- [17] Starling D J, Dixon P B, Williams N S, Jordan A N, Howell J C 2010 *Phys. Rev. A* **82** 011802
- [18] Xu X Y, Kedem Y, Sun K, Vaidman L, Li C F, Guo G C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 033604
- [19] Starling D J, Dixon P B, Jordan A N, Howell J C 2010 *Phys. Rev. A* **82** 063822
- [20] Brunner N, Simon C 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 010405
- [21] Strübi G, Bruder C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 083605
- [22] Hallaji M, Feizpour A, Dmochowski G, Sinclair J, Steinberg A M 2017 *Nat. Phys.* **13** 540
- [23] Du S J, Peng Y G, Feng H R, Han F, Yang L W, Zheng Y J 2020 *Chin. Phys. B* **29** 074202
- [24] Zhang C Y, Fang M F 2021 *Chin. Phys. B* **30** 010303
- [25] Dressel J, Malik M, Miatto F M, Jordan A N, Boyd R W 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 307
- [26] Pfeifer M, Fischer P 2011 *Opt. Express* **19** 16508
- [27] Qiu J D, Li Z X, Xie L G, Luo L, He Y, Ren C L, Zhang Z Y, Du J L 2021 *Chin. Phys. B* **30** 064216
- [28] Fang S Z, Dai Y, Jiang Q W, Tan H T, Li G X, Wu Q L 2021 *Chin. Phys. B* **30** 060601
- [29] Lundeen J S, Resch K J 2005 *Phys. Lett. A* **334** 337
- [30] Salvail J Z, Agnew M, Johnson A S, Bolduc E, Leach J, Boyd R W 2013 *Nat. Photonics* **7** 316
- [31] Malik M, Mirhosseini M, Lavery M P J, Leach J, Padgett M J, Boyd R W 2014 *Nat. Commun.* **5** 3115
- [32] Thekkadath G S, Giner L, Chalich Y, Horton M J, Banker J, Lundeen J S 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 120401
- [33] Xiao Y, Kedem Y, Xu J S, Li C F, Guo G C 2017 *Opt. Express* **25** 14463
- [34] Xiao Y, Wiseman H M, Xu J S, Kedem Y, Li C F, Guo G C 2019 *Sci. Adv.* **5** eaav9547
- [35] Cohen E, Pollak E 2018 *Phys. Rev. A* **98** 042112
- [36] Bolduc E, Garipey G, Leach J 2016 *Nat. Commun.* **7** 10439
- [37] Pan W W, Xu X Y, Kedem Y, Wang Q Q, Chen Z, Jan M, Sun K, Xu J S, Han Y J, Li C F, Guo G C 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 150402
- [38] Chen M C, Li Y, Liu R Z, Wu D, Su Z E, Wang X L, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 030402
- [39] Kobayashi H, Tamate S, Nakanishi T, Sugiyama K, Kitano M 2010 *Phys. Rev. A* **81** 012104
- [40] Shi Z M, Mirhosseini M, Margiewicz J, Malik M, Rivera F, Zhu Z Y, Boyd R W 2015 *Optica* **2** 388
- [41] Maccone L, Rusconi C C 2014 *Phys. Rev. A* **89** 022122
- [42] Mirhosseini M, Magaña-Loaiza O S, Hashemi Rafsanjani S M, Boyd R W 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 090402
- [43] Xu L, Xu H C, Jiang T, Xu F X, Zheng K M, Wang B, Zhang A N, Zhang L J 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 180401
- [44] Piacentini F, Avella A, Levi M P, Gramegna M, Brida G, Degiovanni I P, Cohen E, Lussana R, Villa F, Tosi A, Zappa F, Genovese M 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 170402
- [45] Shojaei E, Jackson C S, Riofrio C A, Kalev A, Deutsch I H 2018 *Phys. Rev. Lett.* **112** 130404
- [46] Bamber C, Lundeen J S 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 070405
- [47] Wu S J 2013 *Sci. Rep.* **3** 1193
- [48] Kocsis S, Braverman B, Ravets S, Stevens M J, Mirin R P,

- Shalm L K, Steinberg A M 2011 *Science* **332** 1170
- [49] Wen Y L, Zhang S C, Yan H, Zhu S L 2022 *Chin. Phys. B* **31** 034206
- [50] Wen Y L, Zhang S C, Yan H, Zhu S L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 110301 (in Chinese) [温永立, 张善超, 颜辉, 朱诗亮 2021 物理学报 **70** 110301]
- [51] Romito A, Gefen Y 2014 *Phys. Rev. B* **90** 085417
- [52] Vallone G, Dequal D 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 040502
- [53] Zhang S C, Zhou Y R, Mei Y F, Liao K Y, Wen Y L, Li J F, Zhang X D, Du S W, Yan H, Zhu S L 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 190402
- [54] Zhang C R, Hu M J, Hou Z B, Tang J F, Zhu J, Xiang G Y, Li C F, Guo G C, Zhang Y S 2020 *Phys. Rev. A* **101** 012119
- [55] Zhang C R, Hu M J, Xiang G Y, Zhang Y S, Li C F, Guo G C 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 080301
- [56] Zhou Y Y, Zhao J, Hay D, McGonagle K, Boyd R W, Shi Z M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 040402
- [57] Yang M, Xiao Y, Liao Y W, Liu Z H, Xu X Y, Xu J S, Li C F, Guo G C 2020 *Laser Photonics Rev.* **14** 1900251
- [58] Calderaro L, Foletto G, Dequal D, Villoresi P, Vallone G 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 230501
- [59] Knarr S H, Lum D J, Schneeloch J, Howell J C 2018 *Phys. Rev. A* **98** 023854
- [60] Pan Y M, Zhang J, Cohen E, Wu C W, Chen P X, Davidson N 2020 *Nat. Phys.* **16** 1206
- [61] Rojo A, Bloch A 2018 *The Principle of Least Action: History and Physics* (Cambridg: Cambridge University Press) pp1–266
- [62] Zhu S L, Wen Y L, Yan H 2023 *Physics* **52** 502 (in Chinese) [朱诗亮, 温永立, 颜辉 2023 物理 **52** 502]
- [63] Salières P, Carré B, Le Déroff L, Grasbon F, Paulus G G, Walther H, Kopold R, Becker W, Milosevic D B, Sanpera A, Lewenstein M 2001 *Science* **292** 902
- [64] Gibbons G W, Hawking S W, Perry M J 1978 *Nucl. Phys. B* **138** 141
- [65] Fujikawa K 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 1195
- [66] Ord G N, Gualtieri J A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 250403
- [67] Caldeira A O, Leggett A J 1983 *Physica A* **121** 587
- [68] Mühlbacher L, Rabani E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 176403
- [69] Pollock E L, Ceperley D M 1984 *Phys. Rev. B* **30** 2555
- [70] Reisenberger M P, Rovelli C 1997 *Phys. Rev. D* **56** 3490
- [71] Hartle J B, Hawking S W 1983 *Phys. Rev. D* **28** 2960
- [72] Ashtekar A, Campiglia M, Henderson A 2010 *Phys. Rev. D* **82** 124043
- [73] Fujikawa K 1982 *Phys. Rev. D* **25** 2584
- [74] Hartle J B, Hawking S W 1976 *Phys. Rev. D* **13** 2188

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Research progress of measurement of propagators in path integrals*

Tian Li-Man¹⁾²⁾ Wen Yong-Li^{1)2)†} Wang Yun-Fei¹⁾²⁾ Zhang Shan-Chao¹⁾²⁾
Li Jian-Feng¹⁾²⁾ Du Jing-Song¹⁾²⁾ Yan Hui¹⁾²⁾³⁾ Zhu Shi-Liang¹⁾²⁾³⁾

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education),
School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials,
South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

3) (*Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Frontier Research Institute for Physics,
South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 31 May 2023; revised manuscript received 19 September 2023)

Abstract

The propagator plays a central role in path integral theory and therefore has significant value in various fields of modern quantum physics, where path integral representations can be used. However, owing to the fact that it has not been directly measured in experiment, progress of experimental studies of quantum systems based on path integral representations has been seriously limited. Recently, we proposed a propagator measurement scheme based on the direct measurement of the wave function and successfully performed the first experimental measurement of the propagator by using a single photon experiment. Furthermore, in this study, the quantum principle of least action is demonstrated for the first time. This research successfully addresses the technical challenges of path integral experimental studies. In this work, we review the research progress in this field, including a brief introduction to the basic concepts and research progress of direct wave function measurement, and a detailed description of the theoretical model, experimental design, and experimental results of propagator measurement. Finally, we introduce an important application example, which can serve as the experimental demonstration of the quantum principle of least action through propagator measurement. The research progress of propagator measurement reviewed in this work will provide important references for future experimental studies by using this method.

Keywords: quantum measurement, propagator, path integrals, quantum principle of least action

PACS: 03.65. Ta, 03.65.-w

DOI: [10.7498/aps.72.20230902](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230902)

* Project supported by the Regional Joint Funds of Basic and Applied Basic Research of Guangdong Province, China (Grant No. 2022A1515110921).

† Corresponding author. E-mail: ylwen@m.scnu.edu.cn



路径积分传播子测量的研究进展

田礼漫 温永立 王云飞 张善超 李建锋 杜镜松 颜辉 朱诗亮

Research progress of measurement of propagators in path integrals

Tian Li-Man Wen Yong-Li Wang Yun-Fei Zhang Shan-Chao Li Jian-Feng Du Jing-Song Yan Hui
Zhu Shi-Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200305 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230902

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230902>

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

利用Kapitza–Dirac脉冲操控简谐势阱中冷原子测量重力加速度

Measurement of gravity acceleration by cold atoms in a harmonic trap using Kapitza–Dirac pulses

物理学报. 2019, 68(20): 203701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190749>

中间测量对受驱单量子比特统计复杂度的影响

Influence of intermediated measurements on quantum statistical complexity of single driven qubit

物理学报. 2020, 69(23): 230301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200802>

基于辅助单比特测量的量子态读取算法

A quantum state readout method based on a single ancilla qubit

物理学报. 2021, 70(21): 210303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211066>

无指针 δ -淬火直接测量法测量量子密度矩阵

Scheme of directly measuring quantum density matrix by δ -quench method

物理学报. 2021, 70(11): 110301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210269>

基于金刚石NV色心的纳米尺度磁场测量和成像技术

Nanoscale magnetic field sensing and imaging based on nitrogen–vacancy center in diamond

物理学报. 2018, 67(13): 130701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180243>

基于测量的量子计算研究进展

Research progress of measurement–based quantum computation

物理学报. 2021, 70(21): 210301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210923>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

平均场反馈下全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统的可解集体动力学*

贺苏娟 邹为†

(华南师范大学数学科学学院, 广州 510631)

(2023 年 5 月 24 日收到; 2023 年 9 月 26 日收到修改稿)

耦合 Stuart-Landau 极限环系统为研究含振幅自由度的自持续振荡系统同步相变和集体动力学提供了一个重要的范式模型. 本文研究了平均场反馈下全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统中 3 种典型的可解集体动力学: 非相干态、振幅死亡及锁频态. 在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 情形下, 利用非相干态线性稳定性分析揭示了耦合系统中同步发生的临界条件, 发现了增强平均场反馈强度可使得耦合系统在更小的扩散耦合强度下出现同步相变行为; 通过对振幅死亡态的线性稳定性分析得到了参数空间中振幅死亡的稳定区, 发现了平均场反馈强度可有效地消除耦合系统中的振幅死亡现象; 从理论上分析了锁频态的存在性条件, 并从锁频态序参量的自治关系中推导出了振幅死亡区的边界线. 本文的研究揭示了平均场反馈对耦合非线性系统中集体行为的动力学控制作用, 加深了平均场反馈技术对耦合诱导的集体行为影响的理解, 进一步阐释了复杂耦合系统中自组织行为的涌现规律与机制.

关键词: 耦合非线性振子, 集体动力学, 相变, 振幅死亡**PACS:** 05.45.-a, 05.45.Xt**DOI:** 10.7498/aps.72.20230842

1 引言

大量单元通过相互作用而自组织形成的集体行为在自然界中普遍存在, 其动力学行为的演化规律与机制可通过耦合非线性振子模型进行定性与定量的探索^[1-4]. 近些年来, 耦合非线性振子系统中各种丰富集体动力学受到不同研究领域学者们的广泛关注^[5-7]. 其中, 同步现象是自然界中最普遍与最典型的集体行为之一, 自 1975 年 Kuramoto 模型提出以来^[8], 同步现象的研究已经取得了大量的理论进展; 迄今, Kuramoto 模型已经成为从物理学到生物学与工程学等众多学科领域中同步行为研究的范例^[9-12]. Kuramoto 模型是由一组全局耦合的相振子来描述的, 通常可有效地刻画弱耦合

系统中的同步相变行为^[13-15]. 然而, 当系统之间的耦合强度变得足够强时, 为了获得对耦合系统集体动力学的完整描述, 子系统的振幅自由度一般不能被简单地忽略. 在强耦合非线性系统中, 振幅自由度通常在决定集体行为涌现形式方面起着关键性作用, 譬如鸟群、鱼群、无人机或昆虫群等^[16-18]. 同时包含相位与振幅自由度的模型对于理解强耦合非线性系统中的分岔也具有特别重要的意义. 结合相位和振幅动力学的一个最简单模型被称为 Stuart-Landau 极限环系统^[19], 它是描述超临界霍普夫 (Hopf) 分岔的标准形式. 在弱耦合的极限下, 全局耦合 Stuart-Landau 振子系统事实上可退化为经典的 Kuramoto 相位模型^[20].

通过考虑单个子系统的振幅动力学, 许多有趣的新的集体行为在耦合非线性振子系统被发现, 通

* 国家自然科学基金 (批准号: 12075089) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: weizou83@gmail.com

常这些现象在不含振幅自由度的纯相位模型中是不存在的^[21,22]. 其中, 最为典型的一个现象是振幅死亡 (amplitude death)^[23,24]: 指自持续振荡系统的振幅由于耦合作用而被完全抑制. 从动力学角度看, 振幅死亡是由于子系统间的相互耦合作用而使得均匀不动点从非稳变为稳定, 进而消除耦合系统的宏观振荡的一种集体行为. 过去的几十年里, 耦合 Stuart-Landau 极限环系统经常被用作一个理想的数学模型来探索振幅死亡现象的涌现规律, 其中许多导致振幅死亡行为的不同动力学机制相续被提出, 譬如频率不匹配^[25–27]、时滞耦合^[28–30]、动态耦合^[31]、共轭耦合^[32,33]、非直接耦合^[34]等. 除了振幅死亡现象外, 全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统也可表现出其他有趣的集体行为^[35–37]: 非相干态 (incoherence) 与锁频态 (locked states). 在非相干态中, 耦合极限环系统的宏观振荡行为消失, 但每个子系统却以其固有自然频率沿着共同的极限环做周期运动. 此外, 在强耦合情形下, 耦合 Stuart-Landau 极限环系统可经历锁频态, 指每个子系统被吸引到不同的不动点上. 本质上, 振幅死亡、非相干态和锁频态这三类集体行为是耦合 Stuart-Landau 极限环系统的不同类型的定态动力学行为, 其共同点是振子数目在相空间的分布并不会随时间变化.

在过去的近十年里, 对同时具有相位和振幅自由度的耦合非线性系统中集体行为的理论研究如春笋般地涌现. 例如, Schwab 等^[38]研究了非直接耦合 Stuart-Landau 极限环系统模型, 并解析地推导出了非相干态、振幅死亡和锁频态 3 种集体行为在参数空间中的边界线. 考虑子系统振幅参数服从一定的概率分布函数, Lee 等^[39]从理论上深入地研究了全局耦合 Stuart-Landau 振子的宏观动力学. 通过调节耦合作用方式, Wang 和 Garnier^[40]在全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统中建立从连续到不连续的同步相变过程; 特别地, 他们通过对非相干态的线性稳定性分析解析地推导出了向前相变点的临界耦合强度. 令人惊讶的是, 即使在全局耦合的全同 Stuart-Landau 振子系统中, 研究人员也发现了大量的新奇的集体行为, 如奇异态^[41]、广泛多稳态^[42]、多集团态^[43]等. 最近, 相位约化技术 (phase reduction technique) 已成功地从

相模型扩展到了全局耦合的全同 Stuart-Landau 振子系统中^[44,45], 该研究具有重要的理论意义, 这将更加有利于耦合 Stuart-Landau 极限环系统中集体行为的深入研究.

众所周知, 反馈作用在许多自然系统中普遍存在, 譬如神经网络^[46]、基因网络^[47]、视觉系统^[48]等. 反馈在系统动力学控制与同步控制问题中的重要性在电子学、生物学、量子信息等各个领域已被广泛地报道. 例如, 脑深部刺激中反馈控制已被发现是治疗震颤 (tremor)、肌张力障碍 (dystonia)、帕金森病 (Parkinson's disease) 等慢性神经疾病最有效的治疗方式^[49–51]. 本文研究了平均场反馈下全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统中的集体行为. 通过引入平均场反馈, 研究结果表明, 在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 情形下, 这种推广的耦合 Stuart-Landau 极限环系统模型中的定态集体动力学行为是可解的. 具体地, 首先通过对非相干态的线性稳定性分析解析地得到了系统发生同步时平均场反馈强度与扩散耦合强度所满足的具体条件, 发现了平均场反馈利于耦合系统的同步行为的发生; 其次通过对振幅死亡态的线性稳定性分析得到了参数空间中振幅死亡区的解析边界线, 发现了平均场反馈可有效地消除耦合系统中的振幅死亡现象; 最后对锁频态的存在性条件给出一定的理论刻画, 并从锁频态序参量的自洽方程中进一步地推导出了振幅死亡稳定区的边界曲线的解析表达式.

本文内容安排如下: 第 2 节引入带平均场反馈的全局耦合 Stuart-Landau 极限环系统模型, 并给出了序参量的具体定义和在序参量下模型的不同表达形式; 第 3 节分别对模型的非相干态、振幅死亡和锁频态 3 种集体行为做了系统的理论分析, 包括通过对非相干态与振幅死亡态的线性稳定性分析得到了各自稳定的解析条件, 并通过数值模拟结果证实了理论预测的有效性; 最后, 第 4 节对全文内容进行概括总结, 并对下一步的研究进行了展望.

2 理论模型

本文考虑平均场反馈下 N 个全局耦合 Stuart-Landau 极限环振子的模型, 其动力学演化方程如下:

$$\begin{aligned} \dot{z}_j = & (1 + i\omega_j - |z_j|^2)z_j + \frac{K_1}{N} \sum_{k=1}^N (z_k - z_j) \\ & + \frac{K_2}{N} \sum_{k=1}^N z_k, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $j=1, 2, \dots, N$ ($N \gg 1$), $z_j = x_j + iy_j = r_j e^{i\theta_j}$ 是复变量, ω_j 代表第 j 个振子的固有自然频率, $K_1 \geq 0$ 是全局扩散耦合强度, $K_2 \geq 0$ 刻画平均场反馈强度. 当扩散耦合强度与平均场反馈强度为零, 即 $K_1 = K_2 = 0$ 时, 单个 Stuart-Landau 系统是一个超临界 Hopf 分岔的范式模型^[4], 其有一个稳定的极限环 $z_j(t) = e^{i\omega_j t}$ 与一个非稳的焦点 $z_j = 0$.

当 N 足够大时, 假设振子的固有自然频率 ω_j 是从分布函数 $g(\omega)$ 中随机选择的. 通常可以假定 ω_j 的平均频率为 $\omega_0 = 0$. 如果 $\omega_0 \neq 0$, 在新的旋转坐标系中 $z'_j = z_j e^{-i\omega_0 t}$, z'_j 的演化方程与 (1) 式完全一样, 但是自然频率变为 $\omega'_j = \omega_j - \omega_0$, 其平均频率为 $\omega'_0 = 0$. 不失一般性, 本文所有的数值模拟实验中将采用均值为 0 和标准差为 Δ 的高斯分布 $\text{Norm}(0, \Delta^2)$, 即

$$g(\omega) = \frac{1}{\Delta\sqrt{2\pi}} e^{-\omega^2/(2\Delta^2)}. \quad (2)$$

为了定量地刻画耦合系统 (1) 的集体动力学特性, 引入如下的复序参量:

$$\langle z \rangle = R e^{i\phi} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N z_k, \quad (3)$$

其中 R 和 ϕ 是复序参量幅值和幅角. 此时, 方程 (1) 可改写为如下形式:

$$\dot{z}_j = (1 + i\omega_j - |z_j|^2 - K_1)z_j + (K_1 + K_2)\langle z \rangle. \quad (4)$$

在极坐标系下, 方程 (4) 可进一步地表达为

$$\dot{r}_j = (1 - K_1 - r_j^2)r_j + (K_1 + K_2)R \cos(\phi - \theta_j), \quad (5)$$

$$\dot{\theta}_j = \omega_j + \frac{K_1 + K_2}{r_j} R \sin(\phi - \theta_j). \quad (6)$$

当平均场反馈强度 $K_2 = 0$ 时, 方程 (1) 退化为文献 [35, 36] 中所研究的模型. 研究表明当逐渐增强扩散耦合强度 K_1 时, 全局耦合 Stuart-Landau 极限系统可表现出 3 种典型的定态集体动力学行为: 非相干态、振幅死亡与锁频态. 耦合系统 (1) 中的宏观定态集体行为是统计意义上的, 指相空间中振子的概率密度分布并不会随时间演化而变化, 即序参量 (3) 中 R 与 ϕ 均为常数. 本文将在热力学极

限 $N \rightarrow \infty$ 下, 从理论上研究平均场反馈作用对全局耦合 Stuart-Landau 系统中定态集体行为的影响. 特别地, 将在扩散耦合强度与平均场反馈强度的参数空间中严格地得到非相干态、振幅死亡与锁频态涌现条件的解析形式.

3 理论与数值结果

3.1 非相干态

耦合系统 (1) 中的非相干态是一种无序态 (非同步态), 每个振子都在半径为 $|z_j| = \sqrt{1 - K_1}$ 的极限环上以各自的自然频率 ω_j 旋转, 且满足序参量 $\langle z \rangle = 0$. 显然非相干态存在的前提条件为扩散耦合强度满足 $K_1 < 1$. 特别地, 平均场反馈作用 K_2 不会影响非相干态解的存在性, 但可能会改变其稳定性. 严格来讲, 非相干态仅在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下才存在.

当 $N \rightarrow \infty$ 时, 耦合系统 (1) 的宏观动力学可方便地由概率密度分布函数 $f(r, \theta, \omega, t)$ 来描述, 其中 $f(r, \theta, \omega, t) r d\theta dr$ 表示 t 时刻频率为 ω 、介于区间 $r \in (r, r + dr)$ 和 $\theta \in (\theta, \theta + d\theta)$ 内振子的占比或振子数密度, 其满足归一化条件:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} f r d\theta dr = 1. \quad (7)$$

由于系统的振子数量守恒, 分布函数 $f(r, \theta, \omega, t)$ 满足如下极坐标系下的连续性方程:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (f r v_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (f v_\theta)}{\partial \theta} = 0, \quad (8)$$

其中 $v_r = \dot{r}$, $v_\theta = r\dot{\theta}$, \dot{r} 和 $\dot{\theta}$ 分别由 (5) 式和 (6) 式给出. 相应地, (3) 式中所定义的序参量在连续极限的情况下可写成积分形式:

$$R e^{i\phi} = \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty \int_0^{2\pi} f(r, \theta, \omega, t) r^2 e^{i\theta} g(\omega) d\theta dr d\omega. \quad (9)$$

在非相干态中, 对每一个频率 ω , 振子均匀地分布在半径为 $r = a = \sqrt{1 - K_1}$ 的圆环上, 故非相干态对应的概率密度分布函数为

$$f = f_0 = \frac{\delta(r - a)}{2\pi r}. \quad (10)$$

可直接验证 (10) 式中非相干态的解满足连续性方程 (8) 及其对应的序参量 $R = 0$.

令 $F(r, \theta, \omega, t) = f(r, \theta, \omega, t) r$, 连续性方程 (8) 可改写为

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial(F\dot{r})}{\partial r} + \frac{\partial(F\dot{\theta})}{\partial \theta} = 0, \quad (11)$$

其中

$$\dot{r} = (1 - K_1 - r^2)r + (K_1 + K_2)R \cos(\phi - \theta),$$

$$\dot{\theta} = \omega + \frac{K_1 + K_2}{r}R \sin(\phi - \theta).$$

相应地, 序参量的幅值与非相干态的解分别为

$$R = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} F(r, \theta, \omega, t) r e^{i(\theta - \phi)} g(\omega) d\theta dr d\omega \quad (12)$$

与

$$F_0 = \frac{\delta(r - a)}{2\pi}. \quad (13)$$

注意, (11) 式和 (12) 式为耦合系统 (1) 在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下的集体动力学提供了一个简洁的自洽描述.

为得到非相干态失稳的临界条件, 接下来对其做线性稳定性分析. 对 (13) 式中非相干态解 F_0 引入一个小的扰动:

$$F = F_0 + \varepsilon e^{st} F_1(r, \theta, \omega) = \frac{\delta(r - a)}{2\pi} + \varepsilon e^{st} F_1(r, \theta, \omega), \quad (14)$$

其中 $0 < \varepsilon \ll 1$. 将 (14) 式代入 (12) 式有

$$R = \varepsilon e^{st} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} F_1 r e^{i(\theta - \phi)} g(\omega) d\theta dr d\omega \\ \triangleq \varepsilon e^{st} R_1, \quad (15)$$

其中 R_1 与 r, θ 和 ω 都无关. 将 (14) 式和 (15) 式代入连续性方程 (11) 中, 只保留 ε 的一阶项, 可得到关于 F_1 的方程:

$$sF_1 + \frac{\partial}{\partial r} [(a^2 - r^2)rF_1] + \omega \frac{\partial F_1}{\partial \theta} \\ = \frac{(K_1 + K_2)R_1\delta}{2\pi a} \cos(\theta - \phi) \\ - \frac{(K_1 + K_2)R_1\delta'}{2\pi} \cos(\theta - \phi), \quad (16)$$

其中 $\delta = \delta(r - a)$ 及 $\delta' = \frac{d\delta(r - a)}{dr}$. 假设方程 (16) 中的 F_1 具有如下形式的解:

$$F_1 = \frac{(K_1 + K_2)R_1\delta}{2\pi a} [A \cos(\theta - \phi) + B \sin(\theta - \phi)] \\ - \frac{(K_1 + K_2)R_1\delta'}{2\pi} [C \cos(\theta - \phi) \\ + D \sin(\theta - \phi)], \quad (17)$$

其中 A, B, C, D 均独立于 r 与 θ . 将 (17) 式中 F_1 的

形式解代入 (16) 式的左边, 并利用 δ 函数等式

$$\delta(r - a)H(r) = H(a)\delta(r - a),$$

$$\frac{d\delta(r - a)}{dr}H(r) = H(a)\frac{d\delta(r - a)}{dr} - \frac{dH(a)}{dr}\delta(r - a), \quad (18)$$

可分别计算出 A, B, C, D 的具体表达式为

$$A = \frac{s}{s^2 + \omega^2},$$

$$B = \frac{\omega}{s^2 + \omega^2},$$

$$C = \frac{s + 2a^2}{(s + 2a^2)^2 + \omega^2},$$

$$D = \frac{\omega}{(s + 2a^2)^2 + \omega^2}. \quad (19)$$

利用 (19) 式, 将 F_1 的具体解 (17) 式代入 (15) 式后, 等式两边消掉非零的 R_1 , 可得到关于 s 的方程:

$$\frac{2}{K_1 + K_2} \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{s}{s^2 + \omega^2} + \frac{s + 2a^2}{(s + 2a^2)^2 + \omega^2} \right] g(\omega) d\omega, \quad (20)$$

其中 $g(\omega)$ 假定是关于原点对称的偶函数. 当且仅当方程 (20) 没有正实部根 s 时, 非相干态是线性稳定的. 特别地, 在方程 (20) 中通过取极限 $s \rightarrow 0^+$, 可得到非相干态稳定的临界扩散耦合强度与临界平均场反馈强度需满足

$$\frac{2}{K_1 + K_2} = \pi g(0) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - K_1)}{\omega^2 + 4(1 - K_1)^2} g(\omega) d\omega, \quad (21)$$

(21) 式很好地从理论上预测耦合系统 (1) 在系统尺寸 N 充分大时非相干态失稳的临界条件.

为验证 (21) 式中理论预测的有效性, 接下来通过展示方程 (1) 的数值模拟结果来直观地显示耦合系统中非相干态的行为规律. 在数值实验中, 固定 $N = 10000$, 利用四阶 Runge-Kutta 方法与随机初始条件对方程 (1) 进行数值模拟, 其中振子的自然频率服从 (2) 式给出的高斯分布. 图 1(a) 给出了不同平均场反馈强度 K_2 下序参量 R 随扩散耦合强度 K_1 的相变图, 其中频率标准差固定为 $\Delta = 0.2$. 显然可以看到, 随着 K_2 的增大, 系统非相干态失稳 (R 的值从零变为非零) 的临界扩散耦合强度 K_{1c} 逐渐减小. 图 1(b) 进一步给出了在不同 K_2 值下 K_{1c} 随 Δ 的变化关系, 其中实线为 (21) 式给出的理论预测, 蓝色的方形实点为数值结果, 可以清晰地看到数值模拟与理论预测一致.

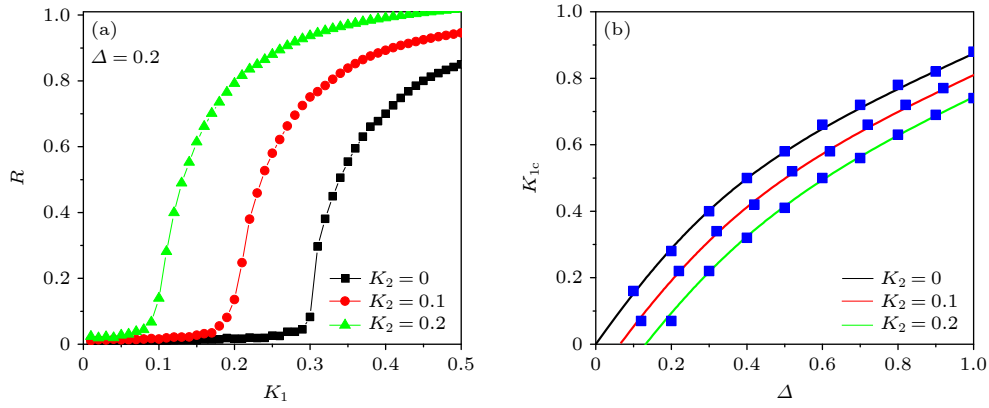


图 1 平均场反馈对全局扩散耦合系统 (1) 中非相干态的影响 (a) 不同平均场反馈强度 K_2 下, 序参量 R 随扩散耦合强度 K_1 的相变图, 其中频率标准差固定为 $\Delta = 0.2$; (b) 不同平均场反馈强度 K_2 下, 使得非相干态失稳的临界扩散耦合强度 K_{1c} 与频率标准差 Δ 的关系. 实线为 (21) 式给出的理论预测, 蓝色的方形实点为数值结果

Fig. 1. Effect of mean-field feedback on the incoherence in coupled system (1): (a) Phase transition diagrams of order parameter R with the strengths of diffusive coupling K_1 under different strengths of the mean-field feedback K_2 , where the standard deviation of natural frequencies is fixed at $\Delta = 0.2$; (b) dependence of the critical diffusive coupling strength K_{1c} , beyond which the incoherence becomes destabilized, on the standard deviation Δ of natural frequencies under different strengths of the mean-field feedback K_2 . The solid lines are the plots of the theoretical prediction given in Eq. (21), whereas the blue squares denote the numerical results.

3.2 振幅死亡

当扩散耦合强度与平均场反馈强度均为零, 即 $K_1 = K_2 = 0$ 时, 方程 (1) 中第 j 个 Stuart-Landau 系统在半径为 $|z_j| = 1$ 的极限环上以频率 ω_j 旋转, 且有一个非稳的焦点 $z_j = 0$. 显然, 对于任何的 $K_1 > 0$ 与 $K_2 > 0$, $z_j = 0$ 依然为方程 (1) 的一个解. 特别地, 当平均场反馈强度 $K_2 = 0$ 时, 前人研究表明在一定的固有自然频率分布与扩散耦合强度 $K_1 > 0$ 下 [25], 不动点 $z_j = 0$ 可转变为方程 (1) 的一个稳定解, 即耦合系统 (1) 经历所谓的扩散耦合诱导的振幅死亡现象 [23,24]. 通过在耦合振子系统中引入反馈, Chandrasekar 等 [52] 首次研究了两个耦合的非全同 Stuart-Landau 振子系统中反馈作用对振幅死亡的影响, 他们发现反馈的出现可消除参数不匹配诱导的振幅死亡现象. 进一步地, Zhao 和 Sun [53] 揭示了平均场反馈可消除两个耦合的 Stuart-Landau 振子系统在不同耦合情形下的振幅死亡行为. 最近, Shi 等 [54] 将平均场反馈扩展

到更一般的形式: 使用双权重反馈作用于耦合 Stuart-Landau 系统中的每个振荡器. 他们发现消除振幅死亡现象的反馈作用中存在一个最优的权重值. 本节将从理论上揭示平均场反馈对 N ($N \gg 2$) 个全局耦合非全同 Stuart-Landau 振子系统中振幅死亡的作用; 特别地, 通过严格的线性稳定性分析, 在热力学极限情形 ($N \rightarrow \infty$) 下得到依赖于扩散耦合强度 K_1 与平均场反馈强度 K_2 的振幅死亡态稳定的精确条件.

为了得到振幅死亡的发生条件, 对方程 (1) 在解 $z_j = 0$ 处进行线性稳定性分析. 将带小扰动的振幅死亡解 $z_j = 0 + \varepsilon \eta_j$ ($0 < \varepsilon \ll 1$) 代入到 (1) 式中展开, 只保留 ε 的一阶线性项后, 可得到如下的线性方程:

$$\dot{\eta}_j = (1 - K_1 + i\omega_j)\eta_j + \frac{K_1 + K_2}{N} \sum_{k=1}^N \eta_k, \quad (22)$$

其中 $j = 1, 2, \dots, N$. 由 (22) 式可知, 耦合系统 (1) 在 $z_j = 0$ 处线性化后的雅可比矩阵为

$$M = \begin{pmatrix} 1 - K_1 + i\omega_1 + \frac{K_1 + K_2}{N} & \frac{K_1 + K_2}{N} & \dots & \frac{K_1 + K_2}{N} \\ \frac{K_1 + K_2}{N} & 1 - K_1 + i\omega_2 + \frac{K_1 + K_2}{N} & \dots & \frac{K_1 + K_2}{N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{K_1 + K_2}{N} & \frac{K_1 + K_2}{N} & \dots & 1 - K_1 + i\omega_N + \frac{K_1 + K_2}{N} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

振幅死亡稳定的充要条件为 (23) 式中的矩阵 M 所有特征值的实部都小于零.

记 $a_j = 1 - K_1 + i\omega_j$, 按照行列式的性质, 矩阵 M 的特征方程 $\det(\lambda I - M) = 0$ 可具体地计算为

$$\begin{aligned} \det(\lambda I - M) &= \det \begin{pmatrix} \lambda - a_1 - \frac{K_1 + K_2}{N} & -\frac{K_1 + K_2}{N} & \cdots & -\frac{K_1 + K_2}{N} \\ -\frac{K_1 + K_2}{N} & \lambda - a_2 - \frac{K_1 + K_2}{N} & \cdots & -\frac{K_1 + K_2}{N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{K_1 + K_2}{N} & -\frac{K_1 + K_2}{N} & \cdots & \lambda - a_N - \frac{K_1 + K_2}{N} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & \lambda - a_1 - \frac{K_1 + K_2}{N} & -\frac{K_1 + K_2}{N} & \cdots & -\frac{K_1 + K_2}{N} \\ 0 & -\frac{K_1 + K_2}{N} & \lambda - a_2 - \frac{K_1 + K_2}{N} & \cdots & -\frac{K_1 + K_2}{N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -\frac{K_1 + K_2}{N} & -\frac{K_1 + K_2}{N} & \cdots & \lambda - a_N - \frac{K_1 + K_2}{N} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \frac{K_1 + K_2}{N} & \lambda - a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{K_1 + K_2}{N} & 0 & \lambda - a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{K_1 + K_2}{N} & 0 & 0 & \cdots & \lambda - a_N \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} 1 - \frac{K_1 + K_2}{N} \sum_{j=1}^N (\lambda - a_j)^{-1} & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & \lambda - a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda - a_N \end{pmatrix} \\ &= \det \left(1 - \frac{K_1 + K_2}{N} \sum_{j=1}^N (\lambda - a_j)^{-1} \right) \prod_{j=1}^N (\lambda - a_j) = 0. \end{aligned}$$

故方程 (1) 在解 $z_j = 0$ 处线性化后的特征方程最终为

$$\left(1 - \frac{K_1 + K_2}{N} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\lambda - 1 + K_1 - i\omega_k} \right) \prod_{k=1}^N (\lambda - 1 + K_1 - i\omega_k) = 0. \quad (24)$$

如果特征方程 (24) 只有实部为负的根, 则耦合系统 (1) 中的振幅死亡态是稳定的. 反之, 如果特征方程 (24) 有一个实部为正的根, 则振幅死亡态是非稳的.

一般情况下, 当 $N > 2$ 时, (24) 式所给出的特征方程的根很难解析地求解, 因为它们依赖于特定频率 $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N$ 的具体分布. 然而, 在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 情形下, 特征方程 (24) 的根的求解问题可得到极大的简化且易于解析地处理. 具体地, 当 $N \rightarrow \infty$ 时, (24) 式中左边的两部分分别对应于振幅死亡的连续谱和离散谱. 一方面, 振幅死亡的连续谱可直接求得为

$$\lambda = 1 - K_1 + i\omega, \quad \omega \in \text{support}(g), \quad (25)$$

其中 $\text{support}(g)$ 为使得 $g(\omega) \neq 0$ 的 ω 的集合. 显然, 当 $K_1 > 1$ 时, 连续谱是稳定的, 即连续谱不会诱导振幅死亡失稳. 另外一方面, 振幅死亡的离散谱由如下方程的根给出:

$$\frac{1}{K_1 + K_2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\omega)}{\lambda - 1 + K_1 - i\omega} d\omega. \quad (26)$$

若 (26) 式的根的实部均为负数, 则离散谱是稳定的. 特别地, 在方程 (26) 中令 $\lambda \rightarrow 0$ 时, 可得离散谱决定的振幅死亡稳定的临界条件为

$$\frac{1}{K_1 + K_2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(K_1 - 1)g(\omega)}{(K_1 - 1)^2 + \omega^2} d\omega. \quad (27)$$

值得强调的是, 热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 情形下, 连续谱 (25) 式与离散谱 (26) 式所预测的振幅死亡稳定区具有重要的理论意义, 它为具有足够大的尺寸 N 的耦合系统 (1) 中振幅死亡的涌现提供了一个相当准确的描述.

图 2(a) 给出了使得振幅死亡稳定的扩散耦合

强度 K_1 区间随着平均场反馈强度 K_2 的变化, 其中频率标准差固定为 $\Delta = 1.5$. 随着 K_2 的增大, 稳定的振幅死亡区间逐渐变小, 并最终彻底地消失.

图 2(b) 进一步地给出了平均场反馈强度为 $K_2 = 0, 0.1$ 和 0.2 时, 耦合系统 (1) 在参数空间 (K_1, Δ) 中振幅死亡的稳定区. 图 2(a) 与图 2(b) 中, 实斜线为 (27) 式所给出的理论预测, 蓝色的方形实点则表示数值实验得到的振幅死亡稳定区的边界. 在数值实验中, 固定系统的尺寸为 $N = 10000$, 自然频率服从高斯分布 (2) 式, 且采用随机初始条件. 图 2 表明理论分析与数值模拟的结果一致: 随着平均场反馈强度的增大, 振幅死亡稳定的参数区逐渐缩小. 故平均场反馈可有效地消除扩散耦合系统 (1) 中的振幅死亡现象, 从而恢复系统的宏观振荡行为.

3.3 锁频态

本节讨论耦合系统 (1) 中的另外一种典型的定态集体行为: 锁频态. 注意到方程 (1) 具有旋转对称性, 假定平均频率 $\omega_0 = 0$ 时, 锁频态对应于方程 (1) 的非平庸不动点解. 当 $2 \ll N < \infty$ 时, 方程 (1) 的非平庸不动点解几乎不可能显式地求得. 然而, 在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 情形下, 依然可从理论上对耦合系统 (1) 中的锁频态获得一定程度的理解.

当 $N \rightarrow \infty$ 时, 锁频态中每个振子的位置取决于自然频率 ω , 故方程 (1) 中振子的状态变量 z 可看作为依赖 ω 的函数. 由 (5) 式与 (6) 式中的极坐

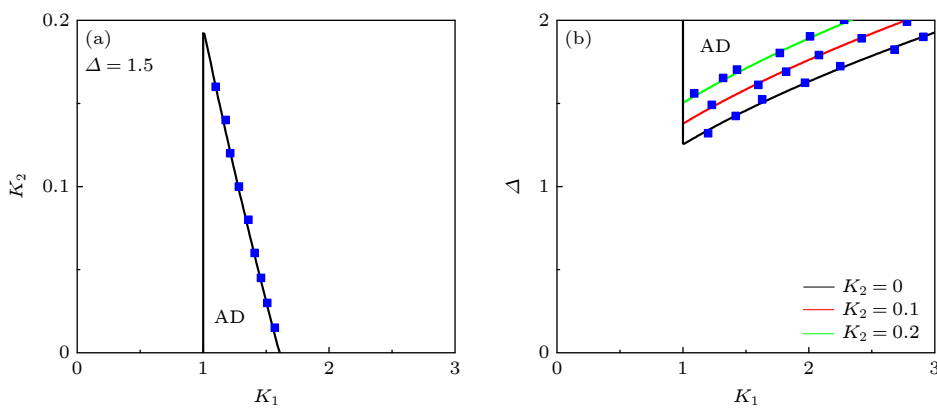


图 2 平均场反馈对全局扩散耦合系统 (1) 中振幅死亡的影响 (a) 稳定的振幅死亡扩散耦合强度 K_1 区间随平均场反馈强度 K_2 的变化, 其中频率标准差固定为 $\Delta = 1.5$; (b) 不同平均场反馈强度 K_2 下, 参数空间 (K_1, Δ) 中振幅死亡的稳定区. (a) 与 (b) 中, 蓝色的方形实点表示数值模拟结果, 实斜线为 (27) 式中的理论预测结果

Fig. 2. Effect of mean-field feedback on amplitude death (AD) in coupled system (1): (a) Stable AD interval of diffusive coupling K_1 versus the strength of the mean-field feedback K_2 , where $\Delta = 1.5$ is fixed; (b) stable regions of AD in the parameter space of (K_1, Δ) under different strengths of the mean-field feedback K_2 . In both panels, the blue squares represent the numerical results, whereas the solid lines denote the theoretical prediction by Eq. (27).

标方程可知, 锁频态中有:

$$(K_1 + K_2)R \cos(\theta - \phi) = (K_1 + r^2 - 1)r, \quad (28)$$

$$(K_1 + K_2)R \sin(\theta - \phi) = \omega r, \quad (29)$$

其中 r, θ, R 和 ϕ 同时满足:

$$R = \int_{-\infty}^{\infty} r e^{i(\theta - \phi)} g(\omega) d\omega. \quad (30)$$

(28) 式—(30) 式对耦合系统 (1) 的锁频态的解提供一个完整的自洽描述.

锁频态中, 振子的位置 r 与 θ 完全由序参量 R, ϕ 和自然频率 ω 来刻画. 显然, 从 (29) 式可得:

$$r = \frac{(K_1 + K_2)R \sin(\theta - \phi)}{\omega}, \quad (31)$$

将其代入到 (28) 式有:

$$\begin{aligned} & [\omega \cot(\theta - \phi) + 1 - K_1] \omega^2 \\ & = (K_1 + K_2)^2 R^2 \sin^2(\theta - \phi), \end{aligned} \quad (32)$$

可进一步地写为关于 $\cot(\theta - \phi)$ 的三次方程:

$$\begin{aligned} & [\omega \cot(\theta - \phi) + 1 - K_1][1 + \cot^2(\theta - \phi)] \omega^2 \\ & = (K_1 + K_2)^2 R^2, \end{aligned} \quad (33)$$

它给出了锁频态中振子相位 θ 依赖于序参量 R, ϕ 和自然频率 ω 的一个隐式关系. 此外, 将 (28) 式与 (29) 式两边平方后相加, 可得关于 r^2 的一个三次方程:

$$[\omega^2 + (K_1 + r^2 - 1)]r^2 = (K_1 + K_2)^2 R^2, \quad (34)$$

它给出了锁频态中振子幅值 r 依赖于序参量 R 和自然频率 ω 的一个隐式关系. 事实上, 由 (28) 式与 (29) 式有:

$$r^2 = \omega \cot(\theta - \phi) + 1 - K_1, \quad (35)$$

可知 (33) 式与 (34) 式本质上是同一个三次方程.

注意到耦合系统 (1) 中的振幅死亡态其实是其锁频态的一类特殊情况, 对应于方程 (1) 中的平庸不动点解 $r = 0$, 且有序参量 $R = 0$. 下面说明 (27) 式中的振幅死亡稳定区的边界线可从锁频态的序参量的自洽关系 (30) 式中推导出. 由 (31) 式, 方程 (30) 可改写为

$$\begin{aligned} \frac{1}{K_1 + K_2} & = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\theta - \phi)}{\omega} [\cos(\theta - \phi) \\ & + i \sin(\theta - \phi)] g(\omega) d\omega. \end{aligned} \quad (36)$$

在振幅死亡态中 $r = 0$, 故从 (35) 式可解得:

$$\cot(\theta - \phi) = \frac{K_1 - 1}{\omega}. \quad (37)$$

利用三角函数等式可进一步地求得:

$$\sin(\theta - \phi) \cos(\theta - \phi) = \frac{(K_1 - 1)\omega}{(K_1 - 1)^2 + \omega^2}, \quad (38)$$

$$\sin^2(\theta - \phi) = \frac{\omega^2}{(K_1 - 1)^2 + \omega^2}. \quad (39)$$

将 (38) 式与 (39) 式代入 (36) 式中可得:

$$\frac{1}{K_1 + K_2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(K_1 - 1)g(\omega)}{(K_1 - 1)^2 + \omega^2} d\omega,$$

即为 (27) 式中所给出的振幅死亡稳定区的边界线表达式.

4 结 论

本文在热力学极限条件 $N \rightarrow \infty$ 下, 探讨了平均场反馈下全局扩散耦合 Stuart-Landau 极限环系统中的 3 种典型的可解集体动力学: 非相干态、振幅死亡态及锁频态. 首先, 通过对非相干态的线性稳定性分析, 解析地得到了耦合系统发生同步的临界扩散耦合强度与临界平均场反馈强度之间满足的具体条件. 理论与数值结果均表明增强平均场反馈强度可使得耦合系统在更小的临界扩散耦合强度下出现同步行为. 其次, 利用振幅死亡线性稳定性分析解析地得到了参数空间中振幅死亡区的临界边界线, 并通过数值实验证实了理论预测的有效性. 结果显示增强平均场反馈强度会导致系统的振幅死亡区逐渐缩减, 进而可使耦合系统从振幅死亡态中复苏系统的集体振荡行为. 最后, 通过对锁频态的序参量的自洽分析得到了锁频态的一些基本理论性质; 特别地, 从锁频态存在性的自洽条件中进一步地推导出了振幅死亡态稳定区的边界线.

一方面, 本文使用的 Stuart-Landau 振子系统是描述超临界霍普夫 (Hopf) 分岔动力学的范式模型, 该模型被诸多学科领域中的研究人员所广泛使用. 基于 Stuart-Landau 极限环模型所得的结果具有非常深刻的科学意义, 常常被认为在大多数霍普夫分岔附近的非线性系统中均成立. 另外一方面, 反馈技术在众多的自然系统中无所不在且有着重要意义与应用, 如同步控制问题与脑深部刺激 (DBS). 本文是对全局扩散耦合 Stuart-Landau 极限环系统中集体动力学研究的一个重要拓展, 本文的研究结果不仅在理论上有很好的普适意义, 而且

在许多物理与生物系统中都将有着重要的潜在应用. 基于本文的研究未来会有更多的关于耦合非线性系统中可解集体动力学的有益探索, 同时对发展平均场反馈技术的应用也有所裨益. 最后, 本文仅对全局耦合系统所表现出的定态集体动力学给出了相应的理论分析, 缺乏对非定态的集体动力学(序参量随时间变化的振荡态, 如周期、拟周期或混沌行为等)的考量以及耦合网络拓扑结构的讨论, 这些重要问题未来亟需得到分析与解决.

参考文献

- [1] Kuramoto Y 1984 *Chemical Oscillations, Waves and Turbulence* (Berlin: Springer-Verlag)
- [2] Pikovsky A, Rosenblum M, Kurths J 2001 *Synchronization: A Universal Concept in Nonlinear Sciences* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [3] Strogatz S 2003 *Sync: The Emerging Science of Spontaneous Order* (London: Penguin Press Science)
- [4] Zheng Z G 2004 *Spatiotemporal Dynamics and Cooperative Behaviors in Coupled Nonlinear Systems* (Beijing: Higher Education Press) (in Chinese) [郑志刚 2004 耦合非线性系统的时空动力学与合作行为 (北京: 高等教育出版社)]
- [5] Ding D W, Lu X Q, Hu Y B, Yang Z L, Wang W, Zhang H W 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 230501 (in Chinese) [丁大为, 卢小齐, 胡永兵, 杨宗立, 王威, 张红伟 2022 物理学报 **71** 230501]
- [6] Jiang H F, Lin J, Hu B B, Zhang X 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 104205 (in Chinese) [蒋宏帆, 林机, 胡贝贝, 张肖 2023 物理学报 **72** 104205]
- [7] Shen L F, Wang J B, Du Z W, Xu X K 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 068701 (in Chinese) [沈力峰, 王建波, 杜占玮, 许小可 2023 物理学报 **72** 068701]
- [8] Kuramoto Y 1975 *Self-entrainment of a Population of Coupled Nonlinear Oscillators, in: International Symposium on Mathematical Problems in Theoretical Physics* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) pp420–428
- [9] Strogatz S H 2000 *Physica D* **143** 1
- [10] Acebrón J A, Bonilla L L, Pérez Vicente C J, Ritort F, Spigler R 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 137
- [11] Guan S G 2020 *Sci. Sin. Phys., Mech. Astron.* **50** 010504 (in Chinese) [管曙光 2020 中国科学: 物理学 力学 天文学 **50** 010504]
- [12] Zheng Z G, Zhai Y 2020 *Sci. Sin. Phys., Mech. Astron.* **50** 010505 (in Chinese) [郑志刚, 翟云 2020 中国科学: 物理学 力学 天文学 **50** 010505]
- [13] Zheng Z G, Zhai Y, Wang X B, Chen H B, Xu C 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 080502 (in Chinese) [郑志刚, 翟云, 王学彬, 陈宏斌, 徐灿 2020 物理学报 **69** 080502]
- [14] Wang X B, Xu C, Zheng Z G 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 170501 (in Chinese) [王学彬, 徐灿, 郑志刚 2020 物理学报 **69** 170501]
- [15] Cai Z K, Xu C, Zheng Z G 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 220501 (in Chinese) [蔡宗楷, 徐灿, 郑志刚 2021 物理学报 **70** 220501]
- [16] Katz Y, Tunström K, Ioannou C C, Huepe C, Couzin I D 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **108** 18720
- [17] Vicsek T, Zafeiris A 2012 *Phys. Rep.* **517** 71
- [18] O’Keefe K P, Hong H, Strogatz S H 2017 *Nat. Commun.* **8** 1504
- [19] Cross M C, Hohenberg P C 1993 *Rev. Mod. Phys.* **65** 851
- [20] Nakagawa N, Kuramoto Y 1993 *Prog. Theor. Phys.* **89** 313
- [21] Liu R Q, Jia M M, Fan W L, He Y F, Liu F C 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 248201 (in Chinese) [刘若琪, 贾萌萌, 范伟丽, 贺亚峰, 刘富成 2022 物理学报 **71** 248201]
- [22] Yang J Q, Liu W J 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 100504 (in Chinese) [杨佳奇, 刘文军 2023 物理学报 **72** 100504]
- [23] Saxena G, Prasad A, Ramaswamy R 2012 *Phys. Rep.* **521** 205
- [24] Zou W, Senthilkumar D V, Zhan M, Kurths J 2021 *Phys. Rep.* **931** 1
- [25] Mirollo R E, Strogatz S H 1989 *J. Stat. Phys.* **60** 245
- [26] Aronson D G, Ermentrout G B, Kopell N 1990 *Physica D* **41** 403
- [27] Zou W, Senthilkumar D V, Nagao R, Kiss I Z, Tang Y, Koseska A, Duan J Q, Kurths J 2015 *Nat. Commun.* **6** 7709
- [28] Ramana Reddy D V, Sen A, Johnston G L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5109
- [29] Atay F M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 094101
- [30] Zou W, Senthilkumar D V, Zhan M, Kurths J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 014101
- [31] Konishi K 2003 *Phys. Rev. E* **68** 067202
- [32] Karnatak R, Ramaswamy R, Prasad A 2007 *Phys. Rev. E* **76** 035201
- [33] Zou W, He S J, Yao C G 2022 *Appl. Math. Lett.* **131** 108052
- [34] Resmi V, Ambika G, Amritkar R E 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046212
- [35] Matthews P C, Strogatz S H 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1701
- [36] Matthews P C, Mirollo R E, Strogatz S H 1991 *Physica D* **52** 293
- [37] Zou W, He S J, Senthilkumar D V, Kurths J 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 107202
- [38] Schwab D J, Baetica A, Mehta P 2012 *Physica D* **241** 1782
- [39] Lee W S, Ott E, Antonsen T M 2013 *Chaos* **23** 033116
- [40] Wang C Q, Garnier N B 2016 *Chaos* **26** 113119
- [41] Kemeth F P, Haugland S W, Krischer K 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 214101
- [42] Röhm A, Lüdige K, Schneider I 2018 *Chaos* **28** 063114
- [43] Kemeth F P, Haugland S W, Krischer K 2019 *Chaos* **29** 023107
- [44] León I, Pazó D 2019 *Phys. Rev. E* **100** 012211
- [45] León I, Pazó D 2020 *Phys. Rev. E* **102** 042203
- [46] Kak S C 1993 *Circuits, Systems and Signal Processing* **12** 263
- [47] Becskei A, Séraphin B, Serrano L 2001 *Embo. J.* **20** 2528
- [48] Draghici S 1997 *Int. J. Neural Syst.* **8** 113
- [49] Gough J E, Gohm R, Yanagisawa M 2008 *Phys. Rev. A* **78** 062104
- [50] Lloyd S 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022108
- [51] Little S, Brown P 2012 *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **1265** 9
- [52] Chandrasekar V K, Karthiga S, Lakshmanan M 2015 *Phys. Rev. E* **92** 012903
- [53] Zhao N N, Sun Z K 2020 *Int. J. Bifurcation and Chaos* **30** 2050094
- [54] Shi D X, Li X R, Shan M H 2023 *Adv. Appl. Math.* **12** 1940 (in Chinese) [史东鑫, 李兴瑞, 单美华 2023 应用数学进展 **12** 1940]

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Solvable collective dynamics of globally coupled Stuart-Landau limit-cycle systems under mean-field feedback^{*}

He Su-Juan Zou Wei[†]*(School of Mathematical Sciences, South China Normal University, Guangzhou 510631, China)*

(Received 24 May 2023; revised manuscript received 26 September 2023)

Abstract

Coupled Stuart-Landau limit-cycle system serves as an important paradigmatic model for studying synchronization transitions and collective dynamics in self-sustained nonlinear systems with amplitude degree of freedom. In this paper, we extensively investigate three typical solvable collective behaviors in globally coupled Stuart-Landau limit-cycle systems under mean-field feedback: incoherence, amplitude death, and locked states. In the thermodynamic limit of $N \rightarrow \infty$, the critical condition characterizing the transition from incoherence to synchronization is explicitly obtained via performing the linear stability of the incoherent states. It is found that the synchronization transition occurs at a smaller coupling strength when the strength of mean-field feedback is gradually enhanced. The stable regions of amplitude death are theoretically obtained via an analysis of the linear stability of coupled systems around the origin. The results indicate that the existence of mean-field feedback can effectively eliminate the amplitude death phenomenon in the coupled systems; furthermore, the existence of locked states is analyzed theoretically, and in particular, the boundary of stable amplitude death region is re-derived from the self-consistent relation of the order parameter for the locked states. This work reveals the key role of mean-field feedback in controlling the collective dynamics of coupled nonlinear systems, deepens the understanding of the influence of mean-field feedback technology on the coupling-induced collective behaviors, and is conducive to our further understanding of the emerging rules and the underlying mechanisms of self-organized behavior in complex coupled systems.

Keywords: coupled nonlinear oscillators, collective dynamics, phase transition, amplitude death**PACS:** 05.45.-a, 05.45.Xt**DOI:** [10.7498/aps.72.20230842](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230842)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12075089).

[†] Corresponding author. E-mail: weizou83@gmail.com



平均场反馈下全局耦合Stuart–Landau极限环系统的可解集体动力学

贺苏娟 邹为

Solvable collective dynamics of globally coupled Stuart–Landau limit–cycle systems under mean–field feedback

He Su-Juan Zou Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200502 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230842

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230842>

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

高阶耦合相振子系统的同步动力学

Collective dynamics of higher–order coupled phase oscillators

物理学报. 2021, 70(22): 220501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211206>

不同频率涨落驱动下全局耦合谐振子的集体动力学行为

Collective behaviors of globally coupled harmonic oscillators driven by different frequency fluctuations

物理学报. 2021, 70(13): 130501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210157>

热峰作用下单斜ZrO₂相变过程的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of phase transition by thermal spikes in monoclinic ZrO₂

物理学报. 2021, 70(13): 136101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201861>

双光腔光机械系统的动力学相变和选择性能量交换

Dynamical phase transition and selective energy exchange in dual–cavity optomechanical systems

物理学报. 2021, 70(14): 140301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210178>

窗口声阻抗对锆相变动力学的影响

Phase transformation kinetics of zirconium under ramp wave loading with different windows

物理学报. 2018, 67(7): 070204 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172198>

多重耦合振子系统的同步动力学

Synchronization in coupled oscillators with multiplex interactions

物理学报. 2020, 69(17): 170501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200394>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

强驱动单态-三重态量子比特的高保真单比特门*

刘启沛¹⁾ 张程贤^{2)†} 薛正远^{1)3)4)‡}

1) (华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (广西大学物理科学与工程技术学院, 南宁 530004)

3) (华南师范大学物理前沿科学研究院, 广东省量子调控与量子材料重点实验室, 粤港量子物质实验室, 广州 510006)

4) (合肥国家实验室, 合肥 230088)

(2023 年 5 月 31 日收到; 2023 年 7 月 6 日收到修改稿)

半导体量子点量子比特是最有希望实现量子计算的候选者之一. 其中自旋单态-三重态量子比特因具有全电控制和读取准确的优良性质而备受关注. 为增强对电荷噪声的免疫, 通常引进强脉冲驱动以尽可能加快门操作速度. 但是, 强驱动脉冲引起的复杂动力学导致旋波近似不再适用, 反而会阻碍高保真度比特操作的实现. 本文提出了一种增加简单的正交脉冲的方法, 可以很好地抑制强驱动引起的高频振荡项的操作错误. 数值计算结果表明, NOT 门的保真度在无噪声时可达 99.99% 且操作时间只需 2 ns. 特别地, 即便电荷噪声强度到了 2 μeV 的水平, NOT 门的平均保真度也可高于 99.9%. 值得注意的是, 该方案同时也适用于任意单比特量子门的优化. 因此, 本文的脉冲优化方案将有助于获得快速高保真度的自旋单态-三重态量子比特.

关键词: 单态-三重态量子比特, 量子单比特门, 强驱动**PACS:** 03.67.Lx, 42.50.Dv**DOI:** 10.7498/aps.72.20230906

1 引言

基于半导体量子点的量子计算具有全电控操作的优势以及可结合现代半导体工业的能力^[1-3], 被认为是实现大规模量子计算的最有潜力的物理系统之一. 近年来, 技术的进步使得基于单量子点单自旋态的高保真单比特门^[4-6]和两比特门^[7-9]得以实验实现. 另外, 基于多量子点多个自旋态实现的量子比特方案, 通过引入更多的自由度带来了相干时间或比特操作上的优势^[2,3,10-13]. 其中, 单态-三重态 (ST₀) 量子比特是由束缚于双量子点的双电子自旋单态和三重态构成的^[11,14], 具有快速全电控制和读取准确率高的优点^[11,15,16]. 近年来, 得

益于硅基半导体上同位素纯化技术的广泛使用^[17,18], 核自旋引起的局域磁场扰动可以进一步得到消除, 大大增强了量子比特的弛豫时间. 然而, 高保真量子比特门的实现仍然受限于量子点附近随机扰动的电荷噪声^[19,20]的影响. 因此, 有必要引入新方法保护比特, 如在对电荷噪声不敏感的甜点区域进行操作^[21-27], 或增强驱动脉冲缩短操作时间^[24].

对量子点自旋比特, 对称工作点^[21,22]是近来备受关注的一种甜点类型. 在该点处, 比特能级间距对电荷噪声一阶不敏感, 因此其平均单比特门操作保真度可高达 99.6%^[25]. 然而, 此时对量子比特进行操作的拉比频率通常被限制在只有几 MHz^[25,28]的水平上, 使得量子比特变得更易受到噪声和控制错误的影响. 此外, 近年来一种被称为横向甜点区

* 国家自然科学基金 (批准号: 11905065, 12275090)、广西科技基地和人才专项 (批准号: 桂科 AD22035186)、广东省重点实验室 (批准号: 2020B1212060066) 和量子科技创新计划 (批准号: 2021ZD0302300) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cxzhang@gxu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zyxue83@163.com

域操作的方案也引发了关注^[23,26]. 在该区域, 量子比特的电偶极耦合主要为横向形式且兼具电偶极矩大和对电荷噪声一阶不敏感的特点, 因此更适合实现快速的比特操作, 进而提高 ST_0 量子比特在电荷噪声下的保真度. 同时, 量子点杂化比特中也存在类似的工作区域^[24,27].

另一方面, 快速高保真的单比特门不能简单地通过增大拉比频率来完成. 这是因为, 在强驱动下, 旋波近似可能不再适用^[29–31]. 为了修正强驱动带来的比特操控误差, 研究人员提出了一种通过补偿 Bloch-Siegert 位移的频率修正方法^[24]. 然而, 该修正方法限制了不同单比特门的门速度的选择, 且仅适用于方波脉冲, 限制了实验上脉冲波形的自由选取. 本文提出了一种通过增加一个简单的正交脉冲来抑制高频振荡项的方案. 这一修正脉冲的求解方法将半经典的驱动场等效为一个光子场^[24,30,31], 从而将高频振荡耦合都转化为了不同光子数的态之间的耦合, 然后抑制逻辑子空间与其他子空间的耦合^[32,33], 达到高保真量子操控的目标. 数值模拟结果表明, 在无噪声时, 本方法优于频率修正方法^[24], 可将单比特门保真度提高至少一个数量级. 因为对强驱动所致控制错误的高效抑制, 本方法将有助于 ST_0 量子比特在电荷噪声下实现快速高保真的单比特门.

2 模型

考虑限制在双量子点中的双电子自旋构成的 ST_0 量子比特, 并定义自旋磁量子数为零 ($m_s = 0$) 的子空间为比特的逻辑空间. 门操作区域在电荷构型 $(1, 1) \leftrightarrow (0, 2)$ 附近, 其中 (n_L, n_R) 表示左(右)量子点中各有 n_L (n_R) 个电子. 在强外磁场下, 极化三重态 $|T_{\pm}(1, 1)\rangle$ 将远离操作空间, 因此可以忽略, 在 $\{|T_0(1, 1)\rangle, |S(1, 1)\rangle, |S(0, 2)\rangle\}$ 基矢下, 系统的哈密顿量可以写为^[23]

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & \Delta B & 0 \\ \Delta B & 0 & \sqrt{2}\tau \\ 0 & \sqrt{2}\tau & -\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (1)$$

其中 $\Delta B = g\mu_B(B_L - B_R)$ 是量子点间的塞曼能量差, g 为电子自旋 g 因子, μ_B 是玻尔磁子, B_L (B_R) 对应左(右)点的磁场强度, 并取约化普朗克常数 $\hbar = 1$ (下文亦然); τ 代表两个点之间的隧穿耦合,

它可以通过改变双量子点中间的门电压进行调节; ε 是两个量子点之间的失谐. 这里定义 $\varepsilon = 0$ 对应于 $|S(1, 1)\rangle - |S(0, 2)\rangle$ 相互转换的位置.

为了保护 ST_0 量子比特免受电荷噪声的影响, 通常在对噪声不敏感的横向甜点处进行比特操作. 对于给定的隧穿耦合 τ_0 , 若存在失谐 ε_{ss} 使得该处比特频率 ω_q 对失谐一阶不敏感, 即 $\partial\omega_q/\partial\varepsilon = 0$, 则 $\{\tau_0, \varepsilon_{ss}\}$ 对应一个横向甜点. 在此处进行单比特门操作, 可以施加一个与比特共振的隧穿耦合脉冲 $\tau_{AC}(t) = \Omega_x(t) \cos(\omega_q t + \phi)$, 其脉冲包络为 $\Omega_x(t)$, 相位为 ϕ . 包含驱动的半经典哈密顿量为

$$H = \sum_{i=0,1,f} E_i \sigma_{ii} + \sum_{i,j=0,1,f} \tau_{AC}(t) V_{ij} \sigma_{ij}, \quad (2)$$

其中 $\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|$, $V_{ij} = \langle i | \partial H_0 / \partial \tau | j \rangle$. 当 $\Omega_x(t) \ll \omega_q$ 时, 在驱动场作用下, 量子比特可以绕布洛赫球 X - Y 平面的任意轴线旋转, 而任意单比特门操作可通过复合这些旋转实现^[34]. 然而, 在强驱动下, 旋转绘景中非共振的耦合项不能被忽略, 量子比特的动力学将变得复杂. 因此, 为了实现快速高保真的操作, 有必要对控制脉冲进行更进一步的设计.

3 强驱动

本节提供一种同时实现快速单比特门操作和抑制额外强驱动效应的控制脉冲方法.

3.1 全量子化哈密顿量

把驱动脉冲量子化为一个单模光子场, 图 1 所示为全量子化哈密顿量对应的裸态能级图. 此时可清楚地阐明强驱动效应引起非共振跃迁的基本过程. 为此, 扩展 (2) 式中的经典驱动场到其对应的量子化光子场. 比特和光子场的哈密顿量分别记为 H_{dot} 和 H_{ph} , 二者的相互作用哈密顿量为 V_{int} , 其量子哈密顿量为

$$H_Q = H_{\text{dot}} + H_{\text{ph}} + V_{\text{int}}, \quad (3)$$

其中 $H_{\text{dot}} = \sum_i E_i \sigma_{ii} \otimes I_{\text{ph}}$, I_{ph} 对应光子场的单位算符; 类似地, $H_{\text{ph}} = I_{\text{dot}} \otimes \omega_q a^\dagger a$, I_{dot} 是比特的单位算符. 这里考虑共振驱动的单比特门, 所以光子的频率与量子比特频率一致, a^\dagger (a) 是光子产生(湮灭)算符. 自由哈密顿量 $H_{\text{dot}} + H_{\text{ph}}$ 的本征态为裸态 $\{|i, n\rangle = |i\rangle \otimes |n\rangle\}$, 其中 $|i\rangle \in \{|0\rangle, |1\rangle, |f\rangle\}$, $|n\rangle$ 代表占有数为 n 的光子数态.

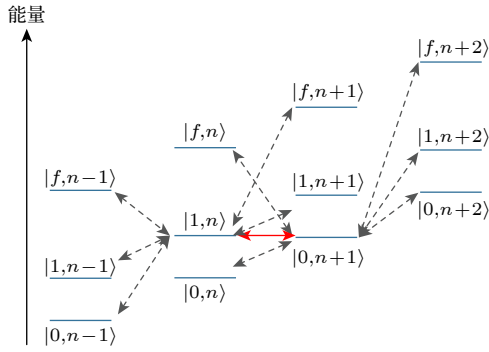


图 1 全量子化哈密顿量的裸态能级图

Fig. 1. Energy levels of the full quantized Hamiltonian for the bare states.

考虑到驱动是由单模的交变电压产生的, 可拟设相互作用哈密顿量为 $V_{\text{int}} = V_{\text{DQD}} \otimes (a + a^\dagger)$, V_{DQD} 对应于作用在双量子点部分的算符. 该哈密顿量应满足经典-量子对应原则^[24], 即

$$V_{\text{DQD}} = \frac{\tau_{\text{AC}}(t)}{2\sqrt{N}} \sum_{ij} V_{ij} \sigma_{ij}. \quad (4)$$

注意到经典驱动场对应的光子数态为相干态, 其分布满足泊松分布, 且平均光子数 N 是一个大数, 光子数偏差 ΔN 远小于 N , 所以可以聚焦在光子数在 N 附近的态上, $n \in [N - \Delta N, N + \Delta N]$. 则任意两个裸态间的耦合强度满足

$$\langle i, n | V_{\text{int}} | j, m \rangle = \frac{V_{ij} \Omega_x(t)}{2} (\delta_{n, m+1} + \delta_{n, m-1}). \quad (5)$$

单比特门操作对应的就是裸态 $|1, n\rangle$ 和 $|0, n+1\rangle$ 之间的拉比振荡. 然而, 如图 1 所示, 上述态还会和其他光子数相差 1 的态耦合, 这对应于半经典哈密顿量中的高频振荡项. 在强驱动下, 这些额外的耦合将导致不可忽略的相位错误和泄漏. 可以看到, 将哈密顿量全量子化后, 处理高频振荡项的问题转变为了抑制逻辑子空间与其他能级之间的耦合的问题.

3.2 修正脉冲

本文通过引入额外的自由度来修正强驱动引起的控制误差. 而对于比特频率, 我们希望保持其为常数, 一是因为量子比特定义在最低的两个能量本征态上, 改变比特频率可能引发泄漏等问题; 二是为了保证 ST_0 比特受横向甜点的保护. 因此, 我们考虑额外增加一个正交的脉冲, 现在总的脉冲为 $\tau'_{\text{AC}}(t) = \Omega_x(t) \cos(\omega_q t + \phi) + \Omega_y(t) \sin(\omega_q t + \phi)$. 拟设对应的全量子化哈密顿量为 $H_Q = H_{\text{dot}} + H_{\text{ph}} + V_Q^x(a_x + a_x^\dagger) + V_Q^y(ia_y' - ia_y^\dagger)$. 由经典-量子

对应原则, 上述哈密顿量可紧凑地表示为

$$H_Q = \sum_{i,j,n} \eta_{ij,x} \sigma_{ij,n}^x + \eta_{ij,y} \sigma_{ij,n}^y + \sum_{i,n} E_{i,n} \sigma_{i,n}, \quad (6)$$

式中的各个记号分别为

$$\begin{aligned} E_{i,n} &= E_i + n\hbar\omega, \quad \sigma_{i,n} = |i, n\rangle \langle i, n|, \\ \sigma_{ij,n}^x &= |i, n\rangle \langle j, n+1| + \text{h.c.}, \\ \sigma_{ij,n}^y &= -i|i, n\rangle \langle j, n+1| + \text{h.c.}, \\ \eta_{ij,x} &= V_{ij} \Omega_x(t)/2, \quad \eta_{ij,y} = -V_{ij} \Omega_y(t)/2. \end{aligned}$$

我们操作的目的在于实现裸态 $|0, n+1\rangle$ 和 $|1, n\rangle$ 之间拉比振荡的同时, 可以同步消除这两个态向其他态的泄漏. 由于光子数相差 1 的裸态间才有直接耦合, 下面只关注光子数属于 $\{n-1, n, n+1, n+2\}$ 的子空间. 为了抑制泄漏, 我们希望找到一个绘景变换算符 $U(t)$, 在该变换下的哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = U^\dagger(t) H_Q U(t) + i \frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t} U(t), \quad (7)$$

要满足以下 3 个要求: 首先, 它的逻辑子空间部分为目标哈密顿量. 其次, 逻辑子空间和泄漏空间之间没有耦合, 即

$$\langle q | H_{\text{eff}} | k \rangle = 0, \quad (8)$$

这里 $|q\rangle$ 属于逻辑子空间, 而 $|k\rangle$ 为泄漏态. 最后, 该变换在比特操作末时刻 t_g 是一个单位算符

$$U(0) = U(t_g) = I, \quad (9)$$

以保证在门操作结束时回到原绘景.

实践中, $U(t)$ 和 $\Omega_{x(y)}(t)$ 可以通过微扰法进行求解^[32]. 为了做到这一点, 引入微扰参量 δ , 并将全量子化的哈密顿量展开为

$$\begin{aligned} H_Q &= \sum_{l=0}^{\infty} \delta^l H^{(l)}(t) + \frac{1}{\delta} H'_0 \\ &= \sum_{i,j,n} \delta^l (\eta_{ij,x}^{(l)} \sigma_{ij,n}^x + \eta_{ij,y}^{(l)} \sigma_{ij,n}^y) + \sum_{i,n} \frac{E'_{i,n}}{\delta} \sigma_{i,n}, \quad (10) \end{aligned}$$

其中态 $|1, n\rangle$ 被定义为零能级, $E'_{i,n} = \delta [E_i - E_1 + (n-m)\hbar\omega]$. 将变换算符改写为矩阵指数, $U(t) = \exp[-iS(t)]$. 进一步, 将 $S(t)$ 展开为 δ 的幂级数, $S(t) = \sum_{l=1}^{\infty} \delta^l S^{(l)}(t)$.

对 (7) 式使用 Baker-Campbell-Hausdorff 展开和 Taylor 展开, 可得到 H_{eff} 的级数展开式, 其第 l 阶的系数为

$$H_{\text{eff}}^{(l)}(t) = H_{\text{ext}}^{(l)}(t) + H^{(l)}(t) + i[S^{(l+1)}(t), H'_0]. \quad (11)$$

特别地, $H_{\text{ext}}^{(l)}(t)$ 代表每一阶中不具规律形式的项, 其第一阶和第二阶的表达式为

$$H_{\text{ext}}^{(0)}(t) = 0, \quad (12)$$

$$H_{\text{ext}}^{(1)}(t) = i[S^{(1)}(t), H^{(0)}(t)] - \partial S^{(1)}(t)/\partial t - [S^{(1)}(t), [S^{(1)}(t), H_0^l]]/2. \quad (13)$$

以 X 轴的旋转操作为例, 将目标哈密顿量 $H_t = h_x(t)\sigma_{10,n}^x$ 展开为微扰级数 $H_t = \delta^l h_x^l(t)\sigma_{10,n}^x$, 则逻辑子空间执行目标操作等价于

$$\eta_{10,x}^{(l)}(t) + \text{tr}[H_{\text{ext}}^{(l)}(t)\sigma_{10,n}^x] = h_x^l(t), \quad (14)$$

$$\eta_{10,y}^{(l)}(t) + \text{tr}[H_{\text{ext}}^{(l)}(t)\sigma_{10,n}^y] = 0, \quad (15)$$

$$\text{tr}[H_{\text{ext}}^{(l)}(t)(\sigma_{0,n+1} - \sigma_{1,n})] = 0. \quad (16)$$

而无泄漏条件 (8) 式的微扰形式为

$$\langle q|S^{(l+1)}(t)|k\rangle = \frac{i}{E_{i,n}'} \langle q|H_{\text{ext}}^{(l)}(t) + H^{(l)}|k\rangle. \quad (17)$$

由 (9) 式和 (14)–(17) 式可选代求得控制脉冲的微扰解。

具体地, 取目标哈密顿参数 $h_x(t) = 2\eta_{10,x}/V_{10}$. 对于一阶微扰解, 由无泄漏条件 (17) 式, $S(t)$ 应该满足

$$\begin{aligned} \langle i,n|S^{(1)}(t)|j,m\rangle &= [\delta_{n,N}(\delta_{m,N-1} + \delta_{m,N+1}) \\ &+ \delta_{n,N+1}(\delta_{m,N} + \delta_{m,N+2})] \frac{iV_{ij}\Omega_x(t)}{2E_{j,m}'}, \end{aligned} \quad (18)$$

其中 $|i,n\rangle$ 为逻辑子空间态, $|j,m\rangle$ 为泄漏态. 由 (18) 式和 (14)–(16) 式可得一阶的脉冲修正 $\eta_{10,x}^{(1)}$ 和频率修正 $\text{tr}[H_{\text{ext}}^{(1)}(t)(\sigma_{0,n+1} - \sigma_{1,n})]$ 所要满足的关系式. 为使绘景变换的时间边界满足 (9) 式, 可取 $s_x^{(1)}(t) = s_z^{(1)}(t) = 0$, 一阶修正时, 仅需将驱动场 y 方向波形修正为

$$\begin{aligned} \Omega_y(t) &= \frac{1}{4V_{01}^2} \left(\frac{V_{01}^2}{E_1 - E_0} + \frac{V_{0f}^2}{E_f - E_1} + \frac{V_{1f}^2}{E_0 - E_f} \right. \\ &\left. + \frac{V_{0f}^2}{E_f + E_1 - 2E_0} - \frac{V_{1f}^2}{E_0 - 2E_1 + E_f} \right) \frac{d\Omega_x(t)}{dt}. \end{aligned} \quad (19)$$

容易发现, 通过简单地改变脉冲的相位 ϕ 即可实现绕不同轴的比特旋转, 所以, 上述方法适用于任意单比特量子门操作的优化。

4 数值模拟

为研究本方案修正脉冲的效果, 对于 NOT 门

的表现, 与文献 [24] 中的频率修正方案及未修正情况做比较. 注意到, 虽然修正脉冲方案是通过求解全量子化哈密顿量得到的, 但也同样适用于半经典哈密顿量, 下文中的数值模拟结果都基于半经典哈密顿量给出, 其中 $\Delta B/(2\pi) = 2$ GHz [35], $\tau_0 = 1.25\Delta B$ 对应的是平坦区域较宽的甜点 [23]. 量子门平均保真度由公式 [36]

$$F = \frac{\sum_i \text{tr}(U_0 U_i^\dagger U_0^\dagger \mathcal{E}(U_i)) + d^2}{d^2(d+1)} \quad (20)$$

计算得出, 其中单比特操作对应 $d = 2$, 而 U_0 为目标量子门, \mathcal{E} 为实际的量子比特操作, U_i 代表泡利算符 I, X, Y 和 Z .

驱动脉冲以实验上常用的截断高斯脉冲

$$V_{01}\Omega_x(t) = \gamma \frac{\exp\left[\frac{-(t-t_g/2)^2}{2\sigma^2}\right] - \exp\left[\frac{-t_g^2}{8\sigma^2}\right]}{\sqrt{2\pi\sigma^2} \text{erf}\left[\frac{t_g}{\sqrt{8}\sigma}\right] - t_g \exp\left[\frac{-t_g^2}{8\sigma^2}\right]}, \quad (21)$$

和三角函数型脉冲

$$V_{01}\Omega_x(t) = \Omega_{\text{max}}(1 - \cos 2\pi t/t_g) \quad (22)$$

为示例, 对应 NOT 门操作, 其中高斯脉冲的半峰全宽取 $\sigma = t_g/4$, $\gamma = \pi$, V_{01} 为甜点处对应的耦合系数 (见 (2) 式), 还有 Ω_{max} 为三角函数型脉冲峰值.

首先考虑无噪声情况, 如图 2(a) 所示, 修正脉冲方案的失真度比未修正的情况至少降低了一个数量级. 特别地, 即便平均拉比频率 $\Omega = \int_0^{t_g} \Omega_x(t) dt/t_g$ 高至 $0.25 \times 2\pi$ GHz (对应门时间 2 ns), 我们方案的失真度也能低于 10^{-4} . 此外, 与文献 [24] 提出的频率修正方法进行比较, 可以看到, 本文的方案比频率修正方案的失真度更低, 这是因为本文方案可以灵活使用不同的拉比频率, 并且对脉冲包络有着较少的限制, 有利于强驱动与其他优化方案相结合. 可见, 通过修正脉冲方案, 强驱动引起的控制误差将大为缓解.

ST₀ 量子比特的相干性主要受失谐噪声的影响. 对准静的失谐噪声 $\varepsilon_{\text{ss}} \rightarrow \varepsilon_{\text{ss}} + \delta\varepsilon$, 其分布满足标准偏差为 σ_ε 的高斯分布. 为计算准静噪声的影响, 数值模拟的基矢为哈密顿量 $H_0(\varepsilon_{\text{ss}} + \delta\varepsilon)$ 的本征态, 并按高斯分布采样 20 个不同的 $\delta\varepsilon$ 数值进行平均. 对高频的失谐噪声, 通过主方程 [37]

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \gamma_\phi \mathcal{D}[\sigma_z]\rho/2 \quad (23)$$

进行模拟, 其中耗散超算符为 $\mathcal{D}[c]\rho = c\rho c^\dagger - c^\dagger c\rho/2 - \rho c^\dagger c/2$, γ_ϕ 为退相干速率.

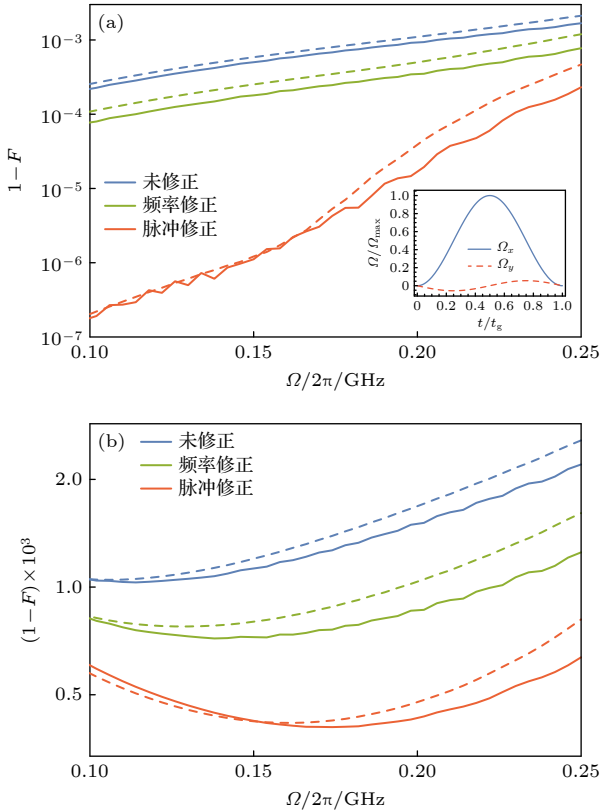


图 2 (a) 无噪声时和 (b) 电荷噪声下的 NOT 门表现. 频率修正和脉冲修正分别指文献 [24] 和本文所用的修正方案. 实线和虚线分别对应 Ω_x 脉冲的包络为高斯型和三角函数型. 图 (a) 右下角的插入图为高斯型 Ω_x 及其对应的 Ω_y 的示意图. 所用参数为 $V_{01} = 0.6402$, $V_{0r} = 0.5309$, $V_{1f} = 0.0014$

Fig. 2. NOT gate performance under (a) noise-free and (b) charge noise. The frequency correction and the pulse correction refers to the correction scheme used in Ref. [24] and this work, respectively. The Gaussian and trigonometric Ω_x pulse envelopes are represented by the solid and dashed lines, respectively. The bottom right insert in panel (a) is a diagram of Gaussian Ω_x and its corresponding Ω_y . Parameters: $V_{01} = 0.6402$, $V_{0r} = 0.5309$, $V_{1f} = 0.0014$.

图 2(b) 模拟了未修正、频率修正方案和脉冲修正方案中 NOT 门在准静噪声和低频噪声共同作用下的表现. 取准静噪声标准为典型值 $\sigma_\epsilon = 2 \mu\text{eV}$ [38,39], 退相干时间 $T_2 = 1/\gamma_\phi = 7 \mu\text{s}$ [40]. 对比脉冲修正方案与其他方案的表现, 脉冲修正的效果在一定区域内随着拉比频率的增加而变得更加显著. 这是因为, 一方面, 高频振荡项的影响在强驱动下更明显; 另一方面, 强驱动缩短了门时间, 减弱了噪声的干扰. 考虑到求解修正脉冲时微扰展开

的有效性, 门保真度不会一直随着拉比频率的增大而增大, 脉冲修正方案下 NOT 门的保真度始终高于 99.9%, 而未修正方案门保真度则低于 99.9%, 这展示了脉冲修正方案对减弱电荷噪声影响的作用. 对比频率修正方案, 脉冲修正的效果不仅对控制脉冲的限制更少, 且利于进一步与其他优化方法的兼容.

5 结论

研究表明, 以横向甜点作为工作区域, 不仅可以实现对 ST_0 量子比特的快速单比特操作, 同时也可以保证量子比特对电荷噪声的一阶不敏感. 另一方面, 在横向甜点工作处, 强驱动下的高频振荡同时也将导致不可忽略的控制误差. 本文提出了一种通过增加一个简单的正交脉冲的方法, 以减少由强驱动引起的控制误差, 并以 NOT 门为例进行了数值模拟. 结果表明, 在本文的脉冲修正下, 即便电荷噪声强度在 $2 \mu\text{eV}$ 的水平, 也可获得保真度高于 99.9% 的单量子比特门操作. 值得注意的是, 该方案同时也适用于任意单比特量子门的优化. 因此, 本文的脉冲优化方案将有助于获得快速高保真度的 ST_0 量子比特. 此外, 这种方法也可应用于实现其他量子系统的快速精确操作.

参考文献

- [1] Chatterjee A, Stevenson P, De Franceschi S, Morello A, de Leon N, Kuemmeth F 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 157
- [2] Wang B C, Chen M B, Cao G, Guo G P 2018 *PHYSICS*. **47** 725 (in Chinese) [王保传, 陈明博, 曹刚, 郭国平 2018 *物理* **47** 725]
- [3] Wang N, Wang B C, Guo G P 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 230301 (in Chinese) [王宁, 王保传, 郭国平 2022 *物理学报* **71** 230301]
- [4] Yoneda J, Takeda K, Otsuka T, et al. 2018 *Nat. Nanotech.* **13** 102
- [5] Takeda K, Kamioka J, Otsuka T, et al. 2016 *Sci. Adv.* **2** e1600694
- [6] Veldhorst M, Hwang J C C, Yang C H, et al. 2014 *Nat. Nanotech.* **9** 981
- [7] Mills A R, Guinn C R, Gullans M J, Sigillito A J, Feldman M M, Nielsen E, Petta J R 2022 *Sci. Adv.* **8** eabn5130
- [8] Xue X, Russ M, Samkharadze N, Undseth B, Sammak A, Scappucci G, Vandersypen L M K 2022 *Nature* **601** 343
- [9] Noiri A, Takeda K, Nakajima T, Kobayashi T, Sammak A, Scappucci G, Tarucha S 2022 *Nature* **601** 338
- [10] Loss D, DiVincenzo D P 1998 *Phys. Rev. A* **57** 120
- [11] Petta J R, Johnson A C, Taylor J M, et al. 2005 *Science* **309** 2180
- [12] DiVincenzo D P, Bacon D, Kempe J, Burkard G, Whaley K

- B 2000 *Nature* **408** 339
- [13] Friesen M, Ghosh J, Eriksson M A, Coppersmith S N 2017 *Nat. Commun.* **8** 15923
- [14] Wu X, Ward D R, Prance J R, et al. 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 11938
- [15] Barthel C, Medford J, Bluhm H, Yacoby A, Marcus C M, Hanson M P, Gossard A C 2012 *Phys. Rev. B* **85** 035306
- [16] Borjans F, Mi X, Petta J R 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 044052
- [17] Eng K, Ladd T D, Smith A, et al. 2015 *Sci. Adv.* **1** e1500214
- [18] Andrews R W, Jones C, Reed M D, et al. 2019 *Nat. Nanotech.* **14** 747
- [19] Bermeister A, Keith D, Culcer D 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 192102
- [20] Chan K W, Huang W, Yang C H, et al. 2018 *Phys. Rev. Appl.* **10** 044017
- [21] Martins F, Malinowski F K, Nissen P D, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 116801
- [22] Reed M D, Maune B M, Andrews R W, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 110402
- [23] Abadillo-Uriel J C, Eriksson M A, Coppersmith S N, Friesen M 2019 *Nat. Commun.* **10** 5641
- [24] Yang Y C, Coppersmith S N, Friesen M 2017 *Phys. Rev. A* **95** 062321
- [25] Takeda K, Noiri A, Yoneda J, Nakajima T, Tarucha S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 117701
- [26] Xie W X, Zhang C X, Xue Z Y 2021 *Ann. Phys.* **533** 2100054
- [27] Abadillo-Uriel, J C, King C, Coppersmith S N, Friesen M 2021 *Phys. Rev. A* **104** 032612
- [28] Zajac D M, Sigillito A J, Russ M, Borjans F, Taylor J M, Burkard G, Petta J R 2018 *Science* **359** 439
- [29] Bloch F, Siegert A 1940 *Phys. Rev.* **57** 522
- [30] Shirley J H 1965 *Phys. Rev.* **138** B979
- [31] Cohen-Tannoudji C, Dupont-Roc J, Fabre C 1973 *J. Phys. B* **6** L214
- [32] Gambetta J M, Motzoi F, Merkel S T, Wilhelm F K 2011 *Phys. Rev. A* **83** 012308
- [33] Motzoi F, Wilhelm F K 2013 *Phys. Rev. A* **88** 062318
- [34] Nielsen M A, Chuang I L 2010 *Quantum Computation and Quantum Information* (10th Anniversary Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press) pp174–177
- [35] Yoneda J, Otsuka T, Takakura T, et al. 2015 *Appl. Phys. Exp.* **8** 084401
- [36] Nielsen M A 2002 *Phys. Lett. A* **303** 249
- [37] Elman S J, Bartlett S D, Doherty A C 2017 *Phys. Rev. B* **96** 115407
- [38] Mi X, Kohler S, Petta J R 2018 *Phys. Rev. B* **98** 161404(R)
- [39] Petersson K D, Petta J R, Lu H, Gossard A C 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 246804
- [40] Nichol J M, Orona L A, Harvey S P, Fallahi S, Gardner G C, Manfra M J, Yacoby A 2017 *npj Quantum Inf.* **3** 3

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

High-fidelity single-qubit gates of a strong driven singlet-triplet qubit*

Liu Qi-Pei¹⁾ Zhang Cheng-Xian^{2)†} Xue Zheng-Yuan^{1)3)4)‡}

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*School of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning 530004, China*)

3) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials, Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Frontier Research Institute for Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

4) (*Hefei National Laboratory, Hefei 230088, China*)

(Received 31 May 2023; revised manuscript received 6 July 2023)

Abstract

Semiconductor quantum dot qubits are one of the most promising candidates for quantum computing. Among them, singlet-triplet qubits have attracted much attention due to their excellent properties of all-electric control and accurate readout. To improve qubit immunity to charge noise, strong driving pulses are usually introduced to make operation as fast as possible. However, the complex dynamics induced by strong driving pulses make the rotating wave approximation inapplicable and hinder the implementation of high-fidelity qubit operation. In this work, we present a method of utilizing simple quadrature pulses to correct errors of high-frequency oscillatory terms induced by strong driving. A scheme to obtain these pulses is proposed based on a full quantization of the system and derivative removal by adiabatic gate (DRAG) theory, as the former clarifies the elementary processes of strong driving effects and enables the latter to find correction pulse shapes. The numerical simulation results show that, a NOT gate with 99.99% fidelity and gate time as short as 2 ns can be achieved with the help of the control pulses of this method, which indicates that the control error brought by strong driving is no longer a limiting factor. In particular, NOT gate fidelity higher than 99.9% is achievable even when the charge noise is at a level of $2 \mu\text{eV}$. Notice that this method can be applied to any resonant-driving single-qubit rotation but not just NOT gates. Therefore, our approach will facilitate qubits to realize fast, high-fidelity single-qubit gates under charge noise.

Keywords: singlet-triplet qubit, single-qubit quantum gate, strong driving

PACS: 03.67.Lx, 42.50.Dv

DOI: [10.7498/aps.72.20230906](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230906)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11905065, 12275090), the Guangxi Science Foundation, China (Grant No. AD22035186), the Key Laboratory of Guangdong Province, China (Grant No. 2020B1212060066), and the Innovation Program for Quantum Science and Technology, China (Grant No. 2021ZD0302300).

† Corresponding author. E-mail: cxzhang@gxu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zyxue83@163.com

强驱动单态-三重态量子比特的高保真单比特门

刘启沛 张程贤 薛正远

High-fidelity single-qubit gates of a strong driven singlet-triplet qubit

Liu Qi-Pei Zhang Cheng-Xian Xue Zheng-Yuan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200302 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230906

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230906>

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

基于辅助单比特测量的量子态读取算法

A quantum state readout method based on a single ancilla qubit

物理学报. 2021, 70(21): 210303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211066>

微波驱动下超导量子比特与磁振子的相干耦合

Coherent coupling in a driven qubit-magnon hybrid quantum system

物理学报. 2022, 71(15): 150302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220260>

相干时间超过10 min的单离子量子比特

Single-ion qubit with coherence time exceeding 10 minutes

物理学报. 2019, 68(3): 030306 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181729>

中间测量对受驱单量子比特统计复杂度的影响

Influence of intermediated measurements on quantum statistical complexity of single driven qubit

物理学报. 2020, 69(23): 230301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200802>

退相干条件下两比特纠缠态的量子非局域关联检验

Testing quantum nonlocality of two-qubit entangled states under decoherence

物理学报. 2022, 71(7): 070301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211453>

零维 Sb^{3+} 掺杂 $\text{Rb}_7\text{Bi}_3\text{Cl}_{16}$ 金属卤化物的三重态自陷激子发射

Zero-dimensional Sb^{3+} doped $\text{Rb}_7\text{Bi}_3\text{Cl}_{16}$ metal halides with triplet self-trapped exciton emission

物理学报. 2021, 70(24): 247801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211024>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

超导-冷原子复合系统的研究进展*

吕庆先¹⁾²⁾ 李赛¹⁾ 涂海涛¹⁾ 廖开宇¹⁾梁振涛^{1)†} 颜辉¹⁾²⁾³⁾ 朱诗亮¹⁾²⁾³⁾

1) (华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广州 510006)

2) (华南师范大学, 广东省量子调控工程与材料重点实验室, 广州 510006)

3) (华南师范大学, 粤港量子物质联合实验室, 物理前沿科学研究院, 广州 510006)

(2023 年 6 月 14 日收到; 2023 年 10 月 6 日收到修改稿)

超导-冷原子复合系统因能够实现快速门操控、长寿命存储和光纤中长距离传输等特点, 被认为是实现两台超导量子计算机光互联的最有潜力的复合体系之一. 本文综述了近年来基于超导-冷原子复合系统实现两台超导量子计算机光互联的研究进展, 包括超导芯片与冷原子相干耦合、微波光波相干转换和超导量子比特与量子转换器长程微波互联. 对该复合量子系统的研究将为超导量子计算机之间的实用化光纤互联奠定物理和技术基础, 有望在分布式超导量子计算机和杂化量子网络中获得广泛应用.

关键词: 超导-冷原子复合系统, 相干耦合, 微波光波转换, 长程微波互联**PACS:** 03.67.-a, 42.50.-p, 42.50.Pq, 03.67.Lx**DOI:** 10.7498/aps.72.20230985

1 引言

近年来, 超导量子计算机的研究取得了众多进展^[1-4], 但建造一台大规模低错误率的超导量子计算机仍然是一个巨大的挑战. 分布式量子计算被认为是解决这一挑战的很有前景的方法. 分布式量子计算是利用量子网络将多个低错误率的小规模量子计算机互联, 构成一台大规模低错误率的量子计算机^[5-9]. 其中的一种技术路线是将两台超导量子计算机通过微波电缆或波导互联^[10-12]. 近期, 实验已经成功实现了相隔 30 m 的超导量子比特的微波互联^[13], 但为了维持波导的低温环境, 每 15 m 就需要使用一台稀释制冷机, 这增加了微波长程互联实现的难度和成本. 另外, 还有一种技术路线是将

微波转化为光波, 然后通过光纤实现量子计算机之间的互联^[14,15]. 该方法有望实现两台超导量子计算机之间的长距离互联. 然而, 将两台超导量子计算机通过光纤实现互联面临两个关键科学与技术问题: 一是微波光波的总转换效率, 二是光诱导热激发微波噪声. 为了解决这些问题, 我们可以结合不同量子系统(如超导量子电路、冷原子、金刚石、量子点、声子、磁振子、通信光子等)各自的优势, 建立复合量子系统^[16]. 这种复合系统有望解决上述关键科学问题. 其中, 超导-冷原子复合系统成为最有潜力的复合系统之一. 它可以实现快速门操控、长寿命存储和光纤中长距离传输, 从而实现两台超导量子计算机之间的光互联.

近年来, 基于超导-冷原子复合系统实现超导量子计算机之间的光互联的研究取得了系列进展.

* 量子科技创新计划(批准号:2021ZD0301705)、国家自然科学基金(批准号: 12104168, 12074132, 12225405, 12247123, 12304287, U20A2074, 12074180)、国家重点研发计划(批准号: 2022YFA1405300, 2022YFA1405303, 2020YFA0309500)、中国博士后科学基金(批准号: 2022M721222, 2023T160233)、广东省基础与应用基础研究基金(批准号: 2021A1515110668, 2023A1515011550)和广州市科技计划(批准号: 202201010533)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ztliangscnu@163.com

本文将综述这一领域的进展并重点介绍华南师范大学研究团队的成果. 我们团队搭建了 4 K 和 mK 两套超高真空稀释制冷机系统用于研究超导-冷原子复合系统. 在低温超导微波腔与冷原子相干耦合方面, 着重介绍超导原子芯片的实验实现和超导 LC 微波腔芯片性能. 在微波光波转换方面, 主要介绍六波混频的机制, 以及自由空间中基于里德伯冷原子六波混频实现微波光波相干转换的实验结果. 在超导量子比特与量子转换器长程互联方面, 主要介绍实验平台的搭建、实验装置的设计以及数值仿真的结果. 最后, 也综述了此领域的一些亟待解决的科学和技术问题.

2 超导-冷原子复合系统

2.1 性能优势

国际广泛研究的复合量子系统包括超导-金刚石、超导-冷原子、超导-量子点、量子比特-声子、量子比特-磁振子、腔光力等复合系统^[16]. 超导量子比特等体系的光互联要求量子转换效率高、带宽高、噪声低. 目前, 各种复合量子系统可以在个别指标上基本满足需求, 但综合来看, 还没有一种复合量子系统可以满足实用化光互联的全部技术需求^[14,15]. 超导-冷原子复合系统近年来取得了系列研究进展. 该系统有以下两种特性: 1) 能够有效地融合超导微波量子比特操控速度快、冷原子量子存储时间长和通信光子比特在光纤中可长距离传输的优势; 2) 能够实现微波光子-冷原子-光波光子的强耦合, 从而实现跨频段量子态转移, 并应用于量子计算及量子通信组网中的跨频段信息交互, 如传输节点、中继、跨频段单光子路由等.

2.2 冷原子系综与超导微波腔耦合机制

⁸⁷Rb 原子系综与超导谐振腔耦合机制可用 Tavis-Cummings 模型描述, 哈密顿量为

$$H_{TC} = \hbar\omega_q\pi^\dagger\pi + \hbar\omega_c\alpha_c^\dagger\alpha_c + \hbar g_{\text{eff}}(\alpha_c^\dagger\pi + \alpha_c\pi^\dagger), \quad (1)$$

其中, 第一项和第二项分别代表原子系综和谐振腔的自由哈密顿量, 第三项表示原子系综与谐振腔的相互作用哈密顿量, 而 π^\dagger 和 π 分别表示原子系综的单激发产生和湮灭算子: $\pi^\dagger = \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_i g_i \cdot \sigma_i^\dagger$ 和 $\pi = \frac{1}{g_{\text{eff}}} \sum_i g_i \cdot \sigma_i$, 式中 $g_{\text{eff}} = \sqrt{\sum_i g_i^2}$ 表示整个系统

的有效耦合强度. 在冷原子系综和超导微波腔耦合系统中, 当原子团较小以至于可近似认为每个原子与超导微波腔的耦合强度都一样时, 冷原子系综与超导微波腔之间的有效耦合强度可表示为 $g_{\text{eff}} = g_0\sqrt{N} = \frac{|\mu_a| \cdot |B|}{\hbar} \sqrt{N}$, 其中 g_0 表示单个原子与超导微波腔的耦合强度, 由原子的跃迁磁矩 μ_a 和磁场 B 大小决定, N 为冷原子系综的原子数. 显然, 要增大有效耦合强度 g_{eff} 就必须增大单个原子的耦合强度 g_0 或增加原子数 N . 通常将冷原子装载到超导原子芯片微磁阱里, 通过提高原子密度进而增大 N . 另一方面, 在制备低阻抗超导 LC 谐振腔芯片时, 通过减小腔模体积 (提高场强) 并且减小原子团与超导微波腔的距离可以提高 g_0 .

3 超导芯片微波腔与冷原子相干耦合

微波腔与冷原子强耦合是实现微波光波高总转换效率的关键. 理论方面, 2009 年, Verdú 等^[17] 提出实现 $\lambda/2$ 超导共面波导谐振腔与 ⁸⁷Rb 原子基态强磁耦合的方案. 该方案将原子囚禁在离超导共面波导谐振腔表面 1 μm 处, 原子所处位置的磁场强度大于 40 μG ($1 \text{ G} = 10^{-4} \text{ T}$), 此时单微波光子与单原子的耦合强度可以达到 40 Hz. 进一步利用原子系综 (10^6 个原子) 的 \sqrt{N} 倍集体增强效应, 最终实现 40 kHz 的耦合强度 (大于共面波导谐振腔的线宽 $\kappa/(2\pi) = 7 \text{ kHz}$). 为了提高原子与超导共面波导谐振腔的耦合强度, 2016 年, Beck 等^[18] 提出实现超导共面波导谐振腔与离其表面 40 μm 处的单个 Cs 里德伯原子强电耦合的方案. 该工作的主要思想是在超导共面波导谐振腔电压波腹处加工一对 50 μm 高的铜电极, 从而增强离超导共面波导谐振腔表面 50 μm 处的真空涨落电场大小, 最终实现 3 MHz 的电耦合强度 (大于超导共面波导谐振腔的线宽 $\kappa/(2\pi) = 500 \text{ kHz}$). 到目前为止, 实验上还尚未有关于超导平面微波谐振腔与原子体系实现强耦合的相关报道. 实验方面, 2013 年, Bernon 等^[19] 实验实现超导共面波导腔芯片表面的冷原子囚禁和相干性测量, 当原子团距离芯片表面为 60, 25 与 14 μm 时, 其相干时间分别为 20.5, 7.8 与 3.9 s, 表明冷原子系综是一种良好的量子存储器. 接着, Hattermann 等^[20] 于 2017 年实验实现了超导共面波导腔与冷原子的相干耦合, 受限于原子基态超精细结构能级之间较弱的磁偶极矩

($\sim a_0 e/137$), 当原子团距离超导芯片表面 $20\ \mu\text{m}$ 时, 基于 $\lambda/2$ 超导共面波导谐振腔所实现的单原子与单微波光子的耦合强度为 $(2\pi \times 0.5)\ \text{Hz}$. Kaiser 等^[21] 于 2021 年进一步实验实现 $\lambda/2$ 超导共面波导谐振腔与里德伯冷原子耦合, 得益于里德伯能级较大的电偶极矩 ($n^2 a_0 e$), 当原子团距离超导芯片表面 $40\ \mu\text{m}$ 时, 实现的耦合强度为 $(2\pi \times 40)\ \text{kHz}$ (选取的里德伯能级为 $39\text{D} \leftrightarrow 38\text{F}$), 但尚未实现强耦合. 为进一步提高耦合强度, 一方面需要使用腔模体积更小的 $\lambda/4$ 超导共面波导谐振腔或超导平面 LC 微波腔, 另一方面可以选取较大主量子数的里德伯态跃迁能级, 结合其大的电偶极矩可以实现 MHz 的耦合强度, 进而实现原子量子比特与微波光子的强耦合. 2020 年, Morgan 和 Hogan^[22] 实验实现 $\lambda/4$ 超导共面波导谐振腔与飞行氦里德伯原子相干耦合, 在离超导芯片表面 $100\ \mu\text{m}$ 处, 测得微波驱动拉比振荡为 $(2\pi \times 3)\ \text{MHz}$. 该工作通过拉比振荡的时域测量, 研究了原子与谐振腔耦合的相干性. 超导芯片微波腔与冷原子相干耦合的相关实验研究进展的结果对比如表 1 所示.

为了实现超导芯片微波谐振腔与冷原子强耦合, 自 2018 年起笔者团队设计并搭建了超高真空超低振动超导芯片与冷原子复合量子系统实验平台. 在超导原子芯片冷原子囚禁方面, 采用 Z 型铌

膜超导原子芯片, 中心导线长 $2\ \text{mm}$, 厚度为 $500\ \text{nm}$, 宽度为 $100\ \mu\text{m}$, 如图 1(a) 所示. 通过 Z 型超导导线产生的磁场与沿 Y 方向的均匀偏置磁场结合, 可以在 Z 型中心导线正上方/正下方产生用于囚禁原子的囚禁势. 在 Z 线电流为 $I_z=1.8\ \text{A}$ 与 Y 方向均匀偏置磁场为 $Y_{\text{bias}}=25\ \text{G}$ 时, 成功实现冷原子的相干囚禁, 原子数为 3.5×10^5 , 如图 1(b) 所示. 进一步测得微磁阱中原子的寿命 $\tau \approx 22\ \text{s}$, 得益于低温下较低的电流热噪声, 其寿命远大于室温原子芯片寿命, 如图 1(c) 所示.

在超导 LC 谐振腔芯片制备方面, 我们设计、仿真、加工和测试了一种可用于与原子实现强磁耦合的具有高品质因数的超导平面 LC 谐振腔芯片, 如图 2(a) 所示. 通过降低 LC 谐振腔的阻抗, 增大其与原子的磁耦合强度, 以提高微波光波转换效率. 实验测得 LC 谐振腔芯片具有很高的品质因数 Q_i , 在 $3.8\ \text{K}$ 的温度下 Q_i 值达到 10146, 如图 2(b) 所示; 并且该芯片的特征频率随温度的升高而降低, 在 $4.45\ \text{K}$ 时其特征频率为 $6.834\ \text{GHz}$, 与 ^{87}Rb 原子的基态超精细能级跃迁频率相同, 可用于与原子的共振磁耦合实验, 如图 2(c) 所示.

在超导 LC 谐振腔芯片与冷原子相干耦合方面, 我们实验上首先将图 3(a) 的超导 LC 谐振腔电感环与超导 Z 线的中心对准, 再通过清漆将其

表 1 超导芯片微波腔与冷原子相干耦合的实验研究进展

Table 1. Experimental research progress on coherent coupling of superconducting-chip microwave resonators and cold atoms.

研究组	图宾根大学 ^[20]	图宾根大学 ^[21]	伦敦大学 ^[22]	华南师大
原子编码态	基态	里德伯态	里德伯态	基态
超导腔形式	共面波导腔	共面波导腔	共面波导腔	LC 谐振腔
耦合方式	磁耦合	电耦合	电耦合	磁耦合
耦合强度	$(2\pi \times 0.5)\ \text{Hz}$	$(2\pi \times 40)\ \text{kHz}$	—	待测

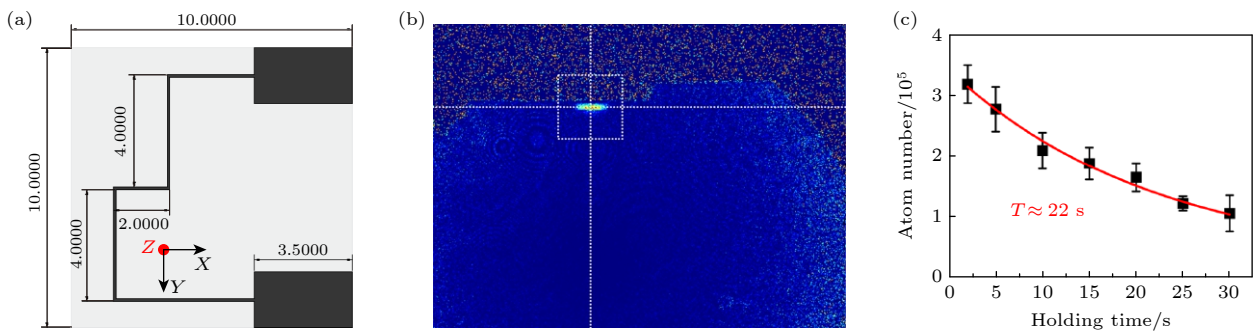


图 1 超导原子芯片 (a) Z 型超导导线 (单位为 mm); (b) 微磁阱中的冷原子囚禁; (c) 微磁阱中原子囚禁寿命

Fig. 1. Superconducting atom chip: (a) Z-type superconducting wire (in mm); (b) cold atoms confined in the superconducting microtrap; (c) the lifetime of atoms trapped in the microtrap.

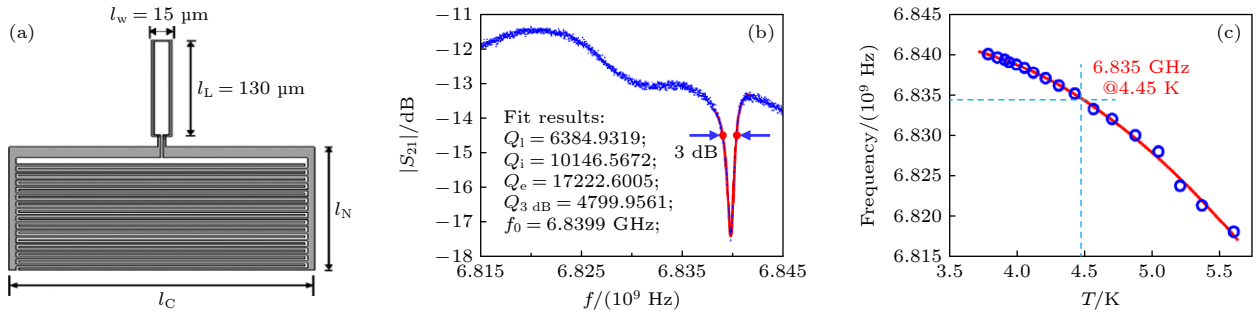


图 2 超导 LC 谐振腔芯片设计与测试 (a) 超导 LC 谐振腔 COMSOL 模型; (b) 在 3.8 K 温度下腔频为 6.84 GHz 的超导 LC 谐振腔芯片的 $|S_{21}|$ 曲线及其 Q 值; (c) 超导 LC 谐振腔频率随温度变化, 当温度为 4.45 K 时, 可以实现 LC 谐振腔与冷原子的共振耦合

Fig. 2. Design and test results of superconducting LC resonator: (a) Model of superconducting LC resonator by COMSOL software; (b) microwave transmission $|S_{21}|$ at 3.8 K of superconducting LC resonator with center frequency of 6.84 GHz and its corresponding Q factor; (c) the frequencies of superconducting LC resonator varies with temperature. When the temperature is 4.45 K, the resonant coupling between LC resonator and cold atoms can be realized.

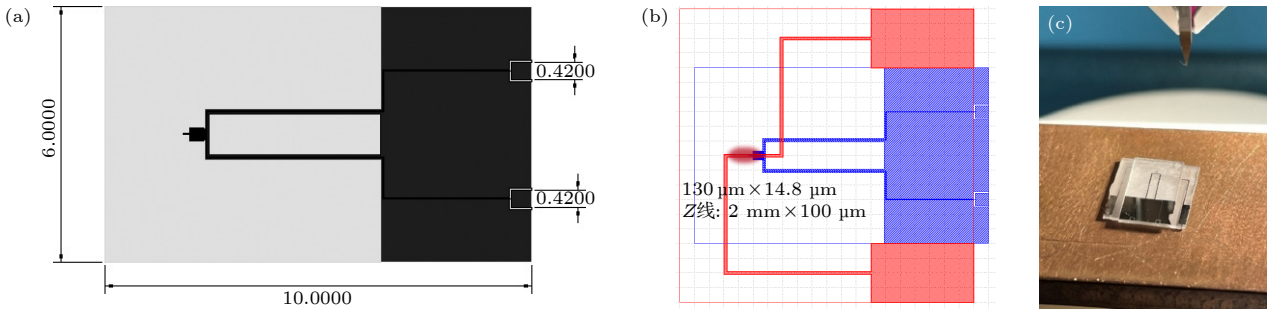


图 3 超导 LC 谐振腔芯片与冷原子相干耦合 (a) 超导 LC 谐振腔芯片尺寸 (单位为 mm); (b), (c) Z 型超导原子芯片与超导 LC 谐振腔定位原理图与实物图

Fig. 3. Coherent coupling between superconducting LC resonator and cold atoms: (a) Size of superconducting LC resonator (in mm); (b), (c) positioning schematic diagram and physical diagram of Z-type superconducting atom chip and superconducting LC resonator

粘合固定于超导 Z 线正上方, 如图 3(b), (c) 所示. 具体实验步骤: 首先利用超导 Z 型微磁阱在超导 LC 谐振腔电感环的正上方实现冷原子的囚禁, 然后通过控制 Z 线电流 I_z 与 Y 方向均匀偏置磁场 Y_{bias} 使冷原子系综距离超导 LC 芯片表面几十微米, 最后实现超导 LC 谐振腔与冷原子系综的相干耦合.

4 微波光波相干转换

高效宽带低噪微波光波相干转换是通过光纤将超导量子计算机互联的关键技术. 目前人们已在很多量子体系开展了微波光波相干转换的研究 [14,15], 如光力电转换器 [23–25]、电光转换器 [26,27]、原子系综转换器 [28–31]、稀土掺杂晶体转换器 [32]、铁磁系统转换器 [33] 等. 2018 年, Higginbotham 等 [24] 制备的光力电转换器的总转换效率为 47%, 带宽 0.012 MHz, 另外, 由于光力电转换器的声

子模式的频率 (1.47 MHz) 较低, 在低温 (40 mK) 下存在热激发噪声. 2022 年, Sahu 等 [26] 制备的电光转换器的总效率为 8.7% (15%), 带宽为 18 MHz, 微波热噪声为 0.16 (0.41). 2023 年, Kumar 等 [28] 制备的原子系综转换器的总效率为 2.5%, 带宽为 0.36 MHz, 热激发毫米波噪声光子数为 0.6. 我国在微波光波相干转换的研究也取得了重要成果. 2022 年, Shen 等 [34] 制备的磁光力转换器的总效率为 1.1×10^{-5} , 调谐范围高达 3 GHz. 本节主要详细介绍基于中性原子微波光波相干转换的实验研究进展, 其结果对比如表 2 所示.

为了提高微波/毫米波与原子系综耦合强度从而提高基于中性原子的微波/毫米波与光波的转换效率, 2016 年 Kiffner 等 [35] 提出在自由空间基于里德伯原子六波混频实现毫米波光子与光波光子相干转换的实验方案, 如图 4(c) 所示. 该方案通过相干布居数囚禁的方式制备长寿命基态 $|1\rangle$ 和长寿命里德伯态 $|3\rangle$ 的缀饰态, 使原子系综同时与

表 2 基于中性原子微波光波相干转换的实验研究进展
Table 2. Experimental research progress of microwave-to-optics conversion based on neutral atoms.

研究组	新加坡国立大学 ^[31]	华南师大 ^[30]	芝加哥大学 ^[28]	阿尔伯塔大学 ^[29]
原子团温度	冷原子	冷原子	冷原子	热原子
混频形式	六波混频	六波混频	四波混频	三波混频
内转换效率/%	5	82	58	—
总转换效率/%			2.5	3×10^{-9}
带宽/MHz	15	1	0.36	1.00

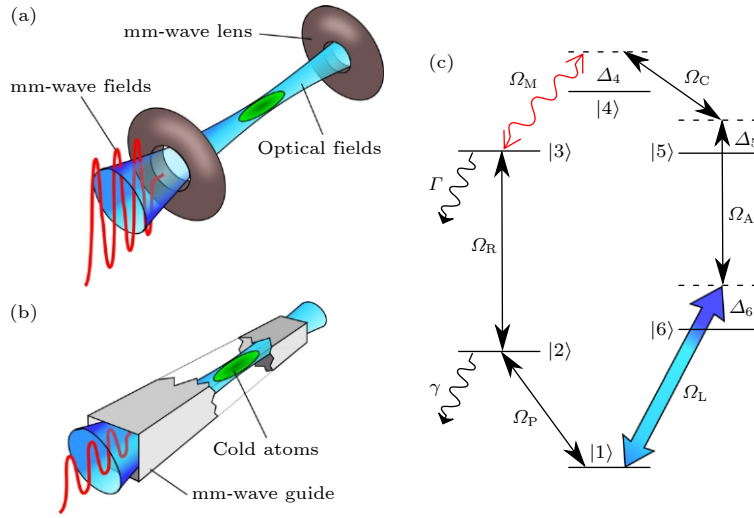


图 4 基于冷⁸⁷Rb原子系综六波混频的毫米波-光波转换方案 (a) 毫米波透镜聚焦毫米波的毫米波-光波转换方案; (b) 波导约束毫米波的毫米波-光波转换方案; (c) 毫米波-光波转换方案原子能级图^[35]

Fig. 4. Millimeter-wave-to-optics conversion via six-wave mixing based on cold ⁸⁷Rb atomic ensembles: (a) Millimeter-wave-to-optics conversion with mm-wave fields focused by dielectric lenses; (b) millimeter-wave-to-optics conversion with mm-wave fields confined by waveguide; (c) six-level system of millimeter-wave-to-optics conversion^[35].

待转换毫米波场和转换光场实现集体电耦合, 从而提高毫米波光波转换效率. 为了提高总转换效率, 该方案提出通过毫米波透镜或波导使毫米波能量更集中的方案, 如图 4(a), (b) 所示. 在实际仿真参数下, 总转换效率原则上超过 90%, 转换带宽至少为 80 kHz.

参考上述研究方案, 2019 年, Vogt 等^[31] 基于自由空间冷里德伯原子六波混频实现转换效率为 5% 的微波光波相干转换. 该方案效率不高的原因^[30] 为: 原子暗态布局数随光学厚度的增大而增大, 导致微波光子的吸收截面减小. 据此分析, 2022 年 Tu 等^[30] 提出了利用非共振六波混频来消除原子暗态布局, 从而增大微波光子的吸收截面的理论方案, 具体方案如图 5 所示.

进一步, Tu 等^[30] 在自由空间大光学厚度的铷 87 冷原子系综中实现了该方案, 具体实验构架如图 6 所示. 采用长条状的冷原子团, 此构型在实现大光学厚度的同时还保持了相对较低的原子

密度. 我们采用稳定的偏置磁场来消除塞曼简并等方式延长了里德伯原子的相干时间. 最终在光学厚度 60 的条件下实现了效率超过 82% 和带宽约 1 MHz 的微波光波相干转换. 此外, 光外差检测还证明此转换过程的相位信息具有超过 98% 的保真度.

为了减少室温微波背景辐射, 实现量子转换 (平均热光子数 $\ll 1$), 2023 年, Kumar 等^[28] 通过光晶格将在 35 K 温区制备的冷 ⁸⁵Rb 原子转移到安装在 5 K 温区的三维超导毫米波谐振腔和振动抑制光腔内, 腔内原子数约为 600. 为了使原子系综同时与待转换毫米波场和转换光场实现集体电耦合, 该方案通过 297 nm 强激光制备长寿命基态 $|g\rangle$ 和长寿命里德伯态 $|f\rangle$ 的缀饰态, 使缀饰态冷原子系综同时与三维超导毫米波谐振腔中毫米波场 (3 mm) 和光腔中光场 (780 nm) 实现电偶极耦合, 如图 7(a) 所示.

在辅助光场 (481 nm) 的作用下, 基于腔内四

波混频该团队实现了毫米波光子与光波光子相干转换, 毫米波光子向光学光子的总(内)转换效率为 2.5%(58%), 转换带宽为 0.36 MHz, 均与该团队先前理论预测一致, 并且光学光子向毫米波光子的反向转换也与预测相一致. 由于毫米波频率为 100 GHz, 在 5 K 温区的三维超导毫米波谐振腔内

的平均热激发毫米波噪声光子数为 0.6, 接近量子水平. 该团队通过在没有毫米波光子输入的情况下监测转换后的光子来证实这一低水平的噪声. 为了进一步提高总(内)转换效率, 还需要提高毫米波光子与原子系综的集体耦合强度, 如增大原子数, 以及增大辅助光场的功率.

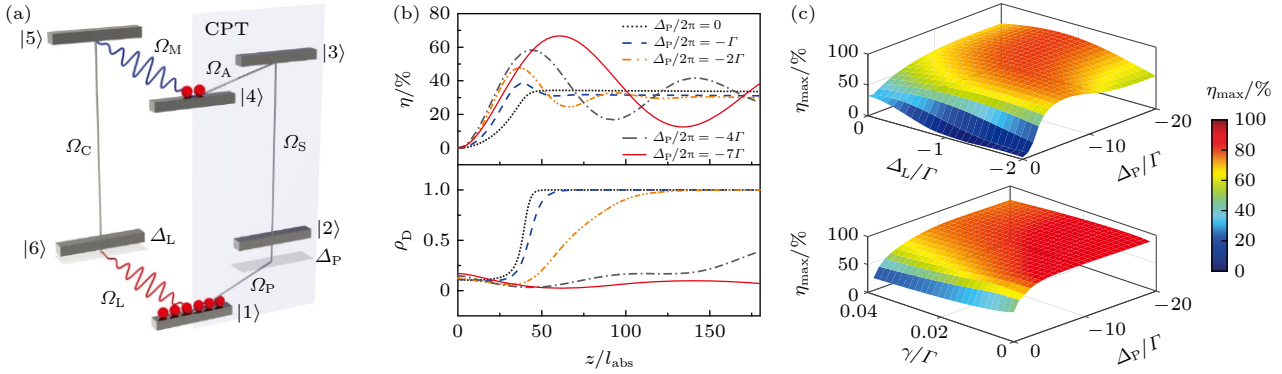


图 5 基于非共振散射的微波-光波转换 (a) 六能级系统; (b) 转换效率和原子暗态布局数随光学厚度的变化; (c) 最大转换效率与激光失谐、里德伯退相率的依赖关系^[30]

Fig. 5. Microwave-to-optics conversion via off-resonant scattering: (a) Six-level system; (b) conversion efficiency and dark-state probability versus optical density; (c) maximum conversion efficiency versus detunings of probe laser and dephasing rates of Rydberg state^[30].

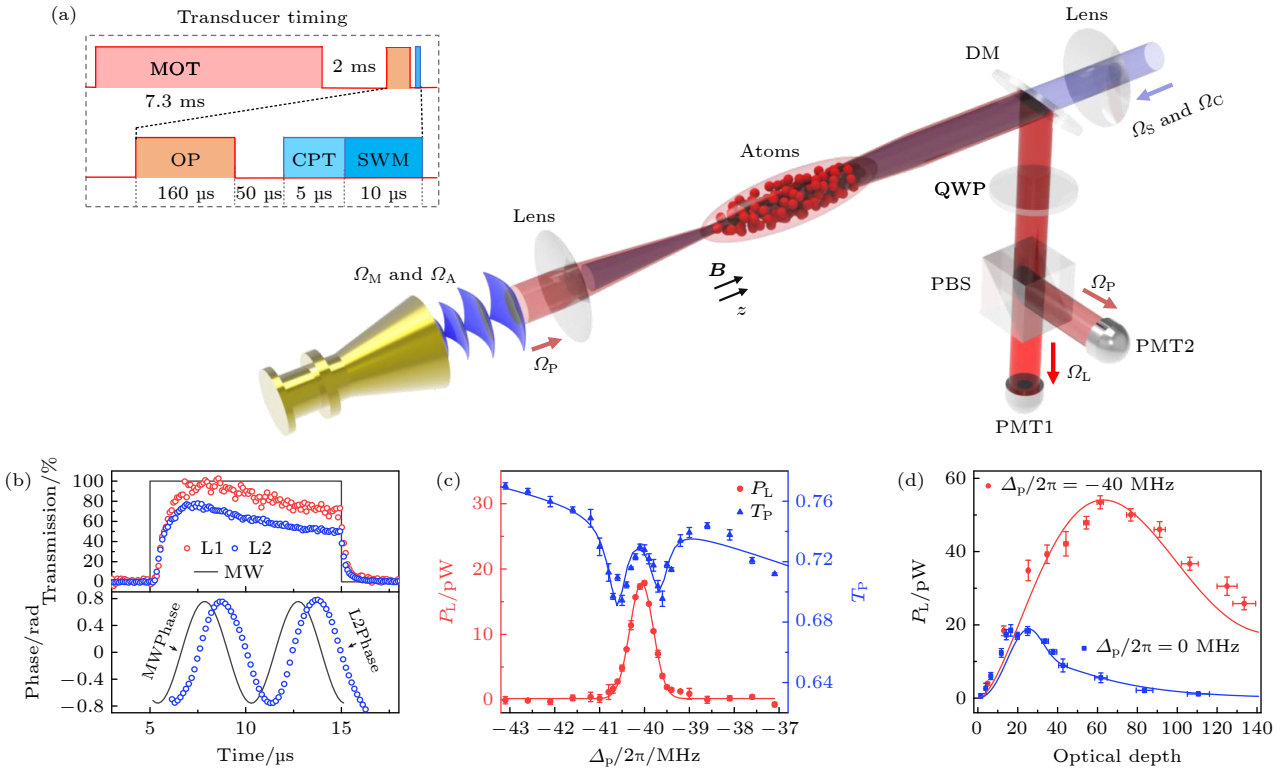


图 6 微波光波相干转换实验结果 (a) 实验构架与时序; (b) 微波光波的波形以及光外差检测结果; (c) 探测光与产生光的谱线; (d) 全共振及非共振的微波频率上转换随光学厚度的变化^[30]

Fig. 6. Experimental results of microwave-to-optics conversion: (a) Experimental setup and time sequence; (b) temporal waveforms of the input microwave pulse and output optical pulses, and the relative phase of a heterodyne signal for the phase-modulated microwave; (c) spectra of transmission and generated optical power; (d) power P_L of output optical pulses versus optical depth for off-resonant and near-resonant scatterings^[30].

为了提高量子通信容量, 2023年, Smith等^[29]基于热⁸⁷Rb原子系综三波混频实验实现了频分多

路复用的微波光子与光波光子的相干转换, 如图8所示. 图8(c)是实验所用的原子能级, 其中圆柱

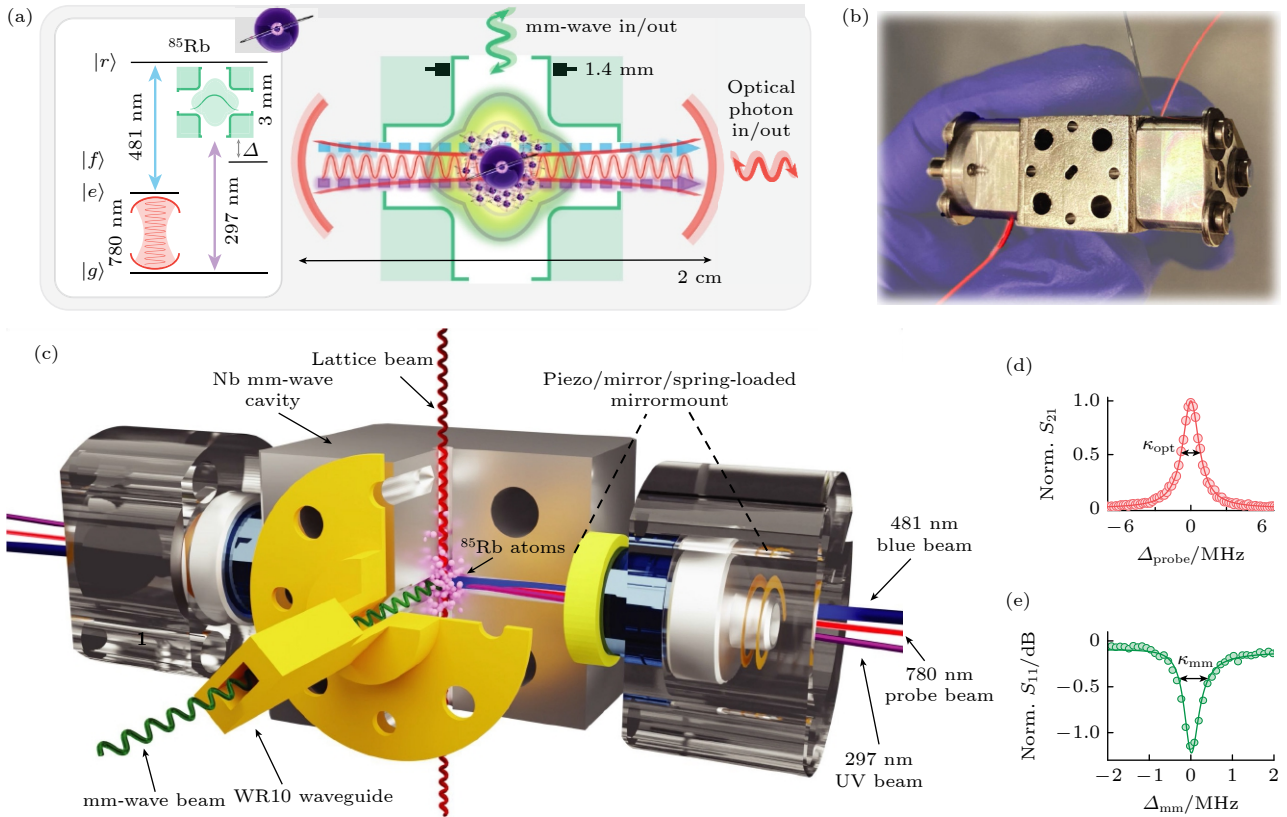


图7 基于四波混频的光学光子与毫米波光子相干转换 (a) 实验方案, 左图为转换所需的原子能级和波长, 右图为毫米波光波转换接口的内部结构; (b) 实物图; (c) 超导腔和光腔的横截面图; (d) 空光腔的传输特性曲线, 半高全宽 $\kappa_{\text{opt}} = 2\pi \times 1.7$ MHz; (e) 在 5 K 温区的超导毫米波谐振腔的反射谱, 半高全宽 $\kappa_{\text{mm}} = 2\pi \times 800$ kHz^[28]

Fig. 7. Millimeter-wave-to-optics conversion via four-wave mixing: (a) Schematic of the system, atomic energy levels and wavelengths of light involved in transduction (left), internal structure of the optical and mmwave interface (right); (b) image of the physical hybrid cavity; (c) expanded view of the main assembly; (d) bare optical cavity transmission with full-width half-maximum (FWHM) linewidth $\kappa_{\text{opt}} = 2\pi \times 1.7$ MHz; (e) reflection spectrum of the superconducting mm wave cavity at 5 K with FWHM linewidth $\kappa_{\text{mm}} = 2\pi \times 800$ kHz^[28].

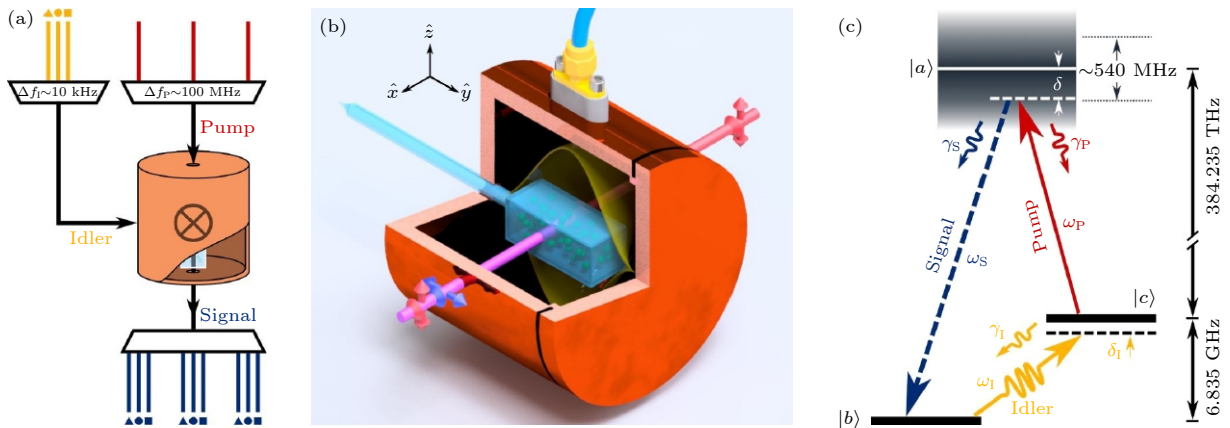


图8 基于热⁸⁷Rb原子系综三波混频的微波-光波转换 (a) 频分多路复用原子转换器方案; (b) 微波腔-铷泡复合系统示意图; (c) 微波-光波转换能级图^[29]

Fig. 8. Microwave-to-optics conversion via three-wave mixing based on thermal ⁸⁷Rb atomic ensembles: (a) Schematic of the atomic frequency-division multiplexing scheme; (b) the microwave cavity-vapor cell hybrid system; (c) three-level system of microwave-to-optics conversion^[29].

铜微波腔的 TE₀₁₁ 模用于囚禁待转换微波信号 (Idler), 使其与原子基态跃迁 $|b\rangle \equiv |5S_{1/2}, F=1\rangle$ 和 $|c\rangle \equiv |5S_{1/2}, F=2\rangle$ 磁耦合. 泵浦光 (pump) 与原子光学跃迁 $|c\rangle$ 和 $|a\rangle \equiv |5P_{3/2}, F'=1, 2\rangle$ 电耦合. 泵浦光和待转换微波信号 (idler) 基于原子系综实现 $\chi^{(2)}$ 相互作用, 并在原子光学跃迁 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 之间产生和频信号, 即转换光波信号 (signal). 由于微波与原子基态的磁耦合强度较小, 总效率仅为 3×10^{-9} . 转换带宽受限于微波腔线宽, 约为 1 MHz. 该方案具有能级结构简单的优势, 但需要进一步减小微波谐振腔的有效腔模体积和提高原子密度, 从而提高微波与原子基态的集体磁耦合强度和转换效率.

5 超导量子比特与量子转换器长程互联

光诱导热激发噪声是限制通过光纤互联超导量子计算机的关键因素. 2020 年, Mirhosseini 等^[36] 的实验结果表明光诱导热激发微波噪声不仅限制了微波光波转换器工作时所需要的驱动光场的功率 (从而限制了微波光波转换效率 (~0.1%)), 还限制了脉冲重复频率 ($R = 100$ Hz). 解决该问题的技术路线有, 一是将超导量子比特和量子转换器在空间上分离并通过电缆或波导连接. 如 2022 年 Delaney 等^[37] 通过微波电缆连接了超导量子比特与光力电转换器, 但光诱导热激发微波噪声有 23. 二是将超导量子比特和量子转换器分别安装在不同的温区, 然后通过物理方法降低热激发微波噪声对超导量子比特和量子转换器之间量子态传输的影响. 如 2020 年, Han 等^[38] 提出将电光转换器热沉在稀释制冷机的 1 K 冷台, 通过辐射冷却技术^[39]

降低热激发微波噪声对量子态传输的影响, 但尚未实验验证.

为研究光诱导热激发噪声对量子态传输影响的解决方案, 自 2020 年起, 我们设计并搭建了超高真空、超低振动的稀释制冷机复合系统实验平台. 一方面, 该稀释制冷机的基础温度约为 10 mK, 满足超导量子比特的工作条件; 另一方面, 该稀释制冷机具有超高的真空度 (约为 1×10^{-8} Pa), 满足超导量子比特与里德伯冷原子互联的硬件需求. 基于此稀释制冷机实验平台, 目前已实验实现了超导量子比特高保真度的单比特门操控, 通过对微波控制线路的优化以及微波驱动的波形修正, 单比特门平均保真度约为 0.9996. 更进一步, 已实验实现两比特的纠缠操控, 正在优化和提升两比特门操控的门保真度. 我们在超导量子比特高保真度操控所取得的研究进展将为探索光诱导热激发噪声对量子态传输不利影响的解决方案提供实验技术支持.

2022 年, Liang 等^[40] 提出了基于 1 K 热耦合腔实现 15 mK 超导量子比特与 1 K 冷台附近里德伯冷原子远程纠缠的实验方案. 实验装置如示意图 9 所示. 相较于冷却后操作方案, 该方案不需要高开关比和快速开关的辅助冷却系统, 从而减小了退相干通道和额外串扰的引入, 降低实验参数校正的难度.

该方案建议利用非传统几何量子门^[41,42] 对耦合腔中热激发和耦合参数不敏感的特性^[43-46], 实现超导量子比特与里德伯冷原子高保真度和高并发度的确实性纠缠. 数值仿真结果表明在现有实验条件下纠缠产生的保真度和并发度分别为 0.991 和 0.982, 如图 10 所示.

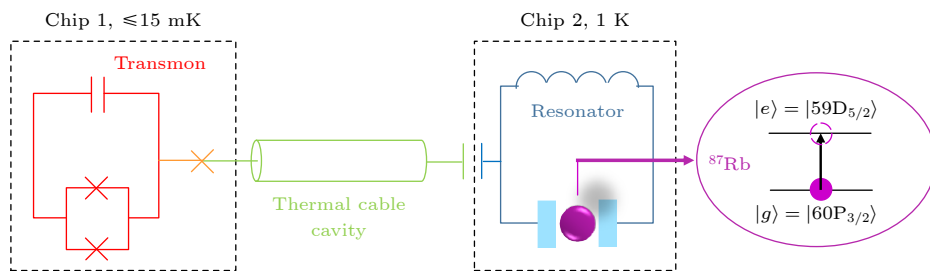


图 9 15 mK 超导量子比特与 1 K 冷台附近里德伯冷原子基于 1 K 热耦合腔长程互联的实验装置示意图^[40]

Fig. 9. Schematic of the hybrid system. A superconducting transmon qubit (red) on chip 1 anchored to a 15 mK plate resonantly couples with a standing mode of a superconducting coaxial-cable cavity (green) via a tunable coupler (orange cross). A superconducting LC resonator (blue) on chip 2 anchored to a 1 K plate resonantly couples with the same coaxial-cable cavity and a Rydberg-atom qubit (purple)^[40].

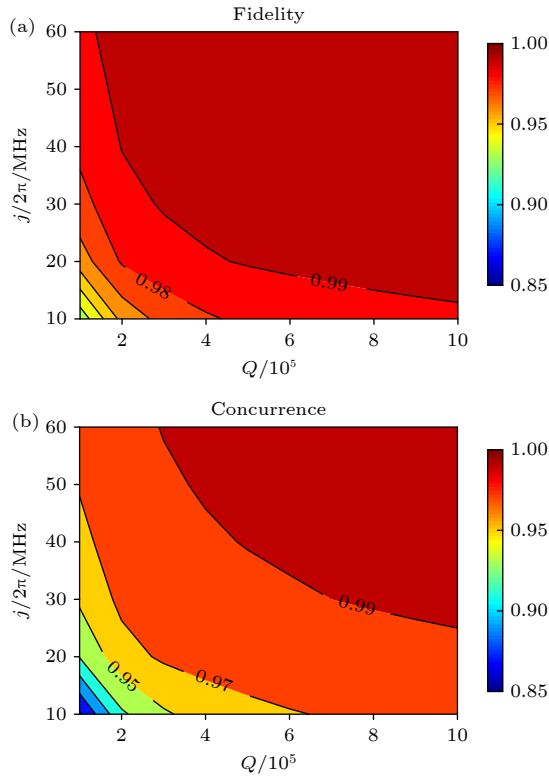


图 10 数值仿真结果 (a) 保真度与腔腔耦合强度 J 和腔 Q 值的依赖关系; (b) 并发度与腔腔耦合强度 J 和腔 Q 值的依赖关系^[40]

Fig. 10. Simulation results: (a) Fidelity versus the cavity-resonator coupling strength J and the internal Q factor; (b) concurrence versus the cavity-resonator coupling strength J and the internal Q factor^[40].

6 总结与展望

本文综述了基于复合量子系统实现超导量子计算机之间光互联的研究进展. 到目前为止, 通过使用不同的复合量子系统和不同的实验方案已经取得了种种优异性能, 如何将这些指标结合到同一套复合量子系统, 从而实现超导量子比特之间的光互联仍然面临巨大挑战. 尤其是如何实现不同量子体系间的强耦合、微波光波高总效率转换以及如何处理光诱导热激发噪声等科学问题仍急待解决. 目前提升超导-冷原子复合系统性能的研究聚焦以下三方面. 1) 实现超导微波谐振腔-冷原子强耦合. 在强磁耦合研究方面, 通过加工低阻抗微波谐振腔^[47]、增加电感环圈数^[48]、减小冷原子与超导芯片的相互作用距离^[17]来增大单原子与单光子的磁耦合强度; 通过压缩磁阱和射频蒸发冷却提高冷原子密度, 从而提高集体耦合强度^[17]. 在强电耦合研究

方面, 加工高阻抗微波谐振腔^[49]和提高里德伯原子密度均可提高耦合强度. 2) 在微波光波转换方面, 除了通过广义阻抗匹配理论优化微波光波转换参数^[50]外, 相较于通过微波喇叭向自由空间发射微波, 通过微波腔或微波波导集中微波能量可提高微波光波总转换效率^[28,35]. 3) 在光诱导热激发噪声处理方面, 需要实验验证相关理论^[40,51,52]和提出更优的解决方案. 解决了这些挑战性问题, 将为超导量子计算机之间的实用化光纤互联奠定物理和技术基础, 有望在分布式超导量子计算机和杂化量子网络中获得广泛应用.

参考文献

- [1] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2019 *Nature* **574** 505
- [2] Zhu Q L, Cao S R, Chen F S, et al. 2022 *Sci. Bull.* **67** 240
- [3] Ye Y, Cao S, Wu Y, et al. 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 100301
- [4] Xu S, Sun Z Z, Wang K, et al. 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 060301
- [5] Monroe C, Raussendorf R, Ruthven A, Brown K R, Maunz P, Duan L M, Kim J 2014 *Phys. Rev. A* **89** 022317
- [6] Nickerson N H, Fitzsimons J F, Benjamin S C 2014 *Phys. Rev. X* **4** 041041
- [7] Wehner S, Elkouss D, Hanson R 2018 *Science* **362** 303
- [8] Li Y, Sun C P 2019 *Physics* **48** 477 (in Chinese) [李颖, 孙昌璞 2019 *物理* **48** 477]
- [9] Awschalom D, Berggren K K, Bernien H, Bhave S, Carr L, Davids P, Economou S, Englund D, Faraon A, Fejer M 2021 *PRX Quantum* **2** 017002
- [10] Zhong Y P, Chang H S, Bienfait A, Dumur É, Chou M H, Conner C R, Grebel J, Povey R G, Yan H X, Schuster D I, Cleland A N 2021 *Nature* **590** 571
- [11] Niu J J, Zhang L B, Liu Y, et al. 2023 *Nat. Electron.* **6** 235
- [12] Magnard P, Storz S, Kurpiers P, et al. 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 260502
- [13] Storz S, Schär J, Kulikov A, et al. 2023 *Nature* **617** 265
- [14] Lambert N J, Rueda A, Sedlmeir F, Schwefel H G 2020 *Adv. Quantum Technol.* **3** 1900077
- [15] Lauk N, Sinclair N, Barzanjeh S, Covey J P, Saman M, Spiropulu M, Simon C 2020 *Quantum Sci. Technol.* **5** 020501
- [16] Kurizki G, Bertet P, Kubo Y, Mølmer K, Petrosyan D, Rabl P, Schmiedmayer J 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **112** 3866
- [17] Verdú J, Zoubi H, Koller C, Majer J, Ritsch H, Schmiedmayer J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 043603
- [18] Beck M A, Isaacs J A, Booth D, Pritchard J D, Saffman M, McDermott R 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 092602
- [19] Bernon S, Hattermann H, Bothner D, Knufinke M, Weiss P, Jessen F, Cano D, Kemmler M, Kleiner R, Koelle D, Fortágh J 2013 *Nat. Commun.* **4** 2380
- [20] Hattermann H, Bothner D, Ley L Y, Ferdinand B, Wiedmaier D, Sárkány L, Kleiner R, Koelle D, Fortágh J 2017 *Nat. Commun.* **8** 2254
- [21] Kaiser M, Glaser C, Li Y L, Grimm J, Hattermann H, Bothner D, Koelle D, Kleiner R, Petrosyan D, Günther A, Fortágh J 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 013207
- [22] Morgan A, Hogan S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 193604

- [23] Andrews R W, Peterson R W, Purdy T P, Cicak K, Simmonds R W, Regal C A, Lehnert K W 2014 *Nat. Phys.* **10** 321
- [24] Higginbotham A P, Burns P S, Urmey M D, Peterson R W, Kampel N S, Brubaker B M, Smith G, Lehnert K W, Regal C A 2018 *Nat. Phys.* **14** 1038
- [25] Forsch M et al. 2020 *Nat. Phys.* **16** 69
- [26] Sahu R, Hease W, Rueda A, Arnold G, Qiu L, Fink J M 2022 *Nat. Commun.* **13** 1276
- [27] Fan L, Zou C L, Cheng R, Guo X, Han X, Gong Z, Tang H X 2018 *Sci. Adv.* **4** eaar4994
- [28] Kumar A, Suleymanzade A, Stone M, Taneja L, Anferov A, Schuster D I, Simon J 2023 *Nature* **615** 614
- [29] Smith B D, Babaei B, Narayanan A, LeBlanc L J 2023 *arXiv*: 2305.19221v1
- [30] Tu H T, Liao K Y, Zhang Z X, Liu X H, Zheng S Y, Yang S Z, Zhang X D, Yan H, Zhu S L 2022 *Nat. Photonics* **16** 291
- [31] Vogt T, Gross C, Han J, Pal S B, Lam M, Kiffner M, Li W 2019 *Phys. Rev. A* **99** 023832
- [32] Fernandez-Gonzalvo X, Horvath S P, Chen Y H, Longdell J J 2019 *Phys. Rev. A* **10** 033807
- [33] Hisatomi R, Osada A, Tabuchi Y, Ishikawa T, Noguchi A, Usami K, Yamazaki R, Nakamura Y 2016 *Phys. Rev. B* **93** 174427
- [34] Shen Z, Xu G T, Zhang M, Zhang Y L, Wang Y, Chai C Z, Zou C L, Guo G C, Dong C H 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 243601
- [35] Kiffner M, Feizpour A, Kaczmarek K T, Jaksch D, Nunn J 2016 *New J. Phys.* **18** 093030
- [36] Mirhosseini M, Sipahigil A, Kalaei M, Painter O 2020 *Nature* **588** 599
- [37] Delaney R D, Urmey M D, Mittal S, Brubaker B M, Kindem J M, Burns P S, Regal C A, Lehnert K W 2022 *Nature* **606** 489
- [38] Han X, Fu W, Zhong C C, Zou C L, Xu Y T, Sayem A A, Xu M R, Wang S H, Cheng R S, Jiang L, Tang H X 2020 *Nat. Commun.* **11** 3237
- [39] Xu M R, Han X, Zou C L, Fu W, Xu Y T, Zhong C C, Jiang L, Tang H X 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 033602
- [40] Liang Z T, Zhang G Q, Yuan J H, Ye Q Z, Liao K Y, Xue Z Y, Yan H, Zhu S L 2022 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **65** 240362
- [41] Zhu S L, Wang Z D, Zanardi P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 100502
- [42] Zhu S L, Wang Z D 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 187902
- [43] Liang Y, Shen P, Ji L N, Xue Z Y 2023 *Phys. Rev. Appl.* **19** 024051
- [44] Ji L N, Liang Y, Shen P, Xue Z Y 2022 *Phys. Rev. Appl.* **18** 044034
- [45] Chen T, Xue Z Y, Wang Z D 2022 *Phys. Rev. Appl.* **18** 014062
- [46] Liang M J, Xue Z Y 2022 *Phys. Rev. A* **106** 012603
- [47] McKenzie-Sell L, Xie J, Lee C M, Robinson J W, Ciccarelli C, Haigh J A 2019 *Phys. Rev. B* **99** 140414
- [48] Sarabi B, Huang P, Zimmerman N M 2019 *Phys. Rev. Appl.* **11** 014001
- [49] Stockklauser A, et al. 2017 *Phys. Rev. X* **7** 011030
- [50] Wang C H, Zhang M, Jiang L 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** L042023
- [51] Xiang Z L, Zhang M, Jiang L, Rabl P 2017 *Phys. Rev. X* **7** 011035
- [52] Vermersch B, Guimond P O, Pichler H, Zoller P 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 133601

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Research progress of superconductor and cold atoms hybrid quantum system*

Lv Qing-Xian¹⁾²⁾ Li Sai¹⁾ Tu Hai-Tao¹⁾ Liao Kai-Yu¹⁾
Liang Zhen-Tao^{1)†} Yan Hui¹⁾²⁾³⁾ Zhu Shi-Liang¹⁾²⁾³⁾

1) (*Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education),
School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Quantum Engineering and Quantum Materials,
South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

3) (*Frontier Research Institute for Physics, Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter,
South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 14 June 2023; revised manuscript received 6 October 2023)

Abstract

The hybrid quantum system composed of superconductor and cold atoms is expected to achieve fast quantum gates, long-life quantum storage and long-distance transmission through optical fibers, making it one of the most promising hybrid quantum systems to realize optical interconnection between two superconducting quantum computers. In this paper, we comprehensively review the recent research advancements in the optical interconnection of two superconducting quantum computers, based on the superconductor and cold atoms hybrid quantum system, specifically the review covers the coherent coupling between superconducting chips and cold atoms, the coherent microwave-to-optics conversion, and the long-range microwave interconnection between superconducting qubits and quantum converters. The system is expected to provide a physical and technical foundation for practical optical-fiber interconnection of two superconducting quantum computers, and have broad applications in distributed superconducting quantum computation and hybrid quantum networks.

Keywords: superconductor and cold atoms hybrid quantum system, coherent coupling, microwave-to-optics conversion, long-distance microwave interconnection

PACS: 03.67.-a, 42.50.-p, 42.50.Pq, 03.67.Lx

DOI: [10.7498/aps.72.20230985](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230985)

* Project supported by the Innovation Program for Quantum Science and Technology, China (Grant No. 2021ZD0301705), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12104168, 12074132, 12225405, 12247123, 12304287, U20A2074, 12074180), the National Key Research and Development Program of China (Grant Nos. 2022YFA1405300, 2022YFA1405303, 2020YFA0309500), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant Nos. 2022M721222, 2023T160233), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2021A1515110668, 2023A1515011550), and the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 202201010533).

† Corresponding author. E-mail: zliangscnu@163.com



超导-冷原子复合系统的研究进展

吕庆先 李赛 涂海涛 廖开宇 梁振涛 颜辉 朱诗亮

Research progress of superconductor and cold atoms hybrid quantum system

Lv Qing-Xian Li Sai Tu Hai-Tao Liao Kai-Yu Liang Zhen-Tao Yan Hui Zhu Shi-Liang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200306 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230985

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230985>

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

微波驱动下超导量子比特与磁振子的相干耦合

Coherent coupling in a driven qubit-magnon hybrid quantum system

物理学报. 2022, 71(15): 150302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220260>

腔光力系统制备微波非经典态研究进展

Research progress in non-classical microwave states preparation based on cavity optomechanical system

物理学报. 2020, 69(5): 054203 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191735>

用于冷原子的高精度磁场锁定系统

High-precision magnetic field locking system for cold atoms

物理学报. 2022, 71(14): 145205 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220399>

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>

腔自旋波混合系统的研究进展

Research progress of hybrid cavity-magnon systems

物理学报. 2019, 68(23): 230305 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191608>

111型铁基超导材料研究进展

Research progress about 111-typed iron based superconductor

物理学报. 2018, 67(20): 207414 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181586>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

电润湿电子纸显示应用物理研究概述与进展*

刘飞龙 程彦银 张境恒 唐彪[†] 周国富[‡]

(华南师范大学华南先进光电子研究院, 彩色动态电子纸显示技术研究所, 广东省光信息材料与技术重点实验室, 广州 510006)

(2023 年 5 月 24 日收到; 2023 年 7 月 6 日收到修改稿)

电润湿是指通过改变作用于液体-固体电极间的电势, 来影响固体和液体间的界面张力, 从而改变固液界面的润湿性, 即接触角, 使液滴产生形变、位移的现象. 电润湿电子纸显示是基于快速响应微流体操控技术的新型反射式“类纸”显示技术. 该技术拥有已商业化的电泳电子纸显示产品低能耗、视觉健康、可柔性等优点, 同时突破了“彩色”和“视频播放”两项当前束缚电子纸显示技术应用领域的瓶颈. 未来, 电润湿电子纸显示将为我国军用、民用市场提供全天候“绿色”显示产品, 具有千亿规模的直接市场和巨大产业辐射力. 本文对电润湿显示器件中涉及的多个物理方向, 特别是润湿与电润湿、两相流体力学、微观与界面物理、光物理、电介质物理、热物理、瞬态物理等, 进行了系统综述; 并且对基本器件工作原理、微观与介观物理图像、器件运行内在机制、器件可靠性等进行了全面介绍.

关键词: 电润湿, 器件物理, 反射式显示**PACS:** 85.60.Pg, 85.60.-q, 68.08.Bc**DOI:** 10.7498/aps.72.20230837

1 引言

显示是信息交互的重要载体. 伴随着 20 世纪的信息技术革命, 显示技术领域发生了重要变革. 从黑白到彩色, 从静态到动态, 从小屏到大屏, 人类对于显示质量的不断追求成为技术进步的强力驱动. 在电子信息技术发展的早期, 阴极射线显像管 (CRT) 显示技术曾经风靡一时, 它采用电子束激发屏幕内表面的荧光粉来显示图像. 然而, 随着新型显示技术的快速发展, CRT 显示在今天已经被市场所淘汰. 如图 1 所示, 目前主流的显示技术依据不同的物理原理, 可分为透射式、发射式、反射式三类. 透射式显示以液晶显示 (LCD) 为代表,

在电场作用下, 其内部液晶分子的排列方向会发生变化, 进而改变外部光源透光率 (调制), 完成电光转换^[1,2]. 发射式显示以有机发光 (OLED)、量子点发光 (QLED) 等为代表, 在电场的作用下, 电极中的空穴和电子发生注入、迁移及复合, 在发光层产生能量激子并最终产生可见光^[3,4]. 反射式显示以电子纸为代表, 由在环境光反射或透射作用下, 可显示颜色的带电微粒或者油墨组成, 在外加电场的作用下, 控制带电有色颗粒或油墨定向运动, 从而实现颜色的控制与切换^[5,6].

1.1 电子纸显示简介

反射式电子纸兼具纸张的观阅舒适性和电子器件的交互特性, 以亚马逊推出的 Kindle 为代表

* 国家重点研发计划 (批准号: 2021YFB3600602)、国家自然科学基金 (批准号: 62005083, 52175403)、科技部外国专家重点支撑计划 (重大科研) (批准号: zcgx2022002L)、广东省海外高层次人才引进计划 (青年拔尖) (批准号: 2021QN02X369)、“广东特支计划”本土创新创业团队 (批准号: 2019BT02C241)、教育部长江学者和创新团队发展计划 (批准号: IRT 17R40)、广东省光信息材料与技术重点实验室 (批准号: 2017B030301007)、广州市类纸显示材料与器件重点实验室 (批准号: 201705030007)、教育部光信息国际合作联合实验室和高等学校学科创新引智计划资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: tangbiao@scnu.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: guofu.zhou@m.scnu.edu.cn

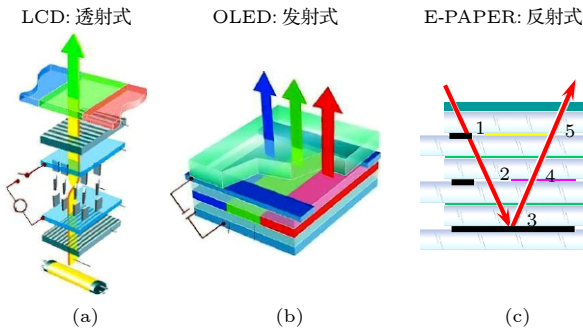


图 1 主流显示器件类型及其工作原理 (a) LCD 液晶显示, 对背光源透射光进行调制; (b) OLED 有机发光显示, 利用电光转换实现自发光; (c) E-Paper 电子纸显示, 对环境光的反射进行调制

Fig. 1. Working principles of mainstream display devices: (a) LCD (liquid crystal) display, based on modulation of backlight transmission; (b) OLED (organic light-emitting) display, based on self-emission by conversion from electricity to light; (c) E-Paper (electronic paper) display, based on modulation of reflective light from environment.

的第一代电子纸产品在电子书市场取得了巨大成功^[7-10]. 它的主要优点有: 1) 模拟传统油墨印刷到纸张上的阅读舒适度; 2) 通过反射式显示, 借用环境光阅读, 特别适合户外阅读; 3) 非常省电, 待机时间长. 特别是其具有舒适护眼、耗电量低、阳光下可视等突出优点, 具有极其广阔的应用范围. 反射式电子纸显示目前主要技术路径分为两类: 基于颗粒体系的电泳显示 (EPD) 和基于流体体系的电润湿显示 (EWD). 其中电泳电子纸通过外加电场控制不同颜色、带不同电荷的微胶囊的移动, 从而实现不同颜色的显示, 如图 2 所示. 该技术目前已广泛应用于电子纸屏幕产品中, 但是其缺点在于响应速度慢 (≥ 100 ms), 彩色颜色数量少 (4096 种),

色域窄 (13% NTSC), 因此无法播放视频和难以显示高色域, 限制了电子纸显示屏的进一步推广和应用.

1.2 电润湿电子纸显示简介

电润湿显示的概念最早由 Beni 与 Hackwood^[11] 和 Beni 与 Tenan^[12] 分别在 1981 年提出, 具体方法是通过电润湿效应操纵液滴在像素格中的形变运动, 进而改变像素内的光学空间相干性, 可以实现电润湿显示面板在显色和透明间相切换. 1875 年, 法国科学家 Gabriel Lippmann^[13] 观察到在汞和电解液 (水) 之间施加电压, 汞液面会发生下降, 由此发现电毛细现象, 明确了电润湿的概念; 并提出了著名电润湿基本理论 Young-Lippmann 方程. 1993 年, Berge^[14] 提出基于介电层的电润湿, 成为近代电润湿应用器件的基础. 2003 年, 荷兰研究员 Hayes 和 Feenstra^[15] 在 *Nature* 杂志上发表文章, 提出电润湿显示技术应用于播放视频的可行性, 将电润湿显示的研究推向新的篇章.

在国际上, 各大高校及研究院所很早就开始了对 EWD 的基础科学研究, 包括荷兰飞利浦研究院、加州大学洛杉矶分校、美国辛辛那提大学、荷兰特文特大学等, 在 EWD 的器件设计、制备工艺等方面也都取得了很好的成果, 处于领先地位. 飞利浦公司意识到 EWD 技术对未来显示行业的颠覆性以及未来巨大的市场潜力, 于 2006 年成立公司 Liquavista, 希望能够主导和实现该领域的产业化. 与此同时, 三星与摩托罗拉等也先后推进 EWD 相关技术的研发和产业化进程. 另外, 电子书龙头

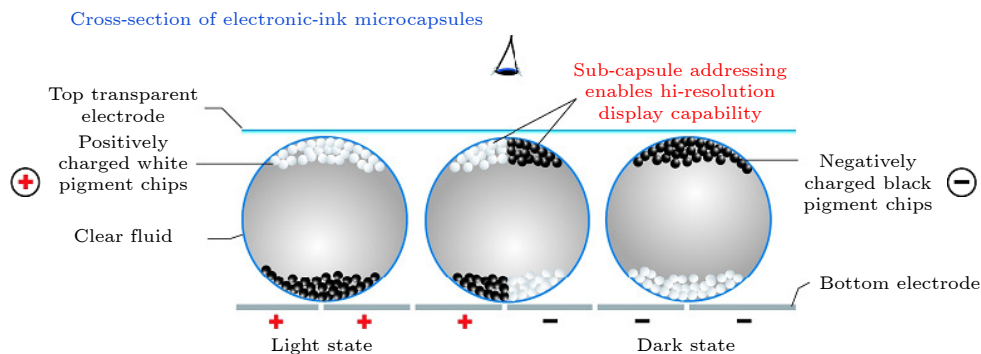


图 2 电泳电子纸显示原理. 微胶囊包裹的两色电异性颗粒体系, 通过施加电场的极性及其强度控制颗粒运动, 实现白色 (左)、灰色 (中)、黑色 (右) 等灰阶显示

Fig. 2. Working principles of electrophoretic e-paper display. Microcapsules are composed of positively charged white pigment chips and negatively charged black pigment chips. Particle motion is controlled by polarity and strength of external electric fields, resulting in display of white (left), grey (middle), and black (right) colors.

亚马逊在 2013 年并购 Liquavista, 此举对当时的电子纸行业有不小的震动, 显示了亚马逊对 EWD 蕴含巨大市场的笃定, 及未来 EWD 成为“彩色视频电子书”唯一技术路径的信心.

在国内, 华南师范大学拥有电润湿显示技术领域最优秀的国际化高水平人才梯队, 在电润湿显示基础科学、制程工艺及器件优化等科研与产业化领域已取得一系列原创性成果, 成为全球最具活力的电润湿显示技术研发机构之一. 华南师范大学于 2015 年 7 月正式完成全球首条电润湿反射式显示器件中试线建设 (2.5 代), 已实现了电润湿显示相关技术成果转化, 成为全球电润湿显示研发与产业化技术的领跑者.

迄今为止, 全球范围内尚未有市场化的电润湿显示产品, 但电润湿显示技术经过数十年的高速发展, 相关技术及基础研究都相当完善, 正处在量产前的攻坚期. 包括提升器件寿命, 柔性化、双稳态、彩色化显示等存在一些关键的科学问题亟待解决, 还有器件的设计、集成与驱动, 薄膜晶体管 (TFT) 背板的设计与制备等领域也存在一些技术难题. 未

来在资金与技术的不断投入下, 随着这些问题的解决, 电润湿显示技术将应用于可穿戴移动终端, 提供可读性强 (特别是自然光下)、能耗超低的绿色显示屏幕, 这将带来千亿元的商机.

电润湿显示技术使通过对液滴加电, 改变固液界面的润湿性, 从而控制彩色油墨的收缩与铺展, 进而实现像素的开关及灰阶的调控^[16]. 每个像素结构如图 3 所示. 底面 TFT 电极层使用亲油疏水绝缘层, 用光刻胶材料构筑像素墙. 然后在像素格底部覆盖一层油墨 (如红色), 再将整个基板放置于极性流体 (如水) 中, 并与上层 ITO 玻璃封装构成显示屏. 像素格未加电时, 油墨铺满像素格底部, 此时像素格显示油墨的颜色; 给像素格上层 ITO 玻璃和下层 TFT 基板加电后, 油墨被水推开, 此时像素呈现像素格底部的颜色 (通常为白色). 这样就可以通过施加电压来实现像素格颜色的切换. 整个像素格显示结构设计简单, 成本低, 易于大规模制造.

电润湿显示原理决定了该技术具有如下七方面特点. 1) 耗能低: 电润湿为电压型驱动, 而非电流型驱动, 不需恒定电流来保持显示状态; 2) 驱动

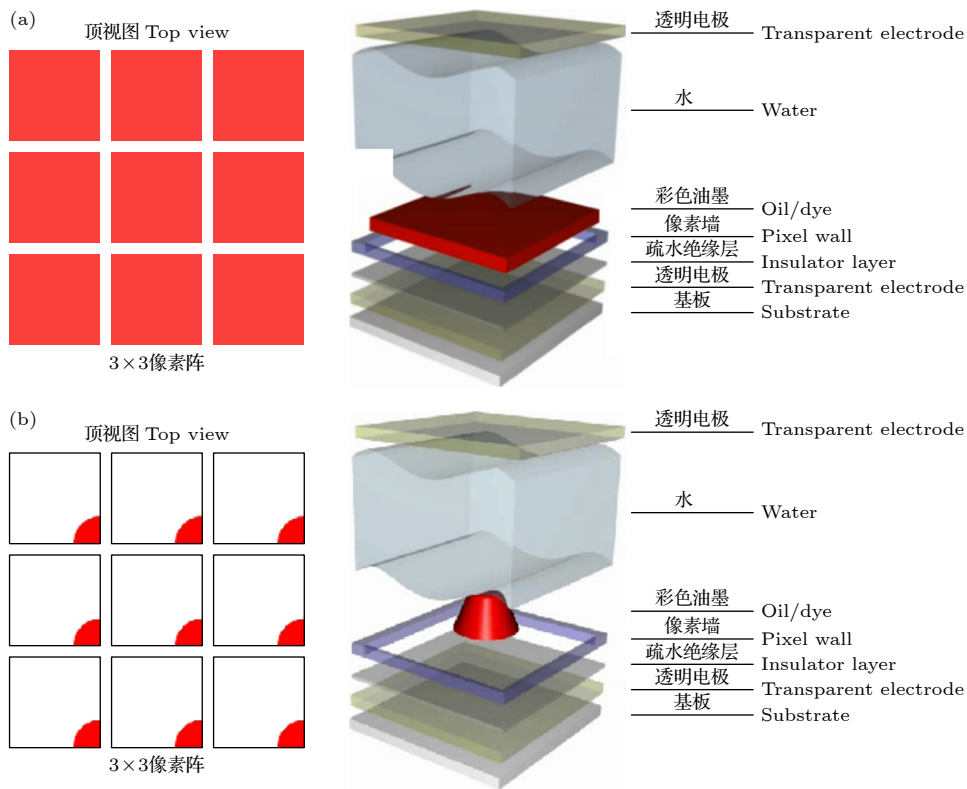


图 3 电润湿电子纸显示原理. 像素单元内两相流体体系通过施加电场强度控制油水界面运动, 实现灰阶调控 (a) 未加电状态; (b) 加电状态

Fig. 3. Working principles of electrowetting e-paper display. Binary phase fluids composed of colored oil and transparent water are controlled by strength of external electric fields, resulting in color modulation: (a) Without electric bias; (b) with electric bias.

速度快: 实验证明改变液滴的形状所需时间远小于驱动油墨颗粒由一端“游动”到另一端的时间 (电泳技术), 为动态显示奠定基础; 3) 色彩丰富: 可以改变或者组合油滴和基板的颜色, 形成多种颜色显示方案; 4) 透射式和反射式工作方式皆可: 当背板为非透明时可以工作在反射模式, 而将背板设计为透明, 并在底部设计背光源时, 其可以工作在透射模式下, 与现有的 LCD 显示方案类似; 5) 对比度、反射度高: 由于显示屏的功能组合层数低, 显示薄膜层薄, 导致其显示的对比度、反射度均非常理想; 6) 结构简单, 制造成本低: 由其原理可知, 该方案下的显示屏结构简单, 组合层数低, 大部分的制造设备、工艺与液晶屏兼容, 可有效地降低制造成本; 7) 易于轻薄化、柔性化: 由于显示屏结构简单, 组合层数低, 因此显示模组厚度可以做得很薄.

2 固液润湿性与电润湿效应

2.1 固液界面润湿性

润湿现象是指液体能接触并附着在固体表面的现象. 液体表面和内部的分子状态不同, 液体表面分子的能量高于其内部分子的能量. 当固体与液体相接触时, 液体表面能量就会降低, 这促使液体在固体界面铺展. 润湿性是指液体保持与固体表面接触的能力.

实践中, 一般会使用接触角去衡量固体表面的润湿程度 (即固体表面疏水或亲水程度). 当液滴或者气泡在固体表面附着时, 其曲球面与固体界面有一条交界线, 一般称其为“三相接触线”. 在润湿过程中, 三相接触线是在不断变化的, 或大或小. 当变化停止时, 说明三相接触线处的自由能 (用界面张力表示) 达到平衡, 此时, 固液间界面切线与液气间界面切线所成夹角称为平衡接触角, 简称接触角, 用 θ_0 表示. 在平衡状态下, Young 在 1805 年提出润湿基本方程:

$$\gamma_{LV} \cos \theta_0 = \gamma_{SV} - \gamma_{SL}, \quad (1)$$

其中 γ_{LV} , γ_{SV} 和 γ_{SL} 分别是液-气、固-气和固-液界面的界面张力, L, V 和 S 分别代表液体、气体和固体. 从 (1) 式可以看出, 该公式中的平衡接触角 θ_0 是关于三相界面张力的函数, 也就是说接触角不仅取决于液体的性质, 也取决于固体表面的性质, 更

取决于二者之间的相互作用性质. 接触角的范围是 0° 到 180° , 通过测量接触角, 可以大致得到固体的润湿性. 接触角越小, 则说明固体界面润湿性越好. 一般认为当接触角 $\theta_0 = 0^\circ$ 时, 固体完全润湿, 液体铺展在固体表面上; $0^\circ < \theta_0 < 90^\circ$ 时, 固体高度润湿; $90^\circ < \theta_0 < 180^\circ$ 时, 固体低度润湿; $\theta_0 = 180^\circ$, 固体完全不润湿, 液体在固体表面上凝聚为小球.

固体表面的润湿性主要由其界面表层原子或原子基团的性质决定. 润湿现象是在界面上的固体和液体分子间微观相互作用的宏观表现. 因而, 可以通过加入表面改性剂的方法来改变固体界面润湿性, 这种方法将使得固体界面润湿性与固体基材性质无关, 而主要取决于改性剂和液相的性质.

2.2 电润湿效应

电润湿 (electrowetting) 是指通过控制施加在固体电极基板与液滴两端的电压, 从而改变液滴同下基板间的界面张力, 进而改变液滴的接触角, 使液滴产生形变和位移的现象 (图 4). 法国科学家 Gabriel Lippmann^[13] 于 1875 年在实验中首次观察到电毛细现象, Gabriel Lippmann 在汞和水之间施加电压, 发现汞液面会发生下降, 由此明确了电润湿概念, 并提出了著名的电润湿理论 Young-Lippmann 方程. 然而, 由于实验中正负电极直接与液滴接触造成了电解效应, 其接触角实际调控范围十分有限, 导致该方法没有引起人们的关注. 直到 1993 年, 法国科学家 Berge^[14] 在电极与电解液间加入一层绝缘介电层, 才消除了电解液的电解效应, 从而突破了电润湿的瓶颈. Berge 提出的方法又被称为介电润湿 (EWOD), 该方法的应用突破了传统电润湿的应用瓶颈, 使得电润湿相关应用创新得以快速发展^[17]. 还有一点要注意的是, 现今如果不是特指, 电润湿就是指介电润湿. 作为一种电场作用下的固液润湿性调控手段, 电润湿已广泛应用于多个领域, 其中包括可变焦微透镜^[18]、微流控芯片实验室^[19]、显示技术^[15]、相变传热^[20]、能量转换^[21]、微电机系统^[22] 等领域.

对于接触角与施加电压之间的关系这一电润湿基础问题, 研究的背景和方法上的差异也衍生了不同的解释机理. 归结起来, 当前主流的电润湿理论基本描述方法包括热力学方法、能量最小化方法及电动力学方法.

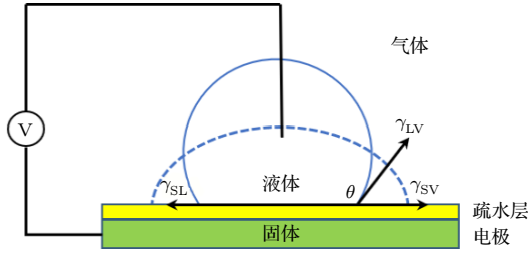


图 4 电润湿原理示意图

Fig. 4. Schematics of electro-wetting.

诺贝尔物理学奖得主 Lippmann 采用热力学观点认为液体接触角的变化是由于施加电压对于导电液体、电极与绝缘层构成的电容充电, 贮存了额外静电能的结果, 并将电润湿体系的静电能引入了 Young 方程, 得到:

$$\gamma_{LV} \cos \theta = \gamma_{SV} - \gamma_{SL} + \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d}{d} U^2. \quad (2)$$

将 (1) 式代入 (2) 式得

$$\cos \theta = \cos \theta_0 + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d\gamma_{LV}}. \quad (3)$$

(3) 式被称为 Young-Lippmann 方程, 即电润湿控制方程. 其中, ε_0 是真空中介电常数, ε_d 是疏水绝缘层相对介电常数, d 是疏水绝缘层厚度; U 为液滴与基板间的电压, θ_0 与 θ 分别为施加电压前后的接触角.

另外, 根据能量最小化方法来分析电润湿体系中液滴的行为, 在体系中 Bond 常数 $Bo = \sqrt{\frac{\Delta\rho g R^2}{\gamma_{LV}}}$ 较小的情形下 ($\Delta\rho$ 为液体与气体密度之差, R 为液滴半径, g 为重力加速度), 可以忽略重力对液滴总自由能的影响. 因此, 在无外加电场的情况下, Bond 常数较小的液滴形态变化过程主要由其表面张力来决定. 液滴总自由能是液滴形态的函数, 液滴的界面自由能可由下式表示:

$$F = F_{if} = A_{LV}\gamma_{LV} + A_{SV}\gamma_{SV} + A_{SL}\gamma_{SL} - \lambda V, \quad (4)$$

其中, λ 是保证体积守恒的拉格朗日变量, λ 的值为液-气界面的压力降 Δp . A 为所对应的两相接触面的面积, V 为液滴体积, 下标 if 代表界面 (interface).

在电润湿体系中, 液滴的自由能主要是由静电自由能和界面自由能构成. 静电自由能为 (下标 el 代表静电 electrostatic):

$$F_{el} = \frac{1}{2} \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) dV, \quad (5)$$

其中 \mathbf{E} 和 \mathbf{D} 分别表示在空间位置 r 的电场强度和电位移矢量, 静电自由能即对整个液滴体积内的电场与电位移矢量进行积分得到. 如果液滴足够大, 液滴的边缘引起的能量变化可以忽略不计. 从而总电场自由能仅仅是由液滴和电极本体所形成的平行平板电容所形成的. 考虑界面自由能 F_{if} 的贡献和体积守恒的原则, 液滴的总能量可以用方程 (6) 来表示:

$$\begin{aligned} F &= F_{if} - F_{el} \\ &= A_{LV}\gamma_{LV} + A_{SV}\gamma_{SV} + A_{SL}\gamma_{SL} \\ &\quad - \Delta p V - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d} A_{SL}. \end{aligned} \quad (6)$$

合并同类项, 于是 (6) 式就变为

$$\begin{aligned} F &= F_{if} - F_{el} = A_{LV}\gamma_{LV} + A_{SV}\gamma_{SV} \\ &\quad + A_{SL} \left(\gamma_{SL} - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d} \right) - \Delta p V. \end{aligned} \quad (7)$$

方程 (7) 和没有电场情况下的自由能计算公式有着相同的结构 (方程 (3)). 比较两方程的系数, 同样可以得到 Young-Lippmann 方程. 正如热力学方法一样, 电润湿基本方程的推导遵循以下假设: 1) 表面张力与电压无关; 2) 液体为完美的导体; 3) 忽略液滴接触线附近区域的影响.

以上热力学与能量最小化两种方法都是基于能量学观点, 即微小液滴与介电层之间电荷积累产生电容效应, 导致能量变化, 从而引起微小液滴表面张力的改变, 进而导致接触角变化^[23]. 尽管这些方法可以对宏观的能量变化进行分析, 但不能帮助我们理解电润湿三相接触线附近微观现象产生的物理机制.

而根据电动力学观点, 微小液滴在三相接触线附近的电荷累积会产生静电力, 这会导致微小液滴表面张力发生改变, 进而引起接触角变化^[24,25]. 在电动力学模型中, 电场引起的液滴接触角变化具有明确的力学意义^[26-29]. 导电液滴在静电场中, 电场力分布通常由 Korteweg-Helmholtz 方程得出^[28]:

$$\mathbf{f}_e = \sigma \mathbf{E} - \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 \nabla \varepsilon + \nabla \left[\frac{\varepsilon_0}{2} E^2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right], \quad (8)$$

其中 σ 表示自由电荷体密度; ε 表示液滴介电常数; ρ 表示液滴密度. (8) 式右边第 1 项代表电场力, 第 2 项代表有质动力 (ponderomotive force), 第 3 项代表电致伸缩力.

三相接触线附近电场力的水平分量和垂直分

量分别是

$$F_{e,x} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d}, \quad (9)$$

$$F_{e,y} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d} \frac{1}{\tan \theta}. \quad (10)$$

电场力水平方向的分量会使液滴产生形变铺展,在与界面张力平衡后稳定.而在垂直方向上的分量并不会影响液滴的表面位移,但一些研究者认为垂直分量对接触角饱和有一定影响.在三相接触线附近建立力学平衡,代入 Young 方程即得 Young-Lippmann 方程:

$$\gamma_{LV} \cos \theta = \gamma_{SV} - \gamma_{SL} + \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d}{d} U^2. \quad (11)$$

如图 5 所示,由于平板电容的边缘场效应,在三相接触线附近的电场强度的最大.根据电动力学方法预测电润湿力主要作用在距离三相接触线的极小范围(通常认为主要作用于绝缘层厚度 d 范围内),因此电润湿力通常被视为界面力而非体积力.

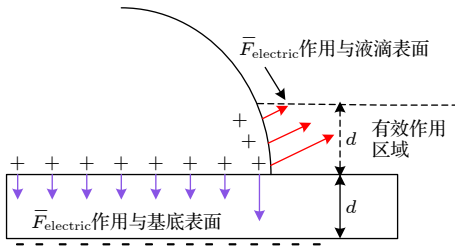


图 5 三相接触线及固液表面附近的电场力分布

Fig. 5. Electric force distribution at the solid-liquid interface and near the three-phase contact line.

综上,热力学、能量最小化和电动力学三种方法都能导出电润湿控制方程,并在一定程度上解释电润湿效应.其中,前两种方法适于对整个液滴稳态过程的分析,而电动力学方法则能精确描述电场力对三相接触线动力学演变过程.

2.3 接触角饱和

根据 Young-Lippmann 方程,理想状态下绝缘层表面液滴的接触角应随电压的不断增大而不断减小.然而经过大量实验验证,在介电润湿装置中,液滴的接触角在低压下可随 Young-Lippmann 理论曲线变化;在高压下接触角却总是会发生饱和(saturation)现象^[30,31],无法实现完全润湿.典型的电润湿曲线如图 6 所示,理论曲线(红色)是根据 Young-Lippmann 的理论方程(方程(3))计

算得出的,可以看到随着偏压的增大,接触角从初始的疏水状态降低到亲水状态.通常接触角的饱和和发生在 30° — 80° 之间,这主要取决于不同实验体系及材料之间的差异^[32].目前为止,关于接触角饱和的物理机制依然存在争议.随着相关研究的不断深入,研究者们提出了各种相关物理机制来解释这种现象.

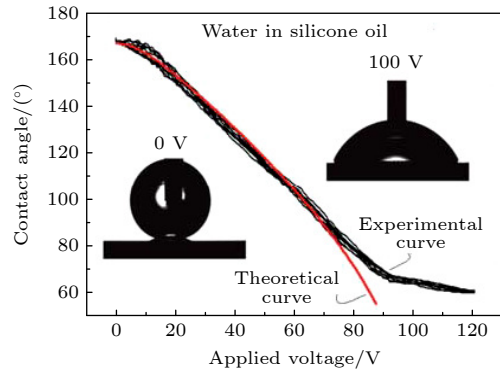


图 6 实验中典型的电润湿曲线

Fig. 6. Typical electrowetting characteristics in experiments.

Verheijen 和 Prins^[33]认为当不断施加电压使液滴驱动达到饱和时,介质层表面不断充电引发电荷陷入(charge trapping)介质层内,从而屏蔽了部分外加电场,导致接触角无法持续降低,发生饱和. Shapiro 等^[34]从能量平衡的观点分析了液滴周围的场强分布并提出了有限电阻率比 $A = \frac{\rho_d d}{\rho_l R}$ 的假设, (ρ_d , ρ_l 分别是介质层和液体的电阻率; R 是液滴半径).通过他们的计算表明,液滴的电势降会随着接触角的减小而不断增加,由此导致了接触角的饱和.这个理论的提出对现存大部分电润湿实验中的饱和现象有了更深入的理解,但是在高电阻率体系中并未得到验证.截至目前,尽管已经提出各种相关的物理机制使得对接触角的饱和问题得到了更多的理解,但是这些解释仍然不能对这个问题进行全面的概括,并未形成一种标准化的数理表达对接角饱和和进行科学有效的推断.似乎很明显的分歧就在于,分布在三相接触线处的电场其实可以引起几种不同的非线性效应,每种效应都可以独立地导致饱和,至于哪种效应占主导作用则取决于具体的实验体系.

总而言之,电润湿对液滴润湿性的操控范围有它的极限.通常在较低的电场强度下固液接触角的变化趋势基本符合 Young-Lippmann 方程,该区

域也被称作“Lippmann”区域;随着电场强度增大,会出现接触角饱和乃至介电击穿失效等问题.因此,如果要获得精准、可逆的润湿性操控,最好将系统的设计工作窗口选择在线性度较好的“Lippmann”区域.

3 两相流体动力学

3.1 流体力学简介

流体力学是力学的一个分支,主要研究在不同力的作用下,流体静止状态和运动状态的行为以及流体与固体壁面间的相互作用和流动规律.在深入理解电润湿显示器件的工作原理前,需要首先对流体力学相关理论有充分认识.

如图 7 所示,固液润湿约束下的流体浸润动力学基础理论研究有多种方法.从微观角度,流体由离散的分子组成,可以通过对大量分子运动(包括分子内部与分子间的力学作用)进行描述,计算各个分子位置和动量随时间的变化,从而得到所组成流体的性质^[35-37].其局限性在于,对于微观分子动力学研究方法,由于其描述的为每一个分子,导致其计算量非常巨大,通常只能描述纳米尺度的液体体系,难以满足电润湿显示所需研究的微米尺度体系的要求.从宏观角度,可以把流体看作连续的介质,流体的运动由纳维斯托克斯(Navier-Stokes, NS)方程决定^[38].NS方程虽然难以得到解析解,但可以通过有限元等近似方法进行数值计算,从而得到流体运动的宏观描述.格子玻尔兹曼(lattice Boltzmann method, LBM)方法^[39-41]一般被认为是介于上述二者之间的介观研究方法.其优点在于计算速度快,易于并行计算.该方法从物理上来看,

是 NS 方程在低流速条件下的近似,因此,该方法难以处理湍流等复杂问题.

3.2 两相流体力学简介

流体力学的一个重要基础是对流扩散方程,它描述了流体的物理量伴随着流体而运输.流体的运输可以理解成一种流动的质量传递现象,主要包括对流和扩散两种方式.对流是依靠流体整体的运动传递物理量,可以理解为宏观上的机械运动;不同于对流是宏观的流体运动,扩散本质上是微观层面上,由分子热运动驱动的,从浓度高向浓度低的运动.对于流体内部某处微小的体积元内的物理量 c ,其随时间的变化可表示为^[38]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c - \mathbf{v} \cdot \nabla c. \quad (12)$$

此方程即为对流扩散方程,其中等号右边第一项为扩散项,第二项为对流项; D 为扩散系数, \mathbf{v} 为流体流速; t 为时间.

如果把对流扩散方程中的扩散系数 D 转化为黏度 μ ,并把被运输的物理量指定为动量,再加入压力的影响,那么对流扩散方程就变成了动量运输方程.此情况即为 NS 方程的特殊形式.而 NS 方程的一般形式为^[38]

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla p + \mathbf{f} + \mu \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (13)$$

其中 ρ 为流体密度(单位体积的质量), $\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right)$ 为加速度,而等号右边的三项均为力,因此 NS 方程可以理解为牛顿第二定律 $F = ma$ 的形式.具体来看,等号左边 $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ 项描述流体速度随时间的变化,为非定常项,在定常流动和静止流场

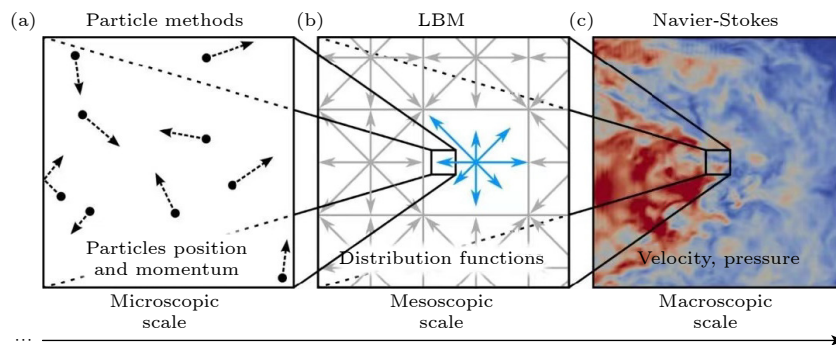


图 7 流体体系基础理论研究方法 (a) 微观尺度: 分子动力学; (b) 介观尺度: 格子玻尔兹曼方法; (c) 宏观尺度: 纳维斯托克斯方程
 Fig. 7. Fundamental theoretical methods for fluid systems: (a) Microscopic scale: molecular dynamics; (b) mesoscopic scale: lattice Boltzmann method; (c) macroscopic scale: Navier-Stokes equation.

情况下均为 0. $\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$ 项为对流项, 描述的是流体运动的速度和方向变化. 等号右边第一项 ∇p 描述的是流体的内部压力梯度, 第二项 \mathbf{f} 是作用在流体上的外力 (如重力 $\mathbf{f} = \rho \mathbf{g}$), 第三项 $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$ 是考虑黏性效应后, 作用在流体的内部应力, μ 为流体的动力黏度, 第三项 $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$ 也同时描述了流体流速的扩散作用.

当流体由两相组分构成时, 需要用一个新的物理量表示局部流体所属的相, 该物理量为相场序参量 ϕ . 例如, 可以定义油水两相分别位于 $\phi = 1$ 和 $\phi = -1$ 处, 为了使得两相不互溶, 可以构造一个 Ginzburg-Landau 形式的能量密度函数^[42,43]:

$$\psi = \frac{3\gamma}{\sqrt{8}l} \left[\frac{\phi^4}{4} - \frac{\phi^2}{2} + \frac{l^2}{2} |\nabla \phi|^2 \right], \quad (14)$$

其中 γ 为两相之间的界面张力, l 为界面层厚度. 由 (14) 式可以看出, 在 $\phi = \pm 1$ 时, 能量密度 ψ 取最小值, 两相互溶 ($\phi = 0$) 则为能量更高的状态, 因此该能量密度函数保证了两相不互溶.

考虑由固液边界包围的两相流体体系, 系统的 Helmholtz 自由能 F_H 可以表示为^[44]

$$F_H = \int_{\Omega} \psi d^3x + \int_{\partial\Omega} \zeta \varphi dS, \quad (15)$$

其中 Ω 为流体在空间占据的体积, $\partial\Omega$ 为固液界面在空间占据的面积, 积分第一项为体积分, 第二项为面积分. ζ 为固液界面润湿势, 它与接触角 θ_0 的关系为^[45]

$$\zeta = \frac{3}{2} \gamma \operatorname{sgn} \left(\theta_0 - \frac{\pi}{2} \right) \sqrt{\cos \left(\frac{\alpha}{3} \right) \left[1 - \cos \left(\frac{\alpha}{3} \right) \right]}, \quad (16)$$

其中 $\alpha = \arccos(\sin^2 \theta_0)$, sgn 为符号函数.

两相流体的化学势 Λ 则可以表示为 Helmholtz 自由能 F_H 对相场序参量 ϕ 的变分:

$$\Lambda = \frac{\delta F_H}{\delta \phi} = \frac{3\gamma}{\sqrt{8}l} (\varphi^3 - \varphi - l^2 \nabla^2 \varphi). \quad (17)$$

两相流体的相场随时间和空间的变化可由 Cahn-Hilliard 方程描述^[46]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = M \nabla^2 \Lambda, \quad (18)$$

其中 M 为两相界面的迁移率. 液体的宏观流速和化学势梯度共同决定了相场的动力学过程.

3.3 有限元方法

有限元方法 (finite element method) 是一种

近似数值计算方法, 常用来求解复杂的数学物理问题. 它的基本方法是将待求解区域分为若干个很小的几何单元 (离散化), 然后通过对这些单元进行数学建模, 利用计算机求解. 现今, 有限元方法被广泛应用于固体力学和流体力学工程实践的问题中. 现代计算力学 (computational mechanics) 的基础就是由有限元和计算机技术等交叉构成. 有限元法的核心内容是“离散化”与“数值近似”.

“离散化”是指, 待求解的体系原本由连续性的微分方程描述 (连续才能求导), 而在有限元思想中, 将连续体系简化为离散体系, 用空间中分布的点来代表系统每一处的状态. 对于流体力学问题, 流体的密度、流速、相场等物理量在空间中的分布, 被简化为在空间中各个点的位置上述各物理量的分布.

“数值近似”是指, 用差分来近似微分. 根据微分的基本定义, $\frac{dy}{dx} = y' = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}$, 当 Δx 足够小但尚未等于 0 时, 等号左右仍可看作近似相等. 因此, 微分方程即可近似为代数方程. 差分法可以分为中心差分 (CD)、前置差分 (FD)、后置差分 (BD) 等多种形式^[47], 例如, 对于一阶微分, 其对应的三种差分形式为

$$f'_{CD}(x_0) = \frac{f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h} + O(h^2), \quad (19a)$$

$$f'_{FD}(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + O(h^2), \quad (19b)$$

$$f'_{BD}(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + O(h^2). \quad (19c)$$

离散后, 用差分方程代替微分方程, 就可以直接进行数值求解. 常见的数值求解方法有龙格库塔法、欧拉法等. 其中龙格库塔法是一种高精度单步算法, 被广泛应用于工程上^[48].

有限元方法中的离散的点相互连接即构成有限元网格. 根据前述可知, 网格越密则计算越精确, 但同时需要的计算资源也越大. 因此, 通常采用网格局部加密的方法进行计算. 例如, 在两相流体体系中, 在两相界面附近, 由于其物理量变化剧烈, 往往需要采用更密的网格保证计算精度; 而在每相流体内部, 则可适当的减少离散点数, 提高计算效率.

当两相流体相界面发生运动变化时, 则还需要

采取动态网格技术, 即进行界面位置追踪, 从而保证网格的致密部分始终在两相界面的附近.

3.4 格子玻尔兹曼方法

近年来, 格子玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 作为一种新的计算流体力学方法被逐渐发展和广泛应用^[39,40], 例如已用于微流体、传热、多孔介质、航空、石油等多个重要工业领域的模拟计算^[41,49,50]. LBM 源自非平衡统计物理学中的玻尔兹曼输运方程, 相比于传统的求解 NS 方程, LBM 易于进行并行计算, 从而大大提高计算效率. 从数学角度出发, LBM 方法在 Chapman-Enskog 展开的形式下可回归为 NS 方程. 从物理角度出发, LBM 适用于液体在低马赫数 (低流速)、低克鲁森数 (系统尺寸远大于液体分子平均自由程) 下的情形. LBM 的不足在于较难以处理高雷诺数 (湍流)、两相液体密度差较大 (不满足伽利略不变性) 等情形. 对于电润湿显示器件, 由于其显示像素尺寸在微米至毫米尺度, 由电压控制的像素开关过程 (液体流动) 响应时间为毫秒量级, 两相液体 (油墨-水) 密度差通常小于 50%, 因此 LBM 方法适用于电润湿显示器件. LBM 的计算效率与现有有限元方法相比虽有显著提高, 但提高程度与具体应用与算法设置等因素相关^[51,52].

LBM 的核心思想为在空间中设置均匀分布的格点, 格点上流体的性质用分布函数来表示. 流体的动力学由不断的“碰撞”与“流动”过程结合而成^[53]. 如图 8 所示, 在“碰撞”部分, 每个格点上流体的运动状态由于内部液体分子的相互碰撞, 而趋向平衡状态 (如常用的碰撞模型有 BGK 碰撞^[54]); 在“流动”部分, 每个格点上流体根据设定的概率分布流向其相邻格点. 流体的宏观物理量如密度、流速等, 可以由分布函数求和或加权求和得到.

对于面向电润湿光电器件的两相流体体系, LBM 目前已有自由能模型^[46,55]、粒子间势模型^[56]、颜色梯度模型^[57,58]、稳定扩散界面模型^[59,60]等多种物理模型, 可以描述不可压缩、互不相溶、低流速下的两相流体动力学. LBM 为固液界面及其润湿性也提供了准确的物理描述, 可以实现固液界面流体的无滑移、无渗透边界条件, 并通过控制固液界面相场在垂直界面方向的梯度和不同的润湿势, 实现不同的固液润湿性^[55,59].

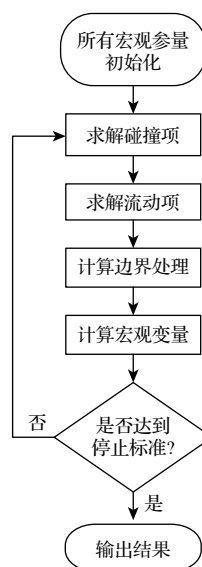


图 8 格子玻尔兹曼方法流体力学计算流程

Fig. 8. Process of lattice Boltzmann method for computational fluid mechanics.

4 微观与界面物理

在电润湿显示器件中, 固液界面扮演着重要的角色, 本章节从微观角度探讨电润湿相关的界面物理问题.

4.1 液体中的离子动力学

油水两相体系在外部电压下, 之所以会发生电润湿效应, 本质原因是油相中不存在带电离子, 而水相中带电离子在外电场作用下定向运动, 向固液界面聚集. 离子所受的电场力是润湿性改变的重要原因. 本节讨论在外电势作用下, 流体中离子运动和分布的物理问题.

流体中离子动力学由泊松-玻尔兹曼 (Poisson-Boltzmann) 方程决定. 泊松-玻尔兹曼方程描述了 Gouy L G 和 Chapman D L 分别于 1910 年和 1913 年独立提出的模型^[61]. 在 Gouy-Chapman 模型中, 带电固体与离子溶液接触, 产生一层表面电荷和反离子分布 (也叫作双电层)^[62]. 由于离子的热运动, 反离子层是一个存在一定厚度的扩散层, 而不仅仅是单层离子, 正如 Helmholtz H 在其模型中提出的那样^[61]. Stern 层模型则更进一步, 考虑了离子尺寸效应, 如表 1 所列.

Gouy-Chapman 模型解释了双电层类似电容的性质^[62]. 如图 9 所示, 正如预期的那样, 反离子在表面附近的浓度高于在本体溶液中的浓度.

表 1 流体中离子动力学物理模型概况

Table 1. Overview of modeling of ion dynamics in fluids.

理论	重要特征	前提假设
Helmholtz	表面电荷被单分子层的反离子中和; 表面电势在两层离子间线性变化	离子热运动、离子扩散、离子表面吸附、 溶剂-固体表面相互作用均忽略
Gouy-Chapman	考虑了离子热运动; 离子被假设为点电荷	离子实际尺寸被忽略; 固体表面电荷均匀分布; 非库仑相互作用被忽略
Stern	考虑了离子的有限尺寸及水合离子作用; 考虑了离子在固体表面的吸附作用(即Stern层)	Stern层厚度小于实际尺寸; Stern层流速假设为0

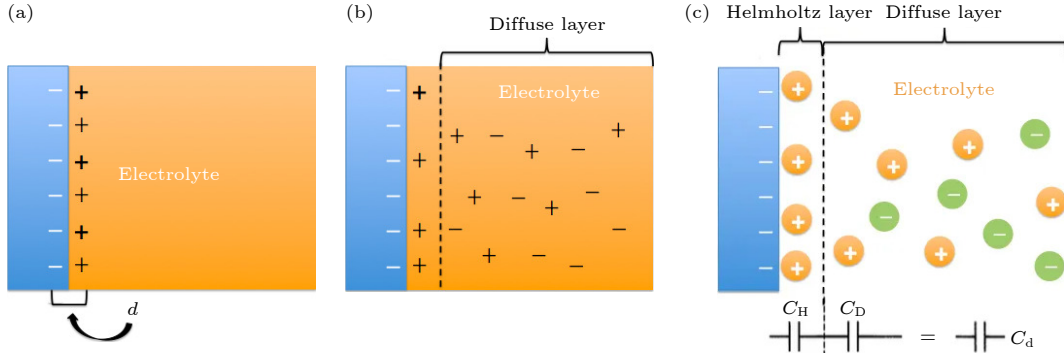


图 9 固液界面加电条件下的离子分布 (a) Helmholtz 模型; (b) Gouy-Chapman 模型; (c) Gouy-Chapman-Stern 模型

Fig. 9. Ion distribution near solid-liquid interfaces under electric stress: (a) Helmholtz model; (b) Gouy-Chapman model; (c) Gouy-Chapman-Stern model.

泊松-玻尔兹曼方程描述了界面扩散层中离子的电势分布. 在三维空间中, 电势分布符合泊松方程:

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{\sigma}{\epsilon_r \epsilon_0}, \quad (20)$$

其中 σ 为局部电荷密度; ϵ_r 为溶剂的介电常数 (相对电容率); ϵ_0 为真空电容率, ϕ 为电势. 带电离子在溶剂中的自由移动过程可由玻尔兹曼统计得到. 玻尔兹曼方程给出了局部的电荷密度 c_i :

$$c_i = c_i^0 \exp\left(-\frac{W_i}{k_B T}\right), \quad (21)$$

其中 c_i^0 是流体内部 (远离边界) 的本征离子浓度; W_i 是将一个离子从无穷远处移到界面附近所需要做的功; k_B 是玻尔兹曼常数, T 为温度.

假设, 1) 将离子从远处移到界面附近所做的功全部为电学功, 2) 液体中的阴阳离子电荷均为 ± 1 价, 3) 液体中离子浓度较低, 绝大部分分子未电离 (例如水)^[62], 在这个前提下, 将阳离子和阴离子从远处移动到界面附近电势为 ϕ 处所需要的电学做功则分别为 $W^+ = e\phi$ 和 $W^- = -e\phi$. e 为基本元电荷. (21) 式可变形为

$$c^- = c_0 \exp\left[\frac{e\phi(x, y, z)}{k_B T}\right], \quad c^+ = c_0 \exp\left[-\frac{e\phi(x, y, z)}{k_B T}\right]. \quad (22)$$

方程 (20) 中的电荷密度项即可写为

$$\sigma = e(c^+ - c^-) = ec_0 \left\{ \exp\left[-\frac{e\phi(x, y, z)}{k_B T}\right] - \exp\left[\frac{e\phi(x, y, z)}{k_B T}\right] \right\}. \quad (23)$$

将方程 (23) 与方程 (20) 联立则构成了完备的泊松-玻尔兹曼方程^[62].

4.2 固体表面的微结构效应

与理想光滑均一表面不同, 真实的固体表面可能存在表面粗糙度 (微结构) 及化学组成不均一, 这种与理想状态的偏差导致了接触角滞后的现象^[63], 定义为前进接触角 (θ_A) 和后退接触角 (θ_R) 之间的差: $H = \theta_A - \theta_R$.

当接触角介于前进角和后退角之间时, 接触线可以看作是被钉扎的, 这时可以观察到接触角滞后行为. 当接触角在前进角和后退角范围之外时, 三相接触线将发生位移, 液滴发生膨胀、收缩或位移^[64]. 前进接触角是最大稳定角, 后退接触角是最小稳定角. 真实固体表面存在许多不同的热力学稳定接触角, 这是接触角滞后的根本原因. 这种处于热力学稳定接触角的状态被称为亚稳态^[65].

相边界的运动以及前进和后退接触角的性质, 总称为动态润湿. 动态润湿和静态润湿接触角的差异正比于毛细数. 当接触线前进, 液体覆盖更多固

体表面时,接触角通常增大,并且增大的程度与接触线的速度有关^[64,66].如果接触线速度持续增大,则接触角可增大至180°,这时会发生气相被夹带在液体和固体之间的薄层中.这是一种动力学非平衡效应,由于接触线移动速度过快而无法发生完全润湿.

当固体与液体接触的表面具有粗糙的纹理时,润湿情形会偏离理想条件.固体不同的表面粗糙状态对润湿液体的接触角具有不同的影响.Cassie-Baxter 和 Wenzel 是试图描述纹理表面润湿的两个主要模型.然而,只有当液滴尺寸与表面粗糙度尺度相比足够大时,下列这些方程才适用^[67].当液滴尺寸与下方表面微结构的尺寸相当时,应考虑线张力的影响^[68].

如图 10(a) 所示, Wenzel 模型描述在粗糙表面的均质润湿情形,即液体完全浸没固体表面,这时粗糙表面的表观接触角 θ^* 与理想表面的接触角 θ 之间满足下式^[67]:

$$\cos(\theta^*) = r \cos(\theta), \quad (24)$$

其中 r 为表征粗糙度的参数,其定义为粗糙固体表面真实表面积除以表观表面积.尽管 Wenzel 模型可以描述粗糙表面的接触角与理想接触角之间的不同,它并不能描述接触角滞后效应^[69].

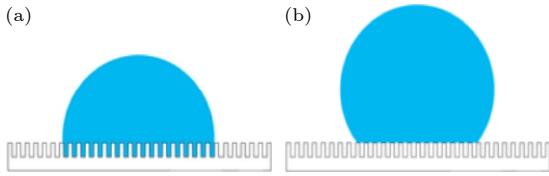


图 10 液滴在粗糙固体表面形成的不同润湿状态 (a) Wenzel 状态^[67]; (b) Cassie-Baxter 状态^[67]

Fig. 10. Different wetting states of a liquid droplet at a rough solid surface: (a) Wenzel state^[67]; (b) Cassie-Baxter state^[67].

如图 10(b) 所示, Cassie-Baxter 模型描述粗糙表面的非均质润湿情形,即液体部分与固体表面接触,粗糙表面部分存在空气.这时方程 (24) 变化为^[67]

$$\cos(\theta^*) = r_f f \cos(\theta) + f - 1, \quad (25)$$

其中 r_f 为润湿表面部分的粗糙度; f 是固体表面被液体润湿部分的比例.当 $r_f = r$ 并且 $f = 1$ 时, Cassie-Baxter 方程 (25) 即简化为 Wenzel 方程 (24).

Wenzel 和 Cassie-Baxter 状态表明,表面的粗

糙度及润湿状态可以显著地影响液滴运动模式.例如,在 Wenzel 状态下,液滴与固体表面通常会存在较高的黏附力,液体难以脱离表面;而在 Cassie-Baxter 状态下,液滴在固体表面的运动与超疏水表面相似,即液滴容易在此类表面进行快速运输.

4.3 钉扎效应

钉扎效应是指,液滴的边界在一定程度上被限制在固定位置,而不随着液滴状态变化而发生运动的现象.钉扎效应可以由几何结构或者润湿梯度导致.

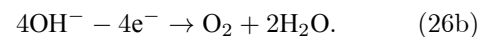
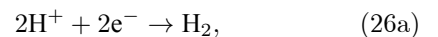
几何钉扎情形如图 11 所示,在固体表面存在一个角度为 α 的几何突变.当液滴在此表面从左向右运动时,液滴与固体表面的接触角 θ (如图 11(a)).液滴运动到固体边界的不光滑处时,液滴的右侧被“钉扎”到此处,直到局部接触角由 θ 增加至 $\theta + \alpha$ (如图 11(b)).当液滴局部接触角大于 $\theta + \alpha$ 时,液滴“去钉扎”继续向右运动(如图 11(c)).

润湿梯度钉扎情形如图 12 所示.在固体平面的表面,可以通过反应离子刻蚀等手段进行局部表面润湿性的修饰,从而制备得到不同润湿梯度的图案^[70].例如,在疏水表面制备局部亲水图案,则水滴会被限域在亲水图案内部.由于表面能的差异,水滴边界被钉扎在亲疏水润湿梯度交界处.当液滴逐渐填充时,接触角逐渐上升,表明此时液滴被限域在亲水区域.当填充液体体积继续增大,则有可能发生去钉扎效应,使得液滴突破润湿梯度的限制.

4.4 固液界面的电荷转移与电化学

电润湿显示器件通过外加电压调控液体,当电压较高时,不仅仅发生物理过程,也可能发生电化学过程,即电荷从液体中转移至电极.实验发现,电润湿过程中重要的电化学过程有电子转移和离子转移两类^[71].

如图 13 所示,对于电子转移,电极中的电子可能从阴极注入液体,与液体中的阳离子(如氢离子)结合,生成氢气;阴离子(例如氢氧根)中的电子也可能转移至电极,生成氧气;即发生类似电解水的电化学过程:



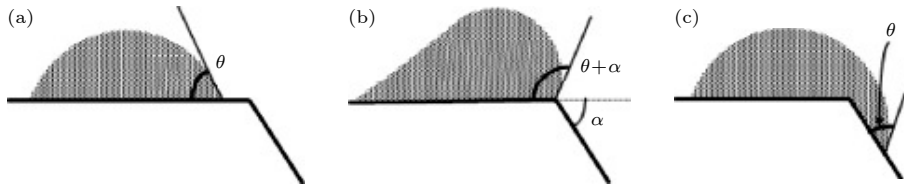


图 11 几何结构导致的钉扎/去钉扎效应示意图 (a) 接触角等于 θ ; (b) 接触角等于 $\theta + \alpha$; (c) 接触角大于 $\theta + \alpha$

Fig. 11. Pinning/depinning effect due to geometric structures: (a) Contact angle = θ ; (b) contact angle = $\theta + \alpha$; (c) contact angle $> \theta + \alpha$.

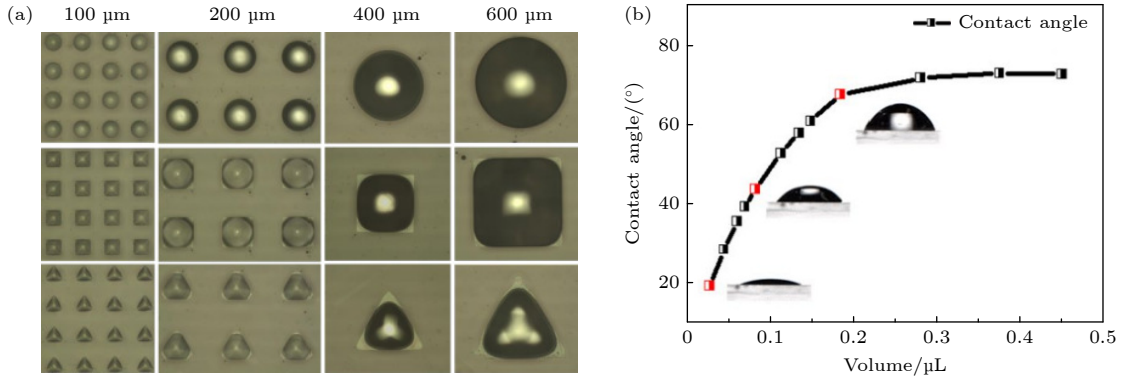


图 12 润湿梯度导致的钉扎/去钉扎效应示意图 (a) 通过表面改性方法制备的不同几何图案的润湿梯度^[70]; (b) 测量得到的润湿角与填充液体体积关系^[70]

Fig. 12. Pinning/depinning effect due to wetting gradients: (a) Wetting gradient patterns fabricated by surface treatment processes^[70]; (b) measured contact angle as a function of droplet volume^[70].

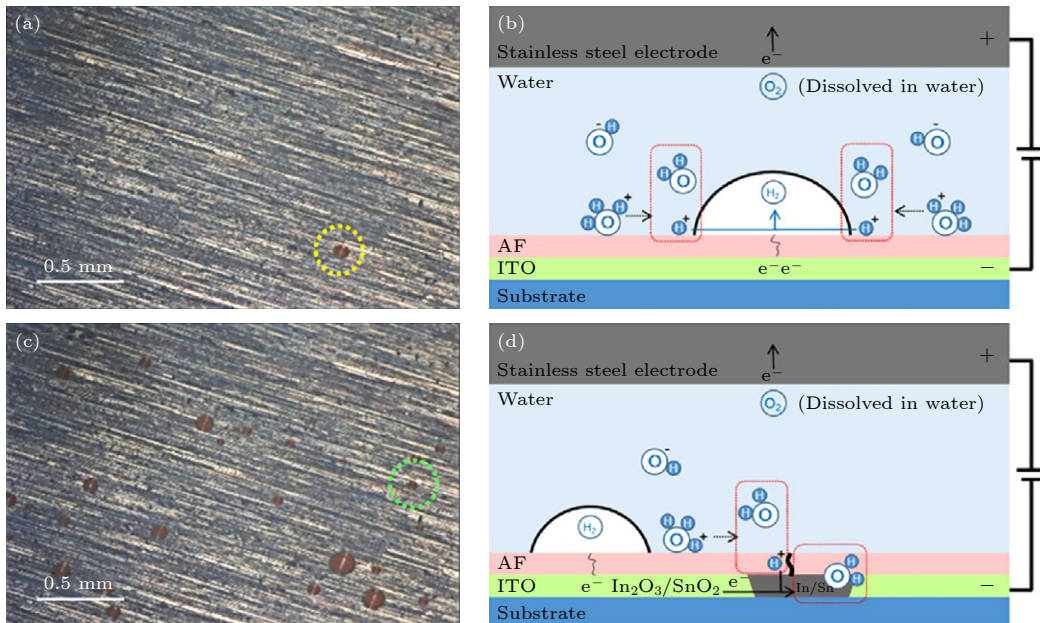
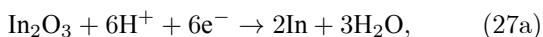


图 13 电润湿显示器件中电荷转移导致的电化学反应与器件老化机制^[71]

Fig. 13. Charge transfer induced electrochemical reactions and degradation mechanisms in electrowetting display devices^[71].

除了电子转移, 液体中的阳离子 (如氢离子) 还可能通过绝缘层的非致密 (例如孔洞) 处, 直接达到电极表面, 与电极发生氧化还原反应. 例如, 对于 ITO 电极, 可发生下列反应^[71]:



固液界面体系电化学反应产生的电流大小, 可以由 Butler-Volmer 方程计算, 该方程是描述电动力学的基本方程. 它描述了在简单的单分子氧化还原反应中, 考虑到阴极反应和阳极反应都发生

在同一电极上, 通过电极的电流密度 J 如何取决于电极和主体电解质之间的电压差^[72].

Butler-Volmer 方程为

$$J = J_0 \left\{ \exp \left[\frac{\alpha_a z F_{ad}}{RT} (E - E_{cq}) \right] - \exp \left[-\frac{\alpha_c z F_{ad}}{RT} (E - E_{cq}) \right] \right\}, \quad (28)$$

其中 J 为电极电流密度, 定义为电流强度除以电极面积; J_0 为交换电流密度; E 为电极电势; E_{cq} 为平衡电势; T 为温度; z 为参与电极化学反应的电子数; F_{ad} 为法拉第常数; R 为气体常数; α_c 为阴极电荷转移系数; α_a 为阳极电荷转移系数, $E - E_{cq}$ 为活化过电势.

5 光物理

在电润湿显示器件中, 显示色彩是其根本目的, 因此, 深入理解电润湿显示器件的光物理相关问题, 对进一步设计优化显示效果, 是不可或缺的.

5.1 油墨材料及其光学性质

电润湿显示油墨是电润湿体系中的核心材料, 它即可以充当光学灰度开关, 也可以进行色彩调控. 电润湿显示油墨是由有机染料、溶剂介质及其他添加剂组成. 溶剂介质作为有机染料载体, 其性能对油墨的流变性、润湿性、电润湿性起着决定性作用. 电润湿显示有机染料主要承担油墨色彩输出的作用, 一般采用可溶性有机染料, 也有一部分分散型颜料. 根据电润湿显示原理, 具备良好应用性能的电润湿显示染料需具备以下技术特征: 1) 吸光度高; 2) 光稳定; 3) 黏度低; 4) 极性低; 5) 纯度高. 从性能与结构的对应关系上分析, 要满足以上性能, 电润湿显示染料在分子结构上必须具有充分的脂溶性基团、高摩尔吸光系数、高光稳定性及分子对称性. 电润湿显示染料按结构类别可分为以下几类.

1) 蒽醌型电润湿显示染料^[73]. 蒽醌类电润湿显示有机染料可通过调控蒽醌环上的杂原子 (例如氧、氮) 取代位置来调节染料的颜色, 其结构通式如图 14 所示. 该显示染料的摩尔吸光系数偏低 (约 $1.5 \times 10^4 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). 因此, 蒽醌类电润湿显示有机染料只能得到品红、紫色、蓝色、青色等颜色, 缺乏浅色系列.

2) 偶氮苯环型电润湿显示染料. 偶氮苯环类有机染料具有易改性分子结构、广泛的光谱范围和高摩尔吸光系数. 通过调节重氮组分和偶合组分可以得到丰富的染料结构, 如图 15 所示.

3) 偶氮吡啶酮型电润湿显示染料^[74]. 将长链烷基取代的吡啶酮为偶合组分, 结合苯胺、氨基偶氮苯为重氮组分, 即可制备黄色电润湿显示染料, 如图 16 中结构通式 16, 17. 以对硝基苯胺为重氮组分, 经过与吡啶酮偶合、还原、重氮化、再与吡啶酮偶合, 可以制备出一系列性能优异的双偶氮双吡啶酮电润湿显示染料, 如结构通式 18. 这类染料最大吸收波长为 480 nm, 色光为橙色, 具有较高的摩尔吸光系数 ($3.6 \times 10^4 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)、溶解度 (0.87 mol/L) 及光稳定性.

4) 金属络合类电润湿显示染料. 为了设计适合于电润湿显示的染料, 研究人员通过改变二吡咯亚甲基金属络合染料中取代基结构, 引入脂溶性基团. 成功合成了一系列新型二吡咯亚甲基金属络合有机染料, 如图 17 中结构通式 19, 20. 这类染料具有高摩尔吸光系数 ($10^5 \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)、电响应速度快 (200 ms)、高溶解度 (质量分数为 5%—10%) 及低回流比 (10%) 等优点, 如结构通式 19, 20 所示.

5) 有机茈型电润湿显示染料^[75,76]. 有机茈染料的优点是具有极优异的光稳定性与良好的色彩饱和度, 但缺点是其结构具有极强的“堆叠效应”, 溶解度低. 因此要制备有机茈型电润湿显示染料, 首先要提高其在电润湿油墨介质中的溶解度. 目前已制备得到覆盖黄色、橙色、红色、品红色、青色的电润湿显示染料, 如图 18 所示.

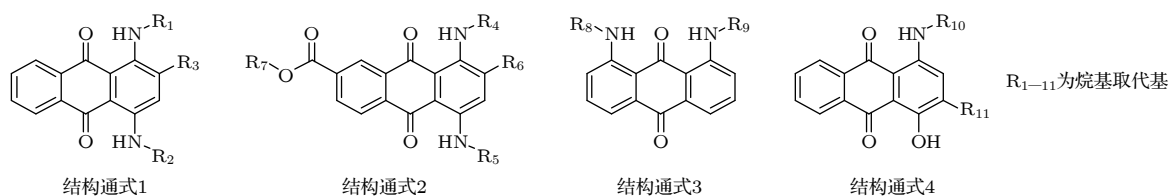


图 14 蒽醌型电润湿显示染料结构式^[73]

Fig. 14. Chemical structure of anthraquinone-type dye molecules for electrowetting display^[73].

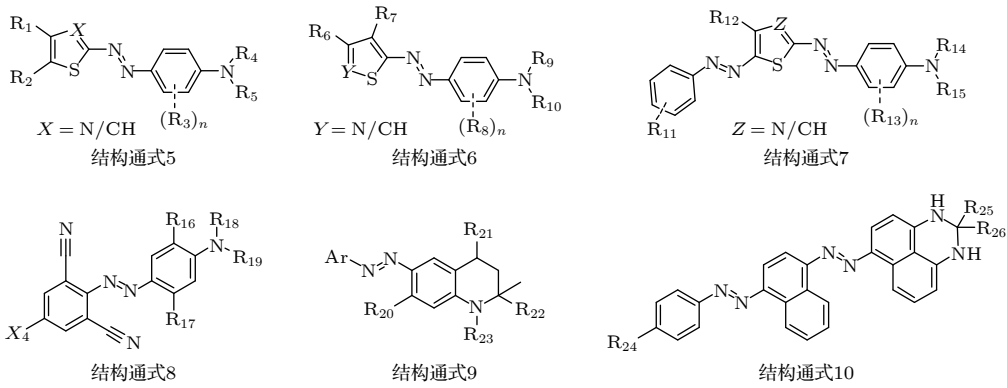


图 15 偶氮苯环型电润湿显示染料结构式

Fig. 15. Chemical structure of azobenzene-type dye molecules for electro wetting display.

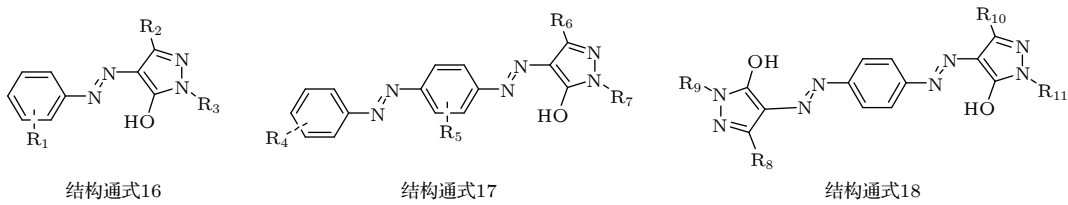
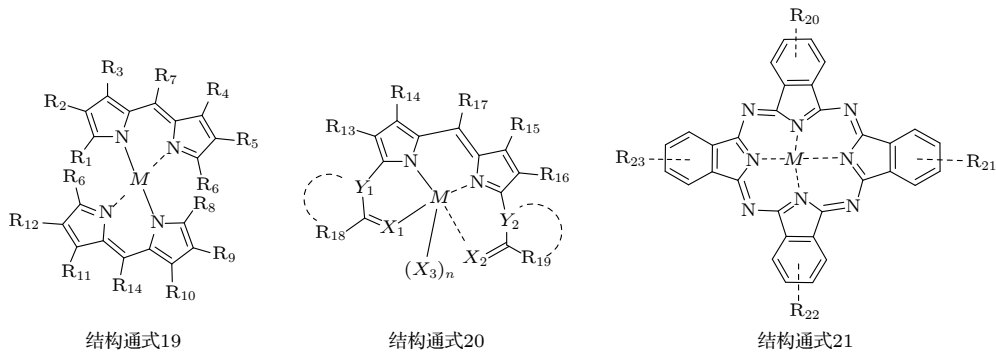


图 16 吡唑啉酮型电润湿显示染料结构式 [74]

Fig. 16. Chemical structure of pyrazolone-type dye molecules for electro wetting display [74].



R_{1-19} 为氢、烷基、芳基、杂环等取代基, R_{20-23} 为烷基, M 为金属原子, 如 Cu^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+}

图 17 金属络合类电润湿显示染料结构式

Fig. 17. Chemical structure of metal-complex-type dye molecules for electro wetting display.

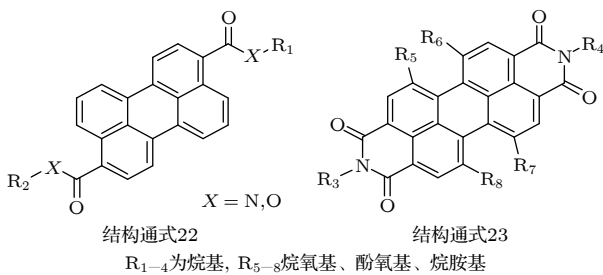


图 18 有机菲型电润湿显示染料结构式

Fig. 18. Chemical structure of organic-perylene-type dye molecules for electro wetting display.

除了上述染料, 电润湿显示器件中应用的染料分子还有对称型多发色体电润湿显示染料、颜料分

散型电润湿显示染料等 [77,78]. 图 19 为实际的多色电润湿显示油墨材料及其光谱.

5.2 电润湿显色原理

目前, 几乎所有的显示技术都采用并排排列 RGB 子像素的方式实现全彩显示, 但这种方式会导致接近 2/3 的光损失, 因此实现高亮度的全彩显示是许多显示技术的难题. 然而, 电润湿显示可以通过其独特的彩色调光模式 (基于彩色油墨的收缩与铺展) 来实现高亮度彩色显示, 因此并不依赖于 RGB 子像素并排排列这种模式, 同时具有高刷新率、低能耗和多灰阶等特点 [79]. 电润湿彩色显示可

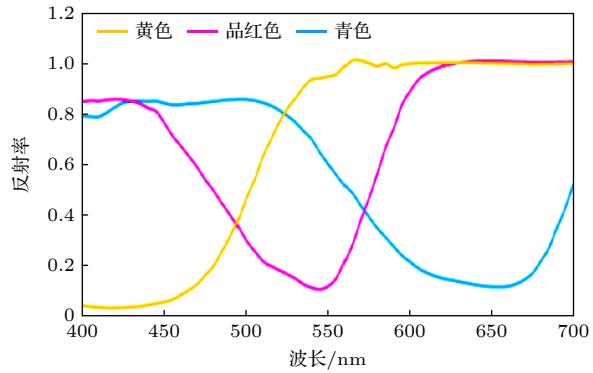


图 19 实际的各色电润湿显示油墨及其吸收光谱

Fig. 19. Practical various-color oils for electrowetting display and their absorption spectra.

以采用单层结构和多层结构两种方式来实现, 本节将对各种结构实现彩色显示的机理和特点进行简要说明.

单层的电润湿结构的每个像素只能实现对一种颜色光的透光性调制, 为了实现彩色显示, 需要在水平方向上将 RGB 三原色子像素并排排列, 通过相加混色的方式实现彩色显示. 实现三原色子像素的方式有三种, 一种是采用彩色滤光片, 此时电润湿像素只负责白光的开关, 类似 LCD 显示; 另一种方式是采用填充三原色油墨的子像素, 三个子像素分别负责一种颜色的调制; 最后一种是采用场顺序光源发出三原色的光, 通过电润湿像素控制各颜色光的透过. 本文主要介绍彩色滤光片方案.

成本最低、工艺最简单的全彩电润湿显示方法是采用 RGB 滤光片, 这种方法是现有彩色显示最通用的彩色化方式, 因此技术成熟度高, 易于实现产业化生产. 但是滤光片的光透过率只有 1/3, 因此严重限制了彩色显示器件的亮度.

彩色电润湿显示结构如图 20 所示^[80], 该方法通过控制黑色油墨来达到对可见光的吸收, 在像素单元上方会有 RGB 滤光片, 每一个滤光片子像素与一个电润湿像素相匹配, 三个电润湿像素就构成了一个显示像素. 在各子像素中由黑色油墨来控制透光率, 当油墨完全收缩时, 光线能够通过, 此时该子像素就会呈现出像素格上方滤光片的色彩, 当油墨扩散铺展时, 光线被吸收, 此时该子像素就会呈现黑色. 利用三种基色光的叠加和混合, 达到全彩色显示的目的.

上述彩色电润湿显示结构制造工艺成熟可靠, 与 LCD 的制造工艺非常相似. 该方式并不需要 LCD 中的滤光片, 当其应用在透射式显示中, 亮度会是 LCD 显示的 2 倍. 采用彩色滤光片的透射式

全彩电润湿显示屏样品如图 21 所示^[81]. 将滤光片放置在样品玻璃基板的内侧, 非常直观的看到采用彩色滤光片, 不仅可以实现全彩电润湿显示, 同时显示效果几乎不受视角限制.

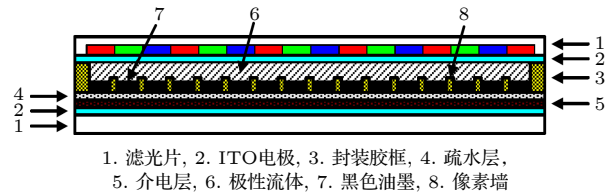


图 20 基于彩色滤光片的全彩电润湿显示结构^[80]

Fig. 20. Full-color electrowetting display device structure based on color filters^[80].

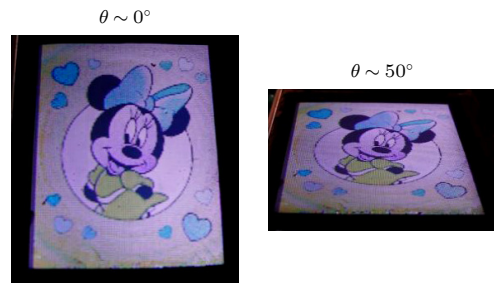


图 21 基于彩色滤光片的透射式全彩电润湿显示屏 (a) $\theta \sim 0^\circ$ ^[81]; (b) $\theta \sim 50^\circ$ ^[81]

Fig. 21. Transmissive full-color electrowetting display screens based on color filters: (a) $\theta \sim 0^\circ$ ^[81]; (b) $\theta \sim 50^\circ$ ^[81].

透射式全彩电润湿显示的色域如图 22 所示, 采用 RGB 相加混色法的显示色域为以三原色的色坐标为顶点的三角形区域. 从图 22 可以看出, 当采用普通黑色油墨 A 时, 显示屏的色域可以达到 31% NTSC, 当采用高摩尔吸光系数的黑色油墨 C 时, 显示屏的色域可以达到 104% NTSC. 由此可见采用滤光片的透射式电润湿全彩显示屏具有足够高的显示色域.

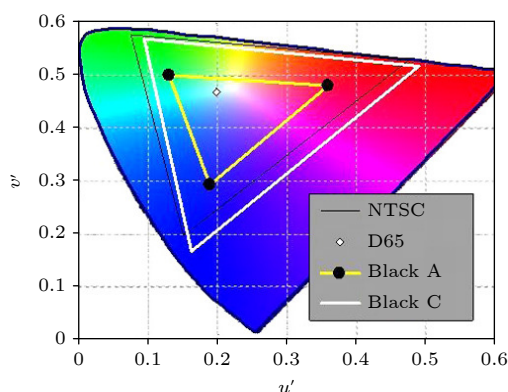


图 22 基于彩色滤光片的透射式全彩电润湿显示屏色域^[81]
Fig. 22. Color gamut of transmissive full-color electrowetting display screens based on color filters^[81].

电润湿电子纸是一种依靠环境光来实现的反射式显示, 而由于滤光片对光的吸收所造成的光能量损失是无法通过增大背光源亮度来补偿的. 除了滤光片的光透过率低 (1/3), 包括像素的开口率、各层材料的光吸收及反射板的反射率等也都会进一步造成反射率的下降, 显示的最终效果会大打折扣, 导致最终显示器件的反射率将低于 20%, 而亮度的降低同时也会影响到显示屏的色域, 使其大幅缩减.

彩色电润湿显示结构有单层和多层两种类型, 单层彩色电润湿显示是把水平方向上多个不同颜色的子像素作为一个彩色显示像素, 而多层彩色电润湿显示则是在垂直方向上将多个不同颜色的子像素作为一个彩色显示像素, 因此多层彩色电润湿显示其在平面内的任何一个像素都是可以独自实现全彩显示的, 具有较高的分辨率. 按照叠加层数, 多层彩色电润湿显示结构又可以分为两层叠加和三层叠加. 本文主要介绍三层叠加方案.

采用 RGB 三原色进行平面混色的方法为相加混色法, 而基于 C(青色), M(洋红色), Y(黄色) 三原色进行垂直混色的方法为相减混色法. 如图 23 所示, CMY 分别与 RGB 为互补色, 吸收对应互补颜色的光线, 并透射其他两种颜色的光线. 当 CMY 三原色两两叠加时, 则会同时吸收 RGB 中的两种互补光线, 显示另一种光线的颜色. 例如黄色 Y 和青色 C 叠加时, 会吸收蓝色 B 和红色 R 的光线, 此时将显示出绿色 G. 当 CMY 三种颜色叠加时, 则会吸收 RGB 所有的光线, 此时显示黑色^[79,81,82].

如图 24(a) 所示, 利用垂直叠加的方式来搭建三层电润湿可单独操纵像素开关的显示层, 任何一

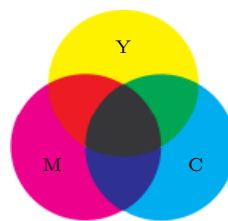


图 23 相减混色原理

Fig. 23. Principle of subtractive color mixing.

层像素都只负责调控 RGB 中的一种颜色, 其他两种色彩的传输不会受到其影响, 在三层子像素的协同作用下可在垂直方向上实现全彩显示. 这样的结构框架下呈现出 CMY, RGB 及黑白八种颜色状态时的混色方式及三层子像素的开光状态如图 24(b) 和图 24(c) 所示, 在三层像素完全扩散铺展开, RGB 光会被三层油墨全部捕获吸收, 这时呈现出来的像素颜色为黑色; 在三层油墨处于聚合缩回的状态时, 不管哪一层像素都不会有吸光能力, 此刻像素就会呈现较高的亮度并且色彩呈现为白色; 三层油墨中状态分布为两层收缩, 一层铺展时, 像素单元就会呈现出铺展层的色彩; 当三层油墨中一层收缩, 剩下的两层处于铺展状态时, 像素单元就会呈现收缩油墨层互补色. 通过操纵每一层像素油墨开口率的大小, 则可获得不同灰阶的三原色, 最终实现全彩显示^[83].

由三层叠加实现的电润湿全彩显示器原理图可以看出, 该方法具有以下突出优点: 1) 无需滤光片, 反射亮度较高; 2) 黑色状态的反射率较低; 3) 水平方向上没有子像素, 在垂直方向上混色, 有较高的分辨率; 4) 色域广, 色彩饱和度高; 5) 可以呈现的色彩数为单层灰阶数量的三次方, 能实现全彩、真彩显示.

华南师范大学于 2018 年已经制作出基于三层叠加的无源矩阵驱动的电润湿全彩电子纸样机, 如图 25(a) 所示. 从图 25(a) 可以看出, 该样机仅依赖环境光时, 可实现高亮度、高色彩饱和度的反射式显示效果, 其白色反射率达 40% 以上, 色域面积大于 50% NTSC. 该样机显示色域如图 25(b) 所示, 可以看出, 基于垂直叠加混色的显示色域为以 CMY, RGB 六原色的色坐标为顶点的六边形, 而不是以 RGB 三原色的色坐标为顶点的三角形. 通过进一步提升像素的开口率、彩色油墨的摩尔吸光系数及光谱、优化器件结构, 基于三层叠加的电润湿彩色电子纸显示屏的色域还有很大的提升空间.

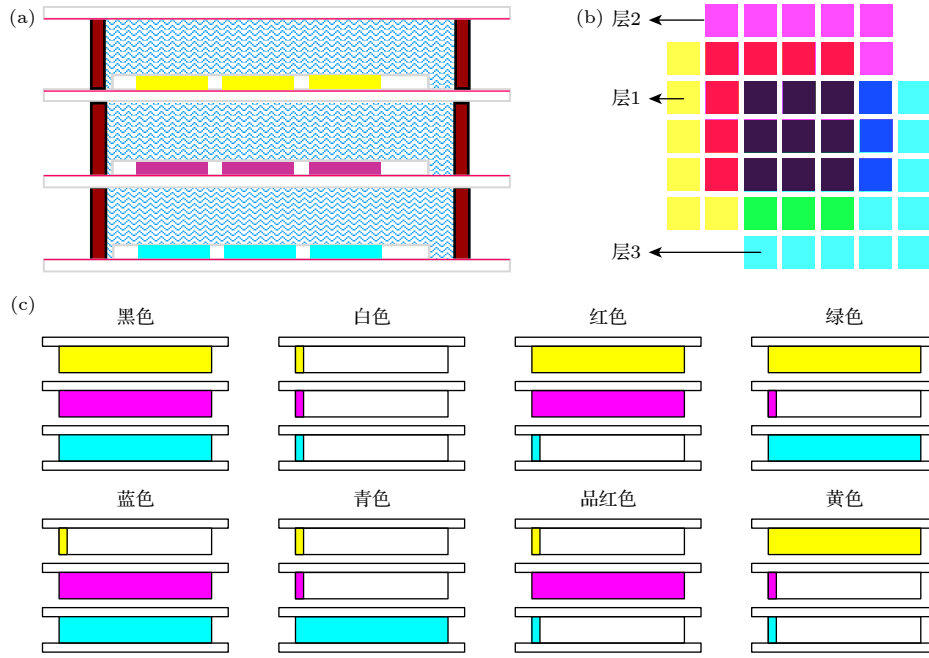


图 24 (a) 三层叠加彩色电润湿显示器结构; (b) 三层叠加彩色电润湿显示器原理图及 (c) 混色方法^[83]

Fig. 24. (a) Structures of three-layer superposed color electrowetting display; (b) principles of three-layer superposed color electrowetting display and (c) methods of color mixing^[83].

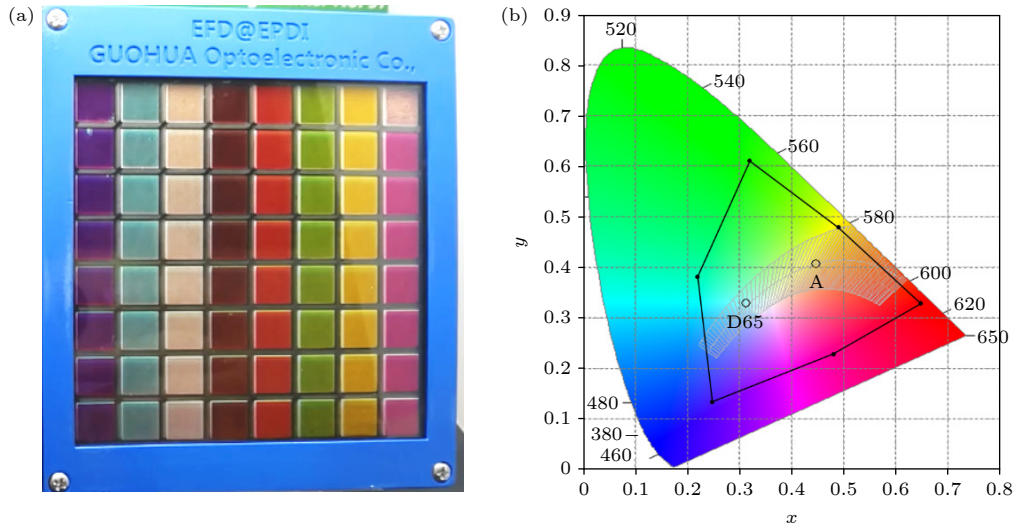


图 25 基于三层叠加的全彩电润湿显示样机 (a) 及其色域 (b)

Fig. 25. Prototype of full color electrowetting display devices (a) based on three-layer superposition and its color gamut (b).

5.3 电润湿液体透镜

利用电润湿原理将液滴置于透明衬底上, 则可以利用电润湿修饰液滴形状的特点, 实现焦距可变的液体微透镜, 如图 26 所示^[84-86].

焦距 f 与外电压 U 的关系可近似由下列公式推导得到. 假设液滴体积为 V 并符合完美球面形状, 接触角为 θ , 液滴的厚度为 h , 曲率半径为 R , 则满足下列几何关系:

$$V = \frac{\pi}{3} h^2 (3R - h), \quad \cos \theta = 1 - \frac{h}{R}. \quad (29)$$

根据造镜者公式, 假设液滴外部为空气 (折射率为 1), 液滴折射率为 n , 则焦距 f 与液滴曲率半径 R 关系为

$$f = R/(n - 1). \quad (30)$$

将 Young-Lippmann 方程 (3) 与方程 (29) 和方程 (30) 联立, 则可以得到焦距 f 与外电压 U 的关系:

$$f = \frac{1}{n-1} \left[\frac{3V}{\pi \left(1 - \cos \theta_0 - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d\gamma_{LV}} \right)^2 \left(2 + \cos \theta_0 + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_d U^2}{2d\gamma_{LV}} \right)} \right]^{1/3}. \quad (31)$$

注意本公式仅适用于液滴的厚度 h 远小于液滴曲率半径 R 的情况, 当 h 与 R 相近甚至 $h > R$ 时, 透镜则不能很好地实现聚焦功能.

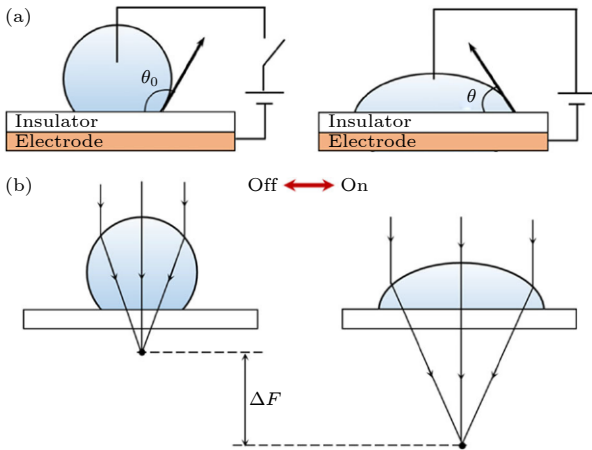


图 26 基于电润湿原理的可变焦距液体微透镜 (a) 施加电压后, 润湿性增加导致 $\theta < \theta_0$; (b) 可调焦距液体透镜的电润湿液滴^[84]

Fig. 26. Microlens with tunable focal lengths based on electrowetting: (a) After applying voltage, the increase in wettability causes $\theta < \theta_0$; (b) an electrowetting-actuated liquid droplet as a tunable-focus liquid lens^[84].

6 电介质物理

6.1 电介质与电极化

介电材料是一类高电阻率、在外电场作用下不导电但可以产生电极化的物质. 介电润湿 (electrowetting-on-dielectric) 通过在电润湿中引入介电层, 在电极-介电材料-(多相) 流体的体系中, 在电极一侧施加电压, 通过介电材料的电极化作用, 可以对介电材料另一侧的极性/非极性流体实现选择性润湿控制作用. 在电润湿应用中, 常用的介电材料 (通常也叫作疏水绝缘材料) 如表 2 所列.

电润湿显示开关过程的油墨动态变化, 可以通过测量电容的变化来进行表征. 如图 27 所示, 未加电压时, 油墨层完全覆盖于疏水绝缘层表面, 假设此时油墨厚度为 d_o , 疏水绝缘层的厚度为 d_d , 油墨与疏水绝缘层的介电常数分别为 ε_o 和 ε_d , 则此时体系可看作由油墨和疏水绝缘层构成的双电容

串联, 单位面积总电容为: $\frac{1}{C} = \frac{d_o}{\varepsilon_o} + \frac{d_d}{\varepsilon_d}$. 而当施加电压油墨破裂收缩时, 假设开口率 (未被油墨覆盖的表面面积除以总面积) 为 η , 则此时单位面积的总电容可以近似估计为

$$C = (1 - \eta) \left(\frac{d_o}{\varepsilon_o} + \frac{d_d}{\varepsilon_d} \right)^{-1} + \frac{\eta \varepsilon_d}{d_d}. \quad (32)$$

(32) 式表示电润湿显示器件的电容随着电压增加和油墨收缩而增加. 在理想情形开口率为 100% 时, 总电容即为介电层电容.

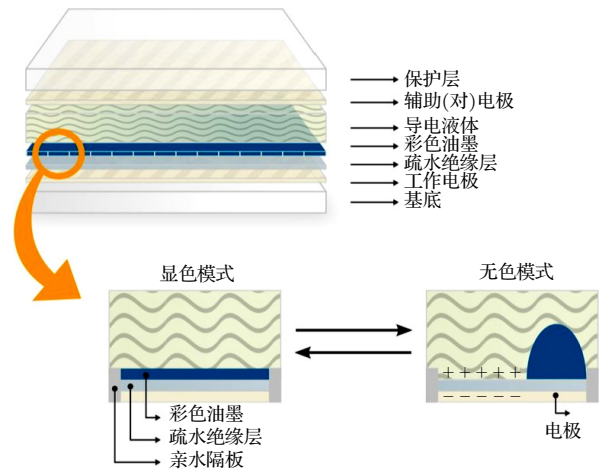


图 27 电润湿显示器件开关过程中导致的电容变化^[90]

Fig. 27. Capacitance change during the switching of electrowetting display devices^[90].

6.2 电介质中的缺陷与漏电流

理想的电介质不存在直流电流, 然而实际的电介质内部可能存在孔洞或者缺陷, 导致形成漏电流. 在 4.4 节中, 讨论了固液界面的电荷转移与电化学反应. 然而在固液界面发生的电荷转移, 电荷最终要流入介电层另一侧的电极, 或者由介电层另一侧的电极所提供. 因此, 电荷如何穿过介电层, 其物理机制有以下几类.

1) 由于疏水绝缘层的非致密特性, 表面存在孔洞, 从而导致液体中的氢离子穿过孔洞直接到达电极表面, 与电极发生氧化还原反应, 形成法拉第电流. 该机制已在 4.4 节进行介绍.

表 2 电润湿显示器件常用介电绝缘材料及其性能概况^[87–89]

Table 2. Overview of common dielectric materials and their properties used in electrowetting display devices^[87–89].

聚合物绝缘材料						
介电材料	Parylene -C/N	Teflon @AF 1600	Teflon PTFE	Cytop™	PDMS	聚氨酯
介电强度/(kV·mm ⁻¹)	268/276	21	60	110	21.2	22
介电常数	2.65/3.15	1.93	2.1	2.1	2.3–2.8	3.4
击穿电压/V	±240(DC) <1 k(AC 50–20 kHz)	—	<300(DC) <600 k(AC 1 kHz)	<120(DC) <800(AC 2 kHz)	±500(DC)	<400 (DC)
厚度/μm	3.5–30.0	0.01–0.10	25–50	0.1–1.0	38	6–35
接触角/(°)	126	120	114	110	120	50–80
加工工艺	气相沉积	旋涂/浸涂	成泡膜材料	旋涂	旋涂	旋涂
无机绝缘材料						
介电材料	二氧化硅	氮化硅	BST			
介电强度/(kV·mm ⁻¹)	400–600	500	18–54			
介电常数	3.9	7.5	225–265			
击穿电压/V	V _{DC} ≥25	>40	V _{DC} ≥15			
厚度/μm	0.1–1.0	0.15	0.07			
接触角/(°)	46.7	30	40.8			
加工工艺	PECVD	气相沉积	MOCVD			

2) 电子可能采取量子隧穿的方式通过介电层。根据量子力学, 量子隧穿的概率与介电层厚度为近似指数衰减的关系, 考虑到电润湿显示器件中介电层的厚度一般为百纳米尺度, 因此电子直接隧穿通过介电层的概率非常小, 电子主要通过多步短程缺陷辅助隧穿机制通过介电层, 形成漏电流^[91–93]。具体的隧穿机制如图 28 所示。

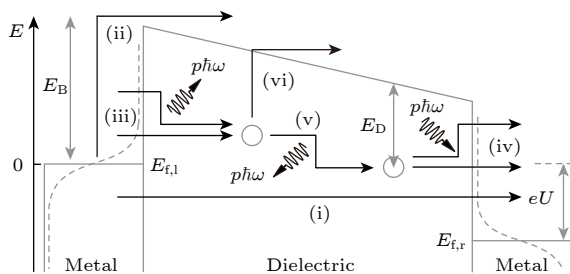


图 28 介电材料漏电微观物理机制^[92]

Fig. 28. Microscopic physical mechanism of leakage current through dielectric materials^[92].

为计算缺陷辅助隧穿电流, 则需要得到电子从电极到缺陷的跃迁速率, 以及电子在缺陷之间的跃迁速率。电子的跃迁过程分为非弹性与弹性跃迁两种机制, 其中弹性跃迁中电子初末态能量相同, 非弹性跃迁中电子初末态能量不同。非弹性跃迁过程能量变化导致电子释放或吸收声子。弹性跃迁速率、非弹性跃迁速率的计算, 需要结合声子能量、

电子费米狄拉克统计分布、金属电极内部的能量态密度、参与单次电子跃迁的声子数量、电子-声子耦合强度、介电层电压、缺陷态在介电材料带隙中的位置、介电层厚度、缺陷态的位置等参数计算, 并且考虑缺陷态在三维空间的分布和静电学泊松方程计算得到漏电流^[93]。

6.3 电介质的老化物理

通过热加速老化实验, 可以研究电润湿显示体系中水/含氟聚合物介电层/ITO 电极的稳定性和失效模式^[94]。实验发现, 含氟聚合物介电层和 ITO 电极在高温、高电压作用下, 均会发生老化失效, 如图 29 所示。其中 ITO 电极的老化失效由电化学因素决定, 在 4.4 节中已经进行讨论。

介电层老化失效的物理机制存在多种可能性^[95], 例如有热化学模型、阳极空穴注入模型、幂律电压模型、指数模型等。这些模型都可以解释实验中可观测的部分趋势, 例如介电失效所需的时间与温度、电场的相关性等。介电薄膜寿命的定义为介电薄膜可以在持续的外加恒定电压下不失去绝缘特性的时间。然而, 这些模型要么是经验模型, 要么是基于过于简化的物理描述, 这些物理描述不能正确地描述微观化学键断裂过程的复杂性, 例如化学键断裂过程可能会受到电荷载流子、相邻缺陷的局部影响。

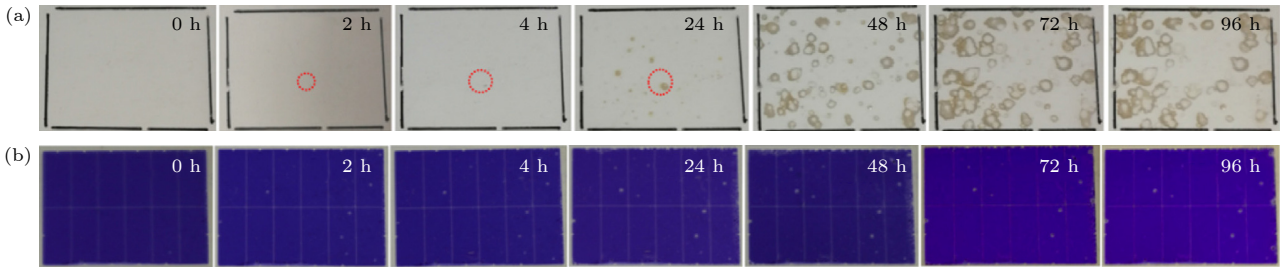


图 29 电润湿显示器件在热加速老化实验下的失效过程^[94]

Fig. 29. Failure process of electrowetting display devices under thermal accelerated aging experiments^[94].

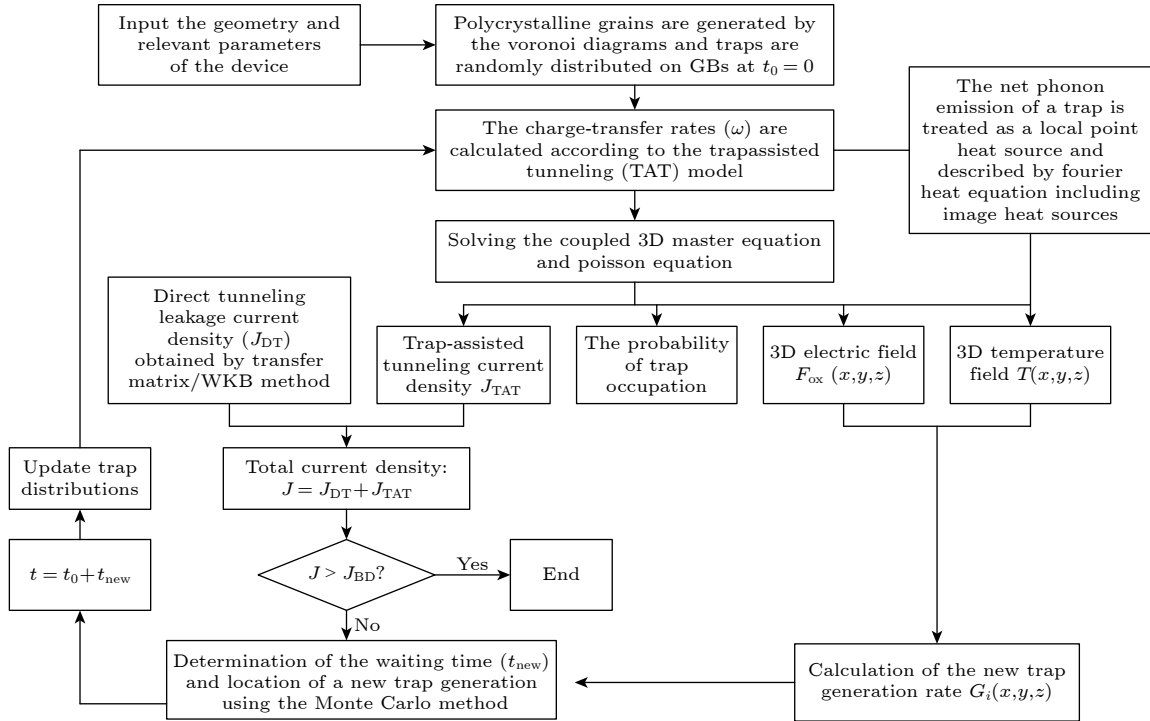


图 30 多晶介电薄膜老化失效的物理模型及计算流程图^[96]

Fig. 30. Flow diagram and physical modeling of dielectric breakdown for polycrystalline thin films^[96].

近期, 本研究组建立了多晶介电薄膜经时击穿 (TDDB) 过程的三维机理模型^[96]. 该模型基于电子的多声子缺陷辅助隧穿理论, 考虑了介电层晶粒边界处缺陷位置与能量的离散性, 通过求解描述隧穿电荷动力学的三维主方程和泊松方程, 得到穿过介电层的漏电流密度. 同时将每个电荷捕获和发射的净声子作为局部点热源处理, 将局部产热功率导入傅里叶热流方程进行三维温度分布计算. 新的缺陷态位置由局部温度和电场确定其概率并由蒙特卡罗算法生成, 随后将其纳入下一轮的电热耦合性质计算. 该计算过程形成正反馈回路, 逐渐导致陷阱密度、温度和漏电流密度的增加, 最终导致介电击穿. 结合实际材料参数, 该模型能较好地近似再现出不同介电层厚度、电压和温度下的实验漏电

流密度-电压特性曲线和击穿时间的威布尔分布, 如图 30 所示.

基于该模型研究发现, 在实际器件中, 当介电层接近击穿时, 电子在三维缺陷之间的传输过程对漏电流的贡献不可忽略. 同时, 该模型的一大特色是识别与每个缺陷相关的漏电流, 通过对比 TDDB 过程中各个部分缺陷对漏电流的贡献发现, 在 TDDB 的早期阶段, 电流的增加主要是由于缺陷浓度的增加; 在接近击穿的 TDDB 的后期, 增加的电流是同时由于缺陷浓度的增加和电子在缺陷与缺陷之间跳跃速率的上升造成的电流增加. 该模型使用三维主方程方法计算效率高, 可以实现在标准台式机上轻松完成 10^3 个缺陷的演化计算, 并为介电层的可靠性优化提供了新的设计准则.

6.4 介电泳效应

介电泳 (dielectrophoresis, DEP) 是与电润湿有一定相似性, 但又有显著不同的另一类物理效应. 介电泳与电润湿均为外加电压/电场对流体流的调控. 但电润湿操控的是导电液体, 介电泳操控的是介电液体 (例如电润湿显示中的油墨材料). 与电润湿对导电液体中的离子施加电场力不同, 介电泳的原理则是针对介电材料中的电极化效应进行流体的操控 [97,98].

介电泳是有质运动效应的一个例子, 其基础是非均匀电场施加在电偶极子上的力. 液体介电泳的现象可以简单地描述为: 非均匀电场中的介电液体倾向于聚集在高电场强度的区域 (图 31(a)); 这种相同的力将这种液体中的气体或蒸汽泡从强场中排斥出来 (图 31(b)). 因为液体是可变形的, 所以液体也会受到不均匀电场的影响. 一旦液体被吸入强场区域, 液体物质往往呈现出其自由表面大致与电场线相平行的形状 (图 31(c)).

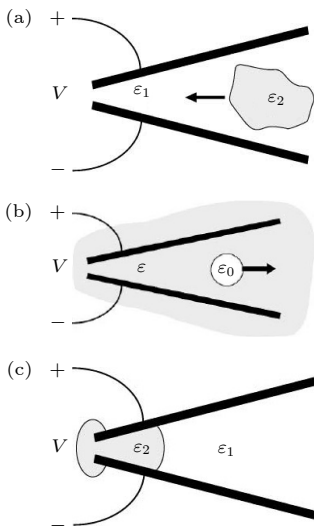


图 31 液体介电泳现象 (a) 介电液体朝向更强电场的方向运动 [97]; (b) 介电液体中的气泡远离强电场方向运动 [97]; (c) 液体的自由界面趋向与电场线平行 [97]

Fig. 31. Liquid DEP phenomenology: (a) Dielectric liquid drawn into a strong electric field [97]; (b) bubble repelled from a strong electric field [97]; (c) controlled liquid profile with surface parallel to the applied electric field [97].

液体介电泳与离子拖曳效应、电对流 (electroconvection)、电渗流 (electro-osmosis) 和其他电流体动力学 (electrohydrodynamics) 现象的不同之处在于, 它实际上不是一种泵送机制. 相反, 它以类似于毛细现象的方式影响流体静力平衡.

如图 32 所示, 在两平行共面电极之间的介电液体在介电泳力与重力相互作用下达到平衡, 其上升高度为: $h_{DEP} \approx \frac{(\epsilon - \epsilon_0) E^2}{2\rho g}$. 其中 ϵ 为介电液体的介电常数, ϵ_0 为真空介电常数, E 为电场, ρ 为介电液体的密度, g 为重力加速度. 这个结论与毛细管中液体由于毛细力与重力相互作用导致的上升 ($h_{CAP} \approx \frac{2\gamma}{\rho g r_c}$, γ 为表面张力, r_c 为毛细管半径) 具有相似性.

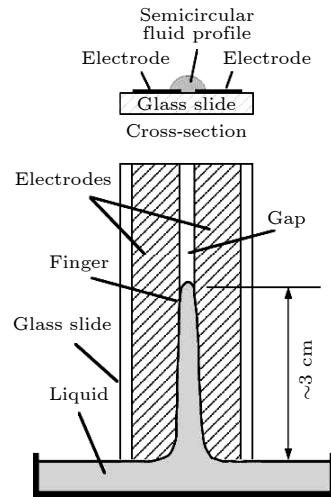


图 32 液体介电泳实验操控微流体向上运动, 直至介电泳力与重力相平衡. 图中介电性的油性液体在两个平行共面电极之间的缝隙中上升, 并且截面为与电场线相平行的半圆形状 [97]

Fig. 32. Liquid DEP experiments with micro liquid moving upwards until DEP is balanced by gravity. Dielectric oil moves upwards within the slit between two parallel coplanar electrodes, with the cross section of the liquid in a semi-circle shape parallel to electric fields [97].

7 热物理

电润湿显示器件在实际应用过程中, 会处于不同环境温度情形下, 例如, 季节变化、阳光直射等因素, 均会影响器件内部的温度. 另一方面, 在高频电压驱动、长时间工作条件下, 尽管电润湿静态功耗很低, 但也有可能有一部分电能转化为热能. 因此, 本节对电润湿显示器件相关的热物理进行简要介绍.

7.1 流体中的热传导与热对流

所谓热传导, 就是指研究对象内部存在温度差或是两个物体直接接触, 但没有相对运动, 热量传递只靠物体内部的微粒热运动. 热对流是指不同温

度的各部分之间在接触时发生相对位移进而导致的热量传递过程. 在流体中, 热传导和热对流同时存在. 在流体内部存在温度梯度, 流体发生自然对流时, 流体内部热传导和热对流的相对强弱, 可以通过瑞利 (Rayleigh) 数 $Ra = \frac{g\beta(T_{\text{wall}} - T_{\infty})L^3}{\nu\alpha}$ 来表征. 其中 g 为重力加速度, β 为流体的热膨胀系数, T_{wall} 为流体边界壁面温度, T_{∞} 为流体内部温度, L 为流体在竖直方向的尺度, α 为流体热扩散系数, ν 为流体的运动黏度.

如图 33 所示 [99], 在方形封闭空间内的流体, 左侧壁面为恒定高温, 右侧壁面为恒定低温, 上下壁面均为绝热壁面. 当瑞利数较低时 (图 33(a)), 流体内部的热量传递以热传导为主, 等温线近似平行于左右壁面. 当瑞利数增大时 (图 33(b)), 左侧流体被加热后密度略微下降, 因此向上运动; 左下侧因为流体减少, 右下侧的流体向左流动进行补充. 从而使得流体形成顺时针方向的流动闭环, 如图 34 所示. 流体的流动带动热量传输, 形成热对流, 导致上层流体更多被高温区占据, 下层流体更多被低温区占据. 当瑞利数进一步增大时, 热对流效应超过热扩散效应, 使得等温线逐渐由竖直变为水平 (图 33(c) 和图 33(d)), 并且流线从单一涡旋演化为双涡旋.

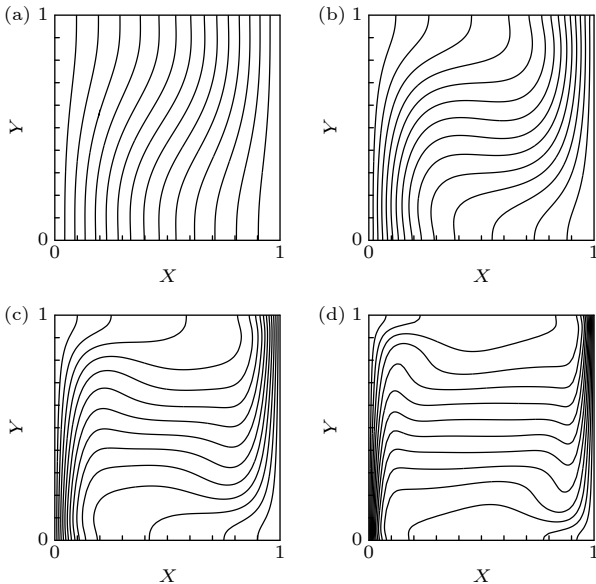


图 33 流体内部在自然对流情形下不同瑞利数 Ra 对应的等温线分布 (a) $Ra = 10^3$ [99]; (b) $Ra = 10^4$ [99]; (c) $Ra = 10^5$ [99]; (d) $Ra = 10^6$ [99]

Fig. 33. Isotherms for a fluid under natural convection, with different Rayleigh numbers: (a) $Ra = 10^3$ [99]; (b) $Ra = 10^4$ [99]; (c) $Ra = 10^5$ [99]; (d) $Ra = 10^6$ [99].

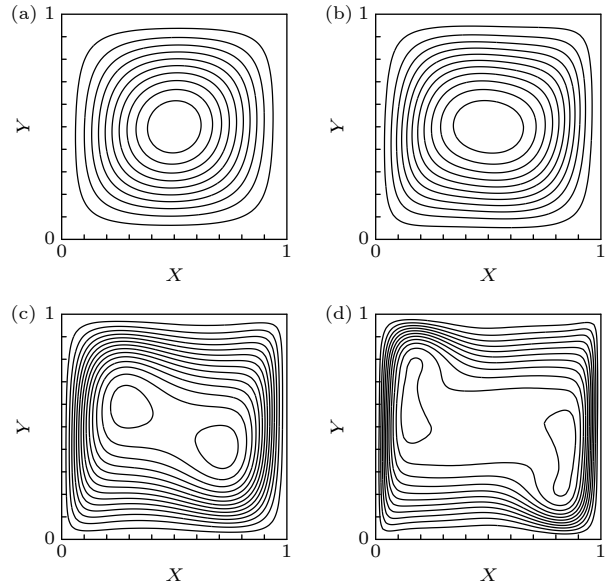


图 34 流体内部在自然对流情形下不同瑞利数对应的流线分布, 分别对应图 33 中的四种情况 (a) $Ra = 10^3$ [99]; (b) $Ra = 10^4$ [99]; (c) $Ra = 10^5$ [99]; (d) $Ra = 10^6$ [99]

Fig. 34. Streamlines for a fluid under natural convection, for the four cases in Fig. 33: (a) $Ra = 10^3$ [99]; (b) $Ra = 10^4$ [99]; (c) $Ra = 10^5$ [99]; (d) $Ra = 10^6$ [99].

7.2 电润湿与气液相变

近期美国休斯敦大学的 Liu 研究组 [20] 展示了电润湿效应可以调控气液相变. 在这项工作中, 该团队提出了一种主动沸腾增强的替代方法, 该方法利用电润湿以可逆且稳健的方式快速调节表面润湿性. 通过这种方法, 固有的疏水沸腾表面可以在中低程度的热通量下工作, 自发形成核沸腾起始点 (onset of nucleate boiling, ONB), 并且可以获得优异的沸腾传热系数. 在高热通量情形下气泡聚集, 可以通过激活电润湿效应, 使得表面在几分之一秒内变为亲水性表面, 从而使得表面可重新发生液体润湿, 以延迟临界热流. 此外, 该研究中使用了交流驱动电润湿, 在液-气界面激发时谐形状振荡 [100], 这可以用来产生有利的气泡动力学并诱导界面不稳定性, 从而抑制膜沸腾的发生. 为了研究交流电润湿增强池沸腾传热, 该论文分别在疏水表面 (作为基准) 和交流电润湿增强表面上, 在广泛的沸腾条件下 (核沸腾起始、完全发展的核沸腾到临界热流下的膜沸腾) 进行了实验, 如图 35 所示. 并且利用同步高速光学成像和红外热成像方法, 同时得到了沸腾表面上的气泡动力学和时空分辨的壁温和热通量分布.

该工作表明, 交流电润湿效应可以有效地增强

池沸腾传热. 交流电润湿对气泡动力学的关键影响包括: 1) 它限制了三相接触线在沸腾表面上的扩展, 2) 它刺激了液-气界面的界面振荡, 随后在气泡附近的液体中诱导了强烈的流动. 因此, 交流电润湿通过触发池沸腾起始处的早期气泡脱附来加速沸腾循环, 并在完全发展的核沸腾中抑制气泡聚结. 此外, 交流电润湿能够在临界热流条件下使蒸汽膜不稳定, 并使膜沸腾恢复为成核沸腾. 实验观察到在从池沸腾起始到临界热流的整个沸腾条件

范围内, 交流电润湿增强的池沸腾优于在基准疏水表面上的池沸腾. 具体实验数据表明临界热流提高了 85%, 最大沸腾传热系数提高了 41%.

7.3 温度梯度液滴输运

随着温度的上升, 一般表面张力会下降. 利用这个原理, 液滴在温度梯度的环境下, 不同位置的表面张力产生不平衡, 可以使得液滴朝某一个方向定向运动. 如图 36 所示, 液滴的运动根据表面润湿性呈现两种不同的状态: 液滴向亲水表面上的较冷区域迁移, 但在疏水表面上反转. 这是因为, 亲水表面液滴两侧的表面张力为“拉力”, 疏水表面液滴两侧的表面张力为“推力”. 降低内外两相的黏度比, 可以使热毛细作用形成的漩涡强度加大, 进而导致液滴的迁移速度增加. 在此过程中发现接触角滞后 (前进接触角和后退接触角之差大于零) 现象, 与两相的黏度比和接触角等都无关. 随着接触角的增加, 液滴输运速度和接触角迟滞会先降低, 再增加, 最小值出现在接触角 90°时. 利用电润湿改变接触角的特点, 则有可能改变液滴输运的方向, 实现热电耦合液滴输运操控.

8 瞬态物理与驱动波形调控

8.1 电润湿的瞬态电学响应

电润湿显示器件应用中, 施加电压后油墨液体薄膜破裂收缩的瞬态特性, 对于快速动态的显示效果是至关重要的 [101]. 在施加电势的情况下, 导电液体 (例如水) 内部表面电荷在 (油水) 界面累积, 这导致油膜上存在静电压力. 只要电位足够高, 就会在油膜中形成波动, 该波动将随着时间的推移而增长, 直到油膜破裂. 对抗油膜上静电拉力的是毛细恢复力 [102]. 在一个非限制系统中, 这种波动的波长是由电毛细波频谱的最快增长 (非稳) 模式描述的. 由于液膜中的摩擦, 与小波长相比, 大波长需要更长的时间才能形成, 而对于较短的波长, 毛细恢复力阻碍了静电驱动力的有效性. 在不受约束的液膜中, 可以发现油墨破裂取决于膜厚度和施加电压的连续波谱. 在电润湿显示应用常见的方形和矩形区域情形中, 由于油墨液面弯月面钉扎到像素壁, 可以预见油墨非稳模式中的典型波长将被离散化. 这使我们能够定义不同模式之间的转换电压, 并导致阈值电压的存在, 即油墨破裂所需的最低电压, 低于该阈值电压, 薄膜保持稳定, 如图 37 所示.

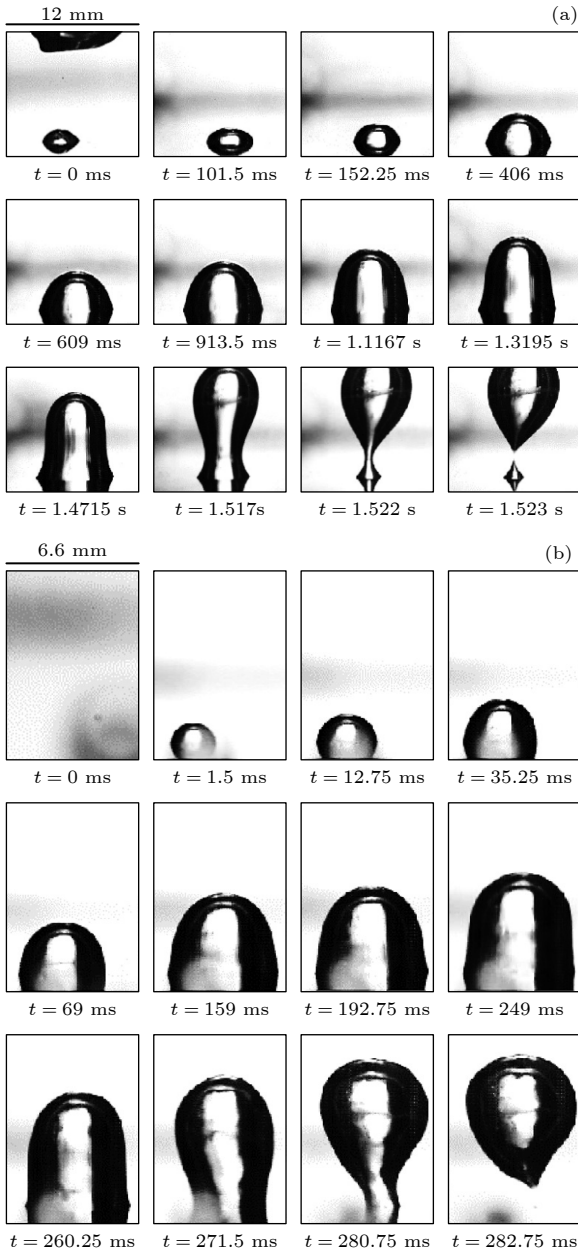


图 35 电润湿效应对临界沸腾液体中气泡生长速度的增强实验结果 (a) 未加电情况 [20]; (b) 施加交流电润湿情况 [20]
Fig. 35. Effects of electrowetting on bubble ebullition at onset of nucleate boiling: (a) Without electrowetting [20]; (b) with AC electrowetting [20].

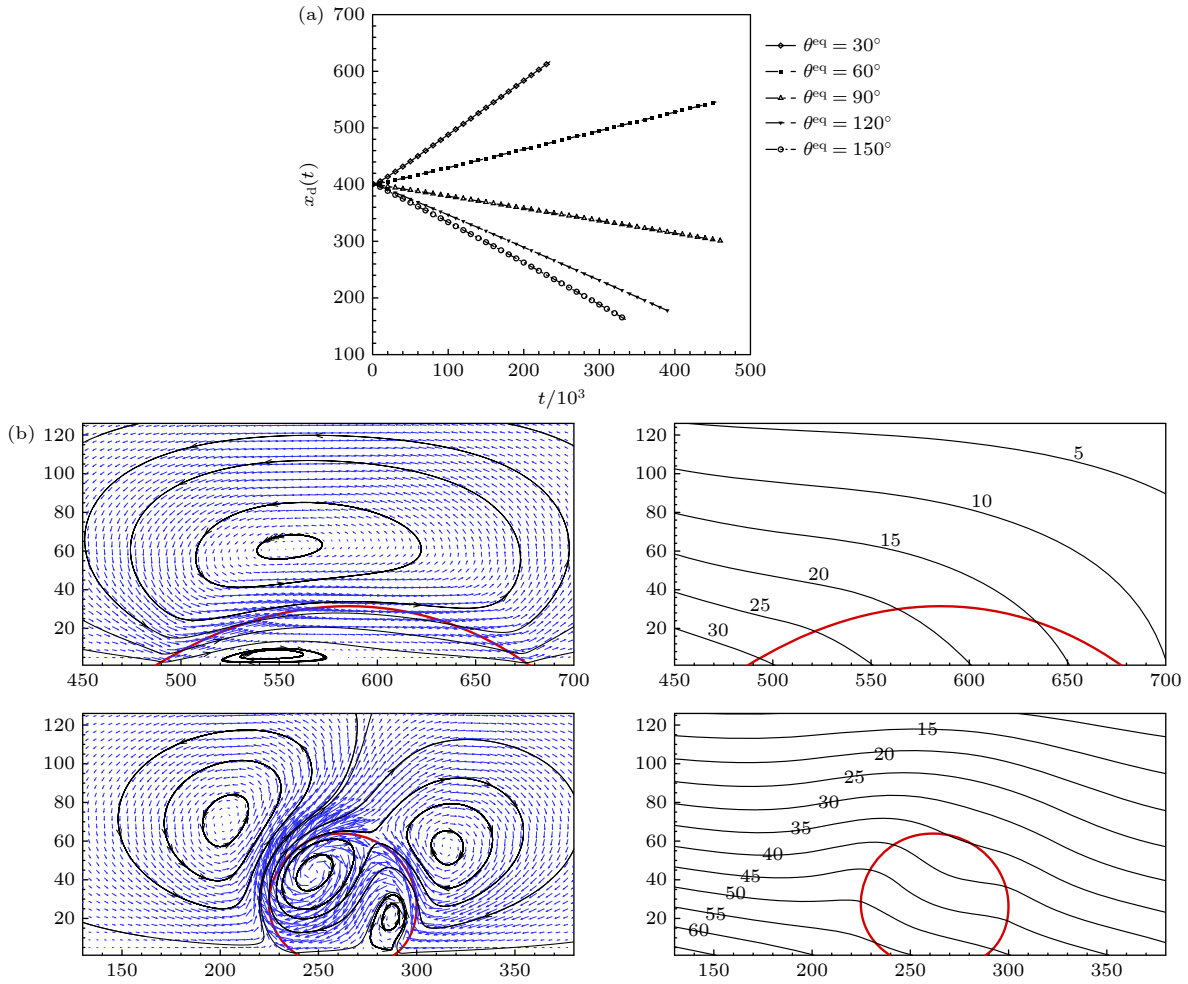


图 36 温度梯度导致的液滴输运在亲疏水情形下表现出相反的运动方向 (a) 液滴中心位置与时间的关系^[57]; (b) 亲疏水情况下的流场、温度场的分布^[57]

Fig. 36. Droplet transport driven by temperature gradient, with opposite directions for hydrophilic and hydrophobic surfaces: (a) Droplet centroid position as a function of time^[57]; (b) streamlines and isotherms for hydrophilic and hydrophobic cases^[57].

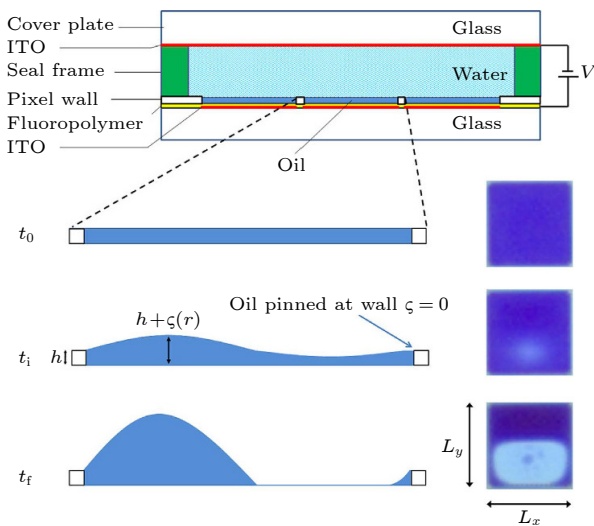


图 37 电润湿显示器件中油墨破裂的瞬态过程^[101]

Fig. 37. Transient behavior of oil rupture in electrowetting display devices^[101].

油墨破裂的物理模型可由下列公式推导得出。假设油墨的厚度在平衡厚度 h 的基础上有一个小的偏离 ζ : 即 $h(r, t) = h + \zeta(r, t)$, 则油墨上的压强可写为

$$P(x, y, t) = \left[\gamma \nabla^2 + \frac{1}{2} C''(h) U^2 \right] \zeta(x, y, t) + P_0, \quad (33)$$

其中 $C(h)$ 是油墨的电容 (与厚度 h 有关); γ 是油水界面表面张力; U 是外加电压. 等号右侧第一项是毛细管恢复压力, 而第二项是倾向于使膜不稳定的压力的静电分量. 油膜电容的二阶导数衡量了由于油膜高度的微小变化而调制静电压力的方式^[103]. 方程 (33) 在液体被钉扎的矩形区域中是有效的. 在矩形区域外, 参考压力为零. 在该区域中发生的压力跳跃 P_0 是为了确保体积守恒^[104].

如果液滴弯月面形状变化的压力已知, 则流体流动由薄液膜斯托克斯方程的润滑近似控制^[103]:

$$\frac{\partial h(r, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\frac{h^3}{3\eta} \nabla P \right), \quad (34)$$

其中 η 为动力黏度. 在矩形限域空间中的波动模式为

$$\varsigma_{mn}(x, y) = \varsigma_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right), \quad (35)$$

其中 m, n 为正整数. 这些模式满足钉扎边界条件. 然而, m 和 n 均为奇数的模式不满足体积守恒, 因此在这些情况下, 考虑纯模式是不合理的, 这一缺点可以通过调用压力跳变 P_0 来解决. 薄膜演化方程可以用于导出每个模式的初始扰动的时间演化. 模式的特征在于波数 k_{mn} 必须与像素尺寸兼容:

$$k_{mn}^2 = \pi^2 (m^2/L_x^2 + n^2/L_y^2). \quad (36)$$

油墨表面波动振幅由指数增长 (或收缩) 控制, 速率如下:

$$\tau_{mn}^{-1} = \frac{h^3 \gamma}{3\eta} k_{mn}^2 [k^2(V) - k_{mn}^2]. \quad (37)$$

静电驱动力也可以写成波数:

$$k^2(V) = V^2 C''(h)/(2\gamma). \quad (38)$$

在方程 (37) 和方程 (38) 中插入实际系统的典型参数值, 可以得到油墨瞬态动力学为毫秒的时间尺度. 研究发现, 油膜的高度几乎不会影响其高度变化速率, 因为流体动力学的摩擦随油膜高度的立方成比例, 而驱动力 $C''(h) \sim h^{-3}$, 从而导致恒定的油墨高度变化速率. 然而, 我们确实发现油墨高度变化速率与所施加的电压有很强的依赖性. 这两个结果均在实验中得到定量证实.

8.2 电润湿的驱动波形调控

电润湿显示光电响应曲线的位置和形状直接取决于较多的几何和材料参数, 称其为像素参数. 如图 38 所示. 驱动电压与这些像素参数之间的关系由以下公式给出:

$$V = \sqrt{2\gamma d_d / (\epsilon_0 \epsilon_d)}, \quad (39)$$

其中 d_d 和 ϵ_d 分别是电介质 (含氟聚合物) 的厚度和介电常数; γ 是油/水界面的界面张力. 因此, 减小界面张力和电介质厚度将减小驱动电压, 而增加电介质的介电常数将具有相同的效果. 油膜的厚度也以两个重要方式起作用: 当油膜较厚时, 将需要更高的阈值电压 (V_{th}) 才能首先打开, 并且会将光电响应曲线移至更高的电压. 如上节讨论, 后者是因为较厚的油膜会增加毛细力, 为了将像素打开到所

需程度, 电场必须克服毛细力. 随着像素的开关, 油/水界面从基本平坦变为弯曲. 当像素完全打开时, 油/水界面与像素壁顶部的夹角约为 60° . 油墨越多, 曲率越大, 界面张力越大, 有利于油的重新分配. 此外, 在保持油厚恒定的同时减小像素尺寸将增加工作电压. 油膜厚度和像素尺寸的这种影响可以有效地组合为一个我们称为像素长宽比 (PAR) 的参数. 这是油膜厚度与像素尺寸的比率. 低 PAR 对应较低的驱动电压 (如图 38 所示).

在电润湿显示的驱动中, 可以通过施加在两电极上的电压来控制像素的开关状态及显示灰阶, 而电润湿油墨的驱动具有明显的迟滞现象, 也就是同一电压前进过程和后退过程开口率不一致性现象, 如图 39 所示. 从图 39 中可以看出, 在电压后退过程中, 像素的开口率与电压基本呈线性关系, 且具有较宽的电压区域, 因此电润湿显示灰阶的控制一般在电压下降沿进行.

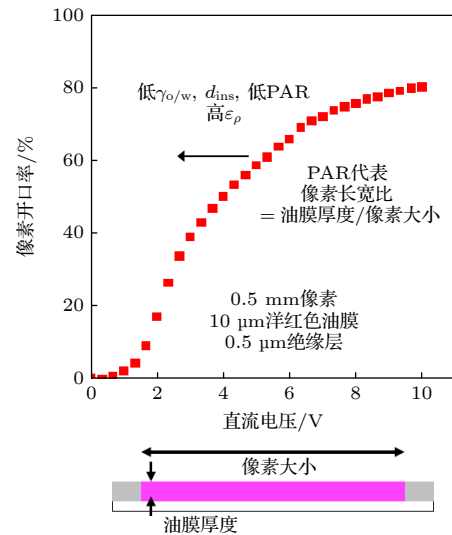


图 38 电润湿显示像素参数对光电响应曲线影响

Fig. 38. Effects of pixel parameters in an electrowetting display on electro-optical response curves.

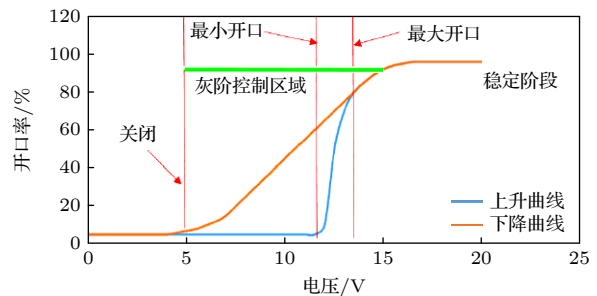


图 39 电润湿油墨驱动迟滞曲线开口率变化

Fig. 39. Change of aperture ratio in the driving delay curve of electrowetting oil.

根据驱动电润湿显示器件是有源矩阵和无源矩阵,分为两种不同的驱动波形进行驱动.有源矩阵的驱动主要通过行列扫描芯片来实现驱动每一个像素,无源矩阵的器件主要通过直接电源电压供电来驱动.其中有源驱动可分为芯片输出不同电压驱动、PWM驱动、幅频混合调制驱动.可以通过设计驱动波形,实现多级灰阶显示,如图40所示[8,105,106].

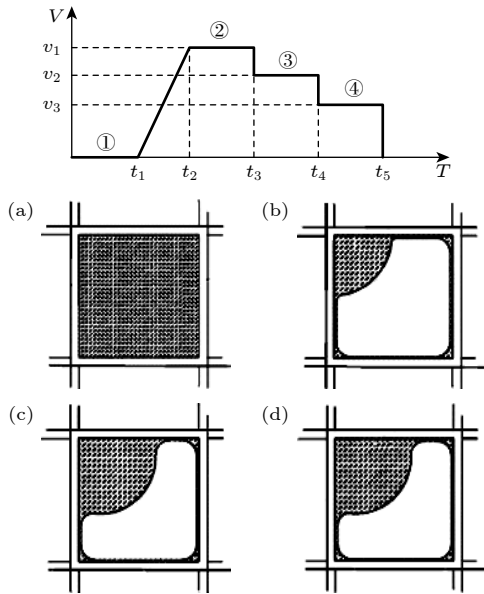


图40 电润湿显示油墨驱动电压波形及其对应油墨状态, (a)–(d)分别对应状态①–④

Fig. 40. Driving voltage waveform design for electrowetting display and the corresponding states of oil rupture. (a)–(d) corresponding to ①–④.

由于电润湿疏水绝缘层电荷会发生转移,在给电润湿显示屏持续施加特定的直流电压时,油墨随着时间出现回流现象,像素开口率出现逐渐下降的趋势,这种开口率自动下降的缺陷严重影响了电润湿灰阶显示性能.为解决油墨回流问题,驱动电润湿驱动波形不能只是单纯的正常传统波形驱动,需要设计特定的复位电压或者反向电压来改善离子电荷介陷到疏水绝缘层.因为持续施加电压的时候,随着时间累积,疏水绝缘层积累的电荷就会越来越多,导致驱动电润湿油墨的电场力越来越小,最后出现电润湿油墨回流现象.为了改善这油墨回流的缺陷影响,可以在电压下的驱动波形上每隔500 ms设计瞬间的反向脉冲.

在电压快速上升时,油墨剧烈震动并发生破裂,容易形成油墨点残留现象.通过延长驱动波形

输入电压上升时间可以有效地抑制油墨的剧烈震动而油墨分裂,进而有效地改善电润湿开口率的问题.电润湿开口率随着驱动波形输入电压上升时间的增加而变大.当输入电压上升时间延长时,使油滴有更多的时间与相邻的油滴结合或合并,从而减少了油的分裂现象,获得了更高的白色基板面积.延长驱动波形上升时间有助于最大限度地提高显示电润湿开口率,但它需要更多的时间和限制帧速率,所以改善电润湿显示质量应充分考虑开口率和响应时间.

9 结论

电润湿显示属于新型反射式类纸显示技术,在保留电子纸显示的低功耗、视觉健康、可柔性等特性的同时,突破彩色和视频播放两项当前束缚电子纸显示技术应用领域的瓶颈,适用于户外、便携、长时间阅读等场合的穿戴式设备、电子阅读、户外广告等众多应用产品,可为我国军用和民用市场提供全天候“绿色”显示产品,具有千亿级的直接市场规模和巨大产业辐射力.电润湿之所以有这些优点,与其内在的物理规律是密不可分的.例如,不同油墨材料的光吸收特性决定了不同的显示色彩,两相流体在电场控制下的运动速率决定了器件的开关响应时间,电介质层的可靠性则影响器件的静态功耗等.

作为极具发展前景的反射式类纸显示,电润湿显示自2003年起被国内外各大显示类企业巨头密切关注,对其重视程度一再攀升.目前,电润湿电子纸显示技术仍面临一些挑战.关键显示材料和制程设备的本土化是电润湿电子纸亟待解决的问题.研究人员正在开展一系列工作,包括研发自主可控的电子纸显示墨水,建立本土化核心材料供应链,加快高色域电子纸器件集成与驱动本土化发展,开发基于印刷制程的彩色视频显示前板制备工艺以及显示墨水填充与封装一体化核心设备.现今,电润湿显示产业正处在一个转折点,待电润湿显示关键技术突破后,其显示设备将成为更多人的选择,也将成为极具市场竞争力的产品.本文对电润湿显示器件中的相关理论,特别是润湿与电润湿、两相流体力学、微观与界面物理、光物理、电介质物理、热物理、瞬态物理等,进行了系统性地介绍.希望通过本文的抛砖引玉,使得显示相关与物理相关的

科研工作者能更多地了解这个领域,理解器件内在的工作机理,并为进一步的研发与优化提供支撑。

参考文献

- [1] Lueder E, Knoll P, Lee S H 2022 *Liquid Crystal Displays: Addressing Schemes and ElectroOptical Effects* (3rd Ed.) (Hoboken, United States: John Wiley & Sons Ltd.)
- [2] Chen H W, Lee J H, Lin B Y, Chen S, Wu S T 2018 *Light-Sci. Appl.* **7** 17168
- [3] Tsujimura T 2017 *OLED Displays Fundamentals and Applications* (2nd Ed.) (Hoboken, United States: John Wiley & Sons Ltd.)
- [4] Shu Y, Lin X, Qin H, Hu Z, Jin Y, Peng X 2020 *Angew. Chem. Int. Ed.* **59** 22312
- [5] Zhou G 2021 *Electronic Paper Display Technology* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [周国富 2021 电子纸显示技术 (北京: 科学出版社)]
- [6] Yang B R 2022 *E-Paper Displays* (Hoboken, United States: John Wiley & Sons Ltd.)
- [7] Rogers J A 2001 *Science* **291** 1502
- [8] Shui L, Hayes R A, Jin M, Zhang X, Bai P, van den Berg A, Zhou G 2014 *Lab Chip* **14** 2374
- [9] Bhowmik A K, Li Z, Bos P J 2008 *Mobile Displays: Technology and Applications* (Hoboken, United States: John Wiley & Sons Ltd.)
- [10] Heikenfeld J, Drzaic P, Yeo J S, Koch T 2011 *J. Soc. Inf. Display* **19** 129
- [11] Beni G, Hackwood S 1981 *Appl. Phys. Lett.* **38** 207
- [12] Beni G, Tenan M A 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 6011
- [13] Lippman G 1875 *Annales de Chimie et de Physique* **5** 494
- [14] Berge B 1993 *Comptes Rendus De L'Academie Des Sciences Paris Serie II* **317** 157
- [15] Hayes R A, Feenstra B J 2003 *Nature* **425** 383
- [16] Chevalliot S, Heikenfeld J, Clapp L, Milarcik A, Vilner S 2011 *J. Disp. Technol.* **7** 649
- [17] Mugele F, Baret J C 2005 *J. Phys. Condens. Matter* **17** R705
- [18] Grilli S, Miccio L, Vespini V, Finizio A, De Nicola S, Ferraro P 2008 *Opt. Express* **16** 8084
- [19] Mark D, Haerberle S, Roth G, von Stetten F, Zengerle R 2010 *Chem. Soc. Rev.* **39** 1153
- [20] Sur A, Lu Y, Pascente C, Ruchhoeft P, Liu D 2018 *Int. J. Heat Mass Transfer* **120** 202
- [21] Krupenkin T, Taylor J A 2011 *Nat. Commun.* **2** 448
- [22] Lee J, Kim C J 2000 *J. Microelectromech. Syst.* **9** 171
- [23] Walker S, Shapiro B 2006 *J. Microelectromech. Syst.* **15** 986
- [24] Jones T 2005 *J. Micromech. Microeng.* **15** 1184
- [25] Digilov R 2000 *Langmuir* **16** 6719
- [26] Oh J M, Ko S H, Kang K H 2010 *Phys. Fluids* **22** 032002
- [27] Zeng J, Korsmeyer T 2004 *Lab Chip* **4** 265
- [28] Jones T B 2002 *Langmuir* **18** 4437
- [29] Kang K H 2002 *Langmuir* **18** 10318
- [30] Papatthanasious A G, Boudouvis A G 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 164102
- [31] Mugele F 2009 *Soft Matter* **5** 3377
- [32] Bienia M, Mugele F, Quilliet C, Ballet P 2004 *Physica A* **339** 72
- [33] Verheijen H J J, Prins M W J 1999 *Langmuir* **15** 6616
- [34] Shapiro B, Moon H, Garrell R L, Kim C J 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 5794
- [35] Song F, Ma B, Fan J, Chen Q, Li B Q 2019 *Langmuir* **35** 9753
- [36] Liu J, Wang M, Chen S, Robbins M O 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 216101
- [37] Daub C D, Bratko D, Luzar A 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 22393
- [38] Łukaszewicz G, Kalita P 2016 *Navier-Stokes Equations An Introduction with Applications* (Cham, Switzerland: Springer)
- [39] Mohamad A A 2011 *Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes* (Heidelberg, Germany: Springer-Verlag)
- [40] He Y, Wang Y, Li Q 2009 *Lattice Boltzmann Method Theory and Applications* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [何雅玲, 王勇, 李庆 2009 格子 Boltzmann 方法的理论及应用 (北京: 科学出版社)]
- [41] Guo Z, Shu C 2013 *Lattice Boltzmann Method and its Applications in Engineering* (Singapore: World Scientific)
- [42] Bray A J 1994 *Adv. Phys.* **43** 357
- [43] Cahn J W, Hillard J E 1958 *J. Chem. Phys.* **28** 258
- [44] Landau L D, Lifshitz E M 1980 *Statistical Physics Part 1 Course of Theoretical Physics* (Oxford, United Kingdom: Butterworth-Heinemann)
- [45] Briant A J, Wagner A J, Yeomans J M 2004 *Phys. Rev. E* **69** 031602
- [46] Swift M R, Orlandini E, Osborn W R, Yeomans J M 1996 *Phys. Rev. E* **54** 5041
- [47] Fornberg B 1988 *Math. Comput.* **51** 699
- [48] Li Q 2008 *Numerical Analysis* (5th Ed.) (Beijing: Tsinghua University Press) (in Chinese) [李庆扬 2008 数值分析 (第5版) (北京: 清华大学出版社)]
- [49] Liu H, Kang Q, Leonardi C R, Schmieschek S, Narváez A, Jones B D, Williams J R, Valocchi A J, Harting J 2016 *Comput. Geosci.* **20** 777
- [50] Sharma K V, Straka R, Tavares F W 2019 *Ind. Eng. Chem. Res.* **58** 16205
- [51] Satofuka N, Nishioka T 1999 *Comput. Mech.* **23** 164
- [52] Wichmann K R K 2019 *Ph. D. Dissertation* (Munich, Germany: Technische Universität München)
- [53] Chen S, Doolen G D 1988 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** 329
- [54] Qian Y H, D'Humières D, Lallemand P 1992 *EPL* **17** 479
- [55] Ruiz-Gutierrez E, Ledesma-Aguilar R 2019 *Langmuir* **35** 4849
- [56] Ren X, Wei S, Qu X, Liu F 2019 *AIP Adv.* **9** 055021
- [57] Liu H, Zhang Y 2015 *J. Comput. Phys.* **280** 37
- [58] Liu H H, Valocchi A J, Kang Q J 2012 *Phys. Rev. E* **85** 046309
- [59] Lee T, Liu L 2010 *J. Comput. Phys.* **229** 8045
- [60] Connington K, Lee T 2013 *J. Comput. Phys.* **250** 601
- [61] Fogolari F, Brigo A, Molinari H 2002 *J. Mol. Recognit.* **15** 379
- [62] Butt H, Graf L, Kappl M 2006 *Physics and Chemistry of Interfaces* (2nd Ed.) (Weinheim, Germany: Wiley-VCH)
- [63] Good R J 1992 *J. Adhes. Sci. Technol.* **6** 1269
- [64] Shi Z, Zhang Y, Liu M, Hanaor D A H, Gan Y 2018 *Colloids Surf., A* **555** 365
- [65] Johnson R E 1993 *Wettability* (New York, United States: Marcel Dekker Inc.)
- [66] De Gennes P G 1994 *Soft Interfaces* (Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press)
- [67] Marmur A 2003 *Langmuir* **19** 8343
- [68] Chen X, Ma R, Li J, Hao C, Guo W, Luk B L, Li S C, Yao S, Wang Z 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 116101
- [69] Marmur A 1992 *Modern Approach to Wettability: Theory and Applications* (New York, United States: Plenum Press)

- [70] Liu Z 2022 *M. S. Thesis* (Guangzhou: South China Normal University) (in Chinese) [刘志浩 2022 硕士学位论文 (广州: 华南师范大学)]
- [71] Zhou R, Ye Q, Li H, Jiang H, Tang B, Zhou G 2019 *Results Phys.* **12** 1991
- [72] Bard A, Faulkner L 2001 *Electrochemical Methods Fundamentals and Applications* (2nd Ed.) (Hoboken, United States: John Wiley & Sons Inc.)
- [73] Deng Y, Tang B, Guo Y, Jiang H, Zhou R, Hayes R A, Zhou G 2016 *Journal of South China Normal University: Natural Sciences* **48** 31 (in Chinese) [邓勇, 唐彪, 郭媛媛, 蒋洪伟, 周蕤, Hayes R A, 周国富 2016 华南师范大学学报 (自然科学版) **48** 31]
- [74] Deng Y, Li S, Ye D, Jiang H, Tang B, Zhou G 2020 *Micromachines* **11** 81
- [75] Yao Z, Zhang M, Wu H, Yang L, Li R, Wang P 2015 *J. Am. Chem. Soc.* **137** 3799
- [76] Li S, Ye D, Henzen A, Deng Y, Zhou G 2020 *New J. Chem.* **44** 415
- [77] Lee P T C, Chiu C W, Lee T M, Chang T Y, Wu M T, Cheng W Y, Kuo S W, Lin J J 2013 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **5** 5914
- [78] Lee P T C, Chiu C W, Chang L Y, Chou P Y, Lee T M, Chang T Y, Wu M T, Cheng W Y, Kuo S W, Lin J J 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 14345
- [79] Blankenbach K, Yan Q, O'Brien R J 2020 *Handbook of Visual Display Technology* (Cham, Switzerland: Springer)
- [80] Kuo S W, Chang Y P, Cheng W Y, Lo K L, Lee D W, Lee H H, Chen K T, Tsai Y H, Chen Y C, Chiu Y H, Chiu W W, Fuh S Y, Sun R L, Su P J, Wang C W, Lee K C, Shiu J W 2009 *SID Int. Symp. Dig. Tech. Pap.* **40** 483
- [81] Giraldo A, Aubert J, Bergeron N, Derckx E, Feenstra B J, Massard R, Mans J, Slack A, Vermeulen P 2010 *J. Soc. Inf. Display* **18** 317
- [82] You H, Steckl A J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 023514
- [83] Guo Y, Jiang H, Yuan D, Tang B, Zhou G 2022 *Chin. J. Liq. Cryst. Disp.* **37** 925 (in Chinese) [郭媛媛, 蒋洪伟, 袁冬, 唐彪, 周国富 2022 液晶与显示 **37** 925]
- [84] Ivanova N 2020 *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* **378** 20190442
- [85] Song X, Zhang H, Li D, Jia D, Liu T 2020 *Sci. Rep.* **10** 16318
- [86] Supekar O D, Zohrabi M, Gopinath J T, Bright V M 2017 *Langmuir* **33** 4863
- [87] Lee J K, Park K W, Kim H R, Kong S H 2011 *Sens. Actuators, B* **160** 1593
- [88] Hapsari A, Won Y H 2014 *Annual Conference on Oxide-based Materials and Devices V at SPIE Photonics West*, San Francisco, CA, February 2–5, 2014 p89871S
- [89] Xia Y, Chen J, Zhu Z, Zhang Q, Yang H, Wang Q 2018 *RSC Adv.* **8** 4032
- [90] Rosa P 2015 *Ph. D. Dissertation* (Lisbon, Portugal: New University of Lisbon)
- [91] Vandelli L, Padovani A, Larcher L, Southwick R G, Knowlton W B, Bersuker G 2011 *IEEE Trans. Electron Devices* **58** 2878
- [92] Jegert G, Kersch A, Weinreich W, Schörder U, Lugli P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 062113
- [93] Liu F, Liu Y Y, Li L, Zhou G, Jiang X, Luo J W 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 024020
- [94] Zhou R, Fu S, Jiang H, Li X, Zhou G 2019 *Results Phys.* **15** 102737
- [95] Padovani A, Gao D Z, Shluger A L, Larcher L 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 155101
- [96] Zhang Q, Yu L, Bian Z, Yuan D, Sun H, Tang B, Lu X, Liu F, Zhou G 2023 *Phys. Rev. Appl.* **19** 024008
- [97] Jones T B 2001 *J. Electrostat.* **51** 290
- [98] R-Gutiérrez É, Edwards A M J, McHale G, Newton M I, Wells G G, Brown C V, L-Aguilar R 2021 *Langmuir* **37** 7328
- [99] Dixit H N, Babu V 2006 *Int. J. Heat Mass Transfer* **49** 727
- [100] Ko S H, Lee S J, Kang K H, 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 194102
- [101] Tang B, Groenewold J, Zhou M, Hayes R A, Zhou G 2016 *Sci. Rep.* **6** 26593
- [102] Tonks L 1936 *Phys. Rev.* **48** 562
- [103] Schaeffer E, Thurn-Albrecht T, Russell T P, Steiner U 2000 *Nature* **403** 874
- [104] González H, Surgy G N D, Chabrier J P 1994 *Phys. Rev. B* **50** 2520
- [105] Yi Z, Shui L, Wang L, Jin M, Hayes R A, Zhou G 2015 *Displays* **37** 86
- [106] Luo Z J, Zhang W N, Liu L W, Xie S, Zhou G 2016 *J. Soc. Inf. Disp.* **24** 345

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Research progress of physics of electrowetting display devices*

Liu Fei-Long Cheng Yan-Kun Zhang Jing-Heng
Tang Biao[†] Zhou Guo-Fu[‡]

(Guangdong Provincial Key Laboratory of Optical Information Materials and Technology, Institute of Electronic Paper Displays, South China Academy of Advanced Optoelectronics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 24 May 2023; revised manuscript received 6 July 2023)

Abstract

Electrowetting refers to the phenomenon of modifying the surface tension between a liquid and a solid by adjusting the externally applied electric potential between the liquid and solid electrodes, thereby changing the contact angle between the two and causing a deformation and displacement of the droplets. Electrowetting electronic paper display is a new reflective “paper-like” display technology based on a rapid response microfluidic control technology. It has the advantages of low energy consumption, visual health, and flexibility of commercial electrophoretic electronic paper display products, while breaking through the bottlenecks of “full-color” and “video-speed response” that currently restrict the application of electronic paper display technology. In this paper, several physical directions involved in electrowetting display devices, especially wetting and electrowetting, binary phase fluid mechanics, microscopic and interfacial physics, photophysics, dielectric physics, thermophysics, and transient physics, are systematically reviewed; the basic principles of device operation, microscopic and mesoscopic physical pictures, internal mechanisms of device operation, and device reliability are also discussed in detail.

Keywords: electrowetting, device physics, reflective display

PACS: 85.60.Pg, 85.60.-q, 68.08.Bc

DOI: 10.7498/aps.72.20230837

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2021YFB3600602), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62005083, 52175403), the Key Support Program for Foreign Experts of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. zcgx2022002L), the Overseas High Level Talent Introduction Program (Top Youth) of Guangdong Province, China (Grant No. 2021QN02X369), the “Guangdong Special Support Program” Local Innovative and Entrepreneurship Teams, China (Grant No. 2019BT02C241), the Program for Chang Jiang Scholars and Innovative Research Teams in Universities of Ministry of Education of China (Grant No. IRT 17R40), the Guangdong Key Laboratory of Optical Information Materials and Technology, China (Grant No. 2017B030301007), the Guangzhou Key Laboratory of Electronic Paper Displays Materials and Devices, China (Grant No. 201705030007), the Joint Laboratory of Optical Information International Cooperation of Ministry of Education, China, and the 111 Project, China.

[†] Corresponding author. E-mail: tangbiao@scnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: guofu.zhou@m.scnu.edu.cn

电润湿电子纸显示应用物理研究概述与进展

刘飞龙 程彦锐 张境恒 唐彪 周国富

Research progress of physics of electrowetting display devices

Liu Fei-Long Cheng Yan-Kun Zhang Jing-Heng Tang Biao Zhou Guo-Fu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 208501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230837

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230837>

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

电驱动引发液滴弹跳过程中的能量转换

Energy conversion during electrically actuated jumping of droplets

物理学报. 2022, 71(11): 114702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212133>

电致红外发射率动态调控器件研究进展

Research progress of infrared electrochromic devices

物理学报. 2021, 70(20): 204205 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210211>

非晶材料与物理近期研究进展

Recent progress of the glassy materials and physics

物理学报. 2018, 67(12): 126101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180681>

新颖材料器件为全息显示带来的新机遇

Novel materials and devices bring new opportunities for holographic display

物理学报. 2018, 67(2): 024213 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172026>

面向量子计算的拓扑超导体材料、物理和器件研究

Research progress of material, physics, and device of topological superconductors for quantum computing

物理学报. 2022, 71(16): 160302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220596>

太赫兹液晶材料与器件研究进展

Research progress of terahertz liquid crystal materials and devices

物理学报. 2019, 68(8): 084205 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182275>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

小型化涡旋光模式解复用器: 原理、制备及应用*

杨鑫宇¹⁾²⁾ 叶华朋^{1)2)†} 李佩芸²⁾ 廖鹤麟²⁾ 袁冬^{1)2)‡} 周国富¹⁾²⁾

1) (华南师范大学, 响应型材料与器件集成国际联合实验室, 国家绿色光电国际研究中心, 广州 510006)

2) (华南师范大学, 华南先进光电子研究院, 广东省光信息材料与技术重点实验室, 彩色动态电子纸显示技术研究所, 广州 510006)

(2023 年 9 月 19 日收到; 2023 年 10 月 7 日收到修改稿)

涡旋光因其具有光学轨道角动量 (orbital angular momentum, OAM) 而在近二十年倍受关注. 由于具有不同 OAM 的涡旋光相互正交, 涡旋光在光通信领域展现了巨大的潜力, 为未来实现高速、大容量的光通信技术提供了潜在的解决方案. 本文旨在介绍涡旋光 OAM 模式解复用技术的基本原理、小型化器件加工方法和在光通信领域的新兴应用. 首先, 回顾 OAM 模式解复用工作原理的发展历程; 随后, 针对涡旋光 OAM 模式解复用, 将介绍多种典型的小型化器件制备方法; 最后探讨基于轨道角动量的涡旋光模式解复用在通信领域中的新兴应用, 并对 OAM 模式解复用的未来发展趋势及前景进行了深入分析和展望.

关键词: 涡旋光, 轨道角动量, 大容量光通信, 解复用, 小型化光子器件**PACS:** 42.79.Sz, 42.79.-e, 42.50.Tx, 85.60.-q**DOI:** 10.7498/aps.72.20231521

1 引言

光子具有多个自由度, 包括频率/波长、时间、复振幅 (振幅、相位)、偏振和空间结构, 操纵光子的这些物理维度可以实现光相关应用的多样性^[1-3]. 除了传统上对频率、时间、复振幅和偏振的关注之外, 另一个已知的光子的物理维度——空间结构也受到越来越多的关注^[4,5]. 1992 年, Allen 等^[6-8]指出光场的螺旋相位结构与光子的光学轨道角动量 (orbital angular momentum, OAM) 之间存在关联. 涡旋光是具有螺旋型等相位面的光束, 相位分布为 $\exp(i l \varphi)$, 其中 l 为轨道角动量角量子数, 也被称为拓扑电荷数, 表征了涡旋光束中每一个光子所携带的轨道角动量的大小 $l\hbar$ (\hbar 是普朗克常数除以 2π), φ 为方位角坐标. 空间结构光领域的进展不仅拓宽了光学研究的范畴, 还为各种应用

领域带来了新的机遇和挑战, 包括量子信息编码、光学操纵、光学超分辨成像、光学测量以及天文学等^[9-17]. 特别地, 由于涡旋光束具有的所有 OAM 模式都是正交的, 理论上存在无穷多个本征态, 这种无限制的额外自由度给了光一个潜在的非约束和相互正交的状态空间, 因此可以被利用来提高各种光通信系统的信息容量^[18,19]. 因为不同模式之间相互正交互不干扰, OAM 复用光通信技术的通信容量已远超传统方案, 突破了 Tbit 量级, 从而可以提高光路的频谱效率和信息容量, 可以作为多路复用器应用于光通信中^[20-23].

涡旋光的生成和涡旋光解复用是涡旋光应用开发的关键所在. 涡旋光束的产生方法包括光学元件的设计, 以及光场调控技术的应用. 到目前为止, 研究人员提出了各种利用光束转换器进行自旋-轨道角动量转换产生涡旋光束的方法^[24]. 常见的方法包括螺旋相位板法^[25]、计算全息法^[26]、模式

* 国家自然科学基金 (批准号: 61805087)、广东省普通高校重点领域专项 (批准号: 2021ZDZX1048)、广东省光信息材料与技术重点实验室 (批准号: 2017B030301007) 和国家绿色光电子国际联合研究中心 (批准号: 2016B01018) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yehp@m.scnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yuandong@scnu.edu.cn

转换法^[8]、超表面^[27,28]、空间光调制器法^[29,30]和液晶q片^[34]。除了光学涡旋,涡旋场的研究对象也逐渐扩展到其他领域,如电子涡旋、太赫兹涡旋和声学涡旋^[32–37]。涡旋光束的探测手段主要包括干涉法和衍射法等,目前存在多种方案可用于测量拓扑荷,包括圆形孔径衍射、三角孔径衍射、同轴干涉等方法^[38–40]。通过观察远场衍射光斑阵列和干涉条纹,可以推断出涡旋光的轨道角动量大小和正负方向。然而,这些方法仅适用于探测单一OAM模式的涡旋光束,不适用于多个OAM模式叠加的涡旋光束。对于多个OAM模式叠加的光束,以及需要灵活、高精度测量的情况,这些方法将失效。因此,在实现多个OAM模式叠加光束和高精度测量时,需要采用其他更复杂的技术和方法。OAM解复用器是OAM通信系统中的核心器件之一,其主要功能是对共轴传输的不同OAM模式在空间上实现有效分离,使得不同模式携带的信息可以互不干扰地被处理和探测。迄今为止,研究者已经提出了多种有效的方法对具有不同拓扑电荷值的涡旋光束进行解复用,如基于马赫-曾德干涉仪^[41]的干涉测量系统和使用衍射光学元件(如定制相位元件^[42–44])的各种方法等。

本文综述了基于涡旋光OAM模式解复用领域的研究,首先简述了涡旋光模式解复用原理的发展历程,从早期的干涉法到目前广泛采用的坐标转换方法;随后,针对涡旋光模式解复用,介绍了多种典型的小型化器件制备方法,如光栅、超表面和液晶器件等,用于实现多个OAM模式的分离和解复用;在进一步讨论中,探讨了基于轨道角动量的涡旋光解复用在模式复用通信领域中的潜在应用;最后,对涡旋光OAM模式解复用技术面临的一些挑战和未来的应用方向进行了简要总结和展望。

2 涡旋光模式解复用的原理

随着无线光通信的迅速发展,传统的调制和复用技术难以满足未来对大容量、高速率和高保密性通信的需求。然而,轨道角动量复用通信技术为无线光通信带来了新的可能性,可以实现多维度的轨道角动量复用通信系统,从而提升通信带宽。涡旋光OAM解复用器是OAM通信系统中的核心器件之一,其主要功能是对共轴传输的不同OAM模式在空间上实现有效分离,实现OAM模式的识别、

分选等。涡旋光OAM模式解复用的目标是通过设计衍射光学元件,实现涡旋光OAM分量在空间上的分离。

2.1 干涉法

过去的研究表明,利用 $\exp(ik\rho)$ 光束及其镜像进行干涉可以生成具有 $2l$ 个径向辐条的干涉图,从而测量携带相同模式多光子的光束的OAM。虽然这种技术可以区分多种状态,但无法测量单个光子的状态,因为这需要多个光子才能形成完整的干涉图案^[45]。2002年,Leach等^[41]提出了一种利用马赫-曾德干涉仪的方法来分类单光子的OAM,如图1(a)所示。他们在干涉装置中引入道威棱镜,通过调整道威棱镜的旋转角度,将具有不同阶数的涡旋光束传播到不同的输出端口,实现OAM模式的分类。具体而言,通过调整旋转角度,可以使相移呈现 $l\alpha$ 的形式。对于特定的 l 和 α 组合,旋转后的光束可以与原始光束同相或异相。当将这种旋转结合到双光束干涉仪的臂中时,两个臂之间的相移将依赖于 l 值。因此,通过设置单级MZ干涉装置的旋转角度($\alpha = \pi$),可以在两个不同的端口实现奇数和偶数阶拓扑电荷数 l 的涡旋光束的分选。如图1(b)所示,当级联多个干涉装置产生更多分选通道时,对于奇数阶拓扑电荷数 l 并没有合适的旋转角度进行分选,因此需要通过全息图法将奇数阶拓扑电荷数 l 转为偶数阶拓扑电荷数 $l+\Delta l$ 进行进一步分选。通过干涉进行单个光子OAM的分选方法在原理上是100%有效的,仅受到组件效率的限制。为了提高测量涡旋光整数阶拓扑电荷值的阶数,2015年,Martelli等^[46]利用柱面透镜的像变换特性,将干涉仪装置中的道威棱镜替换为柱透镜,使用改进的马赫-曾德干涉仪测量拉盖尔-高斯涡旋光束的高阶拓扑电荷阶数高达90。为了测试模式间的串扰,他们通过测量输入端相应的单个OAM模式的两个干涉仪输出端的功率分配比来进行实验。实验结果显示,在OAM模式为 $l = 0$ 时,获得了 -10.3 dB的串扰,而在 $l = 1$ 时,获得了 -8.0 dB的串扰。

在涡旋光OAM解复用领域,干涉测量方法被广泛应用于多个OAM状态的分类。然而,这种方法的分选装置需要进行多个阶段的分类,其中需要 $(n-1)$ 个干涉仪和 $(2n-2)$ 个臂来实现对 n 个不同的OAM状态的分选。随着待分选的OAM状态

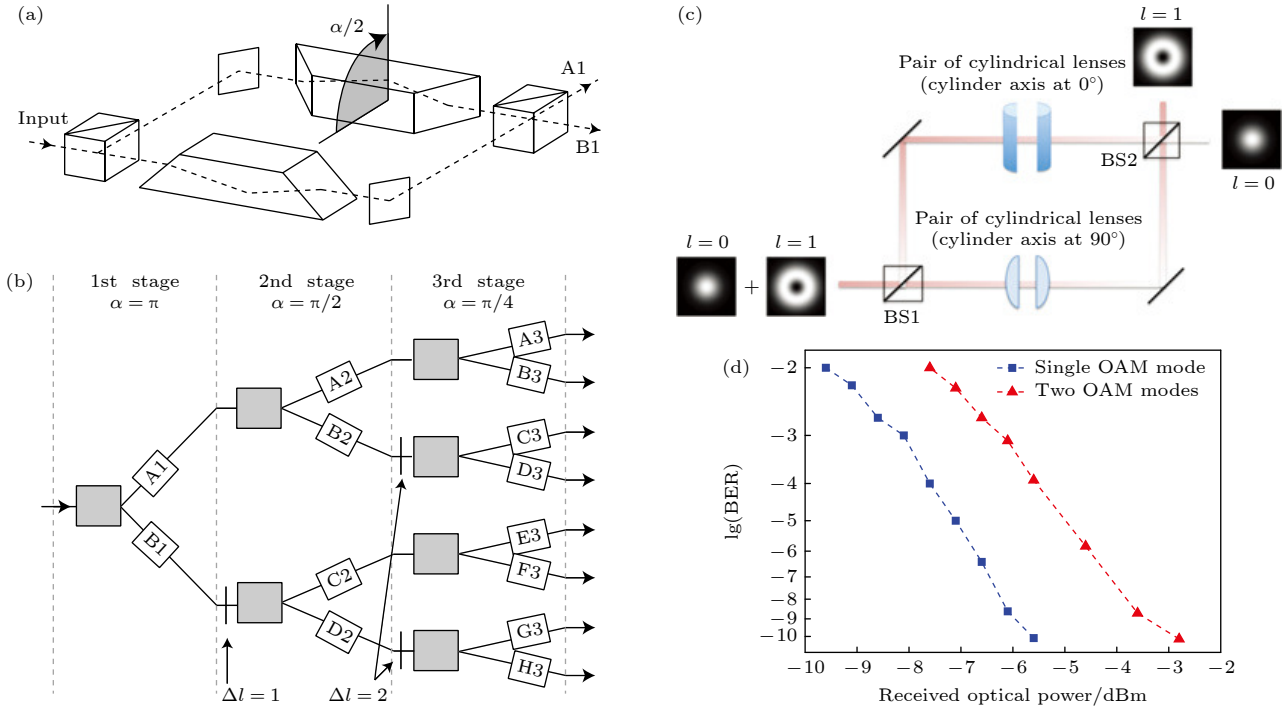


图 1 基于马赫-曾德干涉仪的 OAM 分选方案 (a) OAM 分类器的第 1 阶段; (b) OAM 分类器的前 3 个阶段, 每个灰色框代表 (a) 图所示的干涉仪^[41]; (c) 基于柱面透镜干涉的 OAM 多路复用器/解复用器方案; (d) $l=0$ 时, BER 的测量值随 OAM 模式解复用后接收的光功率的变化规律, 正方形为单个 OAM 模式, 不受 $l=1$ 模式串扰, 三角形为两个 OAM 模式, 受 $l=1$ 模式串扰^[46]

Fig. 1. The schematic of the OAM sorter based on Mach-Zehnder interferometer: (a) The first stage of the OAM sorter; (b) the first three stages of the OAM sorter, the gray boxes in each stage represent the interferometer shown in Fig. 1(a)^[41]; (c) OAM multiplexer/demultiplexer based on interference via cylindrical lens; (d) BER values measured against the received optical power after OAM demultiplexing for mode $l=0$, line denoted with triangles represents two OAM modes with crosstalk because of mode $l=1$, while line denoted with squares represents single OAM mode without crosstalk^[46].

数量的增加, 系统的复杂度和信号损失也会急剧增加. 系统的复杂性和信号损失限制了其在实际应用中的可扩展性. 因此, 进一步的研究将致力于寻找更简化和高效的分选装置, 以提高涡旋光 OAM 解复用技术的性能和可靠性.

2.2 坐标转换法

2.2.1 对数-极坐标转换法及改进方法

2.2.1.1 对数-极坐标转换法

由于马赫-曾德干涉仪存在系统较复杂和耗损随着模式数的增大而增大的可扩展性问题, 无法满足实际光通信系统的小型化要求. 近年来, 基于光学坐标变换的分选系统被认为是一种应用前景广泛的有效解决方案^[47-49].

涡旋光束具有螺旋相位结构, 呈现出一个特征方位角相位项 $\exp(il\varphi)$. 涡旋光的螺旋相位大小和方向随着位置的变化而发生变化, 因此涡旋光的螺旋相位呈现出一个空间分布的角向梯度. 涡旋光的

角向相位梯度与光束的轨道角动量大小和方向密切相关. 具体而言, 角动量的大小与涡旋光的角量子数 l 有关, 而方向则受到光束旋转方向和偏振方向的影响. 在光束传播过程中, 涡旋光的角向相位梯度会随着传播距离的增加而增大. 通过将涡旋光束的螺旋相位梯度转换为横向相位梯度, 然后使用透镜将经过转换后具有不同横向相位梯度的平面波聚焦到不同的位置的方式, 可以将不同 OAM 模式的光束在空间位置上被有效地分离出来, 实现 OAM 模式的高效分选.

基于上述想法, 2010 年, Berkhout 等^[50]首次提出了利用对数-极坐标转换方法进行涡旋光解复用的方法, 如图 2(a) 所示. 他们通过使用两个定制的光学元件将笛卡尔坐标转换为对数极坐标, 成功地将携带 OAM 状态的螺旋相位光束转换为具有横向相位梯度的高斯光束. 接下来, 透镜将每个输入的 OAM 状态聚焦到不同的横向位置, 实现了 OAM 模式的分选. 在这种方法中, 关键的光学元件是将输入光束的方位角位置转换为输出光束的

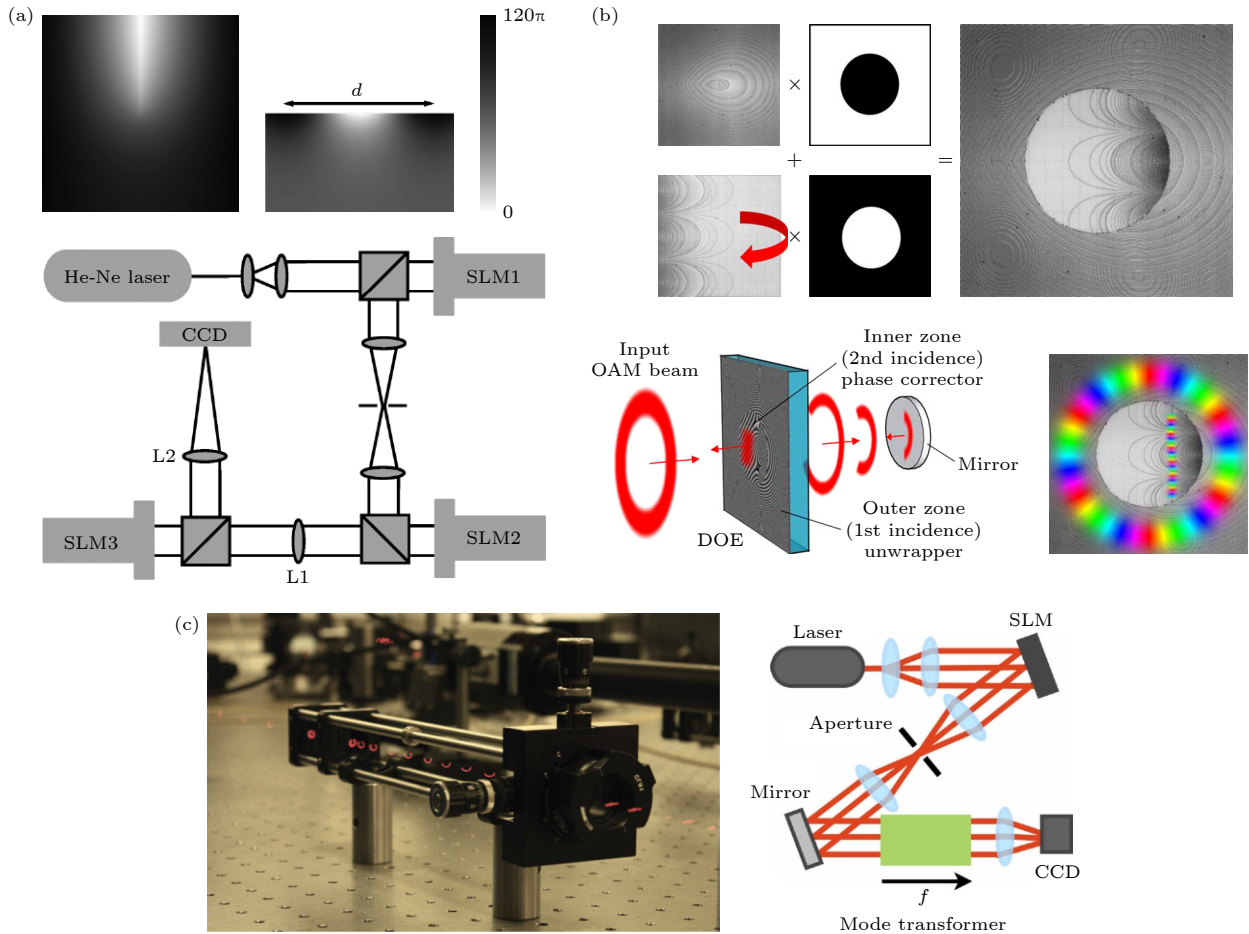


图 2 利用对数-极坐标转换法实现 OAM 模式分离的原理 (a) 对数-极坐标转换法实验装置图^[50]; (b) 基于对数-极坐标变换的紧凑 OAM 模式解复用方案^[52]; (c) 使用折射光学元件将 OAM 状态转换为横向动量状态的光路示意图^[51]

Fig. 2. The principle of realizing OAM mode separation based on logarithmic-polar coordinate transformation method: (a) The schematic of the experimental setup based on log-polar coordinate transformation method^[50]; (b) the scheme of compact OAM mode demultiplexer based on logarithmic-polar coordinate transformation method^[52]; (c) the optical path of converting the OAM state into a transverse momentum state using refractive optical elements^[51].

横向位置, 即将螺旋相位光束转换为横向相位梯度的光学元件, 这相当于将包含同心圆的输入图像转换为包含平行线的输出图像。

然而, 这种转换会引入光程长度的变化, 导致需要对相位失真进行校正。因此, 转换系统包括两个定制的光学元件: 一个用于执行图像转换的解复用器件, 另一个位于解复用器件的傅立叶平面中, 用于校正相位失真的相位矫正器件。解复用器件执行映射 $(x, y) \rightarrow (u, v)$, 其中 (x, y) 和 (u, v) 分别表示输入和输出平面中的笛卡尔坐标系, 而相位矫正器件则对前一步骤中引入的偏差进行相位校正。然而, 由于空间光调制器 (SLM) 的衍射效率有限, 大约有四分之三的输出光束损失, 导致相邻 OAM 模式的分离度受到衍射的限制。

为了改善这一问题, 2012 年, Lavery 等^[51] 改

进了所需的实验装置, 将之前使用的衍射光学元件替换为折射光学元件 (图 2(c)), 实验证明光学元件能够在单光子水平上分离输入涡旋光的 OAM 状态。这项改进提高了携带 OAM 的光束分离效率, 最终测得携带 OAM 的光束分离到探测器上的离散区域效率为 85%。这种方法可用于生成和检测量子通信或量子密钥分配系统中使用的 OAM 状态, 从而增加可编码到单个光子上的信息量。

由于对数-极坐标转换法的解复用器被分为两个相位组件, 在实际过程中对准要求非常严格。为了简化两个相位元件的对准过程, 提高光学体系结构的紧凑性和小型化水平, 研究人员在器件集成、设计优化和采用新型材料等方面进行了深入而系统的研究^[52-56]。2017 年, Ruffato 等^[52] 提出了一种基于对数-极坐标转换法的紧凑型 OAM 模式解复

用器方案(图 2(b)), 将这种解复用技术应用于完美旋涡光的 OAM 分选, 并通过将两个光学元件集成到一个衍射光学元件中, 进一步提高了器件的微型化水平. 具体而言, 解复用器件分为外部解复用区和内部相位矫正区, 涡旋光束首先通过外部展开区(而内部相位矫正区的输入强度为零)进行解码, 然后光束被反射镜反射并照亮解复用器件的内部相位矫正区域. 通过自动设计这两个元件的同轴性、对准性和平行性, 有利于简化对准操作, 并实现了器件的小型化和集成化. 实验结果显示, 当 $\Delta l = 4$ 时, 可以有效地分离远场光斑, 并且降低串扰值低于 -15 dB, 达到高达 96% 的分离效率. 最近, Li 等^[56] 验证了一种新型的光子总角动量(total angular momentum, TAM) 调制器, 实现了 TAM 的选择性提取. 在该工作中, 他们采用对数-极坐标转换的方法设计了液晶衍射元件, 证实了其工作性能稳定并且 OAM 模式分离的串扰很小. 这表明该紧凑型模式解复用器方案能够在高效的同时实现较低的串扰和高分离效率.

2.2.1.2 模式复制法

使用对数-极坐标变换进行解复用是一种简单高效的方法, 但其分辨率受到模式串扰的限制. 由于方位角变量在该数学变换中的周期局限于 2π , 无法完全对应于螺旋相位, 导致解复用结果存在显著重叠, 从而限制了识别分辨率, 并在分离的通道之间产生串扰. 这是该方法固有的局限性, 无法通过放大变换后的平面波来避免. 放大平面波会减小其波前的倾斜角, 虽然放大后的平面波可以聚焦到更小的点上, 但这些点之间的间距也相应减小, 导致重叠程度没有改善.

为了改善这种情况, 2013 年, Mirhosseini 等^[57] 受到 Berkhout 等^[50,51] 的启发, 提出了一种基于对数-极坐标变换的“模式复制”方法, 并在之后的工作中通过对轨道角动量的弱测量和对角位置的强测量, 探索其高纬度状态的检测潜力, 实现了在轨道角动量的离散基中高维状态向量的实际直接测量^[58], 实验装置如图 3(a) 所示. 该方法的原理是将每个 OAM 模式映射到倾斜平面波前的多个副本. 在这种情况下, 变换光束的宽度增大, 而倾斜角度保持不变. 需要注意的是, 截断平面波的相邻副本之间的周期性相位跳跃等于 2π 的整数倍, 因此产生的光束具有平滑的波前. 这些转换后的模式可以聚焦到一系列点上, 这些点的间距与之前

前相同, 但宽度更窄, 实现了更高分辨率的分选. Malik 等^[58] 利用这种方法测量了量子数为 $l = -12$ 到 $l = 12$ 的 OAM 模式, 并计算出正确检测到 OAM 模式的平均概率为 $92.1\% \pm 0.7\%$. 这表明模式复制方法能够提高解复用的分辨率和减少串扰效应. 这一研究为光涡旋解复用技术的发展提供了新的思路, 通过模式复制的方法克服了对数-极坐标变换的局限性, 实现了更高的解复用性能.

2.2.1.3 螺旋-极坐标转换法

值得注意的是, 采用增加相位的方式可能会引入大量冗余数值优化, 并需要额外的相位元件来实现. 为了克服这些问题, 2018 年, Wen 等^[59] 提出了一种更普遍适用的光学变换方案, 称为螺旋坐标转换, 如图 3(b) 所示. 与之前的对数极坐标变换不同, 螺旋坐标转换沿着螺旋线路径对光场的波前进行分解, 实现了从 OAM 模式到倾斜平面波模式的转换, 进而实现对不同的 OAM 模式的分离.

螺旋坐标转换通过沿着螺旋线路径提取更多的相位信息, 可以实现对 OAM 光场的更高分辨率测量. 相比之前的变换方法, 螺旋变换能有效地克服相邻解复用模式在空间上部分重叠引起的串扰问题. 这意味着螺旋坐标转换具有更好的解复用性能和分辨率, 能够更准确地分离和识别不同的 OAM 模式. 螺旋坐标转换的提出为光涡旋解复用技术的进一步发展提供了新的途径. 该方法不仅提高了解复用性能, 还减少了对额外相位元件的依赖, 具有更好的普适性和实用性.

2.2.2 多平面坐标转换法

尽管坐标转换方案在紧凑性和高分辨率方面有了很大的改进, 但是它的模式容量仍然存在限制. 上述方案报道的解复用 OAM 模式数量为几个或数十个, 无法满足大规模大容量光通信系统的需求. 为了解决上述挑战, 研究人员提出了一种名为多平面光转换器(multi-plane light conversion, MPLC)的方案, 实现了数百个 OAM 模式的空间解复用. MPLC 是一组以一定距离依次连接的定制相位调制板, 由于 MPLC 具有较大的模式容量, 研究人员将其应用于涡旋光场的复用与解复用技术, 使得多个 OAM 模式可以同时传输并实现高效的解复用过程^[60-65].

2019 年, Fontaine 等^[60] 提出了一种特殊的变换方法, 用于将笛卡尔坐标系中的点 (x, y) 转换为

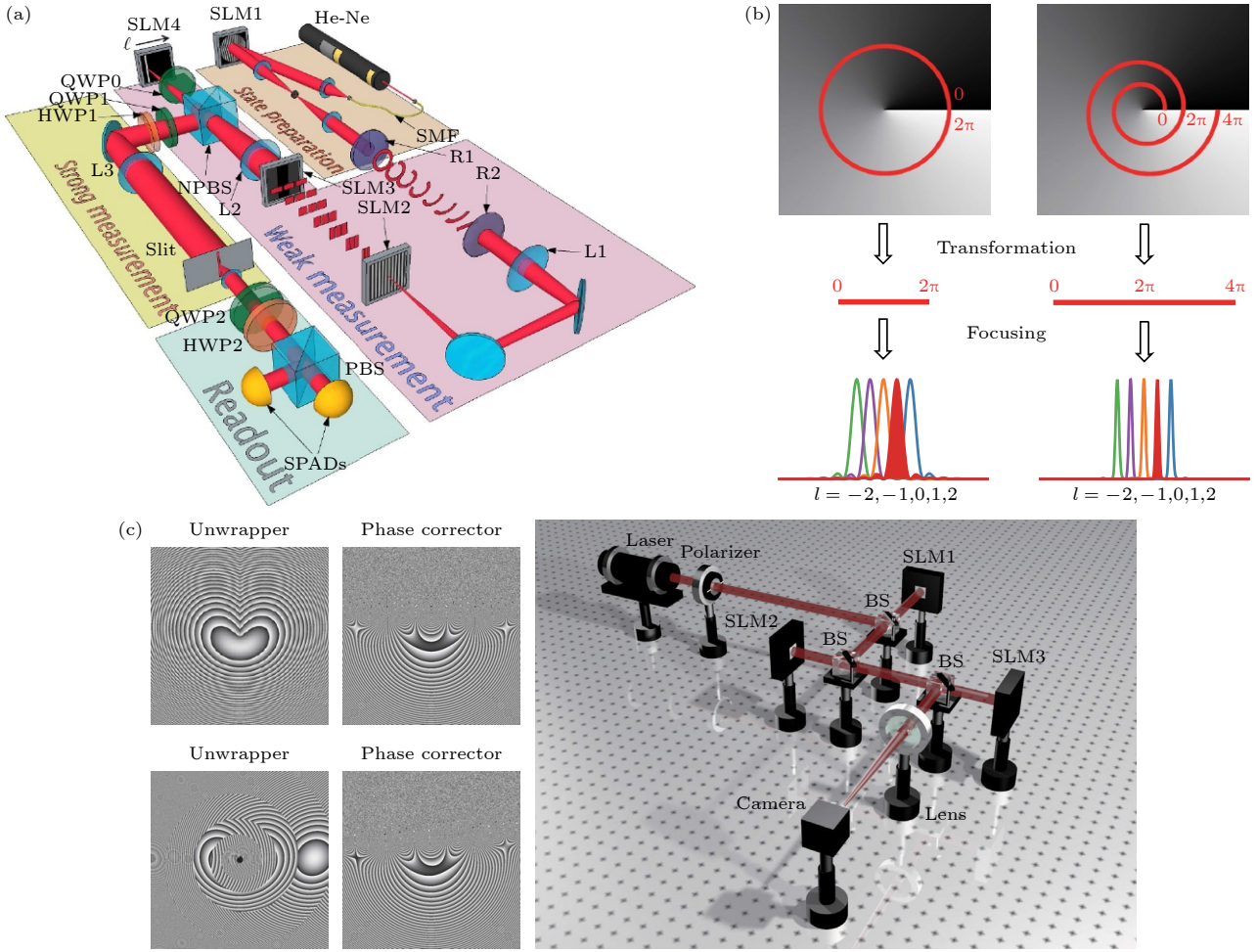


图 3 (a) 模式复制方案分选的光路图^[58]; (b) 螺旋极坐标转换原理与对数极坐标转换原理的对比示意图; (c) 螺旋极坐标转换原理的分选光路图^[59]

Fig. 3. (a) The schematic of the experimental setup of the mode sorter based on refractive beam-copying method^[58]; (b) comparison between the principle of spiral-polar coordinate transformation method and the principle of the log-polar coordinate transformation method; (c) the diagram of the optical path based on spiral-polar coordinate transformation method^[59].

Hermite-Gaussian (HG) 模式中的笛卡尔指数 (m, n), 通过使用少量的等间距相位平面就可以实现. 如图 4(a) 所示, 这种变换方法利用了多平面光转换设备, 研究人员成功地演示了超过 325 种模式的分离. MPLC 设备具有高度复杂的相位变换能力, 它可以将输入光场转换为包含多个光学模式的输出光场. 通过优化相位分布和光学元件的设计, MPLC 设备能够高效地实现 OAM 模式的解复用, 并且具备较大的模式容量. 这项研究的结果表明, 利用特殊变换方法和 MPLC 设备可以实现更大规模的 OAM 模式解复用. 此类研究成果对实现高容量的光通信系统具有重要意义, 它为进一步提升光通信的数据传输速率和容量提供了新的途径. 通过采用特殊变换方法和 MPLC 设备, 可以有效地利用 OAM 模式的多样性和大容量特性, 为光通信领

域带来更加广阔的发展前景. 最近, 研究者也提出了一种光学衍射神经网络, 结合深度学习和光场调制功能, 用于调制 OAM 模式, 显示出出色的信息处理能力^[67-72]. 然而, 这些方法主要集中在对单个涡旋光束的模式转换.

2.3 准小波变换法

为了解决坐标变换方案输出重叠导致分选后相邻 OAM 模式之间的严重串扰问题, 2023 年, Cao 等^[66] 提出了一种新颖独特的方法, 称为准小波变换法, 该方法比多平面光转换方法所需的相平面更少. 准小波变换法的工作原理是将输入平面划分为多个同心环, 并将这些同心环转换为多个倾斜平面波, 然后将它们排列成一条直线, 如图 4(b) 所示. 通过这个操作, 可以得到 N 倍周期的倾斜平面

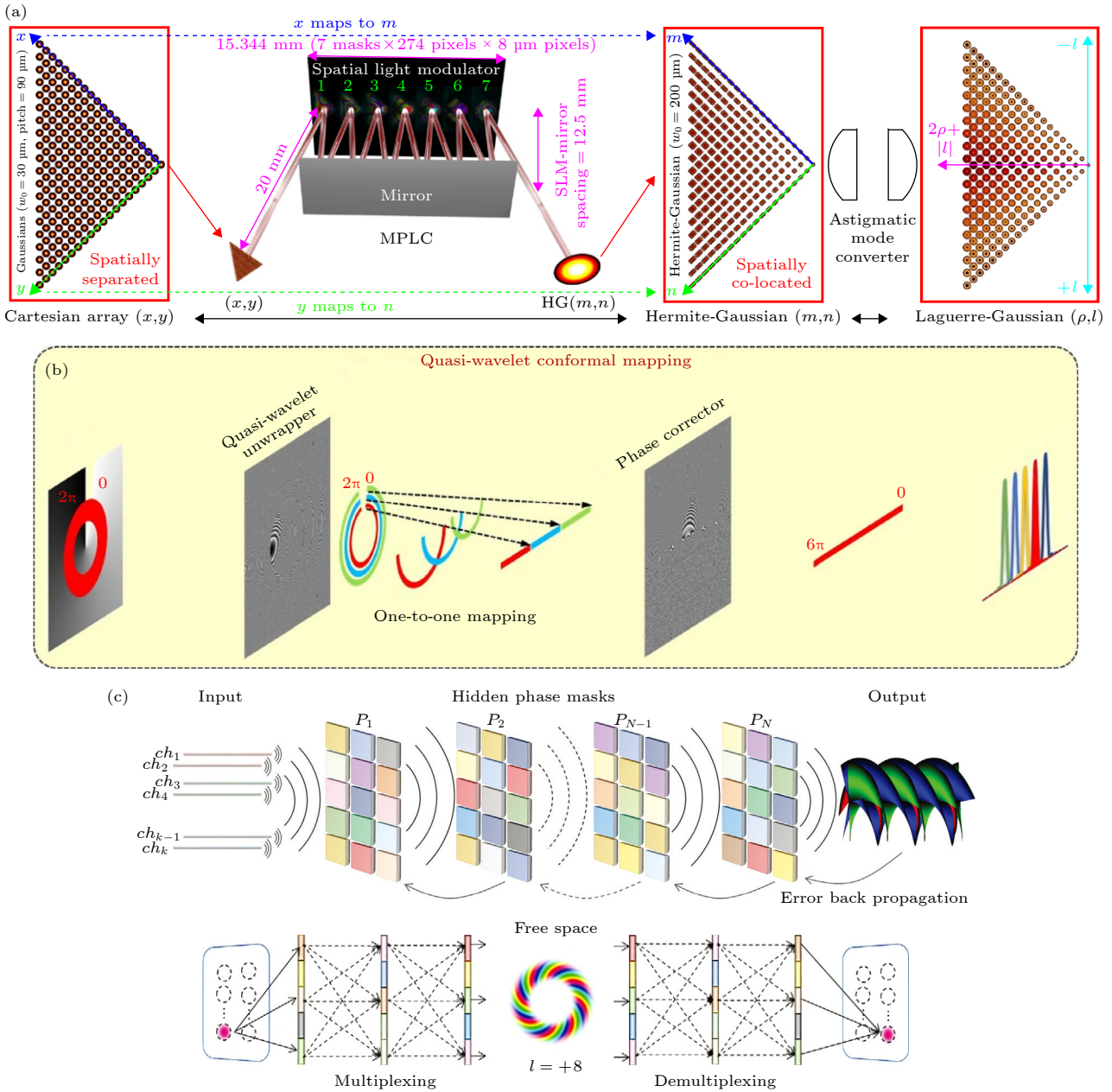


图 4 (a) 用于 HG/LG 叠加态分解的多平面光转换器^[60]; (b) 准小波共形映射示意图^[60]; (c) 基于光衍射神经网络的宽带、低串扰和大信道 OAM 模式解复用^[60]

Fig. 4. (a) Multi-plane optical converter for HG/LG superposition state decomposition^[60]; (b) the schematic of quasi-wavelet conformal mapping^[60]; (c) low crosstalk OAM mode demultiplexer based on optical diffraction neural network^[60].

波, 其中 N 取决于划分的同心环的数量. 倾斜平面波具有周期性延伸和增大长度的特性, 因此能够减少重叠和模式串扰.

与先前提出的极坐标转换法中的一对多映射不同, 准小波共形映射方法实际上是一对一的共形映射. 这意味着每个输入 OAM 模式都被映射到一个唯一的倾斜平面波, 避免了多个模式之间的重叠. 实验表明, 准小波变换法可以实现多达 15 个通道 (OAM-7 到 OAM+7) 的 OAM 解复用, 并且

模式间串扰小于 -12.1 dB . 这种方法的提出为解决 OAM 模式解复用中的串扰问题提供了一种新的有效途径, 并且具有较高的解复用容量和较低的串扰水平.

2.4 基于光衍射神经网络的 OAM 模式解复用

光的波长、时间、偏振和复杂振幅的光通信技术正在接近瓶颈, 而空间维度则相对未被探索. 为

了有效利用光的空间维度, 宽带和低串扰的 OAM 模式解复用器件是必不可少的. 如图 4(c) 所示, 用于 OAM 模式解复用的光学衍射神经网络模型首先通过级联一组相位板来构建^[60], 以该器件的解复用过程为例, 右端口输入的同轴涡旋光束通过自由空间衍射和被相位板 P_1 — P_N 调制后, 将逐渐转化为分离的涡旋光束阵列. 由于这组相位板的结构是通过神经网络来优化设计的, 因此可以快速地预测模型结构. 得益于光学衍射神经网络模型的大操作自由度, 该器件可以支持 16 种 OAM 模式 ($l = \pm 1$ — ± 8), 并有可能进一步扩展通道数, 实现定制化的宽带、低串扰和大信道 OAM 模式解复用.

基于光学坐标变换的分选系统已经在实验中得到验证, 并展示出较高的分类效果和稳定性. 相对于干涉测量方法, 基于光学坐标变换的分选系统具有许多优势. 首先, 它可以减少光学系统的复杂度和体积, 仅需少量的光学元件便可实现分类, 而无需使用数个干涉仪和臂. 其次, 它可以减小信号损失, 因为光学坐标变换不涉及干涉过程, 避免了干涉引起的能量损耗. 然而, 仍然存在一些挑战需要克服, 例如光学元件的设计和制备精度、系统的稳定性和可靠性等方面. 因此, 未来的研究可以集中在优化光学坐标变换分选系统的性能, 并探索适用于实际光通信系统的高效设计. 此外, 基于光衍射神经网络的 OAM 模式解复用通过多层衍射面结构实现了空间维度的解复用, 为光通信技术提供了新的维度.

3 涡旋光模式解复用器的制备方法

需要注意的是, 之前提到用于产生涡旋光束的无源设备也可以应用于涡旋光解复用. 本节将回顾一些有效的涡旋光解复用方法和设备, 这些方法和设备主要基于对涡旋光束的分类或检测, 以实现涡旋光的解复用. 涡旋光解复用的方法和装置通常依据以下原理进行设计: 将具有不同拓扑电荷值的涡旋光束传输到不同的空间位置, 或将涡旋光束转换为其他容易测量的物理参数. 这些方法为涡旋光的解复用提供了一种可行的途径.

3.1 传统制备方法

在过去的二十年里, 已经开发了一系列技术来制备 OAM 分选器. 使用叉状全息图、液晶 q 片或超

表面可以高精度地分选不同的 OAM 模式, 但通常受到 $1/N$ 的成功率的限制, 其中 N 是涉及分离的 OAM 模式的数量. 基于马赫-曾德尔干涉仪的方案可以实现接近单位的效率来测量 N 态, 但这种方法受到多个分选阶段的复杂性和尺寸的影响.

液晶是一种具有可调控光学性质的材料, 可以通过外加电场改变其折射率, 从而调制光的相位, 实现对 OAM 的分选^[73–75]. 2009 年, Karimi 等^[76] 利用液晶双折射片 (q 片) 的特性提出了一种高效产生和分选具有单位拓扑电荷的涡旋光 OAM 的方法. 如图 5(a) 所示, 装置由四分之一波片, q 片和四分之一波片构成. 实施步骤如下: 首先, 使用波长为 532 nm 的线偏振 TEM_{00} 激光束作为 \rangle 激光束作为 \rangle 激光束作为 \rangle 激光束作为 \rangle 激光束作为 \rangle 激光束作为 \rangle 激光束作为 \rangle 激光束作为输入光, 通过四分之一波片控制光的偏振状态为左旋或右旋. 然后, 光束通过 q 片转换为涡旋光. 在分选实验中, 研究人员利用空间光调制器和四分之一波片依次创建了四个光子状态 $|L, 2\rangle$, $|L, -2\rangle$, $|R, 2\rangle$, $|R, -2\rangle$. 随后, 这 4 个状态通过 q 片分别变为 $|R, 4\rangle$, $|R, 0\rangle$, $|L, 0\rangle$, $|L, 4\rangle$. 进一步使用四分之一波片, 这些状态又分别转换为 $|H, 4\rangle$, $|H, 0\rangle$, $|V, 0\rangle$, $|V, -4\rangle$. 其中, $|H, 4\rangle$ 和 $|H, 0\rangle$ 透过偏振分束器传输, 而 $|V, 0\rangle$ 和 $|V, -4\rangle$ 将被反射. 由于 q 片的作用, 反射和透射光束中的两个状态具有不同的光子轨道角动量值 ($m = 0$ 和 $m = 4$). 在远场或透镜的焦平面上, 这两个模式可以通过它们不同的径向分布进行分离, 从而将具有 $m = 0$ 的中心光斑和 $m = 4$ 的外环区分开来, 最终成功将所有 4 个初始自旋轨道模式分类为独立的光束. 实验测试结果显示, 当对比度大于 10^3 时, 分选效率为 50%, 当对比度大于 10^6 时, 分选效率为 10%. 然而由于液晶的性能可能受到温度和环境变化的影响, 需要外部稳定控制, 且液晶 q 片的响应速度较慢, 因此利用液晶 q 片作为涡旋光分选器可能不适用于高速通信系统.

叉状全息图是一种常用于制备涡旋光分选器的方法, 通过光的干涉来实现不同涡旋光模式的分选^[77–79]. 2015 年, Lei 等^[22] 提出了一种名为达曼光栅的新型解复用光学器件. 如图 5(b) 所, 该器件利用达曼光栅对光信号进行编码和解码, 实现了光学信号的解复用. 具体而言, 通过将具有平面波前的高斯形光束投射到达曼光栅上, 光束经过零级

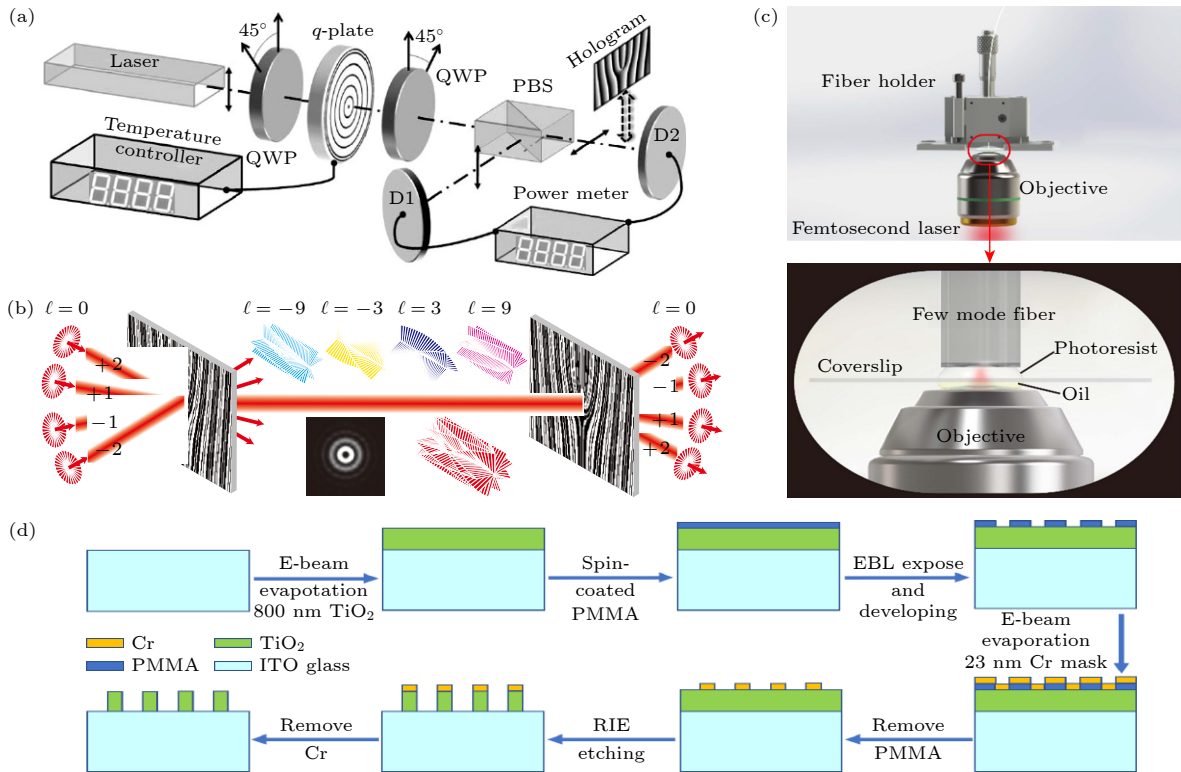


图 5 (a) 光子的 SAM 变化转换为 OAM 的装置示意图 [76]; (b) 基于达曼光栅进行 OAM(解)复用的自由空间光通信示意图 [22]; (c) 使用双光子光刻技术在少模光纤表面上制造涡旋光栅示意图 [80]; (d) 基于电子束刻蚀法制作的超表面流程图 [81]

Fig. 5. (a) The schematic of SAM-OAM mode converter [76]; (b) the schematic of free-space optical communication based on Damann grating for OAM (de)multiplexing [22]; (c) the details of fabricating vortex gratings on the surface of few-mode optical fibers using two-photon lithography [80]; (d) flow chart of producing metasurface based on electron beam etching [81].

衍射后被编码到同轴涡旋光束的不同 OAM 通道中。在接收端，通过同样的达曼光栅进行解复用，将所有 OAM 信道解码为相应衍射级的高斯光束。这种达曼光栅方案能够支持 10 个通道的涡旋光束的解复用，从而实现高达 80/160 Tbit/s 的高速光通信。

研究团队采用紫外光刻技术制造达曼光栅。他们设计了尺寸为 5.12 mm × 5.12 mm 的相位掩模，具有 1024 像素 × 1024 像素的高分辨率，光栅周期尺寸为 50 μm。制备过程如下：首先在石英衬底上涂覆了 AR-N4340 光刻胶，并控制光刻胶厚度为 1.285 μm；然后，经过软烘烤处理后，使用 365 nm 的紫外波长和 20 mW/cm² 的曝光剂量，利用 MJB4 掩模对准仪进行曝光；曝光完成后，进行后烘烤和显影处理，成功制备出所需的达曼光栅结构，其尺寸和图案与设计一致。

在 2018 年的研究中，Xie 等 [80] 提出了一种集成光纤式的 OAM(解)复用器，利用在光纤端面制备的涡旋光栅实现了直接的涡旋光 OAM 复用和解复用。经过 5 km 的少模光纤传输后，误比特率

测量结果证实了该方案的有效性和可行性。制备涡旋光栅的光纤端面制作工艺示意图如图 5(c) 所示。该实验装置解决了在端面上通过双光子光刻进行三维微纳结构制作的困难。所采用的少模光纤的芯径为 20 μm，包层直径为 125 μm。光纤和盖玻片被放置在一个支架上，可以微米级精度地调节切割面和盖玻片之间的距离。涡旋光栅的写入使用了三维光刻系统，并且通过计算机控制的样品台精确操控激光焦点相对于光纤端面的位置。涡旋光栅的模型使用计算机辅助设计软件按照定义的方程进行建模。随后，将三维设计转化为与光刻系统控制软件兼容的代码，光刻系统通过数字写入过程将设计好的结构转移到光刻胶中。

由于光栅的制备过程中涉及特定的角度，使得该方法对于角度变化非常敏感，因此在实际应用中需要精密的角度控制。每个叉状全息图通常只能分选一种涡旋光模式，对于多个涡旋光模式的分选需要多个全息图，增加了系统复杂性。

片上集成 OAM 分选对于解决数据流量指数增长所带来的挑战至关重要。虽然已经取得了一

在液晶层中以不同的方式传播, 实现涡旋光的分选. 2018年, Fang等^[88]提出了一种创新的圆柱矢量光束多路复用通信方案. 该方案利用了基于光取向液晶制造的 Pancharatnam-Berry 光学元件器件, 通过这些器件可以实现自旋相关的光学几何变换 (图 6(a)). 这种变换能够将圆柱矢量光束从甜甜圈形状转换为两条直线, 从而实现对拓扑电荷值在 -10 — $+10$ 之间的柱矢量光进行分选. 实验结果显示, 该方案具有高达 61.7% 的分选效率.

为了设计和制备 Pancharatnam-Berry 光学元件液晶器件, 该团队采用了基于无掩模动态投影曝光系统的光控取向技术. 首先, 在制备器件之前先对 ITO 玻璃基底进行了超声波和紫外臭氧清洁 (玻璃尺寸为 $1.5\text{ cm} \times 2.0\text{ cm}$). 接下来, 使用磺胺基偶氮染料 SD1 作为取向剂, 并将其旋涂在二甲基甲酰胺上. 经过 $100\text{ }^\circ\text{C}$ 下固化 10 min 后, 该团队将两个玻璃基底组装在一起, 并用环氧胶封装形成间格为 $6\text{ }\mu\text{m}$ 的液晶盒. 填充液晶后, SD1 分子将通过分子间相互作用局部引导液晶分子的取向. 需要注意的是, 由于 SD1 分子具有二色性吸收特性, 并对入射光的偏振态敏感, 当吸收紫外偏振光时, 染料分子发生异构化, 最终趋向于与局部偏振方向垂直, 从而只记录最终的光致取向. 为了将偏振全息图转移到 SD1 层上, 他们使用基于数字微镜阵列 (DMD) 的曝光技术. 经过偏振片和准直系统的紫外偏振光通过透镜到达 DMD 表面, DMD 像素微镜可以通过计算机输入图像进行控制, 使反射的紫外线偏振光中携带曝光图案信息, 最终实现液晶高精度图案化取向.

综合考虑, 光控取向液晶制作涡旋光分选器具有实时可调、高效率 and 紧凑性等优点, 但也存在响应速度有限和对波长敏感等缺点.

近几年, 基于亚波长天线阵列的超表面技术已在各个领域展示了巨大的应用价值. 通过引入突变的相位梯度, 超表面已被广泛应用于光的波前整形. 通过调制电磁波的相位和振幅, 超表面可以很容易地被用于涡旋光的复用和解复用中. Zhao等^[89]对基于单层超表面的太赫兹波段 OAM 复用进行了理论和实验验证, 他们所设计的器件可以将入射高斯光束调制为 4 个具有不同拓扑电荷数的聚焦涡旋光束, 这意味着该技术可以支持四通道 OAM 复用. 当使用每个单独的涡旋光束作为入射光束时, 在焦斑处仅识别和提取一个通道, 即实现

了 OAM 模式解复用. 该器件由 100×100 个天线单元组成, 采用真空蒸发、光刻和随后的沉积工艺相结合的方法制造, 图 6(b) 为该器件的部分天线示意图, 所制造的解复用器结构尺寸约为 $1.0\text{ cm} \times 1.0\text{ cm}$, 厚度在亚波长范围内, 其优点包括小尺寸、轻量化和低成本等.

近几十年来, 研究人员对于在紧凑设备中实现微米级和纳米级涡旋光发生器和探测器的研究兴趣逐渐增加. 2020年, Ji等^[90]设计了一种基于二碲化钨的光电探测器, 旨在直接表征涡旋光的轨道角动量的拓扑电荷 (图 6(c)). 这种探测器采用了精心设计的电极几何形状, 可以将涡旋光信号直接转化为电信号. 该光电探测器利用螺旋相位梯度驱动的轨道光电流效应, 通过测量围绕光束轴缠绕的电流来区分不同 OAM 模式. 这种电流的大小与 OAM 模式的量化值成比例, 从而实现对 OAM 拓扑电荷的直接测量.

为了实现光芯片的制备, 首要任务是获取二碲化钨薄膜. 该团队采用化学气相传输法将多晶状态下的二碲化钨粉末和转运剂碘在的耐热石英容器中密封. 在高温的环境下, 让单晶二碲化钨在容器内生长. 数天后用冰水对容器内的二碲化钨薄膜进行冷萃. 随后, 利用脱模剂聚二甲硅氧烷对薄膜进行机械剥离. 最后, 利用物理气相沉积和电子束光刻的方法在薄膜上附上接收光电流的电极. 因此利用该方法制备的光电探测器可以直接测量 OAM, 然而, 利用光电探测器仅能测量单一的拓扑电荷值, 无法对同轴的多个涡旋光束进行有效分选.

4 涡旋光在模式复用通信方面的应用

近年来, OAM 在光通信中的应用是 OAM 子领域中最活跃的研究方向之一^[91–95]. 关键原因是光的自旋角动量只有两个正交状态, 而 OAM 有可能无限多个状态. 早在 2004 年, Padgett 等^[96]就在自由空间通信中首次明确使用了 OAM, 他们在几米范围内的望远镜-望远镜光学链路中应用了 OAM. 该早期系统利用空间光调制器 (SLM) 制造和测量了 8 种不同的 OAM 状态之一, 尽管其固有光学测量效率为 $1/8$. 随后, 利用两个共同传播但可区分的 OAM 信道进行了长路径长度演示^[97], 在射频领域取得了成功. 尽管存在这些早期的演示,

但直到 Wang 等^[98,99]将 OAM 与他们在实际通信系统中的专业知识相结合, OAM 在扩展多路复用选项范围方面的潜力才得到真正的认可.

在 OAM 多路复用光通信领域, 近年来出现了两种主要方案: 自由空间通信^[96,98,100]和光纤通信^[101,102]. OAM 复用光通信已经实现了超过 Tbit 级别的传输容量, 远远超越了传统方案, 从而极大地拓宽了其应用范围. 同时, 随着涡旋光在大气中传播的研究的不断深入, 利用涡旋光进行自由空间通信的性能也在逐步改善和提升. 2012 年, Wang 等^[98]在涡旋光 OAM 解复用领域取得了重要突破, 成功展示了 4 个偏振复用的轨道角动量光束的复用和解复用技术. 如图 7(a) 所示, 他们利用正交幅度调制 (16-QAM) 信号传输每个光束, 实现了每个符号 4 位的数据传输, 每个光束承载了 (42.8×4) Gbit/s 的数据速率. 通过复用 4 个轨道角动量光束和两个偏振状态, 总传输容量达到了 1369.6 Gbit/s, 频谱效率达到了 25.6 bit/s/Hz(使用 50 GHz 网格). 他们还在空间域展示了可扩展性, 通过利用两组同心环, 每组包含 8 个偏振复用的轨道角动量光束. 每个光束承载着 (20×4) Gbit/s 的 16-QAM 信号, 从而实现了令人瞩目的 2560 Gbit/s 的传输容量. 通过复用 8 个轨道角动量光束、两个偏振状态和两组同心环, 频谱效率达到了 95.7 bit/s/Hz(使用 25 GHz 网格). 此外, 他们还成功展示了两个轨道角动量光束之间的数据交换, 每个光束承载了 100 Gbit/s 的差分正交相移键控 (DQPSK) 信号. 这些重要研究成果推动了涡旋光 OAM 解复用技术的发展, 并为高容量、高效率的光通信系统提供了有力的支持.

2017 年, Lavery 等^[103]进行了一项重要实验, 他们在涡旋光 OAM 解复用领域取得了新的突破. 如图 7(b) 所示, 他们在实验中叠加了两束具有不同轨道角动量状态的波长为 809 nm 的光束, 并将其传输穿越了埃尔朗根市区, 距离达到了 1.6 km. 这些光束不仅穿越了公路, 还经过了高耸的建筑物, 在日常的城市环境中受到了噪音和大气湍流的干扰. 通过这个实验, 研究人员成功地探索了在真实的城市环境中传输高维结构化光场的可行性. 这一成果为进一步推动涡旋光 OAM 解复用技术在实际应用中的发展提供了重要的实证基础.

实验中的具体步骤如下. 首先, 使用二极管激光光源产生光束, 然后利用空间光调制器 (SLM)

在光束上编码了具有 l 分叉全息图的 OAM 模式. 在本实验中, 所使用的是线偏振模式. 接下来, 通过望远镜对这些模式进行进一步扩展, 使其具有约 40 mm 的近似光束尺寸. 随后, 这些光束通过 1.6 km 的自由空间链路进行传输. 实验中的模式接收器由一个直径为 150 mm、焦距为 800 mm 的聚光透镜组成. 测量结果显示, 当 $l=1$ 时, 在接收孔径处接收到的光功率损失约为 5.64 dB.

望远镜中还包括第 2 个透镜, 用于对收集到的光束进行缩小, 使其直径约为 10 mm. 为了检测 OAM 内容以及 OAM 通道之间的串扰, 他们在缩小光束的望远镜输出处放置了一个称为模式分选器的设备. 该模式分选器利用两个折射元件将 OAM 态转换为横向动量态 (即倾斜的平面波). 透镜用于将这些转换后的态聚焦到放置在焦平面上的电荷耦合器件 (CCD) 摄像机上的离散点上. 在测量的 CCD 图像中, 他们定义了相邻且大小相等的区域, 每个区域对应于特定的 OAM 模式. 每个区域中测得的像素值之和与每个 OAM 模式中的光束功率成比例. 这种方法提供了一种全新的无线点对点数据传输方式. 由于该方案基于轨道角动量量子态, 它还展示了量子纠缠现象的特性. 这意味着该技术有潜力在量子密码学领域得到应用. 通过利用量子纠缠, 可以实现更安全的通信和数据传输, 进一步推动信息安全领域的发展.

与自由空间 OAM 通信相比, 基于光纤的 OAM 通信系统在湍流大气中具有更好的稳定性. 在 2018 年, Heng 等^[104]提出并展示了一种用于稳定生成和传播轨道角动量光束全光纤方案. 如图 7(c) 所示, 方案利用自行设计和制造的梯度折射率少模纤维 (GI-FMF) 和兼容的模式选择耦合器 (MSC). MSC 由传统的单模光纤 (SMF) 和 GI-FMF 组成, 实现了有效的 SMF 基模到 GI-FMF 目标 OAM 模式的耦合, 满足相位匹配条件. 同时, GI-FMF 打破了所选择的本征模式和相邻矢量模式之间的退化, 确保了所选择 OAM 模式的保持和传播. 经过实验验证, 研究人员成功实现了在 $|l|=1$ 的稳定 OAM 模式下工作的全光纤器件. 实验结果表明, 涡旋光束能够稳定地传播, 模式纯度约为 95%, 带宽达到 100 nm. 这种全光纤器件为进一步开发宽带轨道角动量模式分割复用应用提供了可行性. 这种全光纤器件可用于进一步开发宽带轨道角动量模式分割复用应用.

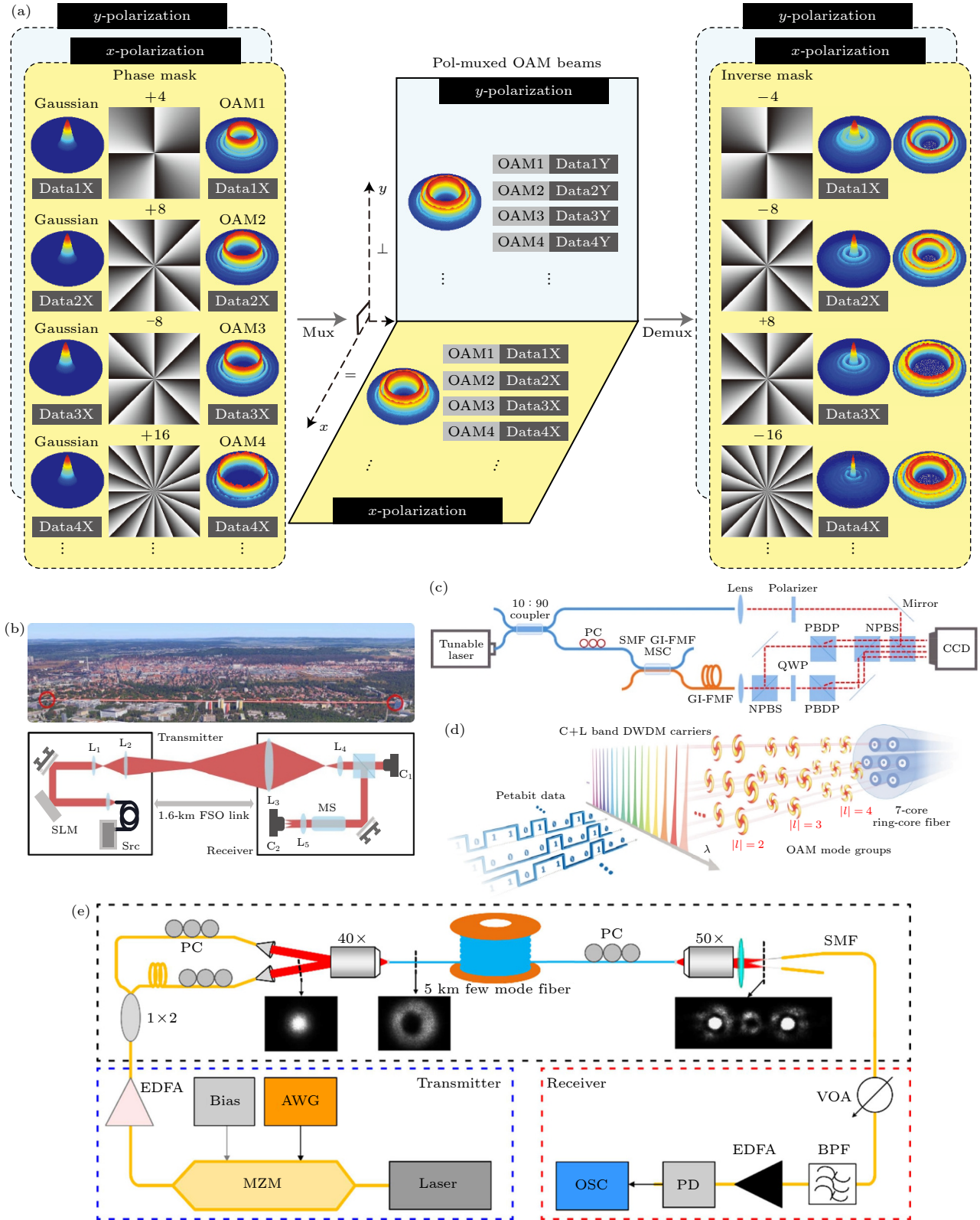


图 7 (a) 载有信息的涡旋光束的复用/解复用以及偏振复用/解复用^[98]; (b) 埃尔朗根天际线 1.6 km 远的自由空间扭曲光路图和实验装置图^[103]; (c) 用于表征生成的涡旋光束的实验装置^[104]; (d) OAM-SDM-WDM 数据传输的实验装置^[105]; (e) OAM 复用光纤通信系统的实验装置, 实验装置包括发射器、OAM(解)复用器和接收器^[80]

Fig. 7. (a) De/multiplexing of OAM beams carrying information and de/multiplexing of polarization^[98]; (b) 1.6 km free-space link in the city of Erlangen and the corresponding experimental setup^[103]; (c) experimental setup for characterizing the generated OAM beam^[104]; (d) experimental setup of OAM-SDM-WDM data transmission^[105]; (e) experimental setup of the optical fiber communication system for OAM multiplexing, including a transmitter, an OAM, de/multiplexer and a receiver^[80].

在 2022 年, Liu 等^[105] 提出了一种创新的 OAM 空间多路复用 (OAM-SDM) 方案, 并成功实现了高容量的光纤传输系统实验. 如图 7(d) 所示, 他们设计了一种具有离轴相位补偿的 7 通道模式转换相位板, 并在自研的 7 环芯 OAM 光纤中实现了低串扰的发射和传输, 包括纤芯间以及纤芯内部模式信道组之间的传输. 在接收端, 仅使用了固定规模的 4×4 多输入多输出 (MIMO) 算法来补偿模式组内部 4 个简并模式之间的串扰. 该方案通过增加每个纤芯中模式组的数量来扩展复用信道的数量, 而不是增加纤芯的数量, 从而保证了光纤的总直径小于 $200 \mu\text{m}$. 基于这一创新的 OAM-SDM 方案, 结合 C + L 波段密集波分复用技术, 他们首次展示了 Pbit/s 级别的 OAM 复用光纤传输系统实验. 在单根光纤内传输了 24960 个数据信道, 传输距离达到 34 km. 该系统的总 (净) 容量可达 $1.223 (1.02) \text{ Pbit/s}$, 并且具有较高的频谱效率, 可达 $156.8 (130.7) \text{ bit}/(\text{s}\cdot\text{Hz})$.

5 总结与展望

本文从涡旋光束的基本理论出发, 对涡旋光的解复用原理、加工制备方法以及新兴应用等相关研究进展进行了综述. 首先简述了 OAM 解复用原理的发展历程. 随后, 针对涡旋光 OAM 解复用, 介绍了多种典型的适用于实现多个涡旋 OAM 的分离和解复用器件的制备方法. 尽管利用马赫-曾德干涉仪的方法可以对单个光子的 OAM 进行分类, 但随着待分选的 OAM 状态数量的增加, 系统的复杂度和信号损失也会迅速增加. 这种复杂性和信号损失的上升限制了其在实际应用中的可扩展性. 然而, 几何坐标变换技术在多个领域已经取得了显著的成功, 这种技术可以将螺旋相位光束转换为横向相位梯度, 从而实现涡旋光 OAM 的有效分选. 新近提出的多平面光转换器方案具有更高的潜力, 可以实现数百个不同 OAM 模式的空间解复用, 这为光通信领域带来了更为广阔的发展前景.

在过去二十年, 涡旋光 OAM 分选器的制备技术得到了广泛研究与发展. 电子束刻蚀法利用电子束对光刻胶进行图案化, 能够形成高分辨率、精确度高的涡旋光解复用器件结构, 适用于微小结构. 然而, 该方法制备效率低, 工艺流程复杂, 难以用于大规模生产, 且可制备器件面积有限, 可能需要

多次曝光和刻蚀才能制作大尺寸器件. 激光直写法通过将聚焦的激光束直接写入光敏材料, 从而制备所需结构. 虽然适用于微小涡旋光器件, 但相较于电子束刻蚀法, 其分辨率依然较低. 利用聚合光敏材料和激光的非线性光学效应, 可以实现亚微米尺度的高分辨率制备. 双光子聚合法适用于制备具有复杂结构和高度定制化的涡旋光解复用器件, 但通常分辨率相对较低. 新兴的光控取向液晶制备涡旋光分选器具有实时可调、高效率 and 紧凑性等优点, 但也存在响应速度有限和对波长敏感等问题. 这些技术为小型化涡旋光 OAM 分选器的制备提供了多样化的选择, 但在选择时需要权衡其优缺点以满足特定应用需求.

除了涡旋光束在粒子操控、生物医学等领域的应用, 近年来 OAM 在通信领域的应用也备受关注. 由于涡旋光 OAM 在理论上具有无限多的拓扑电荷以及不同 OAM 态之间的相互正交性, OAM 为光通信系统提供了一个全新的物理维度. 通过利用 OAM 作为新的光通信自由度, 可以与现有的多路复用传输系统合并兼容, 这有望为光通信技术带来巨大的变革. 这篇综述文章还提供了对 OAM 在光通信领域的应用研究的概述和总结, 为进一步探索和发展基于 OAM 的高容量光通信技术提供了参考.

尽管近年来涡旋光发展迅速, 但仍充满挑战和机遇. 为了进一步推动涡旋光的发展, 需要改进涡旋光的生成、检测和操控方法和设备. 这包括发展更高效、更精确的涡旋光生成技术, 设计更灵敏、更可靠的涡旋光检测方法, 并提供更灵活、更可控的涡旋光操控设备. 此外, 还需要深入研究涡旋光的更高级应用, 探索其在新领域和新技术中的潜在应用, 以实现更广泛的应用和影响. 随着技术的不断进步和理解的深入, 涡旋光必将在光学领域中扮演越来越重要的角色, 并为科学研究和实际应用带来更多创新和突破.

参考文献

- [1] Webb W, Hanzo L 1994 *Modern Quadrature Amplitude Modulation: Principles and Applications for Wireless Communications* (Hoboken: Wiley-IEEE Press)
- [2] Mukherjee B 2006 *Optical WDM Networks* (New York: Springer)
- [3] Hanzo L, Ng S X, Keller T, Webb W 2004 *Quadrature Amplitude Modulation* (Hoboken: Wiley-IEEE Press)

- [4] Rubinsztein-Dunlop H, Forbes A, Berry M V 2017 *J. Opt.* **19** 013001
- [5] Forbes A, De Oliveira M, Dennis M R 2021 *Nat. Photon.* **15** 253
- [6] Allen L, Beijersbergen M W, Spreeuw R J C, Woerdman J P 1992 *Phys. Rev. A* **45** 8185
- [7] Van Enk S J, Nienhuis G 1992 *Opt. Commun.* **94** 147
- [8] Beijersbergen M W, Allen L, Van Der Veen H E L O, Woerdman J P 1993 *Opt. Commun.* **96** 123
- [9] Molina-Terriza G, Torres J P, Torner L 2007 *Nat. Phys.* **3** 305
- [10] Padgett M J 2017 *Opt. Express* **25** 11265
- [11] Tkachenko G, Chen M Z, Dholakia K, Mazilu M 2017 *Optica* **4** 330
- [12] Zhang Y, Shi W, Shen Z, Man Z, Min C, Shen J, Zhu S, Urbach H P, Yuan X 2015 *Sci. Rep.* **5** 15446
- [13] Tamburini F, Anzolin G, Umbriaco G, Bianchini A, Barbieri C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 163903
- [14] Xie G, Song H, Zhao Z, Milione G, Ren Y, Liu C, Zhang R, Bao C, Li L, Wang Z, Pang K, Starodubov D, Lynn B, Tur M, Willner A E 2017 *Opt. Lett.* **42** 4482
- [15] Qiu C W, Yang Y 2017 *Science* **357** 645
- [16] Swartzlander J G A, Ford E L, Abdul-Malik R S, Close L M, Peters M A, Palacios D M, Wilson D W 2008 *Opt. Express* **16** 10200
- [17] Tamburini F, Thide B, Molina-Terriza G, Anzolin G 2011 *Nat. Phys.* **7** 195
- [18] Fang X, Ren H, Gu M 2019 *Nat. Photonics* **14** 102
- [19] Erhard M, Fickler R, Krenn M, Zeilinger A 2018 *Light Sci. Appl.* **7** 17146
- [20] Wang J 2016 *Photon. Res.* **4** B14
- [21] Jia P, Yang Y, Min C J, Fang H, Yuan X C 2013 *Opt. Lett.* **38** 588
- [22] Lei T, Zhang M, Li Y R, Jia P, Liu G N, Xu X G, Li Z H, Min C J, Lin J, Yu C Y, Niu H B, Yuan X C 2015 *Light Sci. Appl.* **4** e257
- [23] Ren Y, Li L, Wang Z, Kamali S M, Arbabi E, Arbabi A, Zhao Z, Xie G, Cao Y, Ahmed N, Yan Y, Liu C, Willner A J, Ashrafi S, Tur M, Faraon A, Willner A E 2016 *Sci. Rep.* **6** 33306
- [24] Padgett M, Courtial J, Allen L 2004 *Phys. Today* **57** 35
- [25] Beijersbergen M W, Coerwinkel R P C, Kristensen M, Woerdman J P 1994 *Opt. Commun.* **112** 321
- [26] Carpentier A V, Michinel H, Salgueiro J R, Olivieri D 2008 *Am. J. Phys.* **76** 916
- [27] Yu N F, Genevet P, Kats M A, Aieta F, Tetienne J P, Capasso F, Gaburro Z 2011 *Science* **334** 333
- [28] Cai X, Wang J, Strain M J, Johnson-Morris B, Zhu J, Sorel M, O'Brien J L, Thompson M G, Yu S 2012 *Science* **338** 363
- [29] Kumar A, Vaity P, Krishna Y, Singh R P 2010 *Opt. Laser Eng.* **48** 276
- [30] Bouchal Z, Haderka O, Celechovsky R 2005 *New J. Phys.* **7** 125
- [31] Marrucci L, Karimi E, Shussarenko S, Piccirillo B, Santamato E, Nagali E, Sciarrino F 2011 *J. Opt.* **13** 064001
- [32] Bozinovic N, Yue Y, Ren Y X, Tur M, Kristensen P, Huang H, Willner A E, Ramachandran S 2013 *Science* **340** 1545
- [33] Anhauser A, Wunenburger R, Brasselet E 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 034301
- [34] Jiang X, Li Y, Liang B, Cheng J C, Zhang L K 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 034301
- [35] Li H, Ren G, Zhu B, Gao Y, Yin B, Wang J, Jian S 2017 *Opt. Lett.* **42** 179
- [36] Verbeeck J, Tian H, Schattschneider P 2010 *Nature* **467** 301
- [37] Liu C M, Liu J S, Niu L T, Wei X L, Wang K J, and Yang Z G 2017 *Sci. Rep.* **7** 3891
- [38] Liu Y X, Sun S H, Pu J X, Lu B D 2013 *Opt. Laser Technol.* **45** 473
- [39] Ambuj A, Vyas R, Singh S 2014 *Opt. Lett.* **39** 5475
- [40] Tao H, Liu Y, Chen Z, Pu J 2012 *Appl. Phys. B* **106** 927
- [41] Leach J, Padgett M J, Barnett S M, Franke-Arnold S, Courtial J 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 257901
- [42] Ruffato G, Massari M, Romanato F 2016 *Sci. Rep.* **6** 24760
- [43] Zheng S, Wang J 2017 *Sci. Rep.* **7** 40781
- [44] Dai K J, Gao C Q, Zhong L, Na Q X, Wang Q 2015 *Opt. Lett.* **40** 562
- [45] Harris M, Hill C A, Tapster P R, Vaughan J M 1994 *Phys. Rev. A* **49** 3119
- [46] Martelli P, Boffi P, Fasiello A, Martinelli M 2015 *Electron. Lett.* **51** 278
- [47] Hossack W J, Darling A M, Dahdouh A 1987 *J. Modern Opt.* **34** 1235
- [48] Ruffato G, Massari M, Parisi G, Romanato F 2017 *Opt. Express* **25** 7859
- [49] Yang J S, Liu Z B, Gao S C, Huang X C, Feng Y H, Liu W P, Li Z H 2019 *Opt. Express* **27** 4338
- [50] Berkhout G C, Lavery M P, Courtial J, Beijersbergen M W, Padgett M J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 153601
- [51] Lavery M P, Robertson D J, Berkhout G C, Love G D, Padgett M J, Courtial J 2012 *Opt. Express* **20** 2110
- [52] Ruffato G, Massari M, Romanato F 2017 *Opt. Lett.* **42** 551
- [53] Ruffato G, Massari M, M Girardi, G Parisi, Zontini M, and Romanato F 2019 *Opt. Express* **27** 24123
- [54] Lightman S, Hurvitz G, Gvishi R, Arie A 2017 *Optica* **4** 605
- [55] Wan C H, Chen J, Zhan Q W 2017 *APL Photonics* **2** 031302
- [56] Li L, Guo Y C, Zhang Z C, Shang Z J, Li C, Wang J Q, Gao L L, Hai L, Gao C Q, Fu S Y 2023 *Adv. Photon.* **5** 056002
- [57] Mirhosseini M, Malik M, Shi Z, Boyd R W 2013 *Nat. Commun.* **4** 2781
- [58] Malik M, Mirhosseini M, Lavery M 2014 *Nat. Commun.* **5** 3115
- [59] Wen Y H, Chremmos I, Chen Y J, Zhu J B, Zhang Y F, Yu S Y 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 193904
- [60] Fontaine N K, Ryf R, Chen H, Neilson D T, Kim K, Carpenter J 2019 *Nat. Commun.* **10** 1865
- [61] Liu Z B, Gao S C, Lai Z Y, Li Y R, Ao Z H, Li J P, Tu J J, Wu Y X, Liu W P, Li Z H 2023 *Laser Photonics Rev.* **17** 2200536
- [62] Huang Z, Wang P, Liu J, Xiong W, He Y, Xiao J, Ye H, Li Y, Chen S, Fan D 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 014037
- [63] Brandt F, Hiekkamäki M, Bouchard F, Huber M, Fickler R 2020 *Optica* **7** 98
- [64] Labroille G, Denolle B, Jian P, Genevaux P, Treps N, Morizur J F 2014 *Opt. Express* **22** 15599
- [65] Schloegel K, Karypis G, Kumar V 2001 *IEEE T. Parall. Distr.* **12** 451
- [66] Cao H, Liang Y Z, Wang L L, Ruan Z S, Wang H Y, Zeng J W, Wang J 2023 *Laser Photonics Rev.* **17** 2200631
- [67] Shi J S, Wei D, Hu C, Chen M C, Liu K W, Luo J, Zhang X Y 2021 *Opt. Express* **29** 7084
- [68] Veli M, Mengü D, Yardımcı N T, Luo Y, Li J, Rivenson Y, Jarrahi M, Ozcan A 2021 *Nat. Commun.* **12** 37
- [69] Zhou T, Lin X, Wu J, Chen Y, Xie H, Li Y, Fan J, Wu H, Fang L, Dai Q 2021 *Nature Photonics* **15** 367
- [70] Yan T, Wu J, Zhou T, Xie H, Xu F, Fan J, Fang L, Lin X,

- Dai Q 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 023901
- [71] Lin X, Rivenson Y, Yardimci N T, Veli M, Luo Y, Jarrahi M, Ozcan A 2018 *Science* **361** 1004
- [72] Doster T, Watnik A T 2017 *Appl. Opt.* **56** 3386
- [73] Chen P, Ma L L, Duan W, Chen J, Ge S J, Zhu Z H, Tang M J, Xu R, Gao W, Li T, Hu W, Lu Y Q 2018 *Adv. Mater.* **30** 1705865
- [74] Milione G, Nguyen T A, Leach J, Nolan D A, Alfano R R 2015 *Opt. Lett.* **40** 4887
- [75] Liu S J, Chen P, S. Ge J, Zhu L, Zhang Y H, Lu Y Q 2022 *Laser Photonics Rev.* **16** 2200118
- [76] Karimi E, Piccirillo B, Nagali E, Marrucci L, Santamato E 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 231124
- [77] Zhang H, Fu C, Fang J, Lei T, Zhang Y, Yuan X 2020 *Appl. Opt.* **59** 11041
- [78] Xie Z, Lei T, Weng X, Du L, Gao S, Yuan Y, Feng S, Zhang Y, Yuan X 2016 *IEEE Photonics Technology Letters* **28** 2799
- [79] Min C, Liu J, Lei T, Si G, Xie Z, Lin J, Du L, Yuan X 2016 *Laser Photonics Rev.* **10** 978
- [80] Xie Z, Gao S, Lei T, Feng S, Zhang Y, Li F, Zhang J, Li Z, Yuan X 2018 *Photon. Res.* **6** 743
- [81] Cheng J, Sha X, Zhang H, Chen Q, Qu G, Song Q, Yu S, Xiao S 2022 *Nano. Lett.* **22** 3993
- [82] Li S, Li X, Zhang L, Wang G, Zhang L, Liu M, Zeng C, Wang L, Sun Q, Zhao W, Zhang W 2020 *Adv. Optical Mater.* **8** 1901666
- [83] Li Y, Li X, Chen L, Pu M, Jin J, Hong M, Luo X 2017 *Adv. Optical Mater.* **5** 1600502
- [84] Zhang S, Huo P, Zhu W, Zhang C, Chen P, Liu M, Chen L, Lezec H J, Agrawal A, Lu Y, Xu T 2020 *Laser & Photonics Reviews* **14** 2000062
- [85] Fu P, Ni P N, Wang Q H, Liu Y F, Wu B, Chen P P, Kan Q, Wang S P, Chen H D, Xu C, Xie Y Y 2021 *Adv. Optical Mater.* **9** 2101308
- [86] Chung H, Kim D, Choi E, Lee J 2022 *Laser Photonics Rev.* **16** 2100456
- [87] Feng Q, Kong X, Shan M, Lin Y, Li L, Cui T J 2022 *Phys. Rev. Appl.* **17** 034017
- [88] Fang J C, Xie Z W, Lei T, Min C J, Du L P, Li Z H, Yuan X C 2018 *Acs Photonics* **5** 3478
- [89] Zhao H, Quan B, Wang X, Gu C, Li J, Zhang Y 2017 *ACS Photonics* **5** 1726
- [90] Ji Z, Liu W, Krylyuk S, Fan X, Zhang Z, Pan A, Feng L, Davydov A, Agarwal R 2020 *Science* **368** 763
- [91] Wang P P, Xiong W J, Huang Z B, He Y L, Liu J M, Ye H P, Xiao J N, Li Y, Fan D Y, Chen S Q 2022 *IEEE J. Sel. Top. Quant.* **28** 7500111
- [92] Wang P, Xiong W, Huang Z, He Y, Xie Z, Liu J, Ye H, Li Y, Fan D, Chen S 2021 *Photon. Res.* **9** 2116
- [93] Xiong W J, Huang Z B, Wang P P, Wang X R, He Y L, Wang C F, Liu J M, Ye H P, Fan D Y, Chen S Q 2021 *Opt. Express* **29** 36936
- [94] Xiong W, Wang P, Cheng M, Liu J, He Y, Zhou X, Xiao J, Li Y, Chen S, Fan D 2020 *J. Lightwave Technol.* **38** 1712
- [95] Willner A E, Li L, Xie G, Ren Y, Huang H, Yue Y, Ahmed N, Willner M J, Willner A J, Yan Y, Zhao Z, Wang Z, Liu C, Tur M, Ashrafi S 2016 *Photon. Res.* **4** B5
- [96] Gibson G, Courtial J, Padgett M, Vasnetsov M, Pas'ko V, Barnett S, Franke-Arnold S 2004 *Opt. Express* **12** 5448
- [97] Tamburini F, Mari E, Sponselli A, Thidé B, Bianchini A, Romanato F 2012 *New J. Phys.* **14** 033001
- [98] Wang J, Yang J Y, Fazal I M, Ahmed N, Yan Y, Huang H, Ren Y X, Yue Y, Dolinar S, Tur M, Willner A E 2012 *Nat. Photonics* **6** 488
- [99] Li L, Zhang R, Zhao Z, Xie G, Liao P, Pang K, Song H, Liu C, Ren Y, Labroille G, Jian P, Starodubov D, Lynn B, Bock R, Tur M, Willner A E 2017 *Sci. Rep.* **7** 17427
- [100] Vallone G, D'Ambrosio V, Sponselli A, Slussarenko S, Marrucci L, Sciarrino F, Villoresi P 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 060503
- [101] Wang A D, Zhu L, Chen S, Du C, Mo Q, Wang J 2016 *Opt. Express* **24** 11716
- [102] Zhu L, Liu J, Mo Q, Du C, Wang J 2016 *Opt. Express* **24** 16934
- [103] Lavery M P J, Peuntinger C, Gunthner K, Banzer P, Elser D, Boyd R W, Padgett M J, Marquardt C, Leuchs G 2017 *Sci. Adv.* **3** e1700552
- [104] Heng X B, Gan J L, Zhang Z S, Li J, Li M Q, Zhao H, Qian Q, Xu S H, Yang Z M 2018 *Opt. Express* **26** 17429
- [105] Liu J, Zhang J, Liu J, Lin Z, Li Z, Lin Z, Zhang J, Huang C, Mo S, Shen L, Lin S, Chen Y, Gao R, Zhang L, Lan X, Cai X, Li Z, Yu S 2022 *Light Sci. Appl.* **11** 202

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Miniaturized optical vortex mode demultiplexer: Principle, fabrication, and applications^{*}

Yang Xin-Yu¹⁾²⁾ Ye Hua-Peng^{1)2)†} Li Pei-Yun²⁾ Liao He-Lin²⁾
 Yuan Dong^{1)2)‡} Zhou Guo-Fu¹⁾²⁾

1) (*National Center for International Research on Green Optoelectronics, SCNU-TUE Joint Lab of Device Integrated Responsive Materials (DIRM), South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Institute of Electronic Paper Displays, Guangdong Provincial Key Laboratory of Optical Information Materials and Technology, South China Academy of Advanced Optoelectronics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 19 September 2023; revised manuscript received 7 October 2023)

Abstract

Vortex beams have attracted extensive attention in recent decade due to the carried optical orbital angular momentum (OAM). Vortex beams carrying different OAM modes are orthogonal to each other, and thus have become highly promising in realizing high-capacity optical communication systems. This review is to introduce the fundamental principles of optical OAM mode demultiplexing, recent advances in the fabrication techniques and emerging applications in high-capacity optical communications. First, this review introduces the development history of the working principle of OAM mode demultiplexer. Subsequently, a variety of preparation techniques and emerging applications of OAM mode demultiplexing are discussed in detail. Finally, we provide an in-depth analysis and outlook for the future trends and prospects of the OAM mode demultiplexer.

Keywords: vortex beam, orbital angular momentum, high-capacity optical communication, demultiplex, miniaturized photonic device

PACS: 42.79.Sz, 42.79.-e, 42.50.Tx, 85.60.-q

DOI: [10.7498/aps.72.20231521](https://doi.org/10.7498/aps.72.20231521)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61805087), the Special Program on Key Fields for Colleges and Universities of Guangdong Province, China (Grant No. 2021ZDZX1048), the Key Laboratory of Optical Information Materials and Technology Guangdong Province, China (Grant No. 2017B030301007), and the National Green Optoelectronics International Joint Research Center (Grant No. 2016B01018).

[†] Corresponding author. E-mail: yehp@m.scnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: yuandong@scnu.edu.cn

小型化涡旋光模式解复用器：原理、制备及应用

杨鑫宇 叶华朋 李佩芸 廖鹤麟 袁冬 周国富

Miniaturized optical vortex mode demultiplexer: Principle, fabrication, and applications

Yang Xin-Yu Ye Hua-Peng Li Pei-Yun Liao He-Lin Yuan Dong Zhou Guo-Fu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204207 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20231521

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231521>

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

基于电光晶体平板部分相位调制动态产生涡旋光束

Dynamic generation of vortex beam based on partial phase modulation of electro-optical crystal plate

物理学报. 2022, 71(20): 207801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220835>

基于平面相控阵的轨道角动量涡旋电磁波扫描特性

Beam steering of orbital angular momentum vortex wave based on planar phased array

物理学报. 2021, 70(23): 238401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211119>

利用衍射光栅探测涡旋光束轨道角动量态的研究进展

Progress of detecting orbital angular momentum states of optical vortices through diffraction gratings

物理学报. 2018, 67(3): 034201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171899>

平板式螺旋相位板的设计与应用

Design and application of flat spiral phase plate

物理学报. 2019, 68(5): 054102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181677>

基于场变换理论的大角度涡旋电磁波生成方法

Wide-angle method for vortex electromagnetic wave generation using field transformation

物理学报. 2020, 69(13): 135201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200365>

一种可用于轨道角动量的受激布里渊放大的光子晶体光纤放大器

Design of photonic crystal fiber amplifier based on stimulated Brillouin amplification for orbital angular momentum

物理学报. 2022, 71(7): 074206 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211909>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

非简并双光子吸收及其应用研究进展*

吴波^{1)†} 王爵¹⁾ 王崑¹⁾ 周国富^{1)2)3)‡}

1) (华南师范大学, 华南先进光电子研究院, 广东省光信息材料与技术重点实验室,

彩色动态电子纸显示技术研究所, 广州 510006)

2) (深圳市国华光电科技有限公司, 深圳 518110)

3) (深圳市国华光电研究院, 深圳 518110)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 7 月 13 日收到修改稿)

非简并双光子吸收是两个能量不同的光子同时被介质吸收, 产生一次电子从基态经过一个中间虚态向激发态跃迁的非线性光学效应. 非简并双光子吸收与简并双光子吸收相比, 由于中间态共振效应, 吸收系数得到了几十倍甚至几百倍的增大, 因此在多个非线性光学应用中具有极大的潜力. 本文首先介绍双光子吸收的基本原理, 解释了非简并双光子吸收的增强机制; 然后详细介绍双光子吸收的基本测量方法; 接着综述三维半导体材料、有机荧光分子、二维材料与量子点的非简并双光子吸收相关研究; 最后重点总结了其在红外探测与成像、双光子荧光显微成像、全光开关与光调制等领域的应用进展, 并对领域领域的未来发展进行了展望.

关键词: 非简并双光子吸收, 红外探测, 非线性光学, 双光子荧光显微成像, 全光开关与光调控**PACS:** 42.65.-k, 85.60.Gz, 42.30.-d, 42.65.Pc**DOI:** 10.7498/aps.72.20230911

1 引言

非线性光学是研究介质在强相干光场作用下的非线性光学性质变化及相关应用的一门科学. 其研究开端可溯源至 1961 年 Franken 等^[1]发现的二次谐波. 伴随着高亮度、高相干光源的不断涌现, 非线性光学经过 60 多年的发展, 已成为光学研究中的一个重要分支, 在多个领域有着广泛的应用. 如现代超短脉冲激光技术的发展极大依赖于非线性光学的应用, 包括电-光开关、混频、倍频、光学参量放大和振荡等^[2]. 光学相位共轭和非线性折射效应被广泛应用于光学信息处理和成像等光电器件中. 此外, 材料在共振和瞬态激励下的非线性光学现象也可以用来揭示材料的基本物理性质, 如高

激发态和载流子动力学^[2]. 因此, 材料非线性光学的研究对于传统非线性光学器件的开发、新型非线性光学器件的设计以及理解光与物质相互作用过程的物理机制具有重要的基础科学和技术意义.

双光子吸收 (two photon absorption, TPA) 是一种典型的三阶非线性光学效应, 是由于强光入射非线性光学介质, 介质同时吸收两个光子发生一次电子从基态经过一个中间虚态向激发态跃迁的光学过程. 其在光开关^[3]、光限幅^[4,5]、生物成像^[6]、微加工^[7]、光信息存储^[8]、光化学治疗^[9]等方向均有着广泛的应用. 三阶磁化率 $\chi^{(3)}$ 是形成三阶非线性的主要原因. 非线性吸收系数 β 与 $\chi^{(3)}$ 的虚部有关, 其关系式为 $\text{Im}\chi^{(3)} = c^2 n_0^2 \epsilon_0 \beta / \omega$. 其中 c 是光速, n_0 为线折射率, ϵ_0 为真空介电常数, ω 是角频率.

* 国家自然科学基金 (批准号: 62175068)、广东省基础与应用基础研究基金自然科学基金 (批准号: 2023B1515020024)、广东省光信息材料与技术重点实验室 (批准号: 2017B030301007) 和国家绿色光电子国际联合研究中心 (批准号: 2016B01018) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bowu@m.scnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: guofu.zhou@m.scnu.edu.cn

在双光子吸收中,当两个光子的能量相同时,称为简并双光子吸收 (degenerate TPA, D-TPA); 反之称为非简并双光子吸收 (nondegenerate TPA, ND-TPA)(图 1). 与 D-TPA 相比, ND-TPA 的吸收系数由于中间态共振效应等影响,可以得到几十倍甚至几百倍的增大. 因此, ND-TPA 在理论和实验中得到了广泛研究,在红外探测^[10-15]、生物成像^[16-19]、全光开关与调制^[20-22]等应用中展现了巨大的潜力.

本文主要介绍非简并双光子吸收的理论原理及其近年来的研究进展与应用. 首先,系统阐述了 TPA 的基本物理原理,接着介绍了几种常用的 TPA 系数的测量方法,然后重点回顾了传统三维半导体材料、有机荧光分子材料、新型低维材料的 ND-TPA 的相关研究以及其在红外探测、生物成像及全光开关与调制方面的应用进展. 最后给出了 ND-TPA 研究未来的挑战及展望.

2 双光子吸收基本原理

双光子吸收是一种三阶非线性光学效应,即与 $\mathbf{P}^{(3)}$ 相关. 当频率为 ω_1 和 ω_2 的两束光波通过介质时,可以通过麦克斯韦方程得到稳态下的非线性波动方程:

$$\frac{\partial \mathbf{E}(z, \omega)}{\partial z} = \frac{i\omega}{2\varepsilon_0 c n} \mathbf{P}^{(3)}(z, \omega). \quad (1)$$

由于频率为 ω_1 和 ω_2 的两个光电场沿 z 方向传播,两光场振幅分别为

$$\mathbf{E}(z, \omega_1) = \mathbf{E}_0(z, \omega_1) e^{i(k_1 z - \omega_1 t)} + \text{c.c.}, \quad (2)$$

$$\mathbf{E}(z, \omega_2) = \mathbf{E}_0(z, \omega_2) e^{i(k_2 z - \omega_2 t)} + \text{c.c.} \quad (3)$$

根据非线性光学经典理论,两光场的极化强度分别表示为

$$\mathbf{P}^{(3)}(\omega_1) = 6\varepsilon_0 \chi^{(3)}(\omega_1; \omega_2, -\omega_2, \omega_1) \times \mathbf{E}(\omega_2) \mathbf{E}^*(\omega_2) \mathbf{E}(\omega_1), \quad (4)$$

$$\mathbf{P}^{(3)}(\omega_2) = 6\varepsilon_0 \chi^{(3)}(\omega_2; \omega_1, -\omega_1, \omega_2) \times \mathbf{E}(\omega_1) \mathbf{E}^*(\omega_1) \mathbf{E}(\omega_2). \quad (5)$$

$\chi^{(3)} = \chi^{(3)'} + i\chi^{(3)''}$ 为三阶非线性极化率,包含实部和虚部两部分. 实部决定了其非线性折射率,即与光学 Kerr 等非线性效应相关. 而非线性吸收系数只与极化率虚部有关,所以在双光子吸收情况下可以直接用 $i\chi^{(3)''}$ 代替 $\chi^{(3)}$ 代入 (1) 式中,得到:

$$\frac{\partial \mathbf{E}(z, \omega_1)}{\partial z} = -\frac{3\omega_1}{c n_1} \chi^{(3)''}(\omega_1; \omega_2, -\omega_2, \omega_1) \times \mathbf{E}(\omega_2) \mathbf{E}^*(\omega_2) \mathbf{E}(\omega_1), \quad (6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}(z, \omega_2)}{\partial z} = -\frac{3\omega_2}{c n_1} \chi^{(3)''}(\omega_2; \omega_1, -\omega_1, \omega_2) \times \mathbf{E}(\omega_1) \mathbf{E}^*(\omega_1) \mathbf{E}(\omega_2). \quad (7)$$

根据极化率对称规则:

$$\chi^{(3)''}(\omega_1; \omega_2, -\omega_2, \omega_1) = \chi^{(3)''}(\omega_2; \omega_1, -\omega_1, \omega_2). \quad (8)$$

经过简单的数学操作,可得到:

$$\frac{n_1}{\omega_1} \mathbf{E}^*(z, \omega_1) \frac{\partial \mathbf{E}(z, \omega_1)}{\partial z} - \frac{n_2}{\omega_2} \mathbf{E}^*(z, \omega_2) \frac{\partial \mathbf{E}(z, \omega_2)}{\partial z} = 0, \quad (9)$$

两边对 z 积分得到

$$\frac{n_1}{\omega_1} |\mathbf{E}(z, \omega_1)|^2 - \frac{n_2}{\omega_2} |\mathbf{E}(z, \omega_2)|^2 = \text{const.} \quad (10)$$

由 $I_i = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 n_i |E_i|^2$ ($i = 1, 2$), 可以推得两束光波的光子数通量相等,即

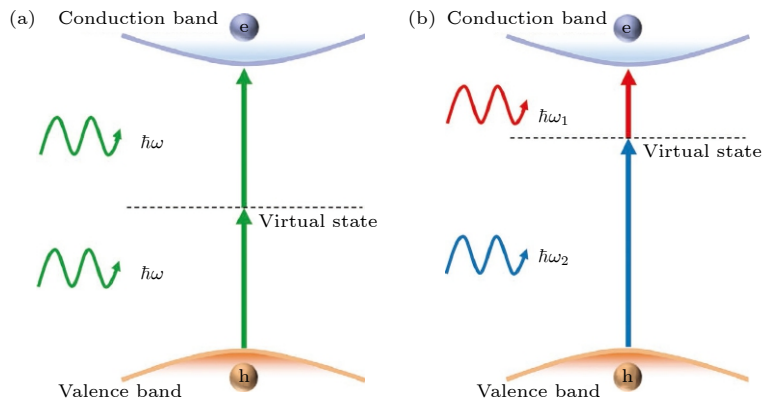


图 1 (a) 简并双光子吸收能级示意图; (b) 非简并双光子吸收能级示意图^[23]

Fig. 1. Schematics of (a) D-TPA and (b) ND-TPA processes^[23].

$$\frac{I_1(z, \omega_1)}{\hbar\omega_1} - \frac{I_2(z, \omega_2)}{\hbar\omega_2} = \text{const.} \quad (11)$$

可通过得到的耦合方程组来描述 TPA 过程:

$$\frac{dI_{1(2)}(z)}{dz} = -\beta_{1(2)}I_{1(2)}I_{2(1)}. \quad (12)$$

式中 β_1 和 β_2 为 TPA 系数,

$$\beta_{1(2)} = \frac{6\omega_{1(2)}}{\varepsilon_0 c^2 n_{1(2)} n_{2(1)}} \chi^{(3)''}. \quad (13)$$

$\chi^{(3)}$ 与单光子吸收振子有着强烈的依赖关系. 根据三能级简化模型, 考虑简并情况的分子能级的跃迁, $\chi^{(3)}$ 可分解为 D 项 (D-term) 和 T 项 (T-term)^[24,25]:

$$\chi^{(3)} = \left[\frac{\mu_{ge}^2 \Delta\mu_{ge}^2}{(E_{ge} - \hbar\omega - i\Gamma_{ge})^2 (E_{ge} - 2\hbar\omega - i\Gamma_{ge})} + \sum_{e'} \frac{\mu_{ge}^2 \mu_{ee'}^2}{(E_{ge} - \hbar\omega - i\Gamma_{ge})^2 (E_{ge'} - 2\hbar\omega - i\Gamma_{ge'})} \right], \quad (14)$$

其中右边第 1 项为 D 项, 第 2 项为 T 项, μ_{ge} 为从基态到第一激发态的跃迁偶极矩, $\mu_{ge'}$ 和 $\mu_{ee'}$ 分别对应从基态到双光子态和双光子态到第一激发态的跃迁偶极矩, Γ 为对应的线宽. $\Delta\mu_{ge}$ 为基态到第一激发态的固有偶极矩之差. 对于具有中心对称的材料, D 项为 0. T 项为 TPA 性质的决定项, 与跃迁偶极矩 μ_{ge} 、高能级跃迁偶极矩 $\mu_{ee'}$ 和激发态能量变化相关.

对于无机直接带隙半导体, 假设其能带结构为经典的抛物线模型, 其双光子吸收系数则可以简化为^[26,27]

$$\beta(\omega_1; \omega_2) = K \frac{\sqrt{E_p}}{n_1 n_2 E_g^3} F_2 \left(\frac{\hbar\omega_1}{E_g}, \frac{\hbar\omega_2}{E_g} \right), \quad (15a)$$

其中

$$F_2(x_1; x_2) = \frac{(x_1 + x_2 - 1)^{3/2}}{2^7 x_1 x_2^2} \left(\frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_2} \right)^2. \quad (15b)$$

E_p 为凯恩能量参数, 对于大部分半导体材料 $E_p \approx 21 \text{ eV}$ ^[28]. E_g 为禁带宽度, $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_2$ 分别为入射的光子能量, n_1, n_2 分别为能量是 $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_2$ 的入射光对应的折射率, I_1, I_2 分别为光子能量为 $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_2$ 的光束的光通量. K 为常量, 不依赖于材料性质, 其理论值 $K = 2^9 \pi e^4 / 5 \sqrt{m_0 c^2} = 1940 \text{ cm}/(\text{GW} \cdot \text{eV}^{5/2})$, 而实验中测量值跟理论值有一定出入, 但是仍然在一个量级, 比如 ZnS 的 K 值为 3100—4000^[29].

当入射光能量相 $\hbar\omega_1 = \hbar\omega_2$ 时, 为 D-TPA.

根据 (15) 式可知, D-TPA 系数只与带隙能量有关, 与其三次幂成反比. 因此为了提高 D-TPA, 需要降低带隙能量, 如窄带隙半导体 InSb 的 D-TPA 系数比宽带隙半导体 ZnSe 的 D-TPA 系数要大 3 个数量级^[30]. 而对于 ND-TPA, 除带隙对双光子吸收系数的影响外, 从 F_2 方程可以看出, 当 ω_1 或 ω_2 减小至接近 0 时, F_2 将会大幅度增大, 从而导致 ND-TPA 双光子吸收系数显著提升. 因此, 可以通过调控 $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_2$ 的能量组合, 实现 ND-TPA 系数的最大化, 即保证 $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 > E_g$ 的情况下, $\hbar\omega_1$ 或 $\hbar\omega_2$ 其中一个取极小值, 另外一个取接近带隙值. 在该极端情况下, 可以近似认为能量高的光子由于能量接近于带隙能量, 接近于能带间的线性吸收共振, 而能量低的光子参与能带内的跃迁共振^[31], 因此导致 ND-TPA 得到了明显增强.

3 双光子吸收测量方法

常用的 TPA 系数测量方法包括非线性透射率 (NLT)、Z-扫描、双光子激发荧光 (TPEF)、泵浦-探测、四波混频等^[32]. NLT 和 Z-扫描技术是直接通过测量激发光束透过样品的强度变化来获取 TPA 系数. 如在 NLT 技术中, 由于 TPA 依赖于激发光强, 可以通过测量不同光强下激发光束的透射率来得到样品的 TPA 系数.

Z-扫描技术是利用透镜将高斯激光束会聚, 然后通过调整样品在光束传播方向 (z 轴) 上的位置, 可改变其接收到激光的功率密度, 测得与其位置相关的归一化透射率 $T(z) = P/P_0$, 其中 P 和 P_0 分别为光束通过和未通过样品的光功率. 当样品从远处移至光束聚焦焦点时, 其所受入射功率密度递增, 因此其 TPA 也逐渐增大, 导致透射率递减. 反之, 当样品从光束焦点逐渐移至远处, 其透射率递增. 测量 TPA 系数需要在探测器的前端保持开孔状态, 以保证收集到透射的所有光子. Z-扫描技术同样可以用于测量非线性折射率. 由于非线性折射率对收集孔径非常敏感, 因此需保持小孔 (闭孔) 状态对其进行测量.

TPEF 是一种利用 TPA 激发产生荧光强度测量 TPA 系数的间接方法. 理论上认为由于卡莎规则, 所有的激发态都先弛豫到带底再发生辐射复合产生荧光. 因此, 无论是通过 TPA 还是单光子激

发, 其最终发光能级、发光量子效率应该一致. 其荧光强度与激发态粒子数成正比, 在 TPA 激发时与入射光强的平方成正比. 在实际测量中, 由于受荧光收集效率、光束空间或者时间分布特征、自吸收等多重因素的影响, TPEF 方法较难精确获取绝对的 TPA 系数^[32]. 当然, 对于同样的光学收集装置, 待测样品与参照样品的双光子吸收光谱和荧光发射光谱重合度越高, 则其测量结果的可信度越高.

对于 ND-TPA, 通常则需要使用泵浦-探测技术测量(图 2), 该技术主要用于探测光电材料内部的激发态动力学. 当一束较强的泵浦光激发样品以后产生基态的漂白、激发态的填充或受激辐射等物理过程, 此时, 另一束微弱的探测光照射到样品上, 其透射或者反射受以上过程的影响会产生微弱的变化. 通过光学延迟线控制泵浦光和探测光相对延迟时间, 即可得到样品激发态信号随着时间的变化. 在 ND-TPA 的测试中, 当泵浦光子和探测光子在空间和时间上重叠时, 发生 TPA, 从而产生基态到激发态的跃迁. 此时, 探测光的透射率将减小, 其在泵浦-探测实验中表现为激发态吸收. 与一般的电子激发态吸收动力学显著不同的是, 它的持续时间决定于泵浦和探测光在样品中重叠的时间. 当样品足够薄的时候, 它直接取决于泵浦光和探测光的脉冲宽度.

根据 Negres 等^[33]提出的模型, 利用泵浦-探测光谱测量的 ND-TPA 的归一化透射率可以描述为

$$T(\tau_d, W, \rho, \Gamma) = \frac{1}{W\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - \left(\frac{\tau + \tau_d - \rho}{W} \right)^2 - \frac{\Gamma\pi^{1/2}}{\rho} [\operatorname{erf}(\tau) - \operatorname{erf}(\tau - \rho)] \right\} d\tau, \quad (16a)$$

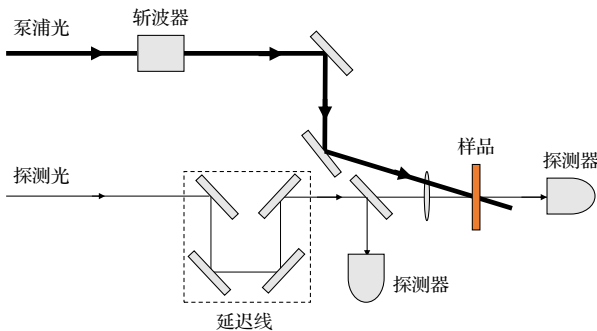


图 2 泵浦-探测实验装置

Fig. 2. Schematics of a typical pump-probe setup.

其中 $W = w_o/w_p$ 是探测脉冲和泵浦脉冲宽度的比值, τ_d 是泵浦和探测之间的延迟时间与泵浦脉冲宽度的比值. ρ 为群速度失配参量:

$$\rho = \frac{L}{w_p c} \left\{ n_o - \lambda_o \frac{dn_o}{d\lambda_o} - \left[n_p - \lambda_p \frac{dn_p}{d\lambda_p} \right] \right\}, \quad (16b)$$

其中 L 为样品厚度, c 为光速, λ_p 为泵浦波长, λ_o 为探测波长, n_p 为泵浦光折射率, n_o 为探测光折射率.

$$\Gamma = L(n_o/n_p) I_p^0 \beta, \quad (16c)$$

其中, I_p^0 是泵浦光焦点处的峰值功率密度, Γ 与 β 成正比, 因此根据对透射率的拟合, 可以得到 TPA 系数 β .

除泵浦-探测技术以外, 通过多种混频技术可以得到 ND-TPA 的相关参数. TPA 系数决定于材料的三阶磁化率 $\chi^{(3)}$. $\chi^{(3)}$ 的大小与非线性相互作用的光场频率相关, 一般用 $\chi^{(3)}(-\omega_s; \omega_1, \omega_2, \omega_3)$ 表示, 其中 ω_i 为相互作用的光子角频率之一, $\omega_s = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3$ 为三阶非线性效应产生的新的光子角频率. 由于相互作用及新产生光场的偏振方向可能不同, $\chi^{(3)}$ 实际上是一个四阶张量. 通过光学 Kerr 效应、简并四波混频 (DFWM)、相干反斯托克拉曼散射 (CARS) 等混频技术方法, 可测量 $\chi^{(3)}(-\omega_s; \omega_1, \omega_2, \omega_3)$ 张量, 从而推知 ND-TPA 的系数或截面大小^[32]. 但是这些方法较为复杂, 一般很少用于 TPA 系数的测量.

4 非简并双光子吸收研究进展

20 世纪 90 年代开始, 随着超快激光和泵浦-探测技术的不断发展, 研究人员也开始对不同材料 ND-TPA 展开研究. ND-TPA 的大小不仅取决于光子对的能量和偏振, 也依赖于材料的带隙、晶向、维度等重要参数. 下文主要将不同材料分类为三维、低维半导体与有机荧光探针分子体系进行回顾总结.

4.1 三维半导体材料

图 3(a), (b) 为通过泵浦-探测手段获取 ND-TPA 系数的两种典型的实验数据图. X 轴为探测光相对于泵浦光的延迟时间, Y 轴为归一化透射率. 可见, 一种是归一化透射率在时间分布上类似于高斯形状; 另一种是类似于梯形状, 或者更准确

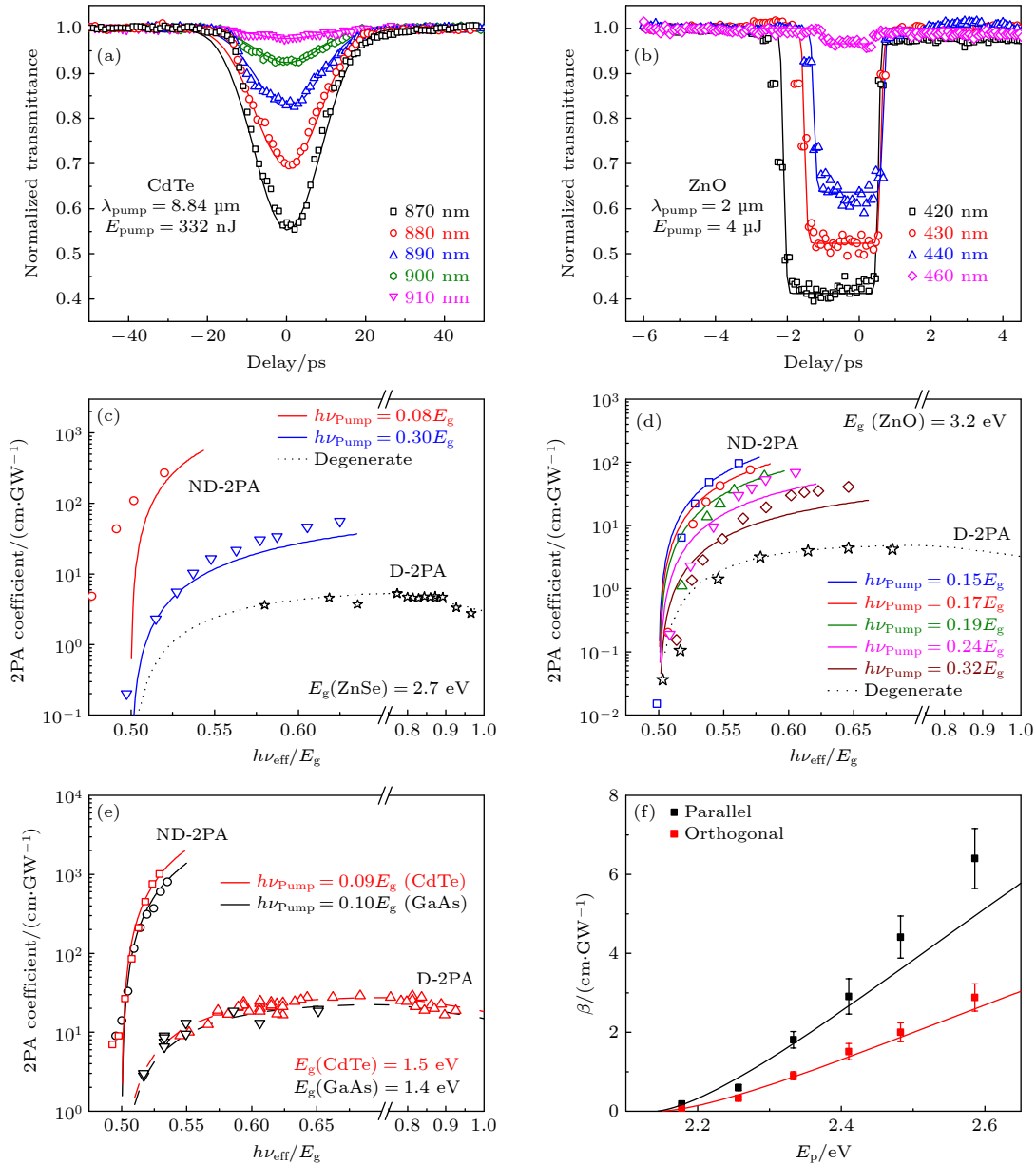


图 3 典型三维半导体的 ND-TPA (a) CdTe 和 (b) ZnO 时间分辨归一化透射率曲线^[34]; (c)–(e) ZnSe, ZnO, CdTe 和 GaAs 的 ND-TPA 和 D-TPA 系数与泵浦-探测光子的能量依赖图^[34]; (f) 泵浦-探测偏振方向对闪锌矿型 ZnS 的 ND-TPA 的影响, 其中探测光偏振方向平行于 z 轴, 泵浦偏振平行或者垂直于探测偏振方向^[29]

Fig. 3. The ND-TPA of typical 3D semiconductors: Normalized transmission dynamics of (a) CdTe and (b) ZnO single crystals^[34]; (c)–(e) ND-TPA and D-TPA coefficients of ZnSe, ZnO, CdTe and GaAs^[34]; (f) pump-probe polarization-dependent ND-TPA coefficients for ZnS single crystal. The polarization of the probe beam is along the z axis, while that for the pump beam is either parallel or perpendicular to the probe polarization^[29].

地说是高斯分布被拦腰截去的形状. 由 (16) 式可知, 该形状特征取决于脉冲宽度、晶体的厚度及群速度色散关系 (group velocity dispersion, GVD). 相比于皮秒激光, 飞秒激光脉冲更短, 因此其泵浦光与探测光的互相干时间更短, 更容易形成梯型的时间分辨探测光透射率曲线. 晶体的厚度越厚, 或者 GVD 更加显著, 泵浦光和探测光在晶体中相干时间更长, 也更容易形成该形状的时间分辨探测光

透射率曲线. 通过 (16) 式拟合, 能获取不同的泵浦-探测光子所对应的 ND-TPA 系数.

Stryland 团队^[11,27,33–35] 在 ND-TPA 研究中做了大量的工作. 图 3(c)–(e) 是该团队测得的几种典型的三维半导体材料 ZnSe, ZnO, GaAs, CdTe 的 ND-TPA 系数与泵浦或探测光子能量的关系^[34]. 可见 ND-TPA 系数对泵浦和探测光子能量具有强烈的依赖性. 当泵浦光子能量固定在非常小的区间

(~0.1 eV), ND-TPA 随着泵浦光子能量接近带隙而显著增大. 同样, 当探测光子能量固定在接近带隙时, ND-TPA 随着泵浦光子能量的减小而剧增. 这种一个光子能量接近带隙, 另一个光子能量非常小的极端 ND-TPA 系数相对于 D-TPA 可高出 2—3 个数量级. 正如 Wherrett^[31] 预测的那样, 能量低的光子进行能带内跃迁共振, 能量高的光子由于能量接近于带隙能量, 因此接近于能带间的线性吸收共振. 两次共振导致 ND-2PA 得到明显的增强, 趋近于单光子吸收. 极端 ND-TPA 使得宽禁带半导体的 TPA 可接近于窄带隙半导体. 如使用中红外泵浦光测量得到 CdTe 最大的 ND-TPA 系数约为 1 cm/MW, 接近于窄带隙半导体 InSb 在中红外波段的 D-TPA 系数^[36]. 表 1 列举了几种常见的无机半导体的 D-TPA 系数 β_D 和 ND-TPA 系数 β_{ND} 对比.

实验中, 当泵浦光子能量小于带隙的 1/3 时, 可以有效地抑制 D-TPA 和三光子吸收 (3PA), 大幅减少自由载流子的产生从而避免额外的能量损失, 使其能灵敏地检测到探测器材料带隙以下的光子能量^[34]. 当泵浦光子能量接近带隙时, 那么可以使用宽带隙半导体检测中红外光子^[10–14,27,37], 有效地克服窄带隙半导体效率低、背景噪声高等缺点. 此外激光脉冲宽度也会影响到实验数据的采集^[33,38]. Bolger 等^[38] 发现当皮秒激光作为泵浦光时, 可能会产生具有较长寿命的自由载流子, 将与 ND-TPA 过程竞争, 从而影响 ND-TPA 的动力学特征. 而

飞秒激光具有更高的时间分辨率, 可以很好地克服自由载流子对 ND-TPA 过程的影响.

晶体的晶向和入射光子的偏振方向会对 ND-TPA 产生显著影响. Chen 等^[29] 研究了 ND-TPA 对闪锌矿型 ZnS 单晶结构的依赖性. 闪锌矿晶体结构具有立方 $\bar{4}3m$ 对称, 其 $\chi^{(3)}$ 张量只有 4 个独立元素不为 0, 分别是 χ_{iiii} , χ_{ijij} , χ_{ijji} , 和 χ_{ijjj} , 其中下标 i 和 j 分别为晶轴 [100], [010] 和 [001]. 他们将探测光的偏振方向保持与 [001] 晶轴一致, 改变泵浦光的偏振方向, 探测 ZnS 的 ND-TPA 系数. 当泵浦和探测光偏振平行时, ND-TPA 系数是二者正交时的 2—3 倍. 如在 480—570 nm 波段, $\beta_{//}$ 为 6.40—0.186 cm/GW, β_{\perp} 为 2.88—0.066 cm/GW (图 3(f)). 另有报道 GaSb 的 $\beta_{//}$ 同样是 β_{\perp} 的 2—3 倍, 与 ZnS 一致^[39]. Krauss-Kodytek 等^[40] 发现另一种闪锌矿结构材料 GaAs(100) 晶面 ND-TPA 的各向异性 ($\beta_{\perp}/\beta_{//}$) 高于 (110) 面, 与 Si 的相反. 这种各向异性是由于闪锌矿固有的对称性造成的, 它依赖于激光偏振方向与晶体偏振方向之间的几何关系, 与两个独立三阶磁化张量的虚部相关^[29]:

$$\beta_{\perp} = \frac{2\pi}{n_p n_e \lambda_p \epsilon_0 c} \text{Im} \chi_{xyxy}, \quad (17a)$$

$$\beta_{//} = \frac{2\pi}{n_p n_e \lambda_p \epsilon_0 c} \text{Im} \chi_{xxxx}, \quad (17b)$$

其中 λ_p 为探测波长, c 为光速, ϵ_0 为自由空间的介电常数. n_p 和 n_e 为晶体对探测和泵浦光的折射率^[29].

表 1 已报道的无机半导体材料的 ND-TPA 系数
Table 1. Reported ND-TPA coefficients for different inorganic semiconductors.

材料	λ_1/nm	λ_2/nm	$\beta_{ND}/(\text{cm}\cdot\text{GW}^{-1})$	测试条件	$\beta_D/(\text{cm}\cdot\text{GW}^{-1})$
CdTe ^[34]	870	8840	~1000	10 Hz, 30 ps	~20
ZnS ^[34]	~390	~1760	~15	1 kHz, 140 fs	~1
ZnSe ^[34]	~480	5600	~270	1 kHz, 140 fs	~2
ZnO ^[34]	420	2000	~40	1 kHz, 140 fs	~2.5
GaAs ^[34]	870	8840	~800	10 Hz, 30 ps	~10
GaSb ^[39]	1720	3550	140	1 kHz, 130 fs	64 ^[41]
Cu ₂ O ^[42]	800	1494	88	1 kHz, 120 fs	27
MAPbBr ₃ ^[23]	577	1700	53	1 kHz, 100 fs	8 ^[43]
GaAs/Al _{0.32} Ga _{0.68} As QW ^[44]	1120	1960	~15	82 MHz, 156 fs	—
WS ₂ ^[45]	620	776	250	80.48 MHz, 250 fs	100
MoSe ₂ ^[45]	790	1500	650	80.48 MHz, 250 fs	80—800
(BA) ₂ (MA) ₃ Pb ₄ X ₁₃ ^[46]	705	760—980	10	100 kHz, 7 fs	—
Si ^[40]	1904	1350	0.97	250 kHz, 160 fs	0.5 ^[47]

4.2 二维材料

二维材料是对一类特定材料的统称. 它们在一个维度上的尺寸小到电子的运动受到量子限域效应的影响, 而在其他两个维度尺寸较大, 电子可以自由移动. 典型二维材料包括纳米薄膜、超晶格、量子阱. 二维材料受量子限域和介电限域效应的影响, 其电子空穴 (激子) 束缚能较大, 振子强度高. 当激子态作为中间态或者最终态参与非线性跃迁时, 非线性光学性质将会得到极大的增强 [48,49]. 如前期一些关于二维材料的研究表明, 其 D-TPA 系数比传统三维半导体材料至少大 1 个数量级 [50–53].

近年来, 研究人员对二维材料中的 ND-TPA 进行研究. 2018 年 Cui 等 [45] 通过飞秒激光泵浦-探测技术同时观察到了 WS₂ 和 MoS₂ 单层膜中的 D-TPA 和 ND-TPA 动力学过程. 瞬态透射光谱显示其在前 500 fs 内会出现正负两部分信号: 负信号来自于 ND-TPA 产生的探测信号损耗; 正信号来自于 D-TPA 导致的载流子积累 (图 4(a)). 基于二者对激发功率不同的依赖关系, 可以将 D-TPA 和 ND-TPA 完全解耦 (图 4(b)). 在非共振泵浦的情况下, 单层 WS₂ 的 D-TPA (776 nm) 和 ND-TPA (776 nm 和 620 nm 光子对) 系数分别为 100 cm/GW 和 250 cm/GW, 并且都会随着泵浦光功率的增大而线性减小. 这可归结为 TPA 产生的激发态电子造成的能带填充效应. 在单层 MoSe₂ 中 2p 激子能级的共振泵浦下, 尽管 ND-TPA 系数同样随着功率增大而线性减小, 但 D-TPA 系数则呈现指数衰减. 当泵浦辐照度从 0.6 GW/cm 升至 12.5 GW/cm 时, D-TPA 系数从 800 cm/GW 剧降至 80 cm/GW. 该现象可能是能带重整化效应和能带填充效应相互作用造成的. 值得注意的是, 此处测得的单层二维材料中的 D-TPA 和 ND-TPA 系数均强于传统三维半导体 TPA 系数 2 个数量级.

2020 年, Cox 等 [44] 利用 1960 nm 泵浦, 1176–1326 nm 探测研究 8 nm GaAs/12 nm Al_{0.32}Ga_{0.68}As 量子阱的 ND-TPA 特性及理论模型. 当泵浦和探测光均为 TM 偏振时, 其 ND-TPA 系数随着总波长 $\lambda_{\text{sum}} = (\lambda_{\text{pump}}^{-1} + \lambda_{\text{probe}}^{-1})^{-1}$ 的变化而成不连续变化 (图 4(c)). 这可归结为轻空穴在 TPA 过程中被选择性激发. 他们发展了一种基于 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法的跃迁速率微扰计算, 其理论结果很好地符合了实验数据. 此外, 依据该理论模型, 他们预测对于红外探测波长

$\lambda_2 = 7.5 \mu\text{m}$, ND-TPA 系数可达 5.7 cm/MW, 是本项研究所采用光子对应 ND-TPA 系数的约 360 倍.

层状 Ruddlesden–Popper 钙钛矿是另外一种新颖的二维材料体系. 其化学式通常为 (LA)₂(A)_{*n*-1}Pb_{*n*}X_{3*n*+1}, 其中 A 为尺寸较小的单价阳离子 (如 MA⁺, FA⁺, Cs⁺ 等), X 是卤族元素, LA 是一种长链有机阳离子, 将 *n* 层角共享 PbX₆ 八面体隔离形成量子阱结构. 2019 年, Grinblat 等 [46] 利用非简并泵浦探测技术研究了机械剥离 (BA)₂(MA)_{*n*-1}Pb_{*n*}X_{3*n*+1} 薄片的非线性光学性质. 他们发现该薄片具有极强的非线性光学 Kerr 效应和 ND-TPA. 当泵浦波长在 760–980 nm 区间, 探测波长为 705 nm 时, 其平均非线性折射率 $n_2 \approx -0.4 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{GW}$, ND-TPA 系数 $\beta \approx 10 \text{ cm}/\text{GW}$. 该效应可用于对可见光/近红外光谱区域实现约 2% 的反射率调制深度, 调制时间小于 20 fs, 调制频率大于 50 THz, 这超过了已报道的基于光子超表面和单纳米天线性能的 5 倍 (图 4(d)).

4.3 有机荧光探针分子

由于在生物荧光成像中的巨大应用前景, 有机荧光探针分子的 ND-TPA 性质也得到了广泛的研究. 因荧光分子一般在溶液中研究, 衡量其 ND-TPA 大小的指标通常用吸收截面 σ 来表示, 其单位为 Göppert-Mayer 单位 GM ($1 \text{ GM} = 10^{-50} \text{ cm}^4 \cdot \text{s}/(\text{photon} \cdot \text{molecule})$). σ 与吸收系数 β 的关系为 $\sigma = 1000h\nu\beta/(N_A C)$, 其中 $h\nu$ 为光子能量, N_A 为阿伏伽德罗常数, C 为溶液浓度 (mol/L). 常用的荧光探针包括荧光蛋白和有机染料等. 但是后者相比于前者在灵敏度和特异性上有着巨大的优势. 在研究荧光探针的 ND-TPA 时, 需考虑到生物样品本身的吸收散射, 如水的吸收在 1500 nm 附近和大于 1800 nm 急剧增大. 因此, 选择的激发波长范围需在生物组织光学窗口范围以内, 通常主要集中在近红外波段. 受此局限, 两个光子的能量相差不大. 尽管如此, Sadegh 等 [55,56] 发现几种常用的探针分子, 如荧光素 (fluorescein)、增强绿光荧光蛋白 (EGFP)、红色荧光蛋白 (mKO2)、荧光素、香豆素 (Coumarin 343)、罗丹明红色荧光染料 (SR101) 的 ND-TPA 截面相对于 D-TPA 截面仍然有着明显的提升, 如 mKO2 的最高增强可达 75%. Xue 等 [57] 通过引入多重锁相放大器, 大幅提升了时间分辨和啁啾修正精度, 发现罗丹明 6 G (Rhodamine

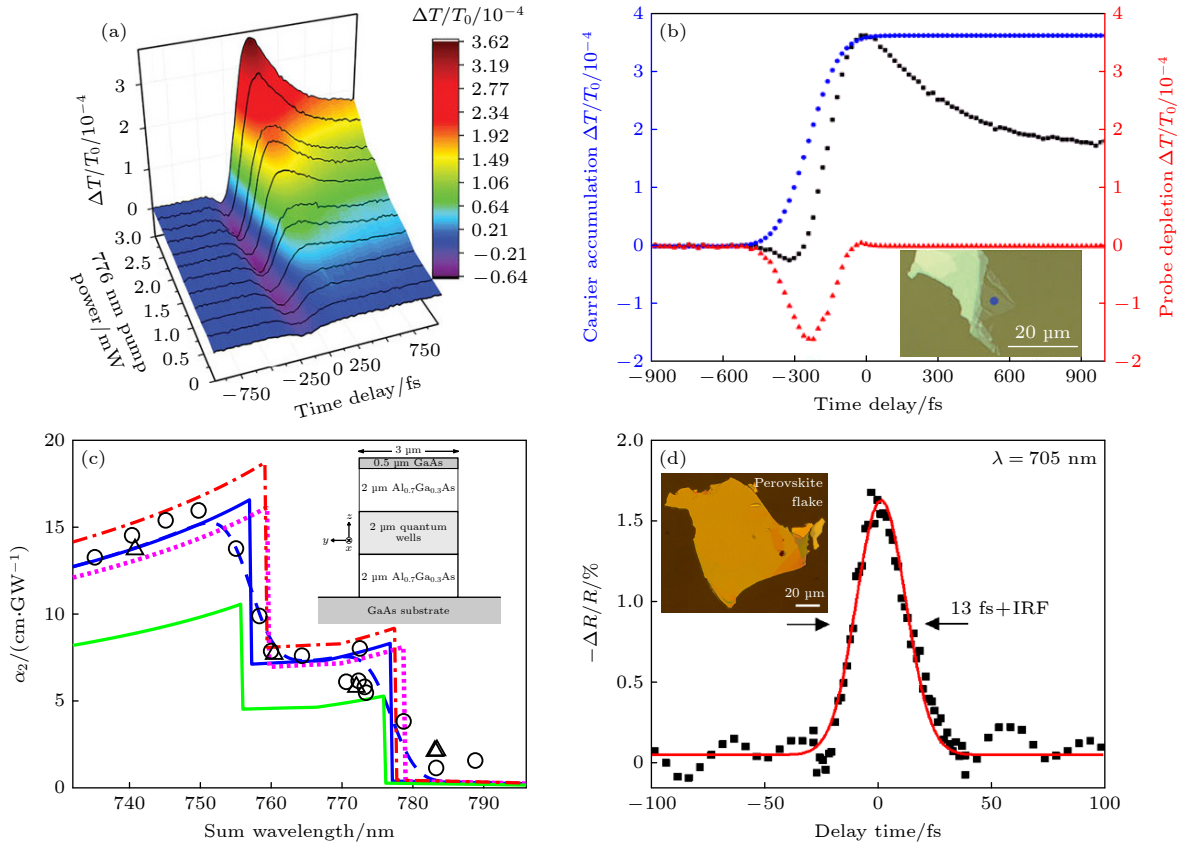


图 4 典型二维材料的 ND-TPA (a) 单层 WS₂ 的瞬态透射动力学曲线与功率依赖关系, 激发波长 776 nm, 功率 0.23—2.96 mW, 0 fs 之前负信号归因为 ND-TPA^[45]; (b) 单层 WS₂ 的瞬态透射动力学曲线分解为 ND-TPA 部分和 D-TPA 部分贡献, 黑点为原始数据, 蓝点源于 D-TPA, 红点源于 ND-TPA^[45]; (c) 8 nm GaAs/12 nm Al_{0.32}Ga_{0.68}As 量子阱的 ND-TPA 系数及理论预测曲线, 此处泵浦与探测偏振均为 TM^[44]; (d) (BA)₂(MA)_{n-1}Pb_nX_{3n+1} 钙钛矿薄片的超快光透射调控, 泵浦波长 760—980 nm, 功率 3.5 μW; 探测波长 705 nm, 实线为 Lorentz 拟合的调制宽度为 13 fs^[54]

Fig. 4. The ND-TPA of typical 2D semiconductors: (a) Power-dependent transient transmission dynamics of monolayer WS₂, the pump wavelength is 776 nm and power in the range of 0.23—2.96 mW, the dip before time zero is attributed to ND-TPA^[45]; (b) the decoupling of transient transmission dynamics for monolayer WS₂, black squares are original data, blue dots are due to D-TPA and red triangles are attributed to ND-TPA^[45]; (c) ND-TPA coefficients of 8 nm GaAs/12 nm Al_{0.32}Ga_{0.68}As quantum well as a function of sum wavelength and its theoretical prediction, and the polarizations of both the pump and probe beams are TM^[44]; (d) ultrafast modulation of light using exfoliated (BA)₂(MA)_{n-1}Pb_nX_{3n+1} flakes. Pump beam: 760—980 nm, power: 3.5 μW. Probe beam: 705 nm. Solid line is a fit using Lorentzian function and 13 fs is obtained for the ultrafast modulation^[54].

6 G) 的 ND-TPA 截面可达 600 GM, 远远高于文献 [58, 59] 报道的 D-TPA 截面 (~100 GM). 表 2 汇总了一些已报道的有机荧光分子的 ND-TPA 截面及其对应的测试条件.

从 (14) 式可知, 在设计有机荧光分子时, 应充分考虑其基态与激发态的电偶极矩. 其 TPA 与分子内电荷转移 (ICT) 和非中心对称的偶极分子息息相关^[24]. 如在共轭发光分子两端加上一个电子给体 D 和一个电子受体 A 组成 D-π-A 结构能够显著增大 μ_{ge} , 从而提升其 TPA 性能^[25]. 理论上, 可以通过引入强的 D/A 功能基团, 增加 π 共轭链长度, 调控电子分布共面性以及调控其偶极矩分布实现其 TPA 性能的提升^[24]. 如 2017 年 Chen 等^[60] 在呋

唑骨架上通过添加吡啶 D/A 功能基团成功合成了一种呋唑衍生物荧光分子 (BEMC), 结合泵浦-探测和泵浦-探测荧光, 通过固定泵浦波长为 800 nm, 改变探测波长 485—650 nm 研究了其 ND-TPA 激发产生的荧光强度, 发现其 ND-TPA 截面显著高于 D-TPA 截面. 如对于 $\lambda_1 = 800$ nm, $\lambda_2 = 650$ nm 光子对, 其 ND-TPA 截面达到了 220 GM, 而其等效波长的 D-TPA 截面仅仅为 34 GM. Elayan 和 Brown^[61] 结合时域密度泛函理论和二能级模型比较不同结构香豆素 (coumarin) 衍生物的 ND-TPA, 发现其比 D-TPA 强 22%—49%, 证实了其 ND-TPA 截面与分子的跃迁电偶极矩 (μ_{01}) 有直接关联, 另外所用溶剂的极性也对 ND-TPA 有一定的影响.

表 2 已报道的有机荧光探针分子的 ND-TPA 截面
Table 2. Reported ND-TPA cross section for different organic fluorescence probe materials.

材料	λ_1/nm	λ_2/nm	$\sigma_{\text{ND}}/\text{GM}$	测试条件	$\sigma_{\text{D}}/\text{GM}$
罗丹明6 G ^[57]	800	691	596	溶剂: 甲醇; 浓度: 16.2 mmol/L; 脉宽: 103 fs	38—150 ^[58,59]
罗丹明 123 ^[57]	800	660	776	溶剂: 甲醇; 浓度: 4.2 mmol/L; 脉宽: 103 fs	80 ^[62]
香豆素6 ^[57]	800	652	1015	溶剂: 甲醇; 浓度: 23.7 mmol/L; 脉宽: 103 fs	—
香豆素343 ^[57]	800	651	49	溶剂: 氯仿; 浓度: 27.3 mmol/L; 脉宽: 103 fs	—
尼罗红 ^[57]	800	669	3270	溶剂: 氯仿; 浓度: 0.75 mmol/L; 脉宽: 103 fs	—
尼罗蓝A ^[57]	800	626	1407	溶剂: 氯仿; 浓度: 0.68 mmol/L; 脉宽: 103 fs	—
吡啶衍生物BEMC ^[60]	800	650	220	溶剂: 甲醇; 浓度: 10 mmol/L; 脉宽: 140 fs	34
氨基七甲噻吩 ^[63]	925	1020	1860	溶剂: 甲醇; 浓度: 1.3 mmol/L; 脉宽: 75 fs	940

5 基于非简并双光子吸收的应用

ND-TPA 相对于 D-TPA 提高了 1—2 个数量级, 这种增强效应导致其可用于对红外光的计数探测. 通过 ND-TPA 激发荧光分子也可用于生物成像, 相比于传统的 D-TPA 成像具有多种优势. 此外, ND-TPA 超快、超强的光响应也可以用于全光开关和调制等非线性应用, 具有巨大的应用前景. 本节主要从红外探测、生物成像和全光开关方面总结了 ND-TPA 相关应用的前沿进展.

5.1 红外探测

传统的红外探测器是通过半导体中的线性吸收来实现探测, 需要半导体带隙小于探测的光子能量, 因此需使用带隙较窄的半导体作为探测器. 但是半导体带隙变窄, 其受到热辐射和暗电流的影响将会显著增大, 导致探测器灵敏度较低^[64]. 通常为了抑制热辐射和暗电流, 需要在液氮冷却的低温环境下进行红外探测, 但要接近单光子灵敏度仍具有挑战性^[65,66]. 除了线性检测技术外, 利用非线性效应也可以进行红外探测. 其利用检测效率高、暗计数低、死区时间短的宽带隙半导体进行红外探测, 并且在室温环境下就可以进行, 这大大降低了实验成本^[67,68]. 如利用 $\chi^{(2)}$ 非线性将红外光子通过和频上转换为高能光子并被具有高量子效率的探测器探测^[69–72]. 然而, $\chi^{(2)}$ 上转换方法需要单独的探测器和周期性极化上转换晶体来进行相位匹配. 相比于和频上转换检测技术, 基于 ND-TPA 的红外探测非常简单, 因为检测器元件本身是非线性材料, 所以只需要满足吸收的两个不同波长光子的能量总和能够大于或等于半导体带隙就可以直接实现光电子检测, 不需要严格的相位匹配^[27].

在量子信息领域, 如量子加密需要用到光通讯范围波长 (1.30—1.55 μm). 对该波段的红外光子计数或采样面临着诸多难题, 如暗电流高、量子效率低等. 2009 年 Boitier 等^[14] 利用 GaAs PMT 的 ND-TPA 成功对 1.55 μm 红外光进行低噪声量子计数 (图 5(a), (b)). 尽管其计数量子效率只有约 10^{-10%}, 但是仍有着很大的提高空间, 可以通过增大相互作用厚度、泵浦光功率、设计光学微腔或光波导等方式进一步提升其效率. 2010 年 Apiratikul 和 Murphy^[15] 同样采用 GaAs 光电二极管的 ND-TPA ($\lambda_1 = 1.49 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1.775 \text{ nm}$) 进行光学采样. 对于脉宽约为 150 fs 的激光脉冲, 其时间分辨率足够实现高达 4 TB/s 的光学采样.

2011 年 Fishman 等^[27] 将极非简并双光子吸收理论应用于中红外探测中, 在室温条件下, 利用宽带隙 GaN 光电二极管 (带隙能量 $\approx 3.42 \text{ eV}$, 对应波长为 365 nm) 对中红外光进行探测 (图 5(c)). 如图 5(d) 所示, 使用波长 390 nm、脉冲宽度为 100 fs 的激光作为门脉冲 (gate pulse), 当泵浦光与被探测的 5600 nm 中红外光在探测器上瞬时重合时, 由于极强的 ND-TPA, 产生了光电流. 通过该方法, 实现了低至 20 pJ 的红外脉冲能量探测. 而在相同条件下, 液氮冷却的 HgCdTe 商用探测器的最小探测能量为 200 pJ.

受其带隙限制, 通用的 Si 光电二极管探测器探测的波长极限约为 1.1 μm . 结合 Si 探测器的高灵敏性和 ND-TPA 的高吸收可以实现对低于 Si 带隙的近红外光进行探测. 如 2019 年 Xu 等^[10] 以 1550 nm 激光为泵浦光, 利用 Si-APD (雪崩光电二极管) 的 ND-TPA 实现了 1700—1850 nm 红外光子计数. 虽然足够高的泵浦功率可以使光子计数率得到显著提高, 但是高强度泵浦会产生不可避免

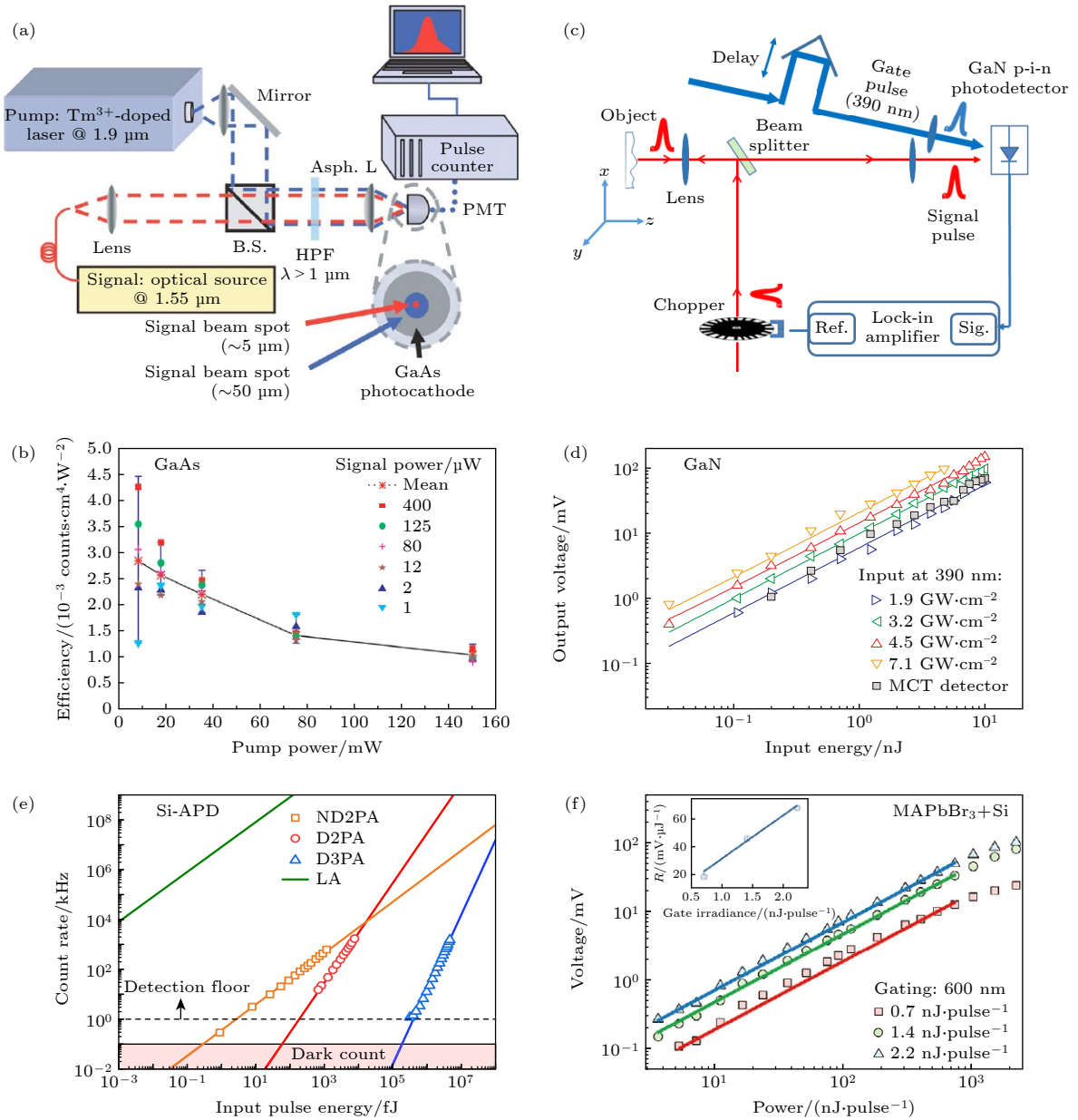


图 5 ND-TPA 用于红外光子计数与探测 (a) GaAs 红外光子计数示意图^[14]; (b) GaAs 红外光子计数与信号光功率及泵浦强度的依赖关系^[14]; (c) GaN 探测器用于中红外光探测示意图^[27]; (d) GaN 探测器输出电压与输入红外信号光能量及泵浦功率依赖关系, 信号波长 5.6 μm, 门脉冲 390 nm^[27]; (e) Si-APD 红外光子计数速率与输入脉冲能量关系, 泵浦光波长 3.07 μm, 能量为 0.32 nJ^[13]; (f) MAPbBr₃ 单晶与 Si 探头组合对 1.7 μm 红外光探测^[23]

Fig. 5. ND-TPA for infrared photon counting and detection: (a) Schematics of infrared photon counting using GaAs photodetector^[14]; (b) ND-TPA photon counts as a function of the signal power for different pump intensities using GaAs photodetector; (c) schematics of mid-infrared photodetection using a GaN photodiode^[27]; (d) output voltage of a GaN diode versus 5.6 μm input signal energy in the presence of temporally overlapped 390 nm gating pulses of various energies^[27]; (e) recorded count rates by the SiAPD as a function of input pulse energy, pump pulse wavelength of 3.07 μm, energy of 0.32 nJ^[13]; (f) 1.7 μm infrared photodetection using a combination of MAPbBr₃ single crystal and Si photodiode^[23].

的 D-2PA 甚至 3PA 形成很大的背景噪声, 导致探测器的灵敏度降低, 限制其动态范围^[27,37]. 2020 年, Fang 等^[13] 利用 3.07 μm 的中红外光作为泵浦光束, 利用硅雪崩光电二极管成功地探测了波长为 1550 nm 的信号光. 由于泵浦光子能量远低于半导体禁带宽度的一半, 从而消除了 D-2PA 对背景噪声

的影响 (图 5(e)). 由于 3PA 引起的噪声比 D-2PA 引起的噪声低 6 个数量级, MIR 泵浦光的最大工作功率比近红外泵浦光的最大工作功率高约 40 dB, 从而大大提高了检测效率, 其可分辨的信号功率可达到飞焦耳水平, 相当于每脉冲约 8×10^3 个光子, 与基于 D-2PA 的探测相比, 其计数率提高了近 10^5

倍. 考虑到 Si 的 TPA 不够强 ($\beta < 2 \text{ cm/GW}$)^[73], Wang 等^[23] 提出了结合 MAPbBr₃ 钙钛矿单晶的高 ND-TPA 和高灵敏 Si 光电二极管对近红外光探测的方案. 该方法通过将 MAPbBr₃ 单晶放置于 Si 光电二极管探测器前端, 实现了对 1 kHz 重频、1700 nm 的近红外光的高灵敏检测 (图 5(f)). 其探测极限为 1 nJ 量级, 响应率约为 68 V/W, 优于商用热释电/热电堆红外探测器.

在利用 ND-TPA 对红外光进行高灵敏低噪声探测的基础上, 结合空间扫描技术可实现对物体的红外成像. 2016 年 Pattanaik 等^[41] 利用 GaN 光电二极管 ND-TPA 实现了对物体的近红外 (1.6 μm) 和中红外 (4.93 μm) 三维成像. 其基本原理与上面的 GaN 红外探测一致 (图 5(c)). 该技术的一个特点是, 其在 z 轴方向 (深度) 的空间分辨率由泵浦光和探测光的相干时间决定:

$$\Delta z = \pm \frac{1}{4\sqrt{\ln 2}} \sqrt{\ln(1 + \sigma)} \tau_{\text{FWHM}c}, \quad (18)$$

其中 τ_{FWHM} 是泵浦-探测互相关曲线半高宽, σ 为噪声, c 为光速. 在该研究的实验条件下 ($\sigma \approx 2\%$, $\tau_{\text{FWHM}} \approx 350 \text{ fs}$), $\Delta z \approx \pm 4 \mu\text{m}$. 通过实验曲线拟合或者用更窄的激光脉冲可实现小于波长的深度空间分辨率. 图 6(a)–(c) 展示的是利用 GaN 的 ND-TPA 对 GaAs 半导体孔状结构三维成像的结果. 其中图 6(a) 为其形貌结构示意图, 图 6(b) 为其 ND-TPA 三维成像图, 图 6(c) 显示的是 6(b) 中 A, B 两点对应的互相关信号. 除了优越的深度空间分辨性能外, 相比于商用的中红外的 HgCdTe (MCT) 探测器, 非简并红外探测器无需液氮冷却的低温环境, 这大大降低了实验成本^[67,68].

2020 年 Knez 等^[37] 则结合了硅基 CCD 相机的 ND-TPA 与有机材料在中红外波段具有振动吸收的特点, 成功实现了若干有机材料体系的中红外成像. 其成像系统示意图如图 6(d) 所示. 其中泵浦波长为低于 Si 带隙的近红外光 1478 nm, 探测光为中红外光 2750–3150 nm. 后者涵盖了常见有机物的 C-H 对称性和反对称性拉伸振动模式. 两者组成的光子对可被 Si 通过 ND-TPA 探测成像. 图 6(e) 为通过该系统对印刷在醋酸纤维素上的黑色字母的成像图. 当探测光所选波长为 b 处时, 由于醋酸纤维素在此处没有红外振动模式, 红外光透射率较高, 其 ND-TPA 成像对比度较高. 而当探测光与 C-H 振动同频时 (d 处), 红外光透射率较低, 最终 ND-TPA 成像对比度较差. 该成像方法

不依赖于相位匹配, 不需要对图像进行复杂的后处理, 对有机化学键的振动模式具有选择性, 因而在有机聚合物或者生物成像中具有极大的应用潜力.

5.2 双光子荧光显微成像

20 世纪 90 年代, 随着脉冲激光器 (特别是钛蓝宝石激光器) 的普及, TPA 理论和应用得到了广泛研究. Denk 等^[74] 发明了双光子荧光显微镜, 并且这种技术被共聚焦显微镜制造商迅速采用. 双光子荧光显微镜与共聚焦显微镜相比, 激发光和荧光的波长差更大, 更容易分离, 因此能获得更高的信噪比和更高对比度的图像. 并且, 使用红外激发光代替紫外或可见光, 可以减少光损伤, 具有更高的穿透深度^[75,76]. 另外, 由于对强度的二次方依赖关系, 双光子激发仅局限于焦区, 因此, 避免了失焦激发导致的损伤.

ND-TPA 相对于 D-TPA 的优势使得其很快就被应用于双光子荧光显微镜中. Xu 等^[77]、Sadegh 等^[55,56]、Chen 等^[60] 证明了对于一些可用于荧光成像的分子, 其 ND-2PA 吸收截面远大于 D-2PA, 并将其归因于中间态共振增强效应^[78]. Lakowicz 等^[79] 证明了通过 ND-TPA 激发的对三联苯荧光分子的荧光强度较 D-TPA 情况下增强了至少 1000 倍, 并且发现可以利用可见光或近红外光激发具有紫外波段吸收的荧光团^[19,80,81]. 此外, 与紫外激发相比, 利用可见光或近红外光激发, 可以显著减少对样品内部的光损伤, 并增强对样品的穿透能力^[82]. 利用各种构造的光照几何计算出 ND-TPA 激发比 D-TPA 激发的轴向分辨率更高^[83–85]. Lim 和 Saloma^[86] 预测, 与 D-2PA 激发相比, ND-2PA 激发减少了由球差引起的误差.

2009 年, Quentmeier 等^[19] 首次实现了基于 ND-TPA 的双色双光子荧光显微镜 (2c2pLSM). 通过钛蓝宝石激光器激光的 800 nm 种子光和 400 nm 倍频光的 ND-TPA 可激发带隙在紫外波段的色氨酸荧光团, 从而实现了第一次测量活体的 MIN-6 细胞, 揭示了细胞核和细胞质的紫外荧光寿命之间的差异. 2012 年, Mahou 等^[16] 利用 λ_1 (750–860 nm) 和 λ_2 (1000–1300 nm) 双色光的 D-TPA ($\lambda_1/2, \lambda_2/2$) 及 ND-TPA ($\lambda_3 = 2/(1/\lambda_1 + 1/\lambda_2)$) 成功地对 3 种荧光团进行同时激发, 实现了对果蝇胚胎“脑虹 (brainbow)”标记组织的三维实时多色成像. 图 7(a) 为该双色双光子成像原理. 图 7(b)

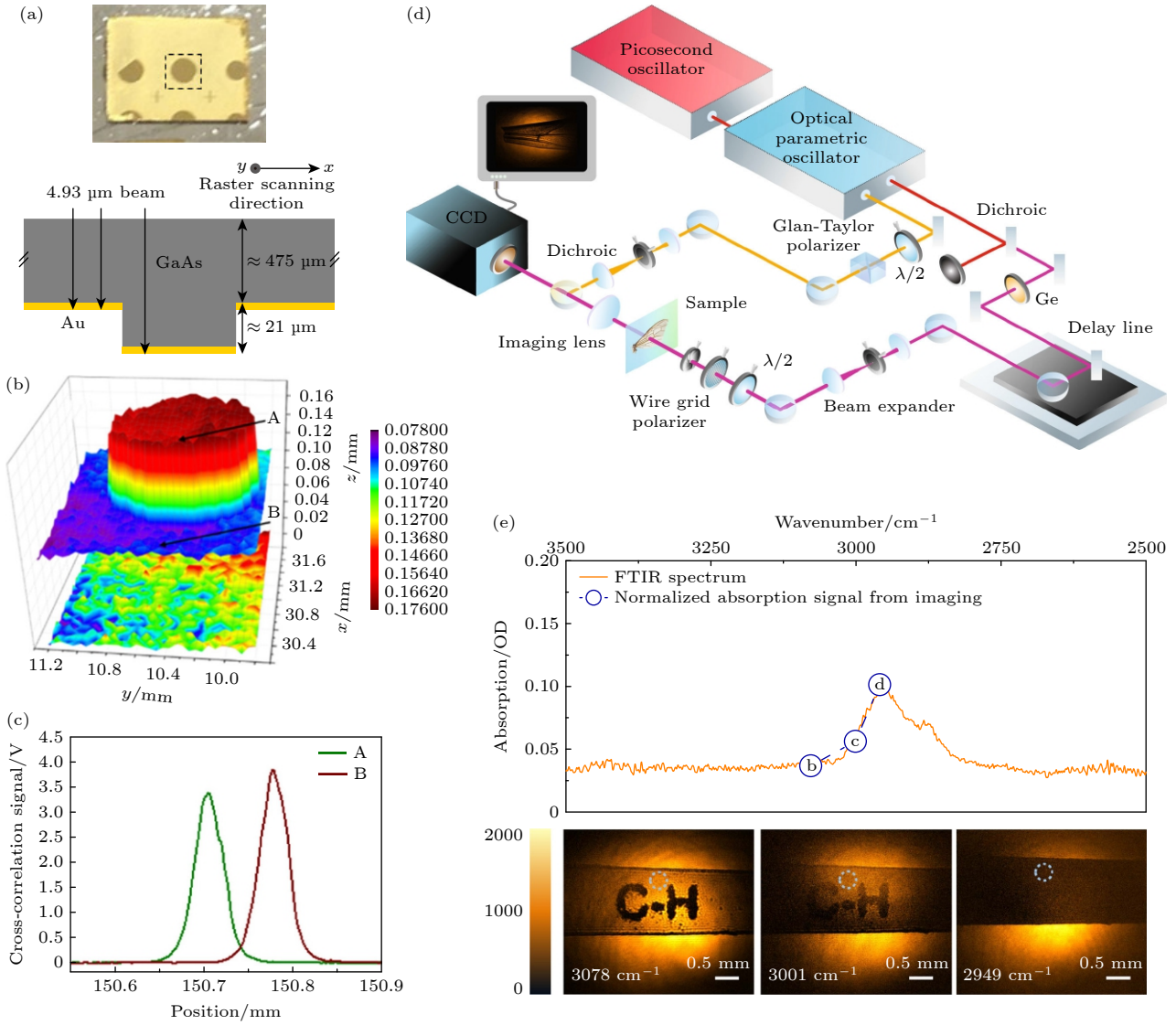


图 6 ND-TPA 用于中红外成像 (a) 用于三维红外成像的 GaAs 半导体孔状结构^[11]; (b) 基于 GaN 的 ND-TPA 对该结构的三维成像图^[11]; (c) 图 (b) 中 A、B 两点对应的泵浦探测光互相关信号^[11]; (d) 基于硅基 CCD 相机的 ND-TPA 中红外振动成像系统示意图^[37]; (e) 印有黑色字母的醋酸纤维素薄膜的中红外选择性成像. b, c, d 点分别对应的是成像激光远离振动吸收、接近振动吸收峰和与在振动吸收峰上 3 种波长对应的成像效果图^[37]

Fig. 6. ND-TPA for mid-infrared imaging: (a) GaAs semiconductor structure used for the 3D imaging^[11]; (b) 3D imaging of the GaAs structure using the ND-TPA of a GaN photodiode^[11]; (c) the cross-correlation curves of points A and B in Fig. (b)^[11]; (d) schematics of the vibration imaging method based on the ND-TPA of a Si CCD^[37]; (e) imaging a cellulose acetate film with printed letters at selected wavelengths, wavelength b: far away from the absorption of C-H vibration, c: near the absorption peak; d: at the absorption peak^[37].

对应三色荧光蛋白的双光子激发光谱. 图 7(c) 为最终的成像效果图. 类似地, 2017 年 Stringari 等^[18] 利用 $\lambda_1 = 760 \text{ nm}$ 和 $\lambda_2 = 1041 \text{ nm}$ 的两束同步脉冲激光的 D-TPA 和 ND-TPA 同时激发了蓝、绿、红三个荧光分子团, 实现了对烟酰胺腺嘌呤二核苷酸和黄素腺嘌呤二核苷酸的同时成像. 不同于基于线性吸收的传统显微成像^[87], 由于激发和发射光谱之间没有重叠, 因此对深层组织成像具有优越性能并提高了探测效率. 同年, Perillo 等^[17] 使用双色

双光子激发 ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1240 \text{ nm}$) 成年小鼠大脑中的血管图像进行三维重建 (图 7(d)). 相比于 D-TPA 激发, ND-TPA 激发的信号强度增加了 90%, 且其成像深度可以达到 $960 \mu\text{m}$, 优于 D-TPA 激发约 $800 \mu\text{m}$ 的成像深度 (图 7(e)).

5.3 全光开关与调制

光开关可以理解为在一定驱动下, 通过光激发^[88] 或外部电流注入^[89], 导致光信号的某个参量从一

种状态快速、可逆、不连续地转变为另一种状态的过程. 对于全光开关, 由于光子之间不能直接产生相互作用, 因此需要光作用于非线性介质, 由于泵浦光的功率高导致介质的参量发生了改变, 从而实现对信号光的开关控制. 在高功率泵浦光存在时, 改变了介质的折射率, 使信号光改变相位和输出功率, 导致光开关处于开启的状态; 当撤掉泵浦光时, 介质参数没有改变, 输出功率处在低态, 导致开关处于关闭的状态.

全光开关的非线性机制可以分为单光子吸收引起的光克尔效应和双光子吸收引起的双光子折射效应. 当连续光或宽脉冲光的作用下, 此时主要以单光子吸收为主, 光激发非线性光学介质产生大量载流子进行能级跃迁, 引起光吸收和相位的变化, 实现光开关开启的作用. 材料的折射率的变化 Δn 与泵浦光的功率 P 成正比, 即 $\Delta n = n_2(P/S) \propto P$, n_2 为材料的非线性折射系数, S 为有效波导截面积. 其开关速度受限于自由载流子寿命. 以硅波

导为例, 载流子的复合时间在几百纳秒到几十皮秒之间, 其与硅波导的种类有关^[90]. 当在飞秒超短脉冲光作用下, 此时主要以双光子吸收为主, 材料的折射率的变化 Δn 与泵浦光的功率 P^2 成正比^[91]. 并且使用低脉冲能量的超短脉冲激光可以有效抑制自由载流子的产生, 从而最大限度地减少光子的损耗^[33].

2005 年, Liang 等^[22] 将 ND-TPA 应用于硅线型波导全光开关, 如图 8(a) 所示为开关的实验装置. 实验采用锁模光纤环形激光器, 在 1552 nm 处产生 1 GHz 重复频率、3.2 ps 的泵浦脉冲, 并通过掺铒光纤放大器放大. 连续波信号由工作在 1536 nm 的可调谐激光器产生. 光耦合器将泵浦光和信号光耦合到线波导中, 通过 ND-TPA 成功对 1536 nm 连续信号光进行调制(图 8(b), (c)). 利用峰值功率约为 1.9 W 的泵浦光, 其调制深度达 70%, 调制时间为 13 ps, 但实际上受限于测量仪器的响应时间, 实际调制时间应接近泵浦脉冲宽度.

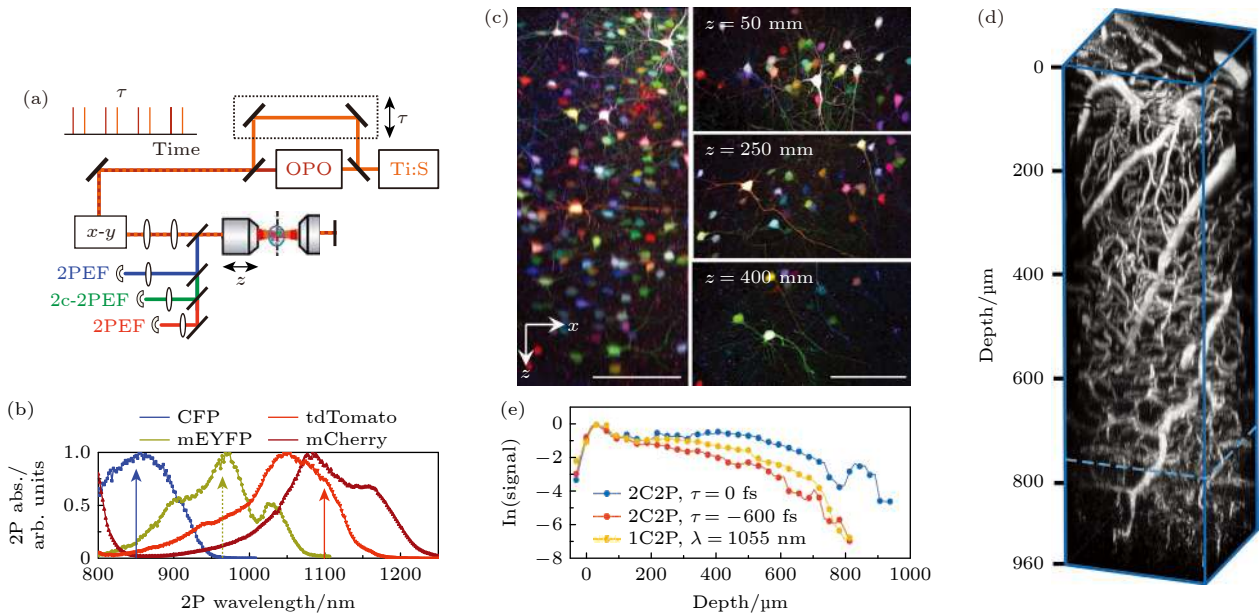


图 7 ND-TPA 用于双光子荧光显微成像 (a) 常用的基于 ND-TPA 的双光子生物成像的原理示意图^[16]; (b) 由彩虹构建的 mCerulean (CFP)、mEYFP、tdTomato 和/或 mCherry 编码的荧光蛋白的双光子激发光谱^[16]; (c) 小鼠皮层 450 μm 厚的 z 堆叠中提取的多色图像(左), 不同深度 ($z = 50, 250, 400 \mu\text{m}$) 的成像截面(右)^[16]; (d) 基于双色激发 ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1240 \text{ nm}$) 的小鼠脑部三维成像图^[17]; (e) 小鼠脑部双色双光子激发荧光信号与深度的依赖关系, 1C2P 为 D-TPA 激发 ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$), 2C2P 为双色激发 ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1240 \text{ nm}$), $\tau = -600 \text{ fs}$, 0 fs 为两种激发光的时间差^[17]

Fig. 7. ND-TPA for two-color two-photon fluorescence imaging: (a) A typical setup of multicolor two-photon imaging using synchronized pulses^[16]; (b) two-photon excitation spectra of the fluorescent proteins encoded by the Brainbow constructs mCerulean (CFP), mEYFP, tdTomato and/or mCherry, arrows indicate the excitation wavelengths^[16]; (c) multicolor images of a mouse cortex extracted from a 450- μm -thick z stack (left), image slices at different depth ($z = 50, 250, 400 \mu\text{m}$) (right)^[16]; (d) the 3D image of a mouse brain using the two-color ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1240 \text{ nm}$) two-photon fluorescence imaging technique^[17]; (e) two-photon excited fluorescence signal intensity versus tissue depth in a mouse brain. 1C2P: D-TPA excitation ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$), 2C2P: ND-TPA excitation ($\lambda_1 = 1055 \text{ nm}$, $\lambda_2 = 1240 \text{ nm}$), $\tau = -600 \text{ fs}$, 0 fs : the time intervals between the excitation pulses^[17].

此后, 该研究团队又报道了基于 ND-TPA 的高速运行的硅波导光逻辑非门^[20], 如图 8(d), (e) 所示, 将具有相同峰值功率的信号 P1 和 P2 组合在一起, 耦合到波导中. 基于 ND-TPA 过程, 利用 P1 和 P2 之和对波导输出的弱连续波探针光进行交叉调制. 布尔 NOR 运算以暗脉冲的形式实现. 该光波导只有 1 cm, 其需要的泵浦光子能量和信号光子能量之和大于硅的带隙, 泵浦脉冲的波长为 1545 nm 和 1555 nm, 信号光则为 1560 nm 的连续光. 该器件的逻辑运算仅需要几个 pJ 的脉冲能量, 开关时间小于 3 ps. 除 NOR 门外, 理论上通过硅波导的 ND-TPA 也可实现低功率全光计算的 NOT, NAND 和 AND 门^[92].

此外, Mehta 等^[93]也演示了基于非晶硅光纤的 ND-TPA 的全光开关, 尽管其最短调制时间仅约为 1 ps, 但长寿命的自由载流子的贡献不可忽视. Li 等^[94]通过波长为 820 nm, 功率为 26.67 J/m² 飞秒激光泵浦, 实现了 SiC 可见波段 (420—720 nm) 光调制, 调制时间约为 100—400 fs, 调制深度约为 10%. 近年随着 2D 材料的兴起, 以及其相比于 3D 材料更加优越的非线性光学性质, 其在全光开关与调制中展现出了巨大的潜力^[94]. 如 Grinblat 等^[46]利用 100 nm 厚的 (BA)₂(A)_{n-1}Pb_nX_{3n+1} 薄片的光学 Kerr 和 ND-TPA 效应实现了可见波段反射调制, 调制深度约为 2%, 调制时间小于 20 fs.

Wang 等^[95]则通过少层 MXene Nb₂C 实现了透射光宽带调制, 调制深度约 2%, 时间为 192 fs, 所需能量约为 800 nJ.

6 结论与展望

本文主要综述了 ND-2PA 的基本原理、测量方法以及前沿研究进展. 由于 ND-2PA 较 D-TPA 有了几十到几百倍的增强, 使得其在多种非线性光学潜在应用具有重要意义. 首先, 结合常用的紫外-可见-近红外探测器 (GaN, Si, GaAs 等) 的高灵敏度和其对可见/近红外和中红外光子对的高 ND-TPA, 可实现高灵敏、低噪声的中红外探测, 可媲美甚至优于需液氮冷却的 HgCdTe 中红外探测器. 但是其探测效率仍远低于紫外到近红外波段的效率. 在接下来的工作, 可以通过优化探测器的厚度、构建光学微腔、使用非线性效应更强的低维材料等方法来增强 ND-TPA, 进一步提升其工作效率.

其次, ND-2PA 应用于双光子荧光显微镜中, 不仅可以保留双光子荧光显微镜的所有优点, 而且可提高其分辨率, 加深其成像深度, 对于激发波长有更宽的选择范围以及增强了激发荧光强度, 因此具有更大的应用潜力. 在未来的工作中, 研究的重点应该是发展设计更多的同时具有高 ND-TPA 截

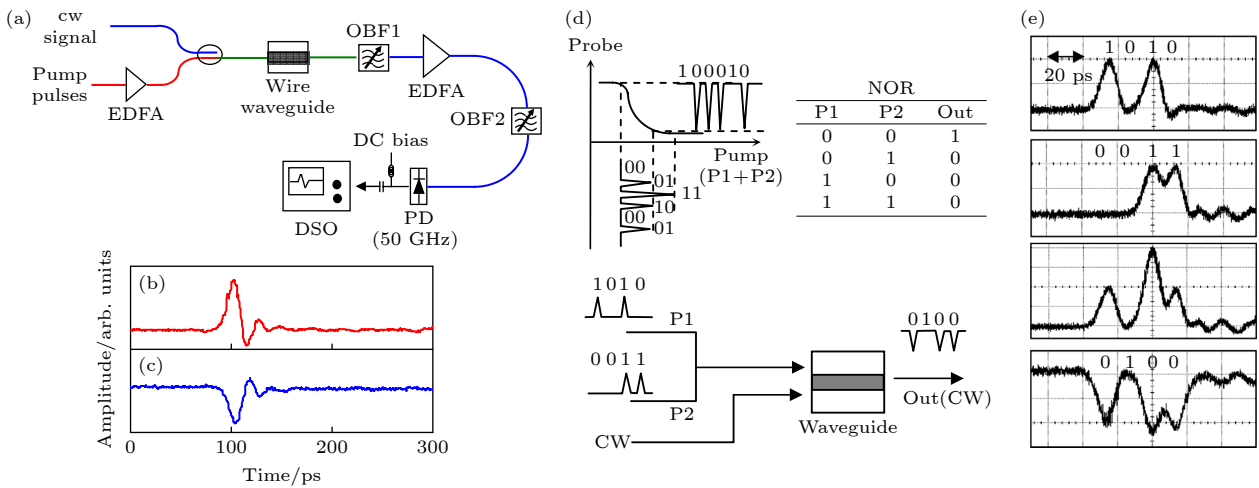


图 8 (a) 用于全光开关的实验装置, EDFA: 掺铒光纤放大器, OBF: 光带通滤波器, PD: 光电二极管, DSO: 数字采样示波器^[22]; (b) 1552 nm 泵浦脉冲和 (c) 1536 nm 处的交叉吸收调制连续波信号^[22]; (d) NOR 门操作原理和真值表^[20]; (e) P1 和 P2 信号及其逻辑 NOR 操作的输出信号^[20]

Fig. 8. (a) Experimental setup of a typical all-optical switch, EDFA: erbium-doped fiber amplifier, OBF: optical bandpass filter, PD: photodiode, DSO: digital sampling oscilloscope^[22]; (b) pump pulses at 1552 nm and (c) cross-absorption modulated CW signal at 1536 nm^[22]; (d) operation principle and truth table of NOR gate^[20]; (e) signal P1, P2 and the output cross-modulated CW probe with logic NOR operation^[20].

面和发光量子产率的荧光分子、超分子结构或者量子点结构。比如在分子层面构建具有强电偶极矩的有机材料或者将适量的具有强非线性效应的低维材料嵌入荧光分子中可能是未来的研究方向之一。

对于全光开关与调制, ND-2PA 使得开关速度大于 THz, 并有效地降低了开关或调制所需要的能耗。但是, 目前其所需的能量仍然比电学开关高几个量级。理想情况下, 全光开关应该具备~fs 响应时间, 开关效率为 100%, 开关所需功率小于 1 kW/cm², 以及 μm 级别的尺寸^[96]。显然, 目前以硅为核心的光通讯系统很难达到这一要求。通过使用低维材料的强 ND-TPA 和光学微腔、超表面等微纳光学尺度优化其光场分布, 可能可以实现全光开关的理想目标。

参考文献

- [1] Franken P A, Hill A E, Peters C W, Weinreich G 1961 *Phys. Rev. Lett.* **7** 118
- [2] Ferrando A, Pastor J P M, Suarez I 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 5612
- [3] Nozaki K, Tanabe T, Shinya A, Matsuo S, Sato T, Taniyama H, Notomi M 2010 *Nat. Photonics* **4** 477
- [4] Boggess A S, Moss S, Boyd I, Van Stryland E 1985 *IEEE J. Quantum Electron.* **21** 488
- [5] Hagan D J, van Stryland E W, Soileau M J, Wu Y Y, Guha S 1988 *Opt. Lett.* **13** 315
- [6] Helmchen F, Denk W 2005 *Nat. Methods* **2** 932
- [7] Park S H, Yang D Y, Lee K S 2009 *Laser Photon. Rev.* **3** 1
- [8] Gu M, Li X P, Cao Y Y 2014 *Light Sci. Appl.* **3** e177
- [9] Gao D, Agayan R R, Xu H, Philbert M A, Kopelman R 2006 *Nano Lett.* **6** 2383
- [10] Xu G J, Ren X Y, Miao Q C, Yan M, Pan H F, Chen X L, Wu G, Wu E 2019 *IEEE Photon.* **31** 1944
- [11] Pattanaik H S, Reichert M, Hagan D J, Van Stryland E W 2016 *Opt. Express* **24** 1196
- [12] Fix B, Jaeck J, Vest B, Verdun M, Beaudoin G, Sagnes I, Pelouard J L, Haidar R 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 041102
- [13] Fang J N, Wang Y Q, Yan M, Wu E, Huang K, Zeng H P 2020 *Phys. Rev. Appl.* **14** 064035
- [14] Boitier F, Dherbecourt J B, Godard A, Rosencher E 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 081112
- [15] Apiratikul P, Murphy T E 2010 *IEEE Photon.* **22** 212
- [16] Mahou P, Zimmerley M, Loulier K, Matho K S, Labroille G, Morin X, Supatto W, Livet J, Debarre D, Beaurepaire E 2012 *Nat. Methods* **9** 815
- [17] Perillo E P, Jarrett J W, Liu Y L, Hassan A, Fernee D C, Goldak J R, Bonteanu A, Spence D J, Yeh H C, Dunn A K 2017 *Light Sci. Appl.* **6** e17095
- [18] Stringari C, Abdeladim L, Malkinson G, Mahou P, Solinas X, Lamarre I, Brizion S, Galey J B, Supatto W, Legouis R, Pena A M, Beaurepaire E 2017 *Sci. Rep.* **7** 3792
- [19] Quentmeier S, Denicke S, Gericke K H 2009 *J. Fluoresc.* **19** 1037
- [20] Liang T K, Nunes L R, Tsuchiya M, Abedin K S, Miyazaki T, Van Thourhout D, Bogaerts W, Dumon P, Baets R, Tsang H K 2006 *Opt. Commun.* **265** 171
- [21] Shen L, Healy N, Mitchell C J, Penades J S, Nedeljkovic M, Mashanovich G Z, Peacock A C 2015 *Opt. Lett.* **40** 2213
- [22] Liang T K, Nunes L R, Sakamoto T, Sasagawa K, Kawanishi T, Tsuchiya M, Priem G R A, van Thourhout D, Dumon P, Baets R, Tsang H K 2005 *Opt. Express* **13** 7298
- [23] Wang W, Wei Q, Gong Y Y, Xing G C, Wu B, Zhou G F 2022 *Adv. Opt. Mater.* **10** 2200400
- [24] Pascal S, David S, Andraud C, Maury O 2021 *Chem. Soc. Rev.* **50** 6613
- [25] Pawlicki M, Collins H A, Denning R G, Anderson H L 2009 *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** 3244
- [26] Sheik-Bahae M, Hutchings D C, Hagan D J, Member, Van Stryland E W 1991 *IEEE J. Quantum Electron.* **27** 1296
- [27] Fishman D A, Cirloganu C M, Webster S, Padilha L A, Monroe M, Hagan D J, Van Stryland E W 2011 *Nat. Photonics* **5** 561
- [28] Kriso C, Stein M, Haeger T, Pourdavoud N, Gerhard M, Rahimi-Iman A, Riedl T, Koch M 2020 *Opt. Lett.* **45** 2431
- [29] Chen S, Zheng M L, Dong X Z, Zhao Z S, Duan X M 2013 *J. Opt. Soc. Am. B* **30** 3117
- [30] Said A A, Sheik-Bahae M, Hagan D J, Wei T H, Wang J, Young Y, Van Stryland E W 1992 *J. Opt. Soc. Am. B* **9** 405
- [31] Wherrett B S 1984 *J. Opt. Soc. Am. B* **1** 67
- [32] Rumi M, Perry J W 2010 *Adv. Opt. Photonics* **2** 451
- [33] Negres R A, Hales J M, Kobayakov A, Hagan D J, van Stryland E W 2002 *Opt. Lett.* **27** 270
- [34] Cirloganu C M, Padilha L A, Fishman D A, Webster S, Hagan D J, Van Stryland E W 2011 *Opt. Express* **19** 22951
- [35] Reichert M, Smirl A L, Salamo G, Hagan D J, Van Stryland E W 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 073602
- [36] Olszak P D, Cirloganu C M, Webster S, Padilha L A, Guha S, Gonzalez L P, Krishnamurthy S, Hagan D J, Van Stryland E W 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235207
- [37] Knez D, Hanninen A M, Prince R C, Potma E O, Fishman D A 2020 *Light Sci. Appl.* **9** 125
- [38] Bolger J A, Kar A. K, Wherrett B S 1993 *Opt. Commun.* **97** 203
- [39] Olson B V, Gehlsen M P, Boggess T F 2013 *Opt. Commun.* **304** 54
- [40] Krauss-Kodytek L, Ruppert C, Betz M 2021 *Opt. Express* **29** 34522
- [41] Wagner T J, Bohn M J, Coutu R A, et al. 2010 *J. Opt. Soc. Am. B* **27** 2122
- [42] Liang H J, Ma Q C, Liu J, Shi X W, Yang G J, Chen S, Liang E 2019 *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **28** 1950015
- [43] Walters G, Sutherland B R, Hoogland S, Shi D, Comin R, Sellan D P, Bakr O M, Sargent E H 2015 *ACS Nano* **9** 9340
- [44] Cox N, Wei J, Pattanaik H, Tabbakh T, Gorza S-P, Hagan D, Van Stryland E W 2020 *Phys. Re. Res.* **2** 013376
- [45] Cui Q N, Li Y Y, Chang J H, Zhao H, Xu C X 2019 *Laser Photon. Rev.* **13** 1800225
- [46] Grinblat G, Abdelwahab I, Nielsen M P, Dichtl P, Leng K, Oulton R F, Loh K P, Maier S A 2019 *ACS Nano* **13** 9504
- [47] Lin Q, Zhang J, Piredda G, Boyd R W, Fauchet P M, Agrawal G P 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 021111
- [48] Wang G, Mei S L, Liao J F, Wang W, Tang Y X, Zhang Q, Tang Z K, Wu B, Xing G C 2021 *Small* **17** 2100809
- [49] Lee C, Fan H 1974 *Phys. Rev. B* **9** 3502

- [50] Li Y X, Dong N N, Zhang S F, Zhang X Y, Feng Y Y, Wang KP, Zhang L, Wang J 2015 *Laser Photon. Rev.* **9** 427
- [51] Liu W W, Xing J, Zhao J X, Wen X L, Wang K, Lu P X, Xiong Q 2017 *Adv. Opt. Mater.* **5** 1601045
- [52] Zhang S F, Dong N N, McEvoy N, O'Brien M, Winters S, Berner N C, Yin C Y, Li Y X, Zhang X Y, Chen Z H, Zhang L, Duesberg G S, Wang J 2015 *ACS Nano* **9** 7142
- [53] Yang H Z, Feng X B, Wang Q, Huang H, Chen W, Wee A T S, Ji W 2011 *Nano Lett.* **11** 2622
- [54] Zhou F, Abdelwahab I, Leng K, Loh K P, Ji W 2019 *Adv. Mater.* **31** e1904155
- [55] Sadegh S, Yang M H, Ferri C G L, Thunemann M, Saisan P A, Devor A, Fainman Y 2019 *Opt. Express* **27** 8335
- [56] Sadegh S, Yang M H, Ferri C G L, Thunemann M, Saisan P A, Wei Z, Rodriguez E A, Adams S R, Kilic K, Boas D A, Sakadzic S, Devor A, Fainman Y 2019 *Opt. Express* **27** 28022
- [57] Xue B, Katan C, Bjorgaard J, Kobayashi T 2015 *AIP Adv.* **5** 127138
- [58] Xu C, Webb W W 1996 *JOSA B* **13** 481
- [59] Makarov N S, Drobizhev M, Rebane A 2008 *Opt. Express* **16** 4029
- [60] Chen S, Zheng Y C, Zheng M L, Dong X Z, Jin F, Zhao Z S, Duan X M 2017 *J. Mater. Chem. C* **5** 470
- [61] Elayan I A, Brown A 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* DOI: 10.1039/D3CP00723E
- [62] Wolleschensky R, Feurer T, Sauerbrey R, Simon U 1998 *Appl. Phys. B-Lasers O.* **67** 87
- [63] Pascal S, Chi S H, Grichine A, Martel-Frchet V, Perry J W, Maury O, Andraud C 2022 *Dyes Pigm.* **203** 110369
- [64] Rogalski A, Martyniuk P, Kopytko M 2016 *Rep. Prog. Phys.* **79** 046501
- [65] Adiyani U, Larsen T, Zarate J J, Villanueva L G, Shea H 2019 *Nat. Commun.* **10** 4518
- [66] Korzh B, Zhao Q Y, Allmaras J P, Frasca S, Autry T M, Bersin E A, Beyer A D, Briggs R M, Bumble B, Colangelo M, Crouch G M, Dane A E, Gerrits T, Lita A E, Marsili F, Moody G, Peña C, Ramirez E, Rezac J D, Sinclair N, Stevens M J, Velasco A E, Verma V B, Wollman E E, Xie S, Zhu D, Hale P D, Spiropulu M, Silverman K L, Mirin R P, Nam S W, Kozorezov A G, Shaw M D, Berggren K K 2020 *Nat. Photonics* **14** 250
- [67] Hu W D, Ye Z H, Liao L, Chen H L, Chen L, Ding R J, He L, Chen X S, Lu W 2014 *Opt. Lett.* **39** 5184
- [68] Martyniuk P, Rogalski A 2015 *Infrared Phys. Technol.* **70** 125
- [69] Dam J S, Tidemand-Lichtenberg P, Pedersen C 2012 *Nat. Photonics* **6** 788
- [70] Kuo P S, Slattery O, Kim Y S, Pelc J S, Fejer M M, Tang X 2013 *Opt. Express* **21** 22523
- [71] Barh A, Rodrigo P J, Meng L, Pedersen C, Tidemand-Lichtenberg P 2019 *Adv. Opt. Photon.* **11** 952
- [72] Pelc J S, Ma L, Phillips C R, Zhang Q, Langrock C, Slattery O, Tang X, Fejer M M 2011 *Opt. Express* **19** 21445
- [73] Bristow A D, Rotenberg N, Van Driel H M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 191104
- [74] Denk W, Strickler J H, Webb W W 1990 *Science* **248** 73
- [75] Niesner R, Andresen V, Neumann J, Spiecker H, Gunzer M 2007 *Biophys. J.* **93** 2519
- [76] Weissleder R, Ntziachristos V 2003 *Nat. Med.* **9** 123
- [77] Xu H T, Chen S, Mu K J, Wang J Q, Tian Y Z, Su S L, Mao Y C, Liang E J 2018 *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **27** 1850027
- [78] Hales J M, Hagan D J, Van Stryland E W, Schafer K J, Morales A R, Belfield K D, Pachter P, Kwon O, Zojer E, Bredas J L 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 3152
- [79] Lakowicz J R, Gryczynski I, Malak H, Gryczynski Z 1996 *Photochem. Photobiol.* **64** 632
- [80] Robinson T, Valluri P, Kennedy G, Sardini A, Dunsby C, Neil M A, Baldwin G S, French P M, de Mello A J 2014 *Anal. Chem.* **86** 10732
- [81] Quentmeier S, Denicke S, Ehlers J E, Niesner R A, Gericke K H 2008 *J. Phys. Chem. B* **112** 5768
- [82] Yang M H, Abashin M, Saisan P A, Tian P, Ferri C G, Devor A, Fainman Y 2016 *Opt. Express* **24** 30173
- [83] Cambaliza M O, Saloma C 2000 *Opt. Commun.* **184** 25
- [84] Ibanez-Lopez C, Escobar I, Saavedra G, Martinez-Corral M 2004 *Microsc. Res. Techniq.* **64** 96
- [85] Blanca C M, Saloma C 2001 *Appl. Opt.* **40** 2722
- [86] Lim M, Saloma C 2003 *Appl. Opt.* **42** 3398
- [87] Garini Y, Young I T, McNamara G 2006 *Cytom. Part A* **69** 735
- [88] Almeida V R, Barrios C A, Panepucci R R, Lipson M, Foster M A, Ouzounov D G, Gaeta A L 2004 *Opt. Lett.* **29** 2867
- [89] Abdalla S, Ng S, Barrios P, Celo D, Delage A, El-Mougy S, Golub I, He J J, Janz S, McKinnon R 2004 *IEEE Photon.* **16** 1038
- [90] Först M, Niehusmann J, Plötzing T, Bolten J, Wahlbrink T, Moormann C, Kurz H 2007 *Opt. Lett.* **32** 2046
- [91] Li C F, Dou N 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 054203
- [92] Mukherjee K, Kumbhakar D 2012 *Optik* **123** 489
- [93] Mehta P, Healy N, Day T, Sparks J, Sazio P, Badding J, Peacock A 2011 *Opt. Express* **19** 19078
- [94] Yu S, Wu X, Wang Y, Guo X, Tong L 2017 *Adv. Mater.* **29** 1606128
- [95] Wang C, Gao L, Chen H, Xu Y, Ma C, Yao H, Song Y, Zhang H 2021 *Nanophotonics* **10** 2617
- [96] Chai Z, Hu X Y, Wang F F, Niu X X, Xie J Y, Gong Q H 2017 *Adv. Opt. Mater.* **5** 1600665

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Research advances in nondegenerate two-photon absorption and its applications*

Wu Bo^{1)†} Wang Jue¹⁾ Wang Wei¹⁾ Zhou Guo-Fu^{1)2)3)‡}

1) (*Institute of Electronic Paper Displays, Guangdong Provincial Key Laboratory of Optical Information Materials and Technology, South China Academy of Advanced Optoelectronics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Shenzhen Guohua Optoelectronics Tech. Co. Ltd., Shenzhen 518110, China*)

3) (*Academy of Shenzhen Guohua Optoelectronics, Shenzhen 518110, China*)

(Received 1 June 2023; revised manuscript received 13 July 2023)

Abstract

Nondegenerate two-photon absorption is a nonlinear optical effect in which two photons with different energy are absorbed by a medium simultaneously, resulting in a single electron transition from ground state to excited state through an intermediate virtual state. Compared with the degenerate two-photon absorption coefficient, the absorption coefficient of nondegenerate two-photon absorption is increased by tens or even hundreds of times due to the intermediate resonance effect, so it has great potentials in many nonlinear optical applications. Firstly, the basic principle of two-photon absorption is introduced and the enhancement mechanism of non-degenerate two-photon absorption is explained in this paper. Secondly, the basic method of measuring two-photon absorption is introduced in detail. Thirdly, the reports on nondegenerate two-photon absorption of three-dimensional semiconductor materials and two-dimensional materials are reviewed. Finally, the application progress of infrared detection and imaging, two-photon fluorescence microscope, all-optical switch and optical modulation is summarized, and the future research in this field is summarized and prospected.

Keywords: non-degenerate two-photon absorption, infrared detection, nonlinear optics, two-photon fluorescence imaging, all optical switch and modulation

PACS: 42.65.-k, 85.60.Gz, 42.30.-d, 42.65.Pc

DOI: [10.7498/aps.72.20230911](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230911)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62175068), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2023B1515020024), the Key Laboratory of Optical Information Materials and Technology of Guangdong Province, China (Grant No. 2017B030301007), and the National Green Optoelectronics International Joint Research Center (Grant No. 2016B01018).

† Corresponding author. E-mail: bowu@m.scnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: guofu.zhou@m.scnu.edu.cn

非简并双光子吸收及其应用研究进展

吴波 王爵 王巍 周国富

Research advances in nondegenerate two-photon absorption and its applications

Wu Bo Wang Jue Wang Wei Zhou Guo-Fu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204204 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230911

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230911>

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

红外探测用无铅铁电陶瓷的热释电特性研究进展

Research progress of pyroelectric characteristics of lead-free ferroelectric ceramics for infrared detection

物理学报. 2020, 69(12): 127708 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200303>

基于等离激元纳米结构非线性响应的超快光开关及脉冲激光器

Ultrafast optical switches and pulse lasers based on strong nonlinear optical response of plasmon nanostructures

物理学报. 2020, 69(18): 189101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200456>

低维半导体材料在非线性光学领域的研究进展

Research progress of low-dimensional semiconductor materials in field of nonlinear optics

物理学报. 2020, 69(18): 184211 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200206>

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>

基于介电常数近零模式与间隙表面等离激元强耦合的增强非线性光学效应

Enhanced nonlinear optical effects based on strong coupling between epsilon-near-zero mode and gap surface plasmons

物理学报. 2021, 70(18): 187303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210290>

给体位置和数目对四苯基乙烯衍生物双光子吸收性质的影响

Effects of donor position and number on two-photon absorption properties of tetraphenylethylene derivatives

物理学报. 2019, 68(18): 183101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190471>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

双通道结构光照明超分辨定量荧光 共振能量转移成像系统*

罗泽伟¹⁾²⁾ 武戈¹⁾²⁾ 陈挚¹⁾²⁾ 邓驰楠¹⁾²⁾ 万蓉¹⁾²⁾
杨涛¹⁾²⁾ 庄正飞¹⁾²⁾ 陈同生^{1)2)†}

1) (华南师范大学生物光子学研究院, 教育部激光生命科学重点实验室, 广州 510631)

2) (华南师范大学生物光子学研究院, 广东省激光生命科学重点实验室, 广州 510631)

(2023 年 5 月 25 日收到; 2023 年 6 月 28 日收到修改稿)

基于结构光照明 (structured illumination, SI) 的超分辨荧光共振能量转移 (super resolution fluorescence resonance energy transfer, SR-FRET) 成像技术 (SISR-FRET) 可以通过解析活细胞内亚衍射区域的 FRET 信号来研究细胞器精细结构上的分子结构与功能. SISR-FRET 成像中激发发射通道切换导致成像速度较慢, 限制了 SISR-FRET 在快速成像中的应用. 针对此问题, 本文提出一种双通道结构光照明超分辨定量 FRET 成像系统和方法, 通过在成像光路中加入 FRET 双通道成像和配准模块, 实现了 SISR-FRET 激发发射通道的空分切换以及通道复用. 结合通道亚像素配准校正的图像重建算法, 双通道 SISR-FRET 可以在保持定量超分辨 FRET 分析的同时提升了 3.5 倍时间分辨率. 利用搭建的多色 SIM 系统进行了活细胞表达靶向线粒体外膜 FRET 标准质粒的超分辨成像实验, 验证了双通道 SISR-FRET 的时空分辨率增强和 FRET 定量分析的保真度.

关键词: 荧光共振能量转移, 结构光照明, 超分辨, 活细胞**PACS:** 87.64.M-, 87.64.kv, 42.30.-d**DOI:** 10.7498/aps.72.20230853

1 引言

荧光共振能量转移 (fluorescence resonance energy transfer, FRET) 显微成像术在活细胞中原位定量检测生物大分子间动态相互作用及空间分布方面具有独特优势. 在细胞生命活动中, 蛋白质与其他生物分子形成复杂相互作用和调节网络, 原位研究蛋白质-蛋白质相互作用的时空分布和功能关系是目前生命科学的重要课题之一^[1,2]. 尽管荧光显微成像技术和荧光标记技术的发展为研究蛋白质-蛋白质相互作用提供了有利的条件, 目前已有的蛋白间互作研究方法仍无法在活细胞内同时

实现蛋白结构功能和空间分布动态变化的解析^[3]. FRET 利用分子间共振能量转移速率与距离 6 次方反比的关系来度量 1—10 nm 尺度分子的接近程度, 该物理过程非常适合于表征分子构象变化和分子间相互作用^[4]. 通过定量计算 FRET 表观效率 (E_D , E_A) 和总受体与供体的浓度比 (R_C), 定量 FRET 实现了活细胞内动态蛋白互作的“可视化”, 并为揭示蛋白复合物形成过程中亲和力和化学计量比的测量提供了独特见解^[5,6]. 以上优势使得定量 FRET 显微成像技术正成为研究蛋白质调控网络和信号转导途径、疾病机制和药物筛选的重要工具^[7-9].

超分辨 FRET 显微成像术 (super resolution FRET, SR-FRET) 为研究亚细胞器精细结构上的

* 国家自然科学基金 (批准号: 62135003) 和广东省重点领域研发计划 (批准号: 2022B0303040003) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chentsh@scnu.edu.cn

分子结构及其功能开辟了新道路. 受限于衍射极限对显微成像空间分辨率的约束, FRET 显微成像分辨能力存在瓶颈, 这使得传统 FRET 显微成像在观测亚细胞区域内蛋白分子相互作用及空间定位时只能解析常规荧光显微镜分辨率约束下多分子事件的平均行为^[10]. 近年来超分辨荧光显微成像技术的发展极大提升了亚细胞器精细结构动态变化的解析力, 因此将超分辨显微与 FRET 成像功能融合并实现 SR-FRET 显微成像获得了学界的广泛关注^[11,12]. 实现超分辨 FRET 显微成像的难点主要包括: 1) 如何从重新分布的超分辨光场中定量解析出 FRET 信号; 2) 如何在有限光通量和光漂白条件下平衡时空分辨率提升与 FRET 定量计算保真度. 目前, 基于单分子定位显微术 (single molecule localization microscopy, SMLM) 和受激发射耗尽显微术 (stimulated emission depletion microscopy, STED) 的 SR-FRET 成像技术利用有机荧光染料标记的 FRET 固定样品实现了 FRET 信号的超分辨解析^[13–15]. 然而基于 SMLM 的 SR-FRET 需要收集供体和受体分子同时处于光激发活化状态时的 FRET 信号, 这对于互相独立闪烁的供受体对来说十分困难, 极长的成像时间也使得该技术与研究活细胞中发生的动态过程很难兼容^[10]. 对于基于 STED 的 SR-FRET, STED 损耗光改变了供体的激发态寿命并导致供体和受体分子的不均匀光漂白, 这种调制过程使得 STED FRET 只能得到半定量的 FRET 指数而不能完成定量 FRET 测量^[15]. 针对以上问题, 本课题组开展了结构光照明显微术 (structured illumination microscopy, SIM) 和定量 FRET 融合的探索^[16]. 由于 SIM 显微术相比其他 SR 成像技术具有照明光强度低、成像速度快的优势, 融合 SIM 和 FRET 技术可能实现目前最佳平衡时空分辨率和光漂白影响的 SR-FRET 成像术^[17–22]. 为了消除 SIM 重建伪影对定量 FRET 的影响, 本课题组设计了一种基于结构光照明超分辨 FRET 两步重建方法 (SISR-FRET), 该方法依次完成三通道 SIM 图像的线性重建和基于共同定位掩模滤波的 FRET 定量解析. 两步过程可以确保重建的 SR-FRET 信号的保真度, 同时可以精确去除由 SIM 伪影引起的假阳性 FRET 信号. 与传统的宽场 FRET 成像相比, SISR-FRET 保持了定量特性并实现了活细胞中 120 nm 空间分辨率解析亚细胞器精细结构上的 FRET 信号^[23].

实现快速结构光照明超分辨定量 FRET 成像是目前活细胞 SR-FRET 研究的迫切需要. 对于 SISR-FRET, 完成一次成像需要采集结构光调制下的三通道 27 张原始图像组, 如果被成像的 FRET 样本在拍摄总时间内移动距离超出了系统点扩散函数 (point spread function, PSF) 范围, 则重建的超分辨图像就会出现运动伪影并导致 FRET 结果失真^[24]. 尽管传统基于滤光片转轮的时分 FRET 三通道切换方案具有切换灵活、无需通道对准等优点, 机械转盘切换速度慢的缺点限制了 SISR-FRET 快速成像^[25]. 针对以上问题, 本文提出一种双通道结构光照明超分辨定量 FRET 成像系统和方法, 通过在成像光路中引入 FRET 双通道探测和对准模块, 双通道 SISR-FRET 系统实现了 FRET 通道的空分切换. 进一步地, 通过优化系统时序控制以及加入通道亚像素对准算法, 双通道 SISR-FRET 系统实现了快速三通道成像并保持通道亚像素精度对准, 最终相比于基于滤光片转轮的时分 FRET 三通道切换方案有效提升了 3.5 倍的时间分辨率. 利用该系统对活细胞表达靶向线粒体外膜的 FRET 标准质粒进行成像, 验证了双通道 SISR-FRET 的时空分辨率增强和 FRET 定量分析的保真度.

2 双通道 SISR-FRET 系统与方法

2.1 成像系统设计与搭建

完成一次 SISR-FRET 成像首先需要收集供体激发供体发射 (DD 通道)、供体激发受体发射 (DA 通道) 和受体激发受体发射 (AA 通道) 3 个通道结构光照明调制的原始图像组. 每一个激发发射通道的原始图像组由 3 个不同结构光方向角, 每个结构光方位角包含 3 个不同相位差的余弦结构光调制的宽场荧光图像构成. 三通道原始数据 $D_{\theta,n}^X(r)$ 的强度分布可以由下式表示:

$$D_{\theta,n}^X(r) = \left\{ S(r) \cdot \left[1 + m_{\theta}^X \cdot \cos(k_{\theta}^X \cdot r + \phi_{\theta}^X + \frac{2\pi(n-1)}{3}) \right] \right\} \otimes H^X(r), \quad (1)$$

其中下标 $\theta (= 1, 2, 3)$ 和 $n (= -1, 0, 1)$ 表示余弦照明的方向角和相位差, 上标 $X (= DD, DA, AA)$ 表示 FRET 通道, $S(r)$ 表示样本荧光信号的空间分布, m_{θ}^X , k_{θ}^X , ϕ_{θ}^X 分别是余弦结构光场的调制深

度、照明频率矢量和初相位, $H^X(r)$ 表示不同 FRET 通道 X ($=$ DD, DA, AA) 对应的点扩散函数 (PSF).

为了获得三通道原始数据 ($D_{\theta,n}^{DD}(r) / D_{\theta,n}^{DA}(r) / D_{\theta,n}^{AA}(r)$), 我们搭建了一个套双通道同时探测的多色干涉式 SIM 系统. 系统光路如图 1 所示. 该系统的激发光由波长为 488 nm (EX1, 供体激发) 和 561 nm (EX2, 受体激发) 激光通过多色合束光源生成 (L4cc, Oxxius). 为了使定量 FRET 计算时系统参数和 FRET 效率不受到激光器的照明功率波动的影响, 在光源耦合到系统光路之前需要先通过激发光强度自动校准装置进行光强校正, 激发光强度自动校准装置由分束器 (BS, BS037, Thorlabs) 和激光功率计 (PM400K1, Thorlabs) 构成. 校正后的光源光束用两个消色差透镜组成的扩束系统完成照明光的扩束和准直. 而后准直光束入射到由偏振分束器 (PBS)、消色差半波片 (HWP) 和铁电液晶空间光调制器 (SLM, QXGA-3DM-STR, forth dimension displays) 组成的等效相位光栅进行衍射, 这样产生的调制衍射光束由消色差透镜 (L1, AC254-300, Thorlabs) 聚焦后, 通过定制的空间掩模滤波器 (Mask, 1 mm 铝片, 孔径为 0.5 mm) 过滤 0 阶和其他高阶衍射光, 最终保

留 ± 1 阶衍射光束. 为了最大化照明图案的调制深度, 照明光的偏振由四分之一波片 (QWP) 和定制的结构化偏振片 (PP, VIS 038BC3CW01, Codixx) 调制并保持 S 偏振. 而后经过偏振调制的双光束通过由消色差透镜 2 (L2, AC254-125, Thorlabs) 和消色差透镜 3 (L3, AC254-200, Thorlabs) 组成的 4f 系统, 将相干光束中继到显微镜物镜的后焦面上 (L4, Apo TIRF 60 \times NA1.49, Nikon). 最终经过物镜重新准直的两束光束在焦平面发生干涉并在样品上产生二维余弦调制光场. 样品的发射荧光经过二向色镜 1 (DM1, DI03-R405/488/561/635, Semrock) 和二向色镜 2 (DM2, DI03-R561, Semrock) 以及供体发射滤光片 1 (EM1, ET530/30x, Chroma) 和受体发射滤光片 2 (EM2, BA570-625, Olympus) 的滤光片组实现 FRET 供体发射光和受体发射光的空域分离, 发射荧光经过管镜 (L5, AC508-300, Thorlabs) 汇聚后由两台科研级 cmos 相机收集 (camera1&2, Fusion BT, Hamamatsu). 为了实现双相机通道的像素级对准, 竖直放置的相机加装了配准模块, 配准模块由 X-Y 平移调整架 (ST1XY, Thorlabs) 以及旋转调整架 (LCP16R1, Thorlabs) 构成, 该配准模块可以为双相机对准提供高精度的旋转、平移调整自由度.

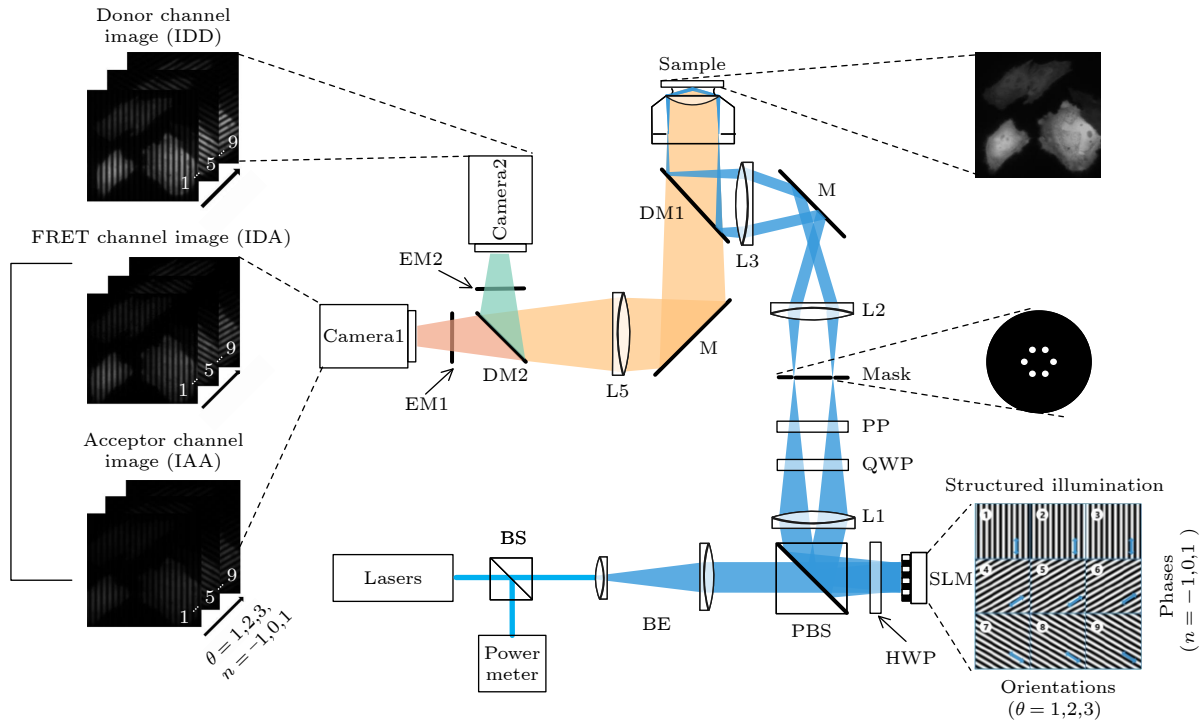


图 1 双通道 SISR-FRET 系统光路示意图

Fig. 1. Schematic diagram of dual-channel SISR-FRET system.

2.2 双通道 SISR-FRET 重构方法

采集三通道原始数据 $D_{\theta,n}^X(r)$ 后, 需要对数据进行重建来获取超分辨结构信息. 为了确保每个重建的 SR 图像在 3 个 FRET 通道中保持荧光强度保真, 使用线性维纳重建算法, 该线性重建过程包括频率分离、频谱搬移和广义维纳反卷积. 每个通道的重建 SR 图像 ($I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}(r) / I_{\text{SIM}}^{\text{DA}}(r) / I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}(r)$) 通过以下公式实现:

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} \tilde{S}_{\theta,0}^X(k) \\ \tilde{S}_{\theta,-1}^X(k - p_{\theta}^X) \\ \tilde{S}_{\theta,1}^X(k + p_{\theta}^X) \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 1 & m_{\theta}^X e^{-i(\phi_{\theta}^X)/2} & m_{\theta}^X e^{i(\phi_{\theta}^X)/2} \\ 1 & m_{\theta}^X e^{-i(\phi_{\theta}^X + \frac{2\pi}{3})/2} & m_{\theta}^X e^{i(\phi_{\theta}^X + \frac{2\pi}{3})/2} \\ 1 & m_{\theta}^X e^{-i(\phi_{\theta}^X + \frac{4\pi}{3})/2} & m_{\theta}^X e^{i(\phi_{\theta}^X + \frac{4\pi}{3})/2} \end{bmatrix}^{-1} \\
 & \times \begin{bmatrix} \tilde{D}_{\theta,0}^X(k) \\ \tilde{D}_{\theta,-1}^X(k) \\ \tilde{D}_{\theta,1}^X(k) \end{bmatrix}, \\
 & I_{\text{SIM}}^X(r) = \text{iff}t \left[\frac{\sum_{\theta,n} \tilde{S}_{\theta,n}^X \tilde{H}^{*X}(k + np_{\theta}^X)}{\sum_{\theta,n} |\tilde{H}^X(k + np_{\theta}^X)|^2 + w^2} \tilde{A}(k) \right], \quad (2)
 \end{aligned}$$

其中 $\tilde{D}_{\theta,n}^X(k)$ 表示三通道原始数据的 $D_{\theta,n}^X(r)$ 傅里叶频谱, $\tilde{S}_{\theta,0}^X(k)$ 和 $\tilde{S}_{\theta,\pm 1}^X(k)$ 是频谱分离后包含 0 阶中低频谱和 ± 1 阶含高频频谱, $\tilde{H}^X(k)$ 是不同 FRET 通道的光学传递函数 (optical transfer function, OTF), 实验中使用 100 nm 荧光微球 (0.1 μm Tetra-Speck, T7279, Thermofisher) 对 OTF 进行了实验标定. $\tilde{A}(k)$ 是切趾函数, w 是维纳系数, 为了重建信号在 FRET 三通道之间仍然能保持灰度强度关系一致, 三通道 SR 图像重建采用统一的维纳系数和高斯型切趾函数, 维纳参数根据经验选取 0.2, 高斯型切趾函数选取为 $\tilde{A}(k) = \exp[-0.5(k\sqrt{2\ln 2})^2]$.

在进一步 FRET 计算之前, 需要对三通道 SR-FRET 图像进行预处理. 由于双通道成像系统存在通道配准的问题, 除了在系统硬件配准模块上进行像素级别的通道对准, 还需要通过配准算法实现 FRET 三通道进一步的亚像素级对准, 以保证 FRET 逐像素计算时的精度. DA 和 AA 通道图像由于通

道的复用关系不需要额外对准, 因此配准算法以 DD 通道 SR 重建图像为基准, 通过将 DA, AA 通道图像与仿射变换相乘来实现与 DD 通道图像的亚像素级对准. 仿射变换矩阵 T 通过以下最优化方法获得:

$$\arg \min_T \|T [I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}(r)] - I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}(r)\|_2^2, \quad (4)$$

$$T = \begin{bmatrix} s \cos(\theta) & -s \sin(\theta) & x_t \\ s \sin(\theta) & s \cos(\theta) & y_t \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中 x_t , y_t 为仿射变换矩阵的平移参数, θ , s 分别表示旋转和缩放补偿参数.

另一方面, FRET 定量计算需要考虑背景灰度的影响. 实验中对每个 FRET 成像通道的超分辨图像进行逐像素灰度值统计, 并以灰度值直方图中第 1 个峰值对应的灰度值作为该视野的背景灰度值 I_{bg}^X ($X = \text{DD}, \text{DA}, \text{AA}$). 接着对图像进行背景修正并将负的像素灰度值置零, 得到每个成像通道的修正图像. 具体过程表示为

$$\begin{aligned}
 I'_{\text{SIM}}^X &= \begin{cases} I_{\text{SIM}}^X - I_{\text{bg}}^X, & I_{\text{SIM}}^X - I_{\text{bg}}^X > 0, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \\
 X &= \text{DD}, \text{DA}, \text{AA}. \quad (6)
 \end{aligned}$$

FRET 三通道原始图像组在采集过程中不可避免产生噪声, 这些噪声会经过 SR-SIM 线性重建放大产生重建伪影并严重影响 FRET 定量分析. 由于噪声伪影是随机叠加在 FRET 三通道图像上, 其空间分布彼此独立, 因此这种伪影在三通道图像间具有非常低的相关性. 相反, 当 FRET 发生的必要条件是供受体荧光分子靠近到 10 nm 尺度内, 这样供体和受体分布将展现出极强的共定位特征, 即超过随机噪声图像间的强相关性. 因此可以利用以上先验信息设计共同定位掩模来抑制重建伪影的干扰. 为了定量表征 FRET 信号和噪声在不同成像通道之间差异, 逐像素的共定位分析可以表示如下:

$$\begin{aligned}
 \text{PCC}_{\text{map}}(r) &= \\
 & \frac{[I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}(r) - I_{\text{AVG}}^{\text{DD}}] \cdot \{T [I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}(r) - I_{\text{AVG}}^{\text{AA}}]\}}{\sqrt{\sum_r [I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}(r) - I_{\text{AVG}}^{\text{DD}}]^2 \cdot \sum_r \{T [I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}(r) - I_{\text{AVG}}^{\text{AA}}]\}^2}}, \quad (7)
 \end{aligned}$$

$$\text{MOC}_{\text{map}}(r) = \frac{I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}(r) \cdot T[I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}(r)]}{\sqrt{\sum_r [I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}(r)]^2 \cdot \sum_r \{T[I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}(r)]\}^2}} \quad (8)$$

其中 $\text{PCC}_{\text{map}}(r)$ 是供体和受体图像中每个像素对皮尔逊相关系数 (PCC) 的权重分布图, $\text{MOC}_{\text{map}}(r)$ 是供体和受体图像中每个像素对曼德斯相关系数 (MOC) 的权重分布图. $I_{\text{AVG}}^{\text{DD}}$ 是经过背景扣除后的 DD 通道图像的灰度平均值, $I_{\text{AVG}}^{\text{AA}}$ 是经过背景扣除后的 AA 通道图像的灰度平均值. 将 $\text{PCC}_{\text{map}}(r)$ 和 $\text{MOC}_{\text{map}}(r)$ 相乘得到混合共定位权重矩阵, 并通过自适应阈值处理算法进行混合共定位权重矩阵的分割生成二值化掩膜板 $B_{\text{colocalmask}}(r)$, 可以如下表示:

$$B_{\text{colocalmask}}(r) = \begin{cases} 1, & \text{PCC}_{\text{map}}(r) \cdot \text{MOC}_{\text{map}}(r) > \text{th}, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (9)$$

经过以上图像预处理后, SISR-FRET 计算供体为中心的 FRET 表观效率 E_{D} 和总受体与供体的浓度比 R_{C} 由如下公式得到:

$$E_{\text{D}} = \frac{\text{Fc}_{\text{SIM}}}{\text{Fc}_{\text{SIM}} + G \cdot I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}} \cdot B_{\text{colocalmask}}, \quad (10)$$

$$R_{\text{C}} = \frac{K \cdot T(I_{\text{SIM}}^{\text{AA}})}{\text{Fc}_{\text{SIM}}/G + I_{\text{SIM}}^{\text{DD}}} \cdot B_{\text{colocalmask}}, \quad (11)$$

$$\text{Fc}_{\text{SIM}} = T(I_{\text{SIM}}^{\text{DA}}) - a [T(I_{\text{SIM}}^{\text{AA}}) - cI_{\text{SIM}}^{\text{DD}}] - d [I_{\text{SIM}}^{\text{DD}} - bT(I_{\text{SIM}}^{\text{AA}})], \quad (12)$$

其中, Fc_{SIM} 为受体敏化发射荧光强度, G 为敏化淬灭转化因子, K 为供受体浓度转化因子, a, b, c, d 为系统串扰系数.

总结双通道 SISR-FRET 算法流程图如图 2 所示, 实施 SISR-FRET 需要以下 3 个步骤: 1) 使用三通道原始数据 $D_{\theta,n}^X(r)$ 重建三通道 SR 图像 $I_{\text{SIM}}^X(r)$ ($X = \text{DD}, \text{DA}, \text{AA}$); 2) 通过图像预处理过程, 对重建的三通道 SR 图像进行背景扣除, 通道对准和共定位掩膜滤波模板生成; 3) 对预处理后的三通道 SR 图像中定量计算 FRET 效率 (E_{D}) 和受供体浓度比 (R_{C}).

2.3 控制系统的设计与优化

根据 2.1 和 2.2 节的内容, 完成一次 SISR-FRET 成像需要采集结构光调制下的三通道 27 张原始图像组. 其中一组典型的 FERT 三通道原始数据采集时序如图 3 所示. 采集过程首先由上位机发送指令给下位机, 随后下位机发出精确同步控制

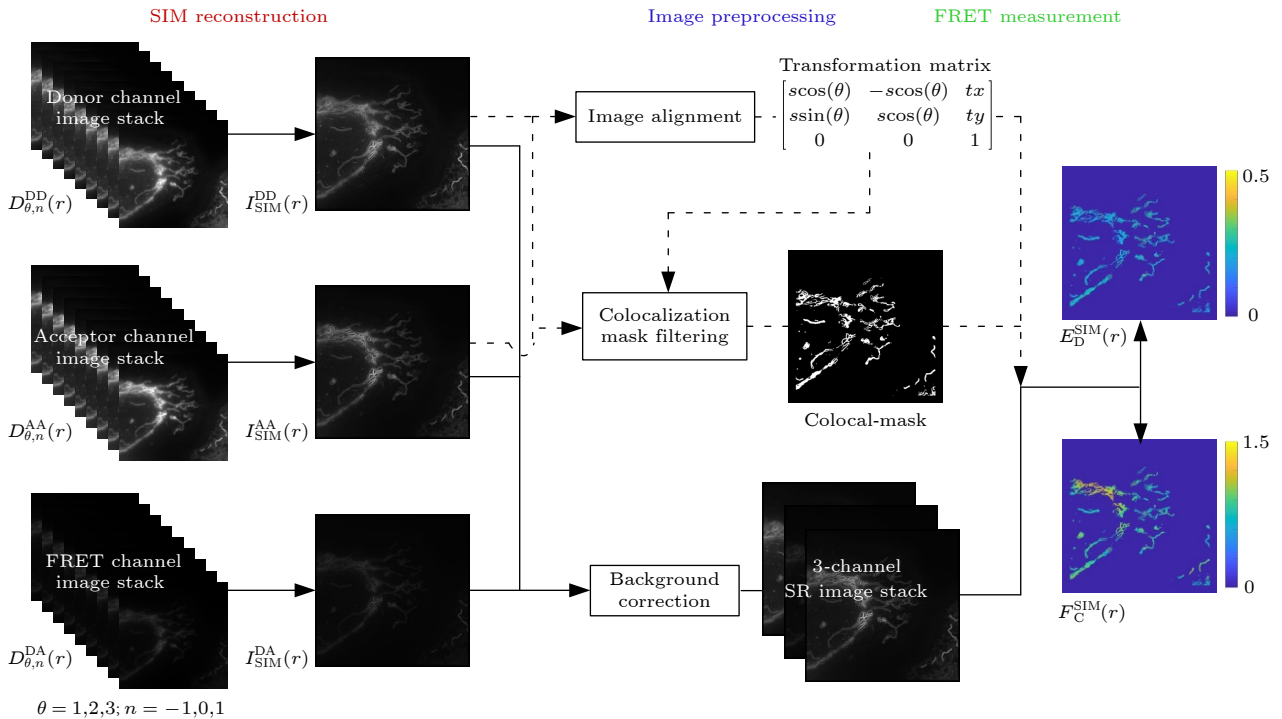


图 2 双通道 SISR-FRET 的算法流程图

Fig. 2. Flow chart of dual-channel SISR-FRET algorithm.

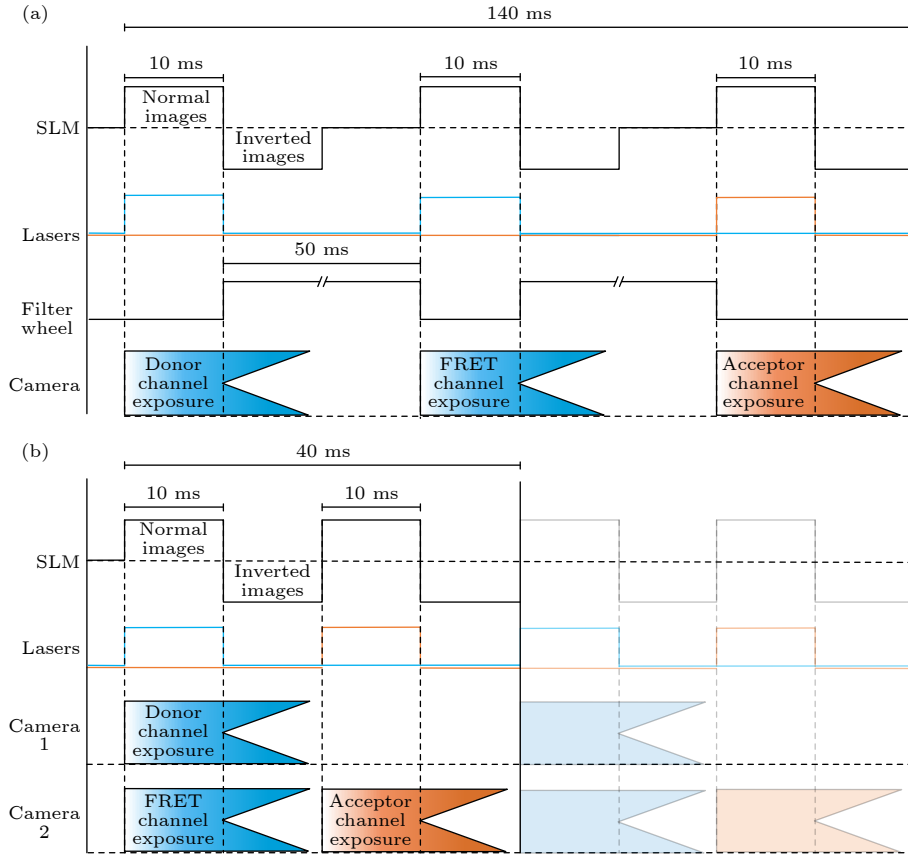


图 3 双通道 SISR-FRET 与单通道 SISR-FRET 时序图对比 (a) 单通道 SISR-FRET 在一个 FRET 采集周期的时序图; (b) 双通道 SISR-FRET 相同周期的时序图

Fig. 3. Comparison of timing sequence of dual-channel SISR-FRET and single-channel SISR-FRET: (a) Timing sequence of single-channel SISR-FRET in one FRET acquisition cycle; (b) timing sequence of dual-channel SISR-FRET in the same cycle.

信号给 SLM、激光器、机械转盘以及两台 sCMOS 相机. 对于单通道 SISR-FRET, 下位机发出同步信号给 SLM 进行结构化图案显示, 同时开启激光器并打开相机曝光完成一次拍摄. 在等待相机读出以及 SLM 暗图像刷新的时间内, 下位机发送触发信号关闭激光器并使能机械转盘完成 FRET 通道切换, 重复以上过程 3 次, 即可完成一组 FERT 原始数据采集并将数据传输给上位机. 为了加快转盘切换速度, 单通道 SISR-FRET 采用快速机械转盘 (FW103, Throlabs), 该器件的最小通道的切换时间为 50 ms. 根据经验设定相机典型单帧曝光时间为 10 ms, 图像采集区域大小为 $512 \times 512 @ 16$ bit, 此时转盘完成切换的时间制约了整个系统成像速度, 该方案可实现的一组 FERT 三通道原始数据采集时间为 140 ms (图 3(a)). 由于双通道 SISR-FRET 将基于滤光片转轮的时分 FRET 三通道切换方案替换为基于二项色镜分光的空分方案, 期间无需转动机械转轮来切换不同波长的发射滤光片, 此时制约成像系统进行下一组曝光的等待时间则

由相机的读出时间和 SLM 的负图像显示时间来确定. 另一方面, 由采用双通道方案, 一次激发可以在两个发射通道实现同时成像 (DD&DA). 相比传统基于滤光片转轮的时分 FRET 三通道切换方案需要切换 3 次才能完成图像采集, 双通道 FRET 成像系统只需两次成像即可完成, 从而将相机曝光读出时间占比进一步减少了 1/3. 在此方案下, 双通道方案在曝光时间相同的情况下完成一组 FRET 三通道原始数据采集时间为 40 ms, 相应系统时间分辨率从原来的约 1 帧/s 提升为 3 帧/s, 实现了约 3.5 倍的时间分辨率提升.

3 成像结果与讨论

为了验证双通道 SISR-FRET 系统在活细胞中超分辨 FRET 成像能力, 使用表达靶向线粒体外膜的 FRET 标准质粒 (ActA-G17M) 的 MCF-7 细胞样本进行系统测试. ActA-G17M 融合了线粒体外膜靶向蛋白 ActA 和 FRET 标准质粒 G17M,

其中 G17M 由 GFP 和 mCherry 之间连接 17 个氨基酸构成. 该质粒的理论 FRET 表观效率 (E_D) 为 0.2, 受体与供体的浓度比 (R_C) 为 1.

利用该样本首先对系统双相机超分辨成像结果的通道对准进行标定, 结果如图 4 所示. 图 4(a) 为样本在 DD 和 AA 通道超分辨成像的伪彩图, 图 4(b) 为 DD 和 AA 通道超分辨成像只经过系统硬件进行通道对准时的叠加效果图, 可以明显观察到 AA 通道对比 DD 通道图像像素的整体向下的错位. 经过双通道 SISR-FRET 图像对准算法处理后, 可计算得到最优对准效果的仿射变换矩阵 T 为 $[1, 0, -0.85], [0, 1, -3.32], [0, 0, 1]$. 此时经过仿射变换矩阵校正后的 DD&AA 叠加效果图如图 4(c) 所示, 其相比于图 4(b) 对准效果明显提升, 在整个视野内 DD&AA 通道线粒体外膜精细结构表现出很好的重合, 证明了对准算法在进行亚像素精度对准的有效性以及 SISR-FRET 成像系统的成像质量.

为了测试双通道 SISR-FRET 系统的超分辨成像能力, 对表达 ActA-G17M 质粒的 MCF7 细胞进行了定量超分辨 FRET 成像. 为获得采样速度和收集光子计数之间的最佳平衡, 单帧图像的曝光时间设置为 10 ms, 相应总的双通道 SISR-FRET 测量时间分辨率约 360 ms. 在此参数设置下, 三通道超分辨图像重建结果如图 5 所示. 图 5(a)—(c)

分别为 DD, DA, AA 通道对 ActA-G17 M 宽场成像结果, 图 5(d)—(f) 分别为 DD, DA, AA 通道对 ActA-G17M 超分辨成像结果. 一些在宽场成像中无法区分的相邻线粒体外膜精细结构在超分辨图像得到清晰解析. 证明当前系统进行 FRET 三通道超分辨成像时分辨率提升的有效性.

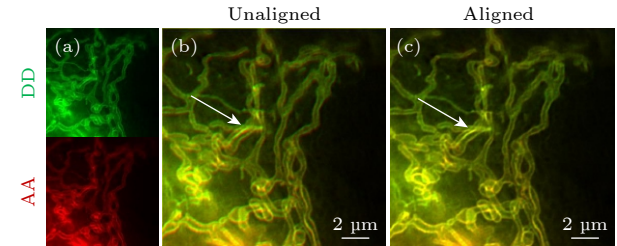


图 4 双通道 SISR-FRET 通道对准效果 (a) DD 通道和 AA 通道成像结果的伪彩图, 绿色为 DD 通道, 红色为 AA 通道; (b) 未经过算法对准的 DD 通道和 AA 通道成像结果叠加图; (c) 经过仿射变换矩阵对准的 DD 通道和 AA 通道成像结果叠加图. 比例尺: $2 \mu\text{m}$

Fig. 4. Dual-channel SISR-FRET alignment results: (a) Pseudo-color image of DD channel and AA channel imaging results, green is DD channel, red is AA channel; (b) overlay of the imaging results of DD channel and AA channel without algorithm alignment; (c) overlay of DD channel and AA channel imaging results after affine transformation matrix alignment. Scale bar: $2 \mu\text{m}$.

为了测试双通道 SISR-FRET 系统的超分辨定量 FRET 分析能力, 对图 5 中三通道超分辨 FRET 图像进一步进行定量 FRET 分析, 结果如图 6 所示.

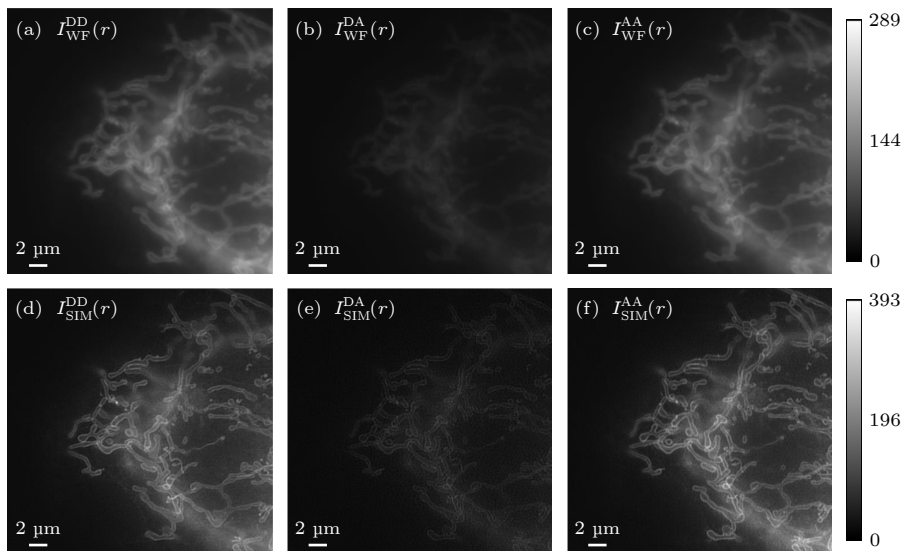


图 5 双通道 SISR-FRET 成像系统对 ActA-G17 M 样本成像结果 (a)—(c) DD, DA, AA 通道宽场成像结果; (d)—(f) DD, DA, AA 通道超分辨成像结果. 比例尺: $2 \mu\text{m}$

Fig. 5. Imaging results of the dual-channel SISR-FRET imaging system for the ActA-G17M sample: (a)—(c) Wide-field imaging results in the DD, DA, and AA channels; (d)—(f) super-resolution imaging results in the DD, DA, and AA channels. Scale bar: $2 \mu\text{m}$.

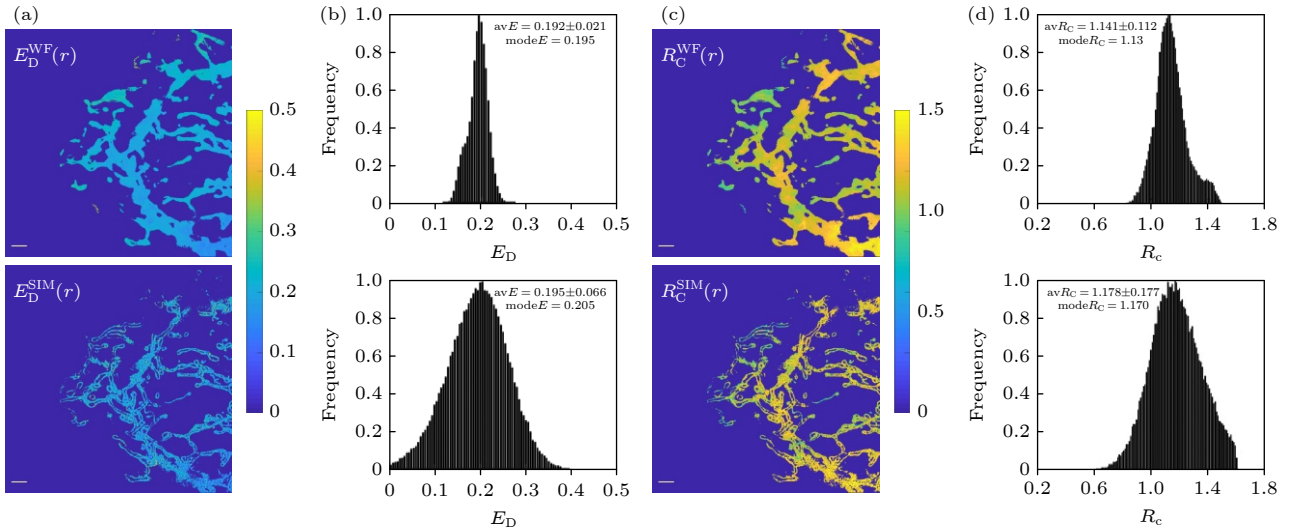


图 6 双通道 SISR-FRET 成像定量 FRET 分析结果对比 (a) 宽场 FRET 和超分辨率 FRET 效率 E_D 的伪彩图; (b) 图 (a) 中结果的统计直方图; (c) 宽场 FRET 和超分辨率 FRET 受供体浓度比 R_C 的伪彩图; (d) 图 (c) 中结果的统计直方图. 比例尺: $2 \mu\text{m}$

Fig. 6. Comparison of quantitative FRET analysis results from dual-channel SISR-FRET imaging: (a) Pseudo-color map of E_D for wide-field FRET and super-resolution FRET; (b) corresponding statistical histograms; (c) pseudo-color plot of R_C for wide-field FRET and super-resolution FRET; (d) corresponding statistical histograms. Scale bars: $2 \mu\text{m}$.

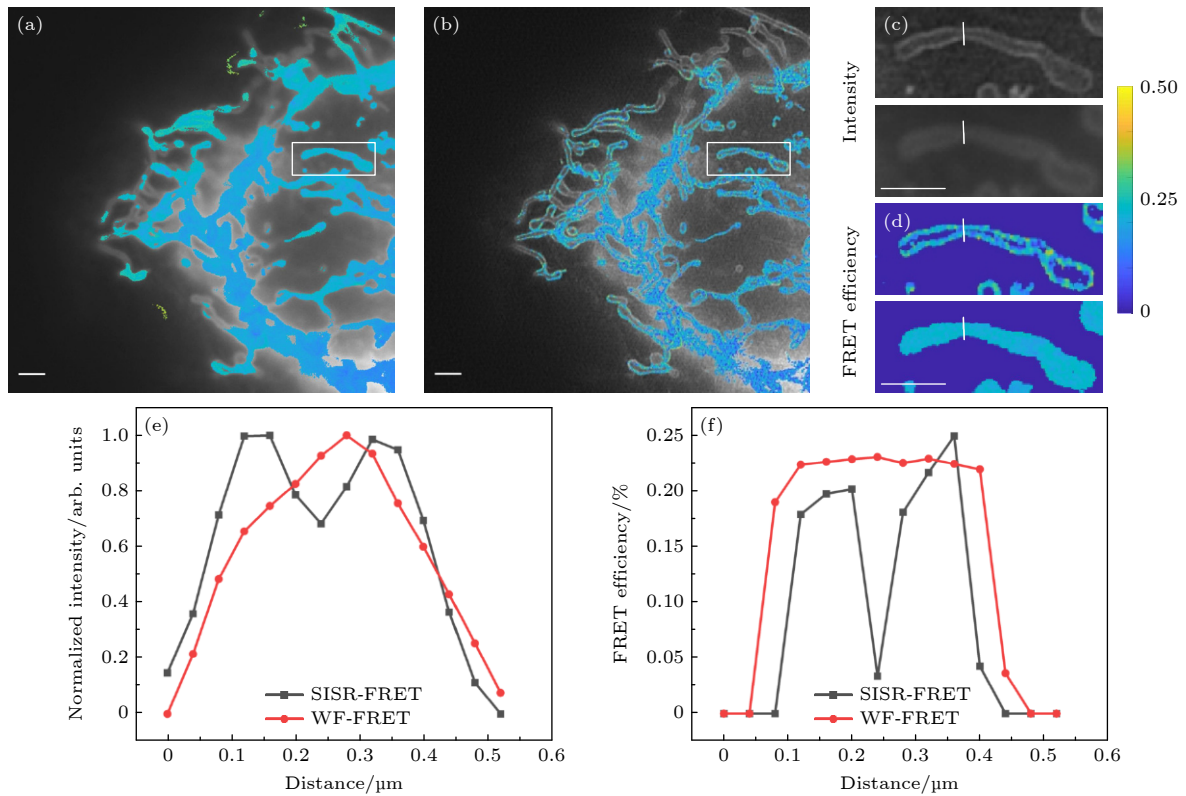


图 7 双通道 SISR-FRET 分辨率提升的定量分析 (a) 宽场 FRET 效率 E_D 的伪彩图和 DD 通道灰度图像的重叠结果; (b) SISR-FRET 效率 E_D 的伪彩图和 DD 通道灰度图像的重叠结果; (c) 宽场 FRET 与 SISR-FRET 中 DD 通道灰度图像的局部细节对比; (d) 宽场 FRET 与 SISR-FRET 中效率 E_D 的伪彩图的局部细节对比; (e), (f) 图 (c) 和图 (d) 中划线位置的横切面强度图. 比例尺: $2 \mu\text{m}$

Fig. 7. Quantitative analysis of dual-channel SISR-FRET resolution enhancement: (a) The merge of intensity and E_D map images of wide-field FRET; (b) the merge of intensity and E_D map images of SISR-FRET; (c) partly enlarged view of intensity images of wide-field FRET and SISR-FRET in the DD channel; (d) partly enlarged view of E_D map images of wide-field FRET and SISR-FRET; (e), (f) normalized intensity and FRET profiles along the marked lines in (c) and (d). Scale bars: $2 \mu\text{m}$.

图 6(a) 和图 6(c) 分别展示了宽场 FRET 和超分辨 FRET 效率 E_D 和受供体浓度比 R_C 的空间分布, 可以清晰看到双通道 SISR-FRET 重建算法对 FRET 空间分辨能力的提升. 另一方面图 6(b), (d) 分别展示了宽场 FRET 和超分辨 FRET 效率 E_D 和受供体浓度比 R_C 的逐像素统计结果, 可以看出 SISR-FRET 和宽场 FRET 一样可以正确解析 ActA-G17 M 质粒的 E_D 和 R_C , 但是由于 SISR-FRET 组 DA 通道的信噪比较低, 最终导致 SISR-FRET 统计直方图的半高全宽相比传统宽场 FRET 结果得到了展宽.

为了定量比较双通道 SISR-FRET 成像分辨率对比宽场 FRET 的提升, 现将图 5 和图 6 结果进行了重叠比较, 结果如图 7(a), (b) 所示, 线粒体外膜的结构分布和经过共定位掩膜滤波的 FRET 效率空间分布有着良好的重合, 证明 SISR-FRET 具备在活细胞中定量解析精细结构上 FRET 信号的能力. 其中图 7(a), (b) 局部放大的线粒体外膜结构 FRET 信号在宽场 FRET 成像下无法分辨, 而在 SISR-FRET 成像下可以清晰区分 (图 7(c)—(f)).

4 结 论

本文提出和搭建了一套双通道结构光照明超分辨定量 FRET 成像系统. 该系统实现了 SISR-FRET 激发发射通道的空分切换以及通道复用, 提升了约 3.5 倍的时间分辨率. 相比传统的宽场 FRET 技术, 双通道 SISR-FRET 具有更高的时空分辨率, 能够更准确地定位和解析供受体之间的 FRET 信号, 从而提高解析活细胞内精细结构上分子互作的能力. 通过将双通道 SISR-FRET 技术应用于亚细胞器尺度的蛋白相互作用过程的精确定量检测中, 可以直观地展示亚细胞器的空间结构变化以及蛋白的定位关系. 这对于揭示活细胞中细胞核、线粒体和内质网等生物大分子生成和执行功能的场所精细结构上的分子结构及其功能具有重要意义. 通过这项技术, 能更深入地了解细胞内复杂的分子动态过程, 为研究生物体的功能和机制提供有力的工具.

参考文献

- [1] Rao V S, Srinivas K, Sujini G N, Kumar G N S 2014 *Int. J. Proteomics* **2014** 1
- [2] Acuner Ozbabacan S E, Engin H B, Gursoy A, Keskin O 2011 *Protein Eng. Des. Sel.* **24** 635
- [3] Xing S, Wallmeroth N, Berendzen K W, Grefen C 2016 *Plant Physiol.* **171** 727
- [4] Algar W R, Hildebrandt N, Vogel S S, Medintz I L 2019 *Nat. Methods* **16** 815
- [5] Jares-Erijman E A, Jovin T M 2003 *Nat. Biotechnol.* **21** 1387
- [6] Ben-Johny M, Yue D N, Yue D T 2016 *Nat. Commun.* **7** 13709
- [7] Chen H C, Sun B N, Sun H, Xu L J, Wu G H, Tu Z, Cheng X C, Fan X H, Mai Z H, Tang Q L, Wang X P, Chen T S 2021 *Cell Death Discov.* **7** 363
- [8] Sun B N, Chen H C, Wang X P, Chen T S 2023 *Cell Death Discov.* **9** 37
- [9] Yang F F, Qu W F, Du M Y, Mai Z Y, Wang B, Ma Y Y, Wang X P, Chen T S 2020 *Cell. Mol. Life Sci.* **77** 2387
- [10] Szalai A M, Zaza C, Stefani F D 2021 *Nanoscale* **13** 18421
- [11] Szabó Á, Szendi-Szatmári T, Szöllösi J, Nagy P 2020 *Methods Appl. Fluoresc.* **8** 032003
- [12] Grecco H E, Verveer P J 2011 *ChemPhysChem* **12** 484
- [13] Deußner-Helfmann N S, Auer A, Strauss M T, Malkusch S, Dietz M S, Barth H D, Jungmann R, Heilemann M 2018 *Nano Lett.* **18** 4626
- [14] Tardif C, Nadeau G, Labrecque S, Côté D, Lavoie-Cardinal F 2019 *Neurophotonics* **6** 1
- [15] Szalai A M, Siarry B, Lukin J, Giusti S, Unsain N, Cáceres A, Steiner F, Timmefeld P, Refojo D, Jovin T M, Stefani F D 2021 *Nano Lett.* **21** 2296
- [16] Liu Z, Luo Z W, Chen H C, Yin A, Sun H, Zhuang Z F, Chen T S 2022 *Cytom. Part A* **101** 264
- [17] Zhao T Y, Wang Z J, Cai Y N, Liang Y S, Wang SW, Zhang J X, Chen T S, Lei M 2023 *Opt. Lasers Eng.* **167** 107606
- [18] Zhao W S, Zhao S Q, Li L J, et al. 2022 *Nat. Biotechnol.* **40** 606
- [19] Huang X S, Fan J C, Li L J, Liu H S, Wu R L, Wu Y, Wei L S, Mao H, Lal A, Xi P, Tang L Q, Zhang Y F, Liu Y M, Tan S, Chen L Y 2018 *Nat. Biotechnol.* **36** 451
- [20] Li D, Shao L, Chen B C, Zhang X, Zhang M, Moses B, Milkie D E, Beach J R, Hammer J A, Pasham M, Kirchhausen T, Baird M A, Davidson M W, Xu P, Betzig E 2015 *Science* **349** aab3500
- [21] Kner P, Chhum B B, Griffis E R, Winoto L, Gustafsson M G L 2009 *Nat. Methods* **6** 339
- [22] Wen G, Li S M, Wang L B, et al. 2021 *Light Sci. Appl.* **10** 70
- [23] Luo Z W, Wu G, Kong M, Chen Z, Zhuang Z F, Fan J C, Chen T S 2023 *Photonics Res.* **11** 887
- [24] Fan J C, Huang X S, Li L, Tan S, Chen L 2019 *Biophys. Rep.* **5** 80
- [25] Sun H, Zhang C, Ma Y, Du M, Chen T S 2019 *Biomed. Signal Process. Control* **53** 101585

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Dual-channel structured illumination super-resolution quantitative fluorescence resonance energy transfer imaging*Luo Ze-Wei¹⁾²⁾ Wu Ge¹⁾²⁾ Chen Zhi¹⁾²⁾ Deng Chi-Nan¹⁾²⁾ Wan Rong¹⁾²⁾Yang Tao¹⁾²⁾ Zhuang Zheng-Fei¹⁾²⁾ Chen Tong-Sheng^{1)2)†}1) (*Key Laboratory of Laser Life Science, Ministry of Education, College of Biophotonics,**South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)2) (*Guangdong Key Laboratory of Laser Life Science, College of Biophotonics,**South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)

(Received 25 May 2023; revised manuscript received 28 June 2023)

Abstract

The Structured illumination (SI)-based super resolution fluorescence resonance energy transfer (SR-FRET) imaging technique, known as SISR-FRET, enables the investigation of molecular structures and functions in cellular organelles by resolving sub-diffraction FRET signals within living cells. The FRET microscopy offers unique advantages for quantitatively detecting dynamic interactions and spatial distribution of biomolecules within living cells. The spatial resolution of conventional FRET microscopy is limited by the diffraction limit, and it can only capture the average behavior of these events within the resolution limits of conventional fluorescence microscopy. The SISR-FRET performs sequential linear reconstruction of the three-channel SIM images followed by FRET quantitative analysis by using a common localization mask-based filtering approach. This two-step process ensures the fidelity of the reconstructed SR-FRET signals while effectively removing false-positive FRET signals caused by SIM artifacts. However, the slow imaging speed resulting from the switching of excitation-emission channels in SISR-FRET imaging limits its application in fast imaging scenarios. To address this issue, this study proposes a dual-channel structured illumination super-resolution quantitative FRET imaging system and method. By incorporating an FRET dual-channel imaging and registration module into the imaging pathway, the spatial switching and channel multiplexing of the SISR-FRET excitation-emission channels are achieved. Combining the image reconstruction algorithm with channel sub-pixel registration correction, the dual-channel SISR-FRET technique enhances the temporal resolution by 3.5 times while preserving the quantitative super-resolution FRET analysis. Experimental results are obtained by using a multi-color SIM system to perform super-resolution imaging of living cells expressing mitochondria outer membrane FRET standard plasmids. These experiments validate the improved spatial and temporal resolution of dual-channel SISR-FRET and the fidelity of FRET quantification analysis. In summary, this research presents a novel dual-channel structured illumination super-resolution FRET imaging system and method. It overcomes the limitations of slow imaging speed in SISR-FRET by realizing the spatial switching and channel multiplexing of excitation-emission channels. The proposed technique enhances the temporal resolution while maintaining quantitative analysis of super-resolution FRET. Experimental validation demonstrates the increased spatial and temporal resolution of dual-channel SISR-FRET and the accuracy of FRET quantification analysis. This advancement contributes to the study of molecular structures and functions in cellular organelles, providing valuable insights into the intricate mechanisms of living cells.

Keywords: fluorescence resonance energy transfer, structured illumination, super-resolution, living cells**PACS:** 87.64.M-, 87.64.kv, 42.30.-d**DOI:** 10.7498/aps.72.20230853

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62135003) and the Key-Area Research and Development Program of Guangdong Province, China (Grant No. 2022B0303040003).

† Corresponding author. E-mail: chentsh@sncu.edu.cn

双通道结构光照明超分辨定量荧光共振能量转移成像系统

罗泽伟 武戈 陈挚 邓驰楠 万蓉 杨涛 庄正飞 陈同生

Dual-channel structured illumination super-resolution quantitative fluorescence resonance energy transfer imaging

Luo Ze-Wei Wu Ge Chen Zhi Deng Chi-Nan Wan Rong Yang Tao Zhuang Zheng-Fei Chen Tong-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 208701 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230853

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230853>

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

结构光照明相位/荧光双模式显微技术

Phase/fluorescence dual-mode microscopy imaging based on structured light illumination

物理学报. 2022, 71(24): 244203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221518>

聚二甲基硅氧烷微流道中光流控荧光共振能量转移激光

Optofluidic fluorescence resonance energy transfer lasing in a polydimethylsiloxane microfluidic channel

物理学报. 2019, 68(5): 054203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181696>

基于希尔伯特变换的结构光照明快速三维彩色显微成像方法

Fast structured illumination three-dimensional color microscopic imaging method based on Hilbert-transform

物理学报. 2020, 69(12): 128701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200352>

平场复用多焦点结构光照明超分辨显微成像

Flat-field multiplexed multifocal structured illumination super-resolution microscopy

物理学报. 2022, 71(4): 048704 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211712>

受激辐射损耗超分辨显微成像系统研究的新进展

New advances in the research of stimulated emission depletion super-resolution microscopy

物理学报. 2020, 69(10): 108702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200168>

结构光照明技术在二维激光诱导荧光成像去杂散光中的应用

Structured illumination for two-dimensional laser induced fluorescence imaging to eliminate stray light interference

物理学报. 2019, 68(21): 218701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190977>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

生物医学微波热声成像*

王雨¹⁾²⁾³⁾⁴⁾ 张慧敏¹⁾²⁾³⁾⁴⁾ 覃欢^{1)2)3)4)†}

1) (华南师范大学, 激光生命科学教育部重点实验室, 广州 510631)

2) (华南师范大学, 广东省激光生命科学重点实验室, 广州 510631)

3) (华南师范大学, 广州市光谱分析与功能探针重点实验室, 广州 510631)

4) (华南师范大学生物光子学研究院, 广州 510631)

(2023 年 5 月 5 日收到; 2023 年 6 月 30 日收到修改稿)

微波热声成像是一种以生物组织电特性差异为原理基础的多物理场耦合成像方法. 其采用脉冲微波作为激发源, 通过热弹性效应产生的超声波呈递深层生物组织的结构与功能信息, 融合了微波成像高对比度和超声成像高分辨率的优点. 目前已在无损脑结构成像、乳腺肿瘤筛查、人体关节炎成像、肝脂肪含量检测等方面展现出了广阔的医学应用前景, 有望成为新的物理医学影像方法. 本文对微波热声成像技术的物理原理、系统装置以及近来的代表性研究进展进行了系统性的介绍, 并分析探讨了微波热声成像技术值得关注的发展方向以及面临的挑战.

关键词: 微波热声成像, 生物组织电特性, 微波源, 脑成像技术**PACS:** 43.35.Ud, 87.85.Pq**DOI:** 10.7498/aps.72.20230732

1 引言

生物医学影像是获取生命科学信息的重要手段. 医学诊疗手段的每一次革新, 都依赖于生物医学影像技术的跨越式发展. 现在常用的医学成像方法中, 电子计算机断层扫描成像 (computed tomography, CT) 是利用 X 光透过人体后由于密度差异造成能量衰减, 从而获得组织结构图像的医学成像方法^[1], 在骨科疾病和肺部疾病的诊断上具有不可替代的优势, 但其有可能产生的电离辐射风险限制了它的使用频率和场景. 核磁共振成像 (magnetic resonance imaging, MRI) 是继 CT 后医学影像学的又一重大进步, 它通过对静磁场中的人体施加某种特定频率的射频脉冲, 使人体中的氢质子受到激励而发生磁共振, 依据氢原子核质子所释放的

能量在物质内部不同结构环境中不同的衰减, 通过外加梯度磁场检测所发射出的电磁波, 据此重建成人体内部结构与功能图像^[2,3]. MRI 具有良好的软组织分辨能力, 在软组织诊断中具有突出优势^[4], 但受到敏感性不足和时间分辨率低的限制不适于对急诊病人检查. 超声成像利用超声束扫描人体, 因声阻抗差异发生反射, 通过对反射信号的接收、处理, 以获得体内器官的图像^[5-7], 可实现无创、高分辨率成像. 然而, 由于早期病变组织声阻抗差异较小, 超声检测对比度不足, 难以识别早期病变. 现有医学影像技术的创新与发展推动了影像医疗的革新与进步, 为广大患者病情的诊断起到了不可或缺的作用. 每一种成像技术在显示其优势的同时, 仍有适用的局限性, 特别是在病变早期, 当生物组织的密度、形态尚未发生明显变化时. 针对人民群众对健康生活的向往以及不断发现的新的

* 国家自然科学基金 (批准号: 62075066), 广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2023A1515010824) 和广州市科技计划 (批准号: 202201010718) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qinghuan@snu.edu.cn

医学问题, 仍然亟需发展新物理原理的生物医学影像技术方法.

以生物组织电特性差异为原理基础的微波热声成像技术 (microwave-induced thermoacoustic imaging, MTAI) 采用短脉冲微波 (一般脉宽小于 500 ns) 作为激发源, 生物组织中的极性分子、离子吸收微波能量后通过热弹性效应产生超声波^[8-10], 被激发的超声波携带着生物组织病理、生理信息向外传播, 通过采集生物组织周围各个方向的超声信号可以重建出组织内部形态结构与功能图像^[11-13]. 由于微波的低散射特性, 通过微波到超声能量传递形式的变换, 微波热声成像技术可实现生物组织无损、数厘米深度、百微米分辨率的成像^[14], 在无脑结构成像^[15]、乳腺肿瘤筛查^[16]、人体关节炎成像^[17]、肝脂肪含量检测等方面展现出广阔的医学应用前景, 有望成为新物理原理的医学影像方法. 然而, 现阶段微波热声成像技术在成像精细度和灵敏度方面仍然难以满足临床转化应用的实际要求, 还需在微波热声激发物理机理和超声探测方法上进行深入研究. 本文主要对微波热声成像技术原理、系统装置和微波热声成像技术生物医学潜在应用方面展开描述, 并结合微波热声成像技术面临的挑战对未来进行展望.

2 微波热声成像技术原理

2.1 微波与生物组织的相互作用机制

微波与生物组织的相互作用机制是微波耦合系统设计及微波热声成像应用开发的理论基础. 生物组织能够反射、折射和吸收电磁波. 微波吸收作为微波与生物组织相互作用过程中能量耗散的主要机制之一, 是微波热声成像技术的物理基础.

微波与生物组织的相互作用机制与生物组织的介电特性紧密相关^[18]. 生物组织的介电特性由其复介电常数 ϵ_c 描述, 复介电常数定义为

$$\epsilon_c = \epsilon' - j\epsilon'' = \epsilon' - j\frac{\sigma}{\omega} = \epsilon_0\epsilon_r - j\frac{(\sigma_c + \sigma_i + \sigma_d)}{\omega}, \quad (1)$$

其中 ϵ' 是复介电常数实部; ϵ'' 是复介电常数虚部; j 为虚数单位; σ 是有效电导率, 包括电子位移极化电导率 σ_c , 离子位移极化电导率 σ_i 和固有偶极矩取向极化电导率 σ_d ; ω 是角频率. 复介电常数 ϵ_c 的实部 ϵ' 与微波的传播有关, 通常不同生物组织的 ϵ' 不同, 在 ϵ' 差异的界面会引起微波的反射和折射,

改变生物组织中的电场分布. 一般用于成像的生物组织尺寸小于电磁波半波长时, 近似认为生物组织中的电场分布是均匀的; 反之认为电场分布是不均匀的, 由于天线感应近场区域的复杂性, 此时的电场分布没有解析解, 一般通过仿真的方式确定生物组织中电场的分布. 虚部 ϵ'' 决定了微波的损耗特性, 在生物组织中, 微波被生物组织吸收后主要以热损耗形式耗散. 当生物组织处于微波场时, 生物组织内的水分子等极性分子会随微波交变电场发生反复旋转, 极性分子高频的旋转摩擦会产生固有偶极矩极化损耗^[19]. 同时生物组织内的离子也会被交变电场极化, 位移迟滞也会产生位移极化损耗^[18,20], 这两部分损耗宏观上以产热的形式表现出来.

在微波热声成像中, 通常用单位时间内单位质量的物质吸收的电磁能量, 即比吸收率 (specific absorptivity, SAR) 来衡量物质吸收电磁波的能力, 并定义为^[13]

$$\text{SAR}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma(\mathbf{r})|\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2}{2\rho(\mathbf{r})}, \quad (2)$$

其中 $\sigma(\mathbf{r})$ 是样品在空间位置 \mathbf{r} 处的有效电导率, $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|$ 为空间位置 \mathbf{r} 处电场强度幅值, $\rho(\mathbf{r})$ 为空间位置 \mathbf{r} 处质量密度.

样品中声波是由热弹性效应产生, 随后在样品中传播, 此过程可由 3 个方程描述. 首先是温升与 SAR 之间的一般关系为^[21]

$$\text{SAR}(\mathbf{r}) = \frac{C_v\Delta T}{\tau}, \quad (3)$$

其中 τ 是电磁波脉宽, C_v 是定容比热容, ΔT 是物质温升.

2.2 热声效应

当电磁波脉宽 τ 满足热禁闭 (1) 式和应力约束 (2) 式条件时, 物质吸收电磁波脉冲后产生瞬时温升, 通过热弹性效应将转化为机械能 (声波)^[22,23], 过程如图 1 所示. 热声效应分为两个过程: 微波能量的吸收和声波的产生.

1) 电磁波脉宽 τ 小于热传导弛豫时间. 电磁波激励处于热传导约束条件时, 初始声压产生的瞬间热量还来不及传导, 即热传导对初始声压分布影响可以忽略^[24-26]. 热传导弛豫时间描述了物质的热扩散特性, 定义为

$$\tau_{\text{th}} = d_c^2/\alpha_{\text{th}}, \quad (4)$$

其中, τ_{th} 是热传导弛豫时间, d_c 是加热区域的特征尺寸, α_{th} 是热扩散系数.

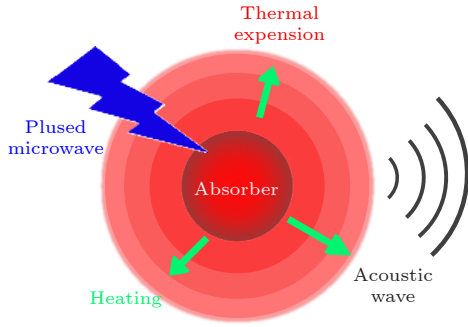


图 1 热声效应示意图

Fig. 1. Schematic diagram of TA effect.

2) 电磁波脉宽 τ 小于弹性形变弛豫时间. 电磁波激励处于应力约束条件时, 初始声压产生的瞬间, 物质内部质心来不及位移, 应力传播对初始声压分布影响可以忽略^[27,28]. 弹性形变弛豫时间描述了压力传播的特性, 定义为

$$\tau_s = d_c/v_s, \quad (5)$$

其中, τ_s 是弹性形变弛豫时间, d_c 是加热区域的特征尺寸, v_s 是物质中的声速.

描述样品吸收微波能量转换成热量之后引起热膨胀过程的热膨胀方程, 可以表示为^[29,30]

$$dV/V = -kp_0 + \beta_e \Delta T, \quad (6)$$

其中 β_e 是物质的体膨胀系数, V 是加热区域体积, k 是等温压缩系数, p_0 是初始声压, ΔT 是物质温升. 最后是波动方程, 它描述了声波的传播^[31-33]:

$$\Delta P(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial}{\partial t^2} P(\mathbf{r}, t) = -\frac{\beta_e}{C_p} \frac{\partial}{\partial t} H(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

其中 $P(\mathbf{r}, t)$ 是热声波, v_s 是物质中的声速, C_p 是定压比热容, β_e 是物质的体膨胀系数, $H(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}) I(t)$ 是加热函数, 加热函数定义为能量源在单位时间和单位体积内沉积的热量, $A(\mathbf{r})$ 是空间微波吸收系数, $I(t)$ 是微波脉冲包络的时域波形. 联立 (2) 式, (3) 式和 (6) 式可得初始声压为^[34]

$$p_0 = \frac{\beta_e \Delta T}{k} = \frac{\beta_e \sigma(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 \tau}{2k\rho(\mathbf{r}) C_v} = \frac{\beta_e \tau}{k C_v} \text{SAR}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

其中 p_0 是初始声压, β_e 是物质的体膨胀系数, ΔT 是物质温升, k 是等温压缩系数, $\rho(\mathbf{r})$ 为空间位置 \mathbf{r} 处质量密度, C_v 是定容比热容, $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|$ 为空间位置 \mathbf{r} 处电场强度幅值, τ 是微波激励的持续时间,

$\text{SAR}(\mathbf{r})$ 是比吸收率. 初始声压与 SAR 成线性关系, SAR 描述了初始声压的强弱.

一般情况下, (7) 式在时域中的解, 即由超声换能器检测到的 TA 信号可表示为^[32,35-37]

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, t) &= \frac{\beta}{4\pi C_p} \iiint \frac{d^3 \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\partial H(\mathbf{r}', t')}{\partial t'} \Big|_{t' = t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{v_s}} \\ &= \frac{\beta I_0 c_0^2 \tau}{4\pi C_p} \oint_{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = v_s t} A(\mathbf{r}') \frac{d\mathbf{r}'}{t}, \end{aligned} \quad (9)$$

其中, $P(\mathbf{r}, t)$ 是热声波, v_s 是物质中的声速, $H(\mathbf{r}', t')$ 是加热函数, τ 是微波激励的持续时间, C_p 是定压比热容, β_e 是物质的体膨胀系数, $A(\mathbf{r}')$ 是空间微波吸收系数, I_0 是入射脉冲微波能量密度.

综上, 由 (3) 式, (6) 式和 (7) 式组成的方程组, 用 $H(\mathbf{r}, t)$, ΔT 和 $P(\mathbf{r}, t)$ 可以描述 TA 效应的一般情况.

2.3 微波热声图像重建算法

当脉冲微波照射到生物组织时, 生物组织中的吸收体吸收微波能量, 产生瞬间温升, 然后通过热弹性效应产生声波, 即热声信号, 通过对热声信号反演可以获得生物组织的不同吸收体的分布图像.

图像重建是微波热声成像技术中最后且重要的一步, 关系到成像的准确性和真实性, 主要是对采集到的热声信号重建以获得二维或三维图像, 通常使用 MATLAB 软件对信号进行处理^[38]. 重建算法可分为两大类: 时域算法和频域算法. 微波热声成像技术中最简单的一种成像算法是延时叠加法, 它是基于时域的一种算法, 源于雷达信号探测技术, 又称直接反投影法. 其基本算法公式为^[36]

$$(i, j) = \sum_N g_k \left(\sqrt{(i - x_k)^2 + (j - y_k)^2} / v_s \right), \quad (10)$$

其中 i, j 是重建点的二维空间坐标, $P(i, j)$ 是热声波, N 是阵元数量, g_k 是探测器第 k 个阵元接收到的时域信号, x_k 和 y_k 是探测器的二维空间坐标, v_s 是物质中的声速. 延时叠加算法是利用超声相干加强的原理进行成像的, 该算法的核心思想是将每个阵元接收到的信号进行时延调节, 然后进行加权叠加, 从而得到一个高质量的图像. 延时叠加算法需要对每个阵元接收到的信号进行时延调节, 使得这些信号能够在待成像点处相位同步, 从而形成一个聚焦的声束^[39], 成像原理如图 2 所示. 与超声成

像中利用的时延调节类似, 微波热声成像中的时延调节也需要考虑介质的声速和阵元到待成像点的距离, 以确定每个阵元的时延量^[40]. 调节后的热声信号需要进行加权叠加, 以获得高质量的图像. 在加权叠加中, 需要为每个时延调节后的信号分配一个权重系数, 然后将这些信号进行叠加, 以获得最终的图像^[41]. 延时叠加算法计算简单, 可以实现快速成像, 但对声场的近似处理可能会导致一定的误差, 对于高频信号或对精度要求较高的成像任务, 可能需要采用更高级的成像算法.

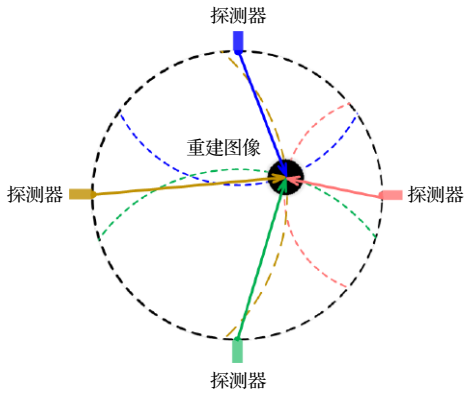


图 2 微波热声信号延时叠加算法示意图

Fig. 2. Schematic diagram of the thermoacoustic signal delay superposition algorithm.

微波热声成像与深度学习相结合是当前热声发展的一个热点方向, 许多团队在深度学习优化热声成像方面做出了巨大的贡献. 蒋华北团队^[42]首次将深度学习方法应用到微波热声成像领域, 探讨了标准 U-Net 模型用于热声重建不准确的原因, 并提出了一种新的 TAT-Net 网络. 王雄团队^[43]提出了一种新的深度学习支持模式来解决稀疏数据重建问题, 该算法仅用 15 组数据即可重建乳腺热声图像, 并且与传统算法相比较伪影更少. 另外, 王雄团队^[44]在经颅热声方向将热声成像与深度学习结合, 很好地优化了脑和颅骨的声速和声衰减异质性对成像的影响.

为解决不同模型的热声图像重建, 越来越多的算法模型和方法被应用到微波热声成像领域, 如压缩感知算法^[45]、声场迭代算法^[46]、全波形反演算法和深度学习算法^[43,44,47,48]等.

3 微波热声成像系统

微波热声成像系统三大组成部分为微波激励

组件、信号采集组件、数据处理组件^[49], 一些典型的微波热声成像系统如图 3 所示. 脉冲微波由微波源产生, 通过波导或者同轴电缆传输, 由天线辐射. 受激发的生物组织产生的超声信号被超声换能器探测, 超声换能器将捕捉的超声信号转变为电信号, 电信号由数字采集卡采集存储为数字信号. 经后端进行数据处理, 还原样品的形态和结构等信息.

微波激励源是微波热声成像系统中最重要的一环, 其各个参数对热声图像质量具有决定性作用, 如表 1 所列. 不同生物组织对不同频率微波的吸收能力不同, 因此微波频率在一定程度上影响图像对比度. 同时, 微波频率还决定成像深度, 值得注意的是, 微波脉冲能量强度也对成像深度有一定影响^[50]. 微波热声成像系统的分辨率由微波脉冲宽度决定^[51,52], 微波脉冲包络的时域波形 $I(t)$ 是影响热声图像分辨率的主要因素^[38]. 当微波脉冲宽度和包络的时域波形一定时, 微波脉冲的重复频率映射单位时间样品的微波吸收量, 决定热声信号的图像信噪比和采集速率^[53,54].

表 1 微波源各参数对成像影响

Table 1. Influence of various parameters of microwave source on imaging.

成像影响	微波源参数
分辨率	脉冲宽度、脉冲波形
信噪比	脉冲重复频率、脉冲能量强度
对比度	中心频率、脉冲能量强度
成像深度	中心频率、脉冲能量强度

天线作为辐射组件, 在微波热声成像系统中负责将波导或同轴电缆中的导行波转换为媒质空间中传播的电磁波, 并照射到样品中. 与传统通讯的天线不同, 微波热声成像系统中的天线工作在感应近场区, 感应近场区是一个储能场, 只进行电场和磁场能量的相互转换, 不向外辐射^[12,55]. 在微波热声成像中, 要把微波能量定向地辐射到样品中, 因此在设计天线时尤其考虑天线增益, 天线增益定量地描述了一个天线把输入功率集中辐射的程度^[56]. 另外在实际天线设计中, 还要考虑天线的耦合环境、阻抗匹配和极化方式等.

微波热声成像系统的理论极限分辨率由微波激励源决定^[51,57], 实际接收的微波热声信号频率范围由超声换能器带宽决定, 即实际分辨率主要由超声换能器决定^[58–60]. 此外, 微波热声信号的幅值大约在 μV 量级^[61], 这就要求信号采集器具有高的灵

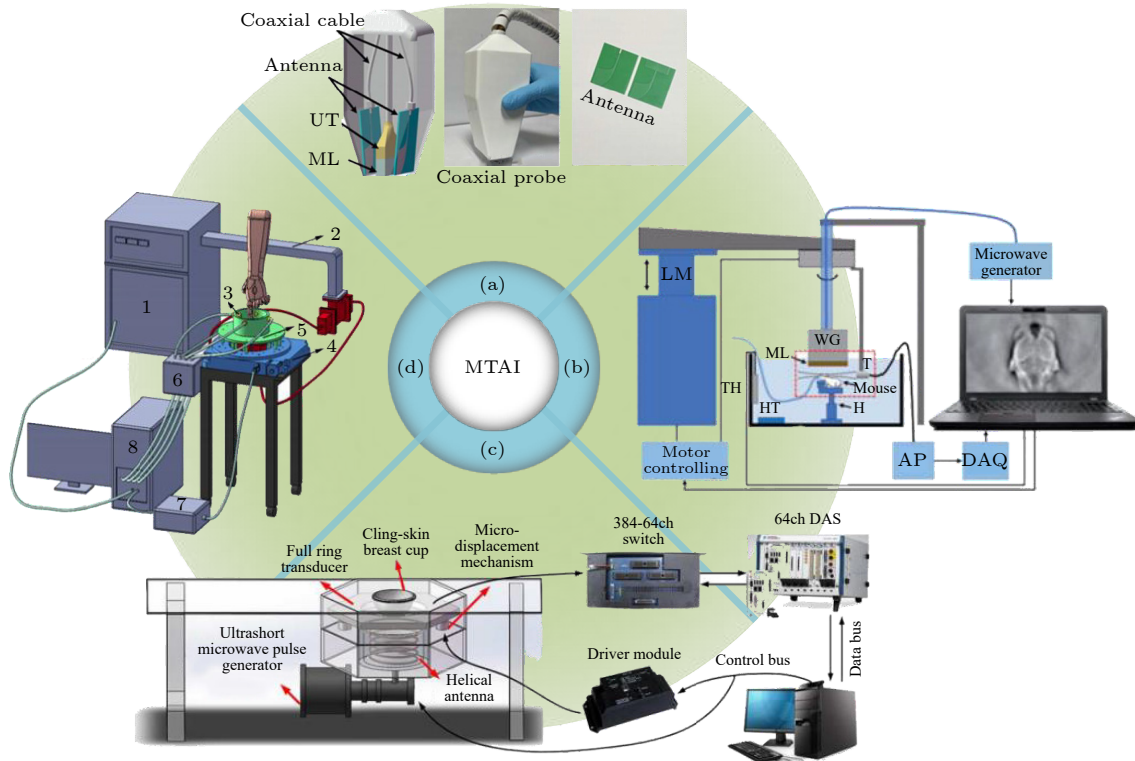


图 3 微波热声成像技术典型实现方案 (a) 微波乳腺热声成像一体化探头装置图^[16]; (b) 微波热声脑成像装置图^[15]; (c) 微波乳腺热声成像装置^[66]; (d) 微波热声关节成像装置图^[17]

Fig. 3. Typical implementation scheme of microwave thermoacoustic imaging technology: (a) Microwave-induced breast thermoacoustic imaging integrated probe device^[16]; (b) diagram of a Microwave-induced brain thermoacoustic imaging device^[15]; (c) microwave-induced breast thermoacoustic imaging system^[66]; (d) microwave-induced thermoacoustic joint imaging device^[17].

敏度, 使用灵敏度较高的压电陶瓷和复合晶体材料制作的超声换能器能精准采集热声信号. 当超声换能器制作材料固定时, 可通过改变材料背衬的厚度来改变超声换能器的中心频率^[62,63], 以采集不同频率的信号. 当超声换能器中心频率一定时, 带宽与灵敏度成反相关, 与时间分辨率成正相关^[64].

数字采集卡将超声换能器的电信号采集并存储为数字信号. 根据奈奎斯特定理, 数据采集卡采样频率只需大于待测信号最高频率 2 倍即可^[65]. 但实际装置搭建中, 为保证数据采集的可靠性和准确性, 一般选择采样频率大于待测信号最高频率 5 倍的数据采集卡. 数据采集卡的输入量程要覆盖被采集热声信号的幅值, 大于输入量程的信号会被采集卡以最大值储存, 从而导致信号失真. 当热声信号未覆盖整个输入量程范围时, 还需考虑数字采集卡的采样精度, 采样精度决定热声信号被采集后划分的级数, 即热声信号被储存为不同幅值数字信号的数量, 当级数大于图像重建时对应的色彩级数时, 被采集的热声信号可无失真地重建图像. 最后, 数字采集卡能分辨的最小信号增量, 即信号解析度

Δv 由数字采集卡的采样精度 R 和输入量程 N 决定:

$$\Delta v = N/R. \quad (11)$$

信号解析度最终决定了数字信号的精确度, 若采集过程中热声信号的变化小于信号解析度, 则数字采集卡在数模转换时会丢失信号.

4 生物医学应用

4.1 微波乳腺热声成像

乳腺癌是女性癌症死亡的主要原因之一, 早期发现可以提高治愈率^[67,68]. 在肿瘤侵袭前沿, 肿瘤血管增值和蛋白质水合作用增强^[69,70]. 虽然肿瘤细胞含水量增加的机制尚不完全清楚, 但膜结合糖蛋白的结构变化理论已被提出^[71]. 水等极性分子作为微波热声成像技术成像对比度的来源, 肿瘤组织离子或水含量升高显著增加微波吸收, 将热声信号的强度与生物组织的生理和病理状态联系, 获得较高对比度的图像. 先前的研究表明, 在大多数微波波段下, 恶性乳腺组织与正常脂肪组织的微波

吸收比例约为 6:1^[50,72,73], 使得微波乳腺热声成像成为可能. 国外 Kruger 等^[74] 首次将微波热声成像技术应用于乳腺癌检测, 结果表明, 基于病变区域与正常组织的微波吸收差异, 获得的肿瘤图像比正常组织图像对比度提升了约两倍. 国内蒋华北教授团队^[49] 成功对乳腺仿体进行了成像, 覃欢团队^[16,75] 研发设计了一种便携式手持装置, 并对人体乳腺进行了成像, 实验结果如图 4 所示. 各研究组对乳腺检测工作的开展有力促进了微波热声成像技术在乳腺领域的应用.

虽然目前的 MTAI 技术在乳腺肿瘤成像方面取得了显著进展, 并在志愿者中进行临床评估, 但该技术在实际应用中仍有问题需要解决. 首先, 微波在微波热声检测过程中不可避免地会影响传感器. 其次, 该技术对含水量较少的肿瘤, 如乳腺显

微瘤的敏感性较差. 此外, 乳腺中恶性组织与正常腺体、纤维结缔组织的微波频率介电特性差异较小, 目前的微波热声成像技术很难在患者体内区分出如此小的差异. 微波热声成像技术在乳腺癌检测领域有着广阔的应用前景, 但需要进一步的研究和改进来提高其成像效果和准确性.

4.2 微波热声脑成像

脑作为神经系统的中心, 脑疾病的诊断和治疗对人的发展至关重要. 与传统的脑成像技术——核磁共振、超声和光学成像相比, 微波热声成像技术结合了微波成像高穿透深度和超声成像高空间和时间分辨率的优点, 具有无需注射放射性示踪剂、非侵入式的特点, 可实现实时对全脑结构高分辨率成像. 微波热声成像技术基于组织的介电特性影响

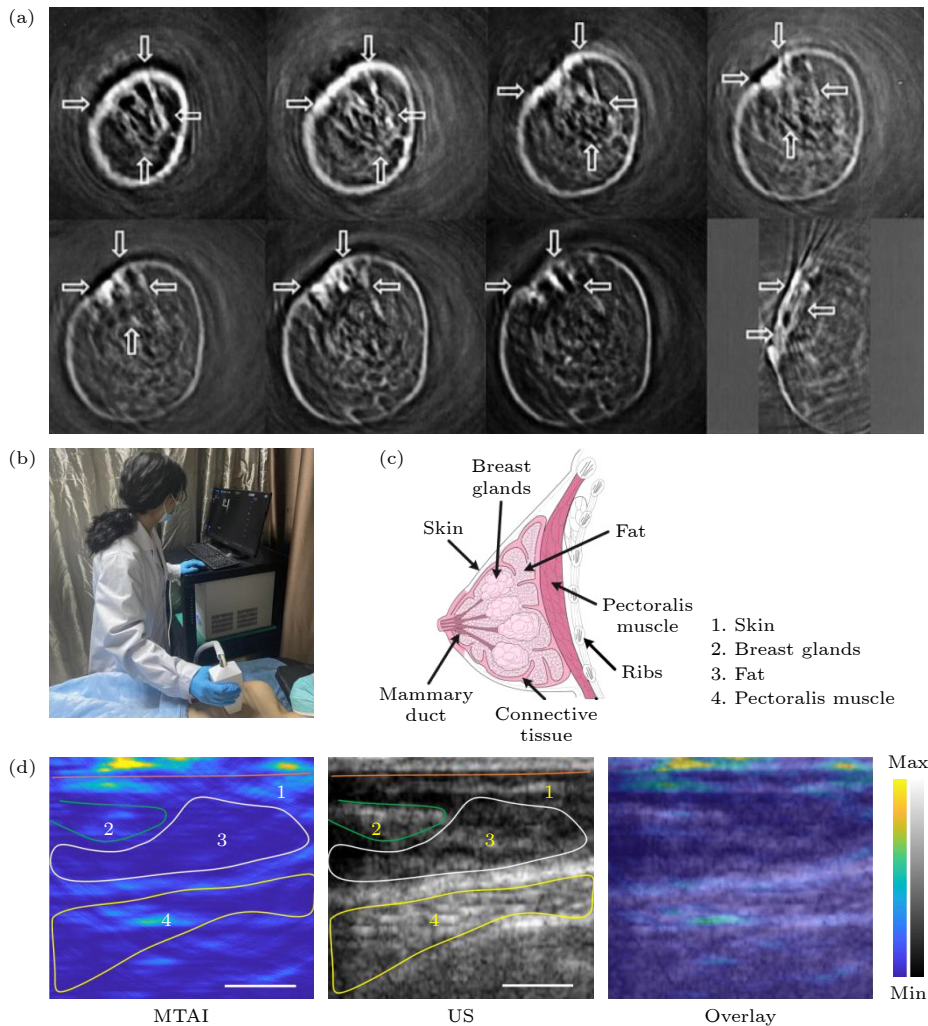


图 4 微波热声成像乳腺成像 (a) Kruger 等^[74] 的乳腺成像图; (b) 微波热声乳腺成像实操图^[16]; (c) 乳房的解剖结构示意图^[16]; (d) 覃欢团队^[16] 乳腺成像图

Fig. 4. MTAI breast imaging: (a) Kruger et al.^[74] breast imaging; (b) microwave thermoacoustic breast imaging actual operation^[16]; (c) anatomical diagram of the breast^[16]; (d) breast imaging of Professor Qin Huan's team^[16].

微波吸收和反射,进而影响热声信号的产生和传播.不同的脑组织具有不同的介电性质^[15],具体参数如表2所列,因此,微波热声成像技术对组织介电差异的高灵敏性使其可以对脑组织各结构进行清晰的分辨^[76].同时,组织病变引起电磁特性的改变,造成病变区域和正常组织的微波吸收差异^[77],微波热声成像技术可获取相关区域结构和功能信息.多个研究已经证明,微波热声成像技术可以通过绘制脑组织的电学特性来提供新的组织对比,形成对脑组织完整的层析成像^[78].

表2 主要脑组织在3.05 GHz下的电导率^[15]
Table 2. Conductivity property of major brain tissues at 3.05 GHz^[15].

物质	电导率/(S·m ⁻¹)
脑灰质	2.2588
脑白质	1.5393
血液	3.0991
脑脊液	4.0592
小脑	2.5189
血管壁	1.8444
硬膜	2.0485
脊髓	1.3530

蒋华北教授团队^[79]对活体小鼠脑进行断层扫描成像,并进一步验证了微波热声成像技术对活体小鼠脑出血模型的成像能力^[15],在脑组织的形状

和大小方面,微波热声图像和相应的组织学切片结果高度吻合,特别是与相应的组织学切片相比,微波热声成像技术可以更准确地检测到小鼠大脑不同深度的水肿区域,成像结果如图5所示.证明了微波热声成像技术能够有效地对脑组织功能成像,展示了微波热声成像技术在脑组织成像领域的巨大潜力.

微波热声成像技术提供了一种新的无创脑成像方案,为人们了解脑的功能结构提供了新的技术工具,有助于人们进一步对脑功能的探索.进一步发展实时脑成像方案,克服超声信号被颅骨干扰的障碍,微波热声成像技术有望成为研究脑功能的重要手段.

4.3 微波诱导关节热声成像

关节疾病是一个严重的公共卫生问题,会引起疼痛、肿胀、僵硬、功能障碍等一系列症状^[80,81].由于关节结构的复杂性和多样性,诊断关节疾病,包括关节炎和创伤,是一个具有挑战性的问题.基于对关节类疾病的研究,关节病变通常会引起关节组织的结构和化学成分的改变,从而对其电导率和介电常数产生影响^[82].当关节受到炎症、损伤或其他疾病的影响时,组织的水分含量可能会发生变化,导致电导率的改变^[83,84].例如,风湿性关节炎和骨

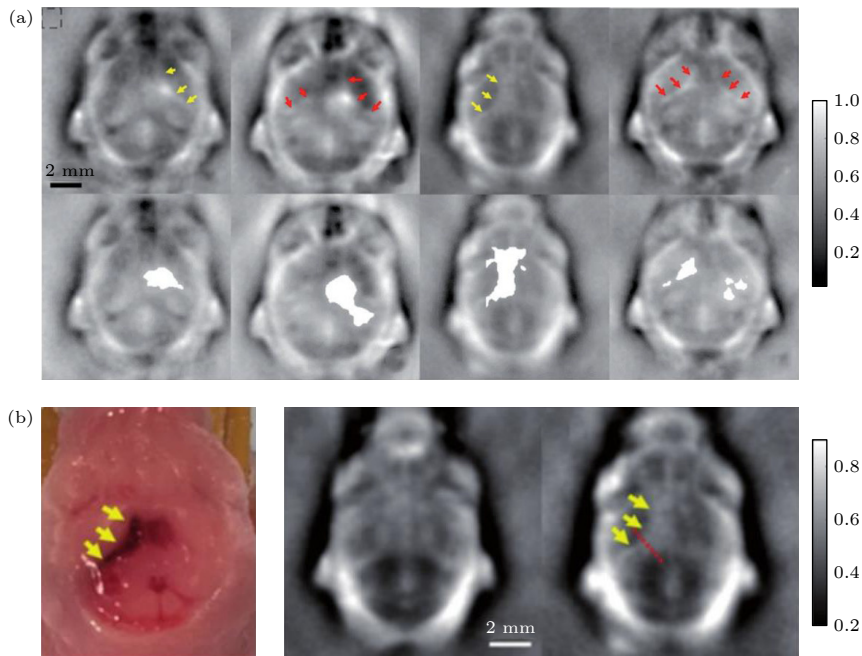


图5 微波热声脑成像^[15] (a) 两只新生小鼠脑出血的热声图像及出血区域标注(白色区域);(b) 脑出血组织切片与相应热声图像对照

Fig. 5. MTAI brain imaging^[15]: (a) MTAI image and bleeding area (white area) of cerebral hemorrhage in two newborn mice; (b) comparison of cerebral hemorrhage tissue slices with corresponding MTAI images.

性关节炎等炎症性关节病变会导致关节周围的水肿和炎症,从而导致局部电导率的升高. 关节的介电常数通常与其中的水分含量和电荷分布相关,当关节受到炎症、损伤或其他疾病的影响时,组织的水分含量和电荷分布可能会发生变化,导致介电常数的改变. 例如,软骨组织的介电常数较低,但是当软骨发生损伤或疾病时,其介电常数可能会发生变化,关节各组织介电参数如表 3 所列.

表 3 关节各组织在 3 GHz 下的电导率和介电常数 [85]

Table 3. Conductivity and permittivity of each tissue of the joint at 3 GHz [85].

物质	相对介电常数	电导率/(S·m ⁻¹)
肌腱/韧带	42.13	2.17
软骨	37.61	2.21
骨松质	17.94	1.01

在微波热声成像技术的应用中,大量的研究表明,基于关节内部各区域以及周围组织的介电差异,致使其各组织对微波吸收后的热效应不同,最终导致热声信号的不同. 因此,微波热声成像技术能够清晰分辨关节各区域和相邻组织,可以高保真地使肌腱、韧带、软骨和骨骼可视化 [86,87]. Chi 等 [17] 成功使用微波热声成像技术检测了手指关节类风湿性关节炎,成像结果与 MRI 结果高度吻合,结果如图 6 所示,揭示了微波热声成像技术能够有效重建指间关节的软硬组织,为临床应用于关节和骨骼疾病检测和诊断提供了基础.

虽然微波热声成像技术在关节成像方面已经取得了一定的进展,但在成像质量和技术成熟度等方面仍存在一些挑战. 例如,在获得更高分辨率的图像方面,需要进一步优化成像算法和技术参数. 此外,还需要对该技术在不同类型的关节疾病和病变

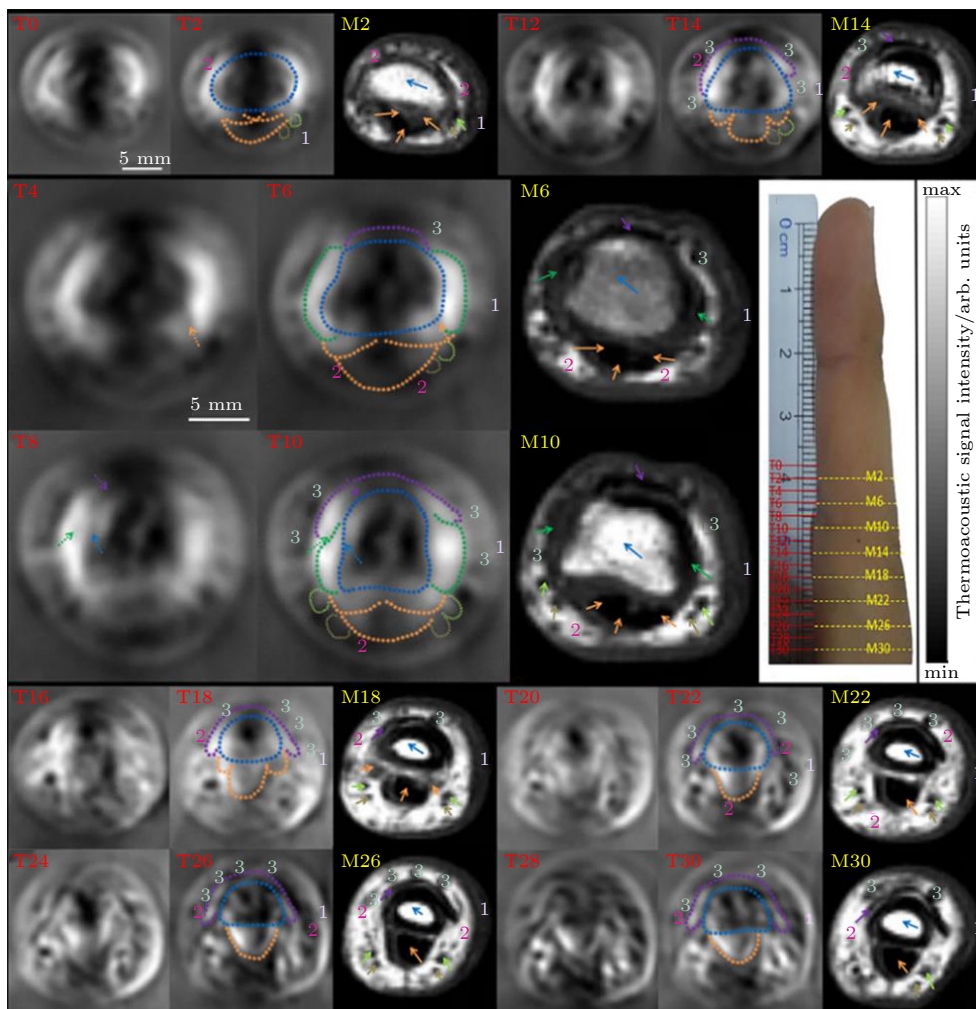


图 6 受试者中指的热声图像 (T0-T30) 和 MRI (M2-M30) 的比较 [17]

Fig. 6. Comparison of MTAI (T0-T30) and MRI (M2-M30) of subjects' middle fingers [17].

中的应用进行深入的研究和探索. 总体来说, 微波热声成像技术在关节成像方面具有广泛的应用前景, 为医学诊断和治疗提供了一个新的视角和工具.

4.4 偏振微波热声成像

心肌梗死是由于心肌血管狭窄或阻塞导致心肌缺血坏死所引起的一种疾病. 心肌细胞是心肌的基本构成单位, 它们紧密地排列在心脏组织中形成心肌. 在心肌梗死中, 缺血坏死的心肌细胞会被纤维组织所代替, 导致心肌组织的排列和结构发生变化^[88–92].

生物的基本结构组成及其空间排列决定了其电导率分布. 对于各向同性物质, 电导率 σ 是一个标量; 对于各项异性物质, 电导率 σ_{ij} 是一个张量. 例如

肌肉和心肌纤维等单长轴组织, 电导率是一个非线性和各向异性的张量, 其张量矩阵是一个正定矩阵:

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}, \quad (12)$$

那么, (2) 式可改写为

$$\text{SAR}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma_{ij}(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2}{2\rho(\mathbf{r})}, \quad (13)$$

其中, $\text{SAR}(\mathbf{r})$ 是比吸收率, $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ 是生物组织电导率, $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|$ 是电场强度幅值, $\rho(\mathbf{r})$ 是生物组织密度. 根据微波热声成像原理, 热声信号 $P_{\text{TA}}(\mathbf{r}, t)$ 可简单用温升、热膨胀和声传播 3 个过程描述:

$$P_{\text{TA}}(\mathbf{r}, t) \propto \beta \cdot \text{SAR}(\mathbf{r}) \cdot \eta, \quad (14)$$

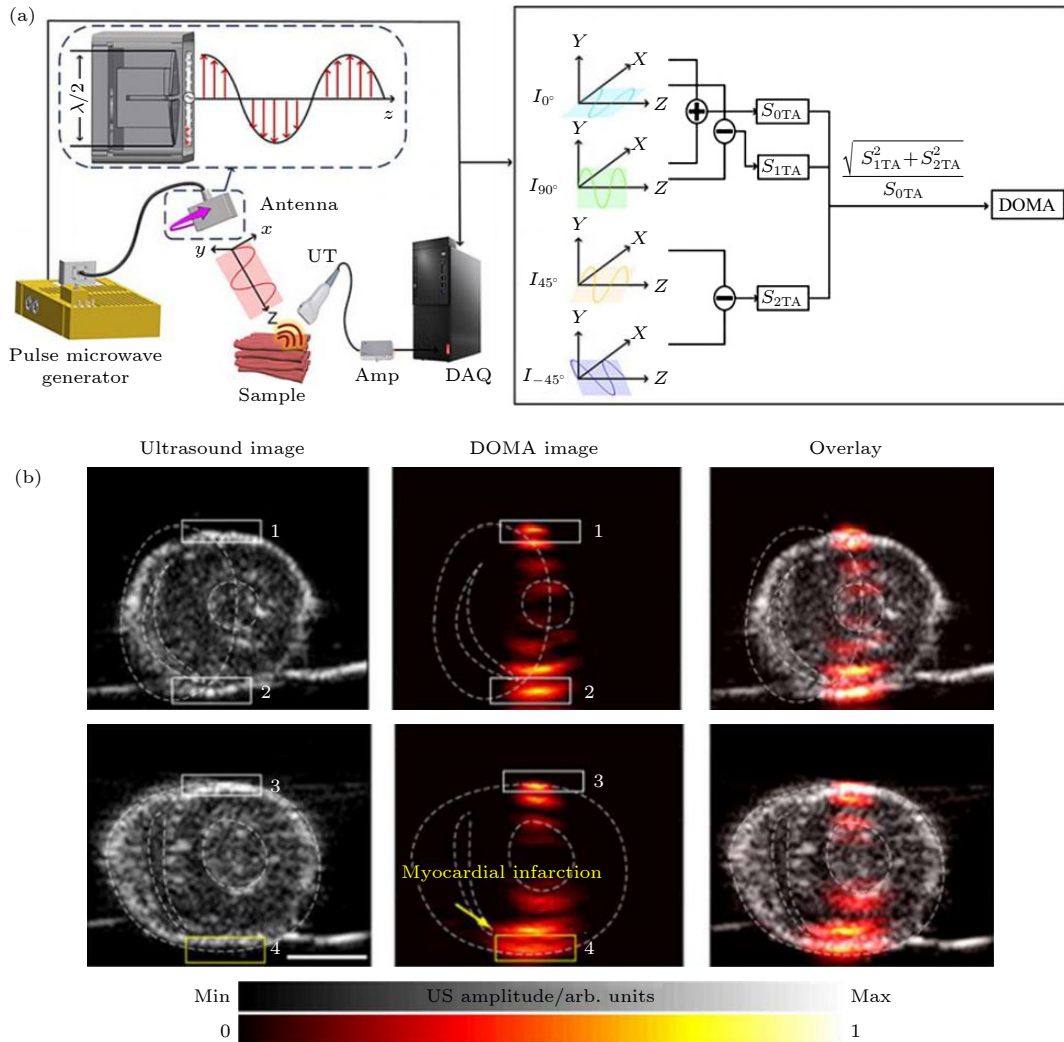


图 7 偏振微波热声心肌梗模型成像^[93] (a) 偏振微波热声成像系统的示意图和用于计算异质性参数 (DOMA) 的偏振微波热声成像机制; (b) 超声图像及相应的 DOMA 图像

Fig. 7. P-MTAI myocardial infarction model detection^[93]: (a) Schematic diagram of the P-MTAI imaging system and the P-MTAI mechanism used to calculate DOMA; (b) ultrasonic images and corresponding DOMA images.

其中, β 是热膨胀系数, SAR 是比吸收率, η 是声传播系数. 可知, 热声信号与比吸收率成正相关, 显然 $P_{TA}(\mathbf{r}, t)$ 中携带了生物组织的电导率分布信息, 即生物组织的结构和空间排列信息. 覃欢团队^[93] 成功将偏振微波热声成像 (polarization microwave-induced thermoacoustic imaging, P-MTAI) 技术应用于离体心梗模型检测, 获得的偏振热声图像与超声检测的结果高度吻合, 准确地标定了心梗区域, 成像原理和结果如图 7 所示. 偏振微波热声成像可以敏感地捕捉到生物组织的空间排列信息, 为组织结构成像提供了技术支撑, 也开拓了热声成像检测心梗等组织结构紊乱型疾病的应用. 考虑偏振微波热声成像技术临床化的进一步发展, 如何实现对体内心脏梗坏检测是偏振微波热声成像应用推广的方向和难题之一.

5 总结与展望

综上所述, 研究者已从微波热声成像的原理、装置和应用等各方面进行了深入研究, 但微波热声成像技术作为一种致力于临床应用的新型成像技术, 还需要进一步的探索和优化, 之后的发展研究应考虑以下几点.

1) 提升成像分辨率和对比度. 为了更好地应用于生物医学成像, 微波热声成像技术需要在成像分辨率和对比度方面进一步提高. 未来可以通过开发新型的探测器、应用稳定的超短微波辐射源、改善探测器的灵敏度等方面, 提高微波热声成像技术的成像分辨率和对比度.

2) 发展成像算法. 目前微波热声成像技术的图像重建算法主要是借鉴超声或光声成像方法, 假设超声在生物组织中传播是均质的, 但是实际上各个生物组织的声速是不均匀的. 研究更先进的算法, 解决声速不均的问题可提升图像重建的准确度, 更精确地还原图像.

3) 成像系统的小型化. 传统的微波热声成像系统微波发生器多采用磁控管模式, 体积大、结构复杂, 难以移动, 应研究更便携、更易推进临床应用的小型微波发生器.

4) 研究多模态成像. 往往一种成像模式难以获取完整的病理信息, 多种成像方式相配合, 有利于做出更精确的诊断, 发展微波热声、超声、光声

三模态成像设备是一个很有前景的研究方向.

总之, 随着微波热声成像技术的不断发展和完善, 该技术将会在医疗领域得到更广泛的应用和推广.

参考文献

- [1] Ketcham R A, Carlson W D 2001 *Comput. Geosci.* **27** 381
- [2] Bushong S C, Clarke G 2003 *Magnetic Resonance Imaging: Physical and Biological Principles* (Amsterdam: Elsevier Health Sciences) pp58–65
- [3] Bushberg J T, Boone J M 2011 *The Essential Physics of Medical Imaging* (Philadelphia: Lippincott Williams & Wilkins) pp171–202
- [4] Haribabu V, Girigoswami K, Sharmiladevi P, Girigoswami A 2020 *ACS Biomater. Sci. Eng.* **6** 4377
- [5] Chan V, Perlas A 2011 *Atlas of Ultrasound-guided Procedures in Interventional Pain Management* (New York: Springer) p13
- [6] Nguyen K C T, Le L H, Kaipatur N R, Zheng R, Lou E H, Major P W 2016 *Ann. Biomed. Eng.* **44** 2874
- [7] Wang H, Liu N 2020 *J. Med. Imaging Health Inf.* **10** 918
- [8] Xu M H, Ku G, Jin X, Wang L V, Fornage B D, Hunt K K 2005 *The Sixth Conference on Biomedical Thermoacoustics, Optoacoustics, and Acousto-optics* **5697** 45
- [9] Behari J 2019 *Radio Frequency and Microwave Effects on Biological Tissues* (New York: CRC Press) pp63–82
- [10] Chen H, Tang X, Nie G, Wang Z, Hu J, Hu J, Qin H 2023 *J. Innovative Opt. Health Sci.* **16** 2243002
- [11] Lin J C 2005 *Advances in Electromagnetic Fields in Living Systems* (Boston: Springer) p41
- [12] Zhao S X, Wang H H, Li Y J, Nie L M, Zhang S X, Xing D, Qin H 2021 *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **69** 725
- [13] Rahpeima R, Soltani M, Kashkooli F M 2020 *Comput. Methods Programs Biomed.* **196** 105606
- [14] Liu Q, Liang X, Li T, Chao W, Qi W Z, Jin T, Gong Y, Jiang H B, Xi L 2023 *IEEE Trans. Med. Imaging* **42** 2425
- [15] Zhao Y, Shan T, Chi Z H, Jiang H B 2020 *J. Xray Sci. Technol.* **28** 83
- [16] Ren M Y, Cheng Z W, Wu L H, et al. 2023 *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **70** 175
- [17] Chi Z H, Huang L, Wu D, Long X J, Xu X L, Jiang H B 2022 *Med. Phys.* **49** 84
- [18] Vander Vorst A, Rosen A, Kotsuka Y 2006 *RF/microwave Interaction With Biological Tissues* (Hoboken: John Wiley & Sons) pp30–38
- [19] Schwan H P, Foster K R 1980 *Proc. IEEE* **68** 104
- [20] Foster K R, Schwan H P 2019 *CRC Handbook of Biological Effects of Electromagnetic Fields* (Boca Raton: CRC press) pp27–76
- [21] Fiedler T M, Ladd M E, Bitz A K 2018 *Neuroimage* **168** 33
- [22] Williams J M 2001 arXiv: 0102007 [physics.gen-ph]
- [23] Bacon C, Guilliorit E, Hosten B, Chimenti D E 2001 *J. Acoust. Soc. Am.* **110** 1398
- [24] Dagro A M, Wilkerson J W, Thomas T P, Kalinosky B T, Payne J A 2021 *Sci. Adv.* **7** eabd8405
- [25] Zhang X C, Xu J 2010 *Introduction to THz Wave Photonics* (Vol. 29) (New York: Springer) pp70–82
- [26] Drain L 2019 *Laser Ultrasonics: Techniques and Applications* (New York: Routledge) pp305–322
- [27] Paltanuf G, Dyer P E 2003 *Chem. Rev.* **103** 487

- [28] Harris C M, Piersol A G 2002 *Harris' Shock and Vibration Handbook* (Vol. 5) (New York: McGraw-Hill) p21
- [29] Drebuschak V 2020 *J. Therm. Anal. Calorim.* **142** 1097
- [30] Gao F, Zheng Q, Zheng Y J 2014 *Med. Phys.* **41** 053302
- [31] Luo W L, Ji Z, Yang S H, Xing D 2018 *Phys. Rev. Appl.* **10** 1728
- [32] Lou C G, Yang S H, Ji Z, Chen Q, Xing D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 218101
- [33] Ji Z, Lou C G, Yang S H, Xing D 2012 *Med. Phys.* **39** 6738
- [34] Yan J, Tao C J, Wu S Z 2005 *IEEE Engineering in Medicine and Biology 27th Annual Conference* Shanghai, China, 17–18 January 2006 p1521
- [35] Lou C G, Nie L M, Xu D 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 083101
- [36] Ji Z, Ding W Z, Ye F H, Lou C G, Xing D 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 094104
- [37] Ji Z, Lou C G, Shi Y, Ding W Z, Yang S H, Xing D 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 839
- [38] Wang X, Bauer D R, Vollin J L, Manzi D G, Witte R S, Xin H 2012 *IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett.* **11** 1634
- [39] Sharif-Khodaei Z, Aliabadi M 2014 *Smart Mater. Struct.* **23** 075007
- [40] Berger C R, Demissie B, Heckenbach J, Willett P, Zhou S 2010 *IEEE J. Sel. Top. Sign. Proces.* **4** 226
- [41] Li J, Wu R B 1998 *IEEE Trans. Sign. Proces.* **46** 2231
- [42] Xu Q W, Zheng Z, Jiang H B 2021 *Chin. Phys. B* **30** 024302
- [43] Zhang J L, Li C Z, Jiang W C, Wang Z C, Zhang L J, Wang X 2022 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **70** 6336
- [44] Li C Z, Xi Z J, Jin G F, Jiang W C, Wang B S, Cai X R, Wang X 2023 *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **70** 2350
- [45] Wang B S, Sun Y F, Wang Z C, Wang X 2020 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **68** 377
- [46] Yu L, Antoni J, Wu H, Leclere Q, Jiang W 2019 *Mech. Syst. Sig. Process.* **134** 106309
- [47] Song J, Shen T, Wang Q W 2022 *IEEE J. Electromagn. RF Microwaves Med. Biol.* **7** 59
- [48] Luo Z X, Li C Z, Liu D T, Wang B S, Zhang L J, Ma Y X, Xu K W, Wang X 2023 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **71** 2652
- [49] Huang L, Rong J, Yao L, Qi W Z, Wu D, Xu J Y, Jiang H B 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 124301
- [50] Nie L M, Xing D, Zhou Q, Yang D W, Guo H 2008 *Med. Phys.* **35** 4026
- [51] Huang L, Zheng Z, Chi Z H, Jiang H B 2021 *Med. Phys.* **48** 4242
- [52] Ku G, Wang L V 2001 *Med. Phys.* **28** 4
- [53] Liang X, Guo H, Liu Q, Wu C F, Gong Y B, Xi L 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 013702
- [54] Fu Y, Ji Z, Ding W Z, Ye F H, Lou C G 2014 *Med. Phys.* **41** 110701
- [55] Ding W Z, Ji Z, Ye F H, Lou C G, Xing D 2015 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **63** 3272
- [56] Volmer C, Weber J, Stephan R, Blau K, Hein M A 2008 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **56** 360
- [57] Nan H, Arbabian A 2017 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **65** 2607
- [58] Ku G, Wang L V 2000 *Med. Phys.* **27** 1195
- [59] Xu M H, Xu Y, Wang L V 2003 *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **50** 1086
- [60] Xu M H, Wang L V 2002 *IEEE Trans. Med. Imaging* **21** 814
- [61] Zhao Z Q, Song J, Zhu X Z, Wang J G, Wu J N, Liu Y L, Nie Z P, Liu Q H 2012 *Electromagn. Waves* **134** 323
- [62] Cannata J M, Ritter T A, Chen W H, Silverman R H, Shung K K 2003 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **50** 1548
- [63] Sun X L, Yang X C, Zhu X Y, Liu H H 2017 *IEEE Sens. J.* **18** 1373
- [64] Li Z X, Chen D D, Fei C L, Li D, Feng W, Yang Y T 2021 *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* **68** 2202
- [65] Candès E J, Wakin M B 2008 *IEEE Signal Process. Mag.* **25** 21
- [66] Ye F H, Ji Z, Ding W Z, Lou C G, Yang S H, Xing D 2016 *IEEE Trans. Med. Imaging* **35** 839
- [67] Chia S K, Speers C H, D'yachkova Y, Kang A, Malfair - Taylor S, Barnett J, Coldman A, Gelmon K A, O'reilly S E, Olivotto I A 2007 *Cancer* **110** 973
- [68] Youlden D R, Cramb S M, Dunn N A, Muller J M, Pyke C M, Baade P D 2012 *Cancer Epidemiol.* **36** 237
- [69] Verkman A, Hara-Chikuma M, Papadopoulos M C 2008 *J. Mol. Med.* **86** 523
- [70] Yu C H, Tang W, Wang Y H, Shen Q, Wang B, Cai C Q, Meng X J, Zou F 2016 *Cancer Lett.* **376** 268
- [71] Baritaki S, Apostolakis S, Kanellou P, Dimanche - Boitrel M T, Spandidos D A, Bonavida B 2007 *Adv. Cancer Res.* **98** 149
- [72] Li X, Davis S K, Hagness S C, Van der Weide D W, Van Veen B D 2004 *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **52** 1856
- [73] Celik A R, Kurt M B, Helhel S 2019 *ACES* **34** 1549
- [74] Kruger R A, Miller K D, Reynolds H E, Kiser Jr W L, Reinecke D R, Kruger G A 2000 *Radiology* **216** 279
- [75] Wu L H, Cheng Z W, Ma Y Z, Li Y J, Ren M Y, Xing D, Qin H 2022 *IEEE Trans. Med. Imaging* **41** 1080
- [76] Huang Y, Omar M, Tian W, Lopez-Schier H, Westmeyer G G, Chmyrov A, Sergiadis G, Ntziachristos V 2021 *Sci. Adv.* **7** eabd1505
- [77] Joines W T, Jirtle R L, Rafal M D, Schaefer D J 1980 *Inte. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys.* **6** 681
- [78] Zheng Z, Jiang Y C, Huang L, Zhao Y, Jiang H B 2020 *J. X-Ray Sci. Technol.* **28** 137
- [79] Zhao Y, Chi Z H, Huang L, Zheng Z, Yang J G, Jiang H B 2017 *J. Innovative Opt. Health Sci.* **10** 1740001
- [80] Cunningham L S, Kelsey J L 1984 *Am. J. Public Health* **74** 574
- [81] Tański W, Dudek K, Tomaszewicz A, Świątoniowska-Lonc N 2022 *Int. J. Environ. Res. Public Health* **19** 3088
- [82] Gadeval A, Chaudhari S, Bollampally S P, et al. 2021 *Drug Discovery Today* **26** 2315
- [83] Thornton G, Shrive N, Frank C 2001 *J. Orthop. Res.* **19** 845
- [84] Buckwalter J A, Mow V C, Ratcliffe A 1994 *JAAOS-J. Am. Acad. Orthopaedic Surgeons* **2** 192
- [85] Sultan K S, Mohammed B, Manoufali M, Abbosh A M 2021 *IEEE Trans. Antennas Propag.* **69** 6824
- [86] Chi Z H, Zhao Y, Huang L, Zheng Z, Jiang H B 2016 *Med. Phys.* **43** 6226
- [87] Chi Z H, Zhao Y, Yang J G, Li T T, Zhang G, Jiang H B 2019 *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **66** 1598
- [88] Gandhi M S, Kamalov G, Shahbaz A U, Bhattacharya S K, Ahokas R A, Sun Y, Gerling I C, Weber K T 2011 *Heart Fail. Rev.* **16** 23
- [89] Weber K T, Sun Y, Bhattacharya S K, Ahokas R A, Gerling I C 2013 *Nat. Rev. Cardiol.* **10** 15
- [90] Friedberg C K, Horn H 1939 *J. Am. Med. Assoc.* **112** 1675
- [91] Smit M, Coetzee A, Lochner A 2020 *J. Cardiothorac. Vasc. Anesth.* **34** 2501
- [92] Alpert J S 1989 *Cardiology* **76** 85
- [93] Li Y J, Zhang S X, Wu L H, et al. 2022 *Photonics Res.* **10** 1297

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Biomedical microwave-induced thermoacoustic imaging*Wang Yu¹⁾²⁾³⁾⁴⁾ Zhang Hui-Min¹⁾²⁾³⁾⁴⁾ Qin Huan^{1)2)3)4)†}1) (*Key Laboratory of Laser Life Science & Institute of Laser Life Science, Ministry of Education, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)2) (*Guangdong Provincial Key Laboratory of Laser Life Science, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)3) (*Guangzhou Key Laboratory of Spectral Analysis and Functional Probes, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)4) (*College of Biophotonics, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)

(Received 5 May 2023; revised manuscript received 30 June 2023)

Abstract

Microwave thermoacoustic imaging (MTAI) is an exciting imaging technique rooted from the underlying principle of exploiting the distinct electrical properties of biological tissues. By using short-pulsed microwaves as a stimulation source and their interaction with the human body, MTAI has paved the way for revolutionary advancements in medical imaging. When microwaves are absorbed by polar molecules and ions within the tissues, an ingenious thermoelastic effect gives rise to ultrasound waves. These ultrasound waves, brimming with invaluable pathological and physiological insights, propagate outward, carrying the essence of the composition and functionality of biological tissue. Through a meticulous collection of ultrasound signals from all directions surrounding the tissue, it becomes possible to reconstruct intricate internal structures and visualize the tissue's functional dynamics. The MTAI excels in non-invasiveness, capable of delving several centimeters beneath the surface with a microscopic resolution on the order of micrometers. The magic lies in converting microwave energy into ultrasound waves, entering into the hidden depths of tissues without causing harm. This groundbreaking imaging modality unlocks a realm of possibilities for acquiring profound insights into the intricate structures and functionality of deep-seated tissues. Furthermore, the inherent polarization characteristics of microwaves empower MTAI to capture additional dimensions of information, unraveling the intricate polarization properties and illuminating a richer understanding of the tissue's complexity. The great potential of MTAI extends far and wide within the medicine field. It has made remarkable achievements in non-invasive imaging of brain structures, screening breast tumors, visualizing human arthritis, and detecting liver fat content. These accomplishments have laid a solid foundation, firmly establishing MTAI as a trailblazing medical imaging technique. The present study offers a comprehensive and in-depth exploration of the physical principles underpinning MTAI, the sophisticated system devices involved, and the recent groundbreaking research breakthroughs. Moreover, it delves into the exciting prospects and challenges that lie ahead in the future development of MTAI. As the technology continues to progress by leaps and bounds, MTAI is ready to break down barriers, and usher in a new era of unmatched imaging quality and performance. This, in turn, will open the floodgates for transformative innovations and applications in medical diagnosis and treatment. The anticipation is palpable as MTAI strives to make substantial contributions to the ever-developing medical imaging field, bestowing upon humanity more accurate, reliable, and life-enhancing diagnostic capabilities.

Keywords: microwave-induced thermoacoustic imaging, electrical properties of biological tissues, microwave sources, technique of brain imaging

PACS: 43.35.Ud, 87.85.Pq**DOI:** [10.7498/aps.72.20230732](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230732)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62075066), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2023A1515010824), and the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 202201010718).

† Corresponding author. E-mail: qinghuan@sncu.edu.cn



生物医学微波热声成像

王雨 张慧敏 覃欢

Biomedical microwave-induced thermoacoustic imaging

Wang Yu Zhang Hui-Min Qin Huan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230732

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230732>

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

多光子成像技术的生物医学应用新进展

New advances in biomedical applications of multiphoton imaging technology

物理学报. 2020, 69(22): 228702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201039>

基于镂空阵列探头的反射式光声/热声双模态组织成像

Reflection mode photoacoustic/thermoacoustic dual modality imaging based on hollow concave array

物理学报. 2021, 70(10): 100701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202012>

基于多路放大器加法电路噪声抑制的热声成像技术

Thermoacoustic imaging based on noise suppression of multi-channel amplifier and additive circuit

物理学报. 2020, 69(24): 240701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201036>

基于随机场照射的最优微波成像

Optimal microwave imaging with random field illuminations

物理学报. 2019, 68(5): 055201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182122>

基于生物阻抗谱成像的生物组织检测方法

Biological tissue detection based on electrical impedance spectroscopic tomography

物理学报. 2022, 71(4): 048706 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211600>

热注射法合成用于生物成像的核壳上转换纳米晶

Hot injection synthesis of core-shell upconversion nanoparticles for bioimaging application

物理学报. 2020, 69(14): 147801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200347>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

基于点扫描的高时空分辨荧光显微成像技术进展*

潘彬雄^{1) #} 弓晟^{1) #} 张鹏¹⁾ 刘子叶¹⁾ 皮彭健¹⁾
陈旺¹⁾ 黄文强²⁾ 王保举^{1) †} 詹求强^{1) ‡}

1) (华南师范大学, 华南先进光电子研究院, 广州 510006)

2) (华南师范大学物理学院, 广州 510006)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 8 月 23 日收到修改稿)

激光点扫描荧光显微镜凭借高分辨率、高灵敏度、高特异性、可光学层切三维成像和动态成像等优势, 已成为生命科学研究中广泛应用的重要工具. 随着研究者对生命科学研究的逐渐深入, 由于受光学衍射极限影响和逐点扫描探测的限制, 传统点扫描共聚焦显微镜的时空分辨率已无法完全满足相关研究需求, 在实际应用中面临诸多挑战. 近二十年来, 超分辨荧光显微成像技术取得了重要进展, 研究人员发展了多种高空间分辨率、高时间分辨率的点扫描荧光显微成像技术, 对于生物成像等具有重要意义. 然而, 有关该领域最新进展的综述论文较少, 系统地讨论、总结基于点扫描的高时空分辨荧光显微成像技术的研究进展, 对于其未来发展极为重要. 本文主要从时间分辨率与空间分辨率两个维度分别介绍了各类点扫描荧光显微成像技术的基本原理及相关进展, 并介绍了高时空分辨显微成像技术及应用, 最后讨论展望了高时空分辨点扫描荧光显微镜的未来发展趋势和挑战.

关键词: 点扫描共聚焦, 超分辨显微成像, 荧光显微镜, 时空分辨率

PACS: 42.40.Lx, 42.15.Eq, 87.64.M-, 87.64.mk

DOI: 10.7498/aps.72.20230912

1 引言

光学显微镜将人类视野从宏观拓展到了微观领域, 为探究物质构成与生命起源发挥了重要作用. 1873 年, 德国科学家 Abbe 提出传统光学显微镜的分辨率由波长和物镜数值孔径决定, 其理论公式为横向分辨率 $d_{\min} = \lambda_0 / (2NA_{\text{obj}})$, 轴向分辨率 $Z_{\min} = 2\lambda_0 / (NA_{\text{obj}})^2$ [1,2]. 其中, d_{\min} 是横向分辨最小距离; Z_{\min} 是轴向分辨最小距离; λ_0 是光波长; NA_{obj} 是物镜数值孔径. 因此, 在可见光波段, 传统光学显微镜分辨率, 横向约为 200 nm, 轴向约为

500 nm.

然而, 为进一步揭示蛋白分子相互作用, 亚细胞器动态变化等机理, 光学显微镜分辨率需要由百纳米量级跨越至几十纳米甚至几纳米量级. 为实现上述目标, 研究者提出多种突破衍射极限的远场光学显微超分辨成像技术, 其中代表性技术有: 基于单分子定位显微镜 (single-molecule localization microscopy, SMLM) 的光激活定位显微镜 (photo-activated localization microscopy, PALM) [3] 和随机光学重构显微镜 (stochastic optical reconstruction microscopy, STORM) [4], 基于频域扩展的结构光照明显微镜 (structured illumination micro-

* 国家自然科学基金 (批准号: 62335008, 62122028, 11974123, 62105106)、广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2023B1515040018, 2022A1515011395)、广州市基础与应用基础研究基金 (批准号: 202201010376) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2021M691089, 2023T160237) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: baoju.wang@m.scnu.edu.cn‡ 通信作者. E-mail: zhanqiuqiang@m.scnu.edu.cn

scopy, SIM)^[5], 以及基于点扫描成像的受激辐射损耗显微镜 (stimulated emission depletion, STED)^[6]. 这些代表性技术在空间分辨率与时间分辨率方面各具优势. 例如, 单分子定位显微镜 (SMLM) 核心思想为“闪烁”、“定位”与“重构”^[7–9], 通过每次激发少量探针以达到高定位精度, 横向分辨率最高可达 10 nm, 但需要大量原始图像进行重构计算, 因此时间分辨率通常在分钟量级, 难以实现活细胞快速动态成像. SIM 技术采用结构光照明方式, 提取目标图像的高频信息, 需 5—9 张原始图像重构计算出高分辨图像^[10,11], 其时间分辨率相对较高, 但空间分辨率有限, 仅比宽场显微镜提高 2 倍. 相较于上述两类技术, STED 技术的空间分辨率显著高于 SIM, 一般为 20—50 nm^[6,12,13], 时间分辨率也明显高于 SMLM, 因此在兼具高时空分辨率方面具有优势 (表 1).

为应对当前科学研究需求, 研究者对现代显微技术的时空分辨率均提出了更高要求, 实现高时空分辨率显微成像技术已成为显微成像领域的重要研究方向. 本文主要介绍了多种基于点扫描成像的技术原理及相关进展, 从时间分辨率与空间分辨率两个维度分别讨论了各类技术的发展与应用, 总结了基于点扫描的高时空分辨显微成像技术进展及应用, 最后分析讨论了高时空分辨点扫描荧光显微镜的未来发展趋势和挑战.

1.1 传统点扫描共聚焦显微成像

早期, 传统光学显微成像系统以宽场显微镜为主, 即整个样品被同时激发, 所产生的荧光信号被相机收集的同时, 也包括了未聚焦的背景信号 (图 1(a) 和图 1(b)). 因此, 宽场显微镜的轴向分辨率很差, 无法实现清晰的三维成像 (图 1(e) 和图 1(f)). 共聚焦激光扫描显微镜 (confocal laser scanning microscopy, CLSM) 通过空间针孔阻挡

了离焦光, 进而提高了分辨率和对比度, 使其具备光学切片的能力, 能够实现清晰的三维成像 (图 1(c)—(f))^[14,15]. 因此, 共聚焦激光扫描显微镜凭借具有非接触、非侵入性、操作简便等优势, 得到了广泛应用, 且已实现了商业化^[16,17].

为提高共聚焦显微镜分辨率, 1988 年 Sheppard^[19] 提出了在不牺牲信噪比的情况下, 获得两倍分辨率提高的点扫描共聚焦成像方式, 其原理为使用阵列探测器替代单像素探测器, 每个像素都充当一个针孔, 用于记录分辨率增强但信号低和偏移的共焦图像, 如图 2(a) 所示. 通过将检测到的荧光向照明轴重新分配来校正偏移并恢复信号, 如图 2(b) 所示, 从而减少信号损失的情况下提高了分辨率. 与反卷积算法结合, 横向分辨率可以达到 120 nm, 该成像系统已有商业化产品, 即蔡司的 Airyscan 显微镜^[20]. 然而, 逐点串行扫描方式会导致时间分辨率相对较差. 例如, 同样成像视野 (512×512 像素), 宽场成像单帧时间为 20 ms, 共聚焦点扫描单像素驻留时间为 10 μs, 整个成像视野则需 2.6 s.

2 高时间分辨率点扫描成像技术

2.1 基于多焦点阵列提高成像速度

为提高共聚焦显微镜成像速度, 2010 年 Müller 和 Enderlein^[21] 提出了基于面阵探测器 (CCD) 的单焦点激光扫描共聚焦显微成像技术, 并将其命名为图像扫描显微技术 (image scanning microscopy, ISM). 其将传统的共聚焦激光扫描显微镜与快速宽场 CCD 检测相结合, 同时通过上述像素重定位方法和反卷积算法实现分辨率提升. 在对荧光珠成像中, 传统共聚焦显微镜实现了 244 nm 分辨率, 而 ISM 的分辨率可至 150 nm, 相比于 CLSM 分辨率提高了约 1.63 倍 (图 2(a)—(c)). 为解决 ISM

表 1 SMLM, SIM, STED 超分辨技术的关键性能指标对比
Table 1. Technical comparison of SMLM, SIM, STED super-resolution microscopy.

技术	横向分辨率/nm	轴向分辨率/nm	二维时间分辨率	激光类型	激光强度/(W·cm ⁻²)	激光波段	荧光漂白程度	重构算法
SMLM ^[3,4,7,8]	10—30	40—70	1—10 min (20 μm×20 μm)	CW	~1000	可见光	☆☆☆	需要
SIM ^[10,11]	90—110	~300	1—10 ms (40 μm×40 μm)	CW	1—100	可见光	☆☆	需要
STED ^[6,12,13]	20—50	40—150	1—20 s (50 μm×50 μm)	fs/ps	10 ⁹ —10 ¹⁰	可见光	☆☆☆☆☆	无需

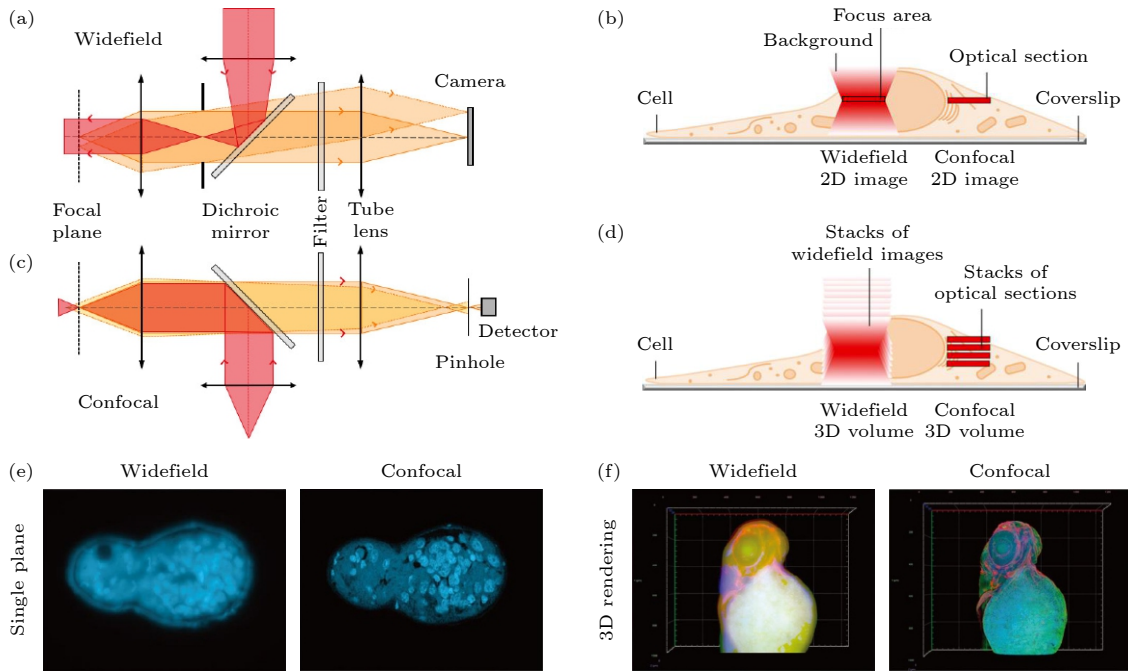


图 1 宽场和共聚焦显微成像技术对比 (a) 宽场显微镜系统简化图; (b) 宽场显微镜荧光信号采集方式^[18]; (c) 共聚焦显微镜系统简化图; (d) 共聚焦显微镜荧光信号采集方式^[18]; (e) 二维切面图对比^[18]; (f) 三维重构图对比^[18]

Fig. 1. Comparison of wide-field and confocal microscopy: (a) Simplified system schematic of wide-field microscopy; (b) fluorescent signal acquisition of wide-field microscopy^[18]; (c) simplified system schematic of confocal microscopy; (d) fluorescent signal acquisition of confocal microscopy^[18]; (e) comparison of two-dimensional section images^[18]; (f) comparison of three-dimensional reconstruction images^[18].

技术单点扫描成像速度有限的问题, York 等^[22] 在 2012 年提出了多焦点结构光照明显微镜 (multifocal structured illumination microscopy, MSIM). 该技术原理如图 2(d) 所示, 采用高速数字微反射镜器件 (digital micromirror device, DMD) 同时实现多焦点结构光的产生和扫描, 通过数字像素重定位和反卷积技术进行图像重构, 在 $45.6 \mu\text{m} \times 45.6 \mu\text{m}$ 的超大视野成像中获得了 1 Hz 时间分辨率, 并以此实现三维层切成像, 其中成像深度可达 $48 \mu\text{m}$, 同时具有横向约 145 nm、轴向约 400 nm 的空间分辨率, 如图 2(e) 和图 2(f) 所示. 该技术相比单点扫描 ISM 技术不仅具有高时间分辨率, 还同时具有深层三维成像能力, 为活体厚样品的三维成像提供了强有力的工具. 为进一步提高 MSIM 成像深度, 2014 年, Ingaramo 等^[23] 引入近红外脉冲光实现了多光子激发的 MSIM 技术, 将成像深度提高至 $100 \mu\text{m}$, 同时兼顾了高时间分辨率与高空间分辨率的优势.

2.2 基于微透镜阵列提高成像速度

由于多焦点光场的光强严重受限于数字微镜

阵列和空间光调制器的反射效率. 为生成高效率多焦点光场, 有研究者提出利用微透镜阵列产生并行多焦点聚焦光斑. 转盘共聚焦显微镜 (spinning disk confocal microscopy, SDCM) 正是利用此概念, 如图 3(a) 所示, 该系统核心器件由两个分别带有微透镜阵列和针孔阵列的转盘组成. 当用准直光照射时, 每个微透镜都会产生一个聚焦光点, 微透镜阵列产生约 1000 个焦点对样品进行实时扫描成像^[26,27]. 在相同信噪比下, 转盘共聚焦显微镜的成像速度是传统共聚焦显微镜的 10—100 倍^[28]. 此外, 转盘共聚焦显微镜还具有降低光漂白, 细胞光毒性低, 可长时程活细胞成像的优势^[29–31]. 转盘共聚焦显微镜虽然借助微透镜阵列提高了成像速度, 但其分辨率相较于传统共聚焦显微镜并未改善.

为了提高转盘共聚焦显微镜分辨率, 同时兼顾其高速成像的优势, York 等^[32] 在 2013 年提出了一种基于微透镜阵列的实时多焦点结构光超分辨技术 (instantaneous structured illumination microscope, Instant-SIM), 其原理为: 首先利用微透镜阵列生成多焦点激发模式, 与之相匹配的针孔阵列在共焦面抑制离焦荧光信号, 再利用一个共轭且匹配的微透镜阵列局部缩小每个透过针孔的荧光焦

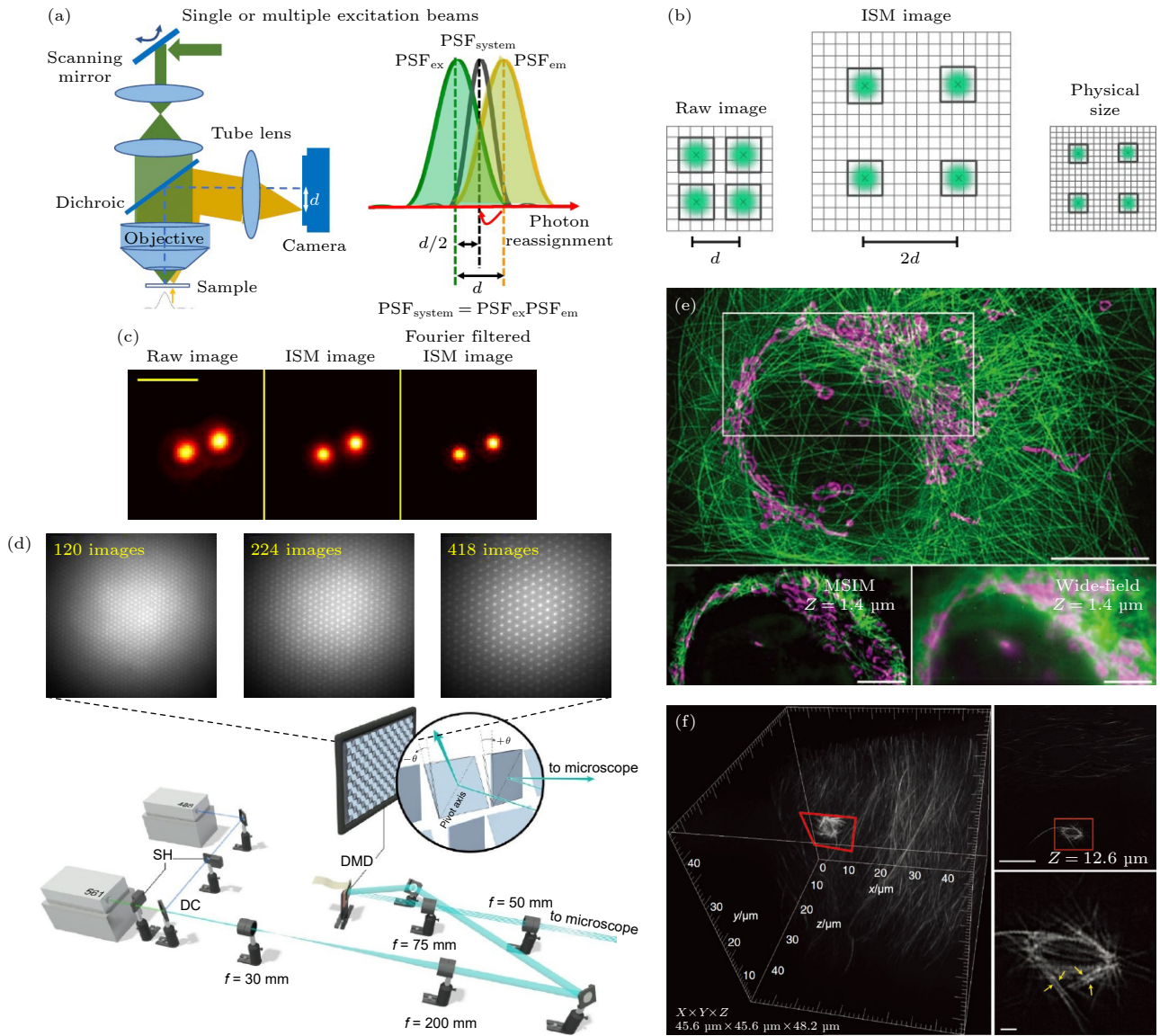


图 2 基于多焦点阵列的快速成像技术示意图 (a), (b) 像素重定位原理^[24,25]; (c) 共聚焦显微镜和 ISM 对 100 nm 直径荧光球的成像对比^[21]; (d) MSIM 照明系统^[22]; (e) MSIM 和宽场显微镜的活细胞双色成像对比^[22]; (f) MSIM 的活细胞三维成像^[22]

Fig. 2. Schematic diagram of fast imaging technology based on multifocus array: (a), (b) Principle of pixel reassignment^[24,25]; (c) imaging comparison of confocal microscope and ISM on 100 nm diameter fluorescent spheres^[21]; (d) illumination system for MSIM^[22]; (e) dual-color imaging comparison of MSIM and wide-field microscope on live-cell^[22]; (f) 3D imaging of live cells by MSIM^[22].

点至原来尺寸的 1/2, 通过硬件实现像素重定位效果, 最后再由振镜控制激发点阵扫描整个视场, 并将缩小后的荧光点阵反射到 CCD 对应的位置, 叠加形成实时超分辨图像 (图 3(b)). Instant-SIM 将 MSIM 需要后处理的步骤完全在硬件中实现, 使其具备了对活体样品进行高分辨率实时观测的能力. 同时, Instant-SIM 的横向和轴向的分辨率分别为 145 nm 和 350 nm, 采集速度高达 100 Hz, 并在活体肺成纤维细胞中以更高的三维分辨率且 10 倍于转盘共聚焦显微镜的成像速度获取双色超分辨图像 (图 3(c)). Qin 等^[25,33] 还通过将传统转盘共聚焦显微镜与 ISM 的超分辨方法相结合, 提出了分辨

率更高的 CSD-ISM 技术, 其显著优势在于可简单实现, 如对现有共聚焦转盘装置进行光源调制, 使转盘与照明和成像相机同步, 从而很容易地升级到 ISM.

3 超高空间分辨率点扫描成像技术

3.1 点扫描超分辨成像技术

研究者提出的上述多种方案提高了成像速度, 但依然面临空间分辨率有限的问题. 为实现共聚焦超分辨成像 (<100 nm), Hell 和 Wichmann^[6] 在

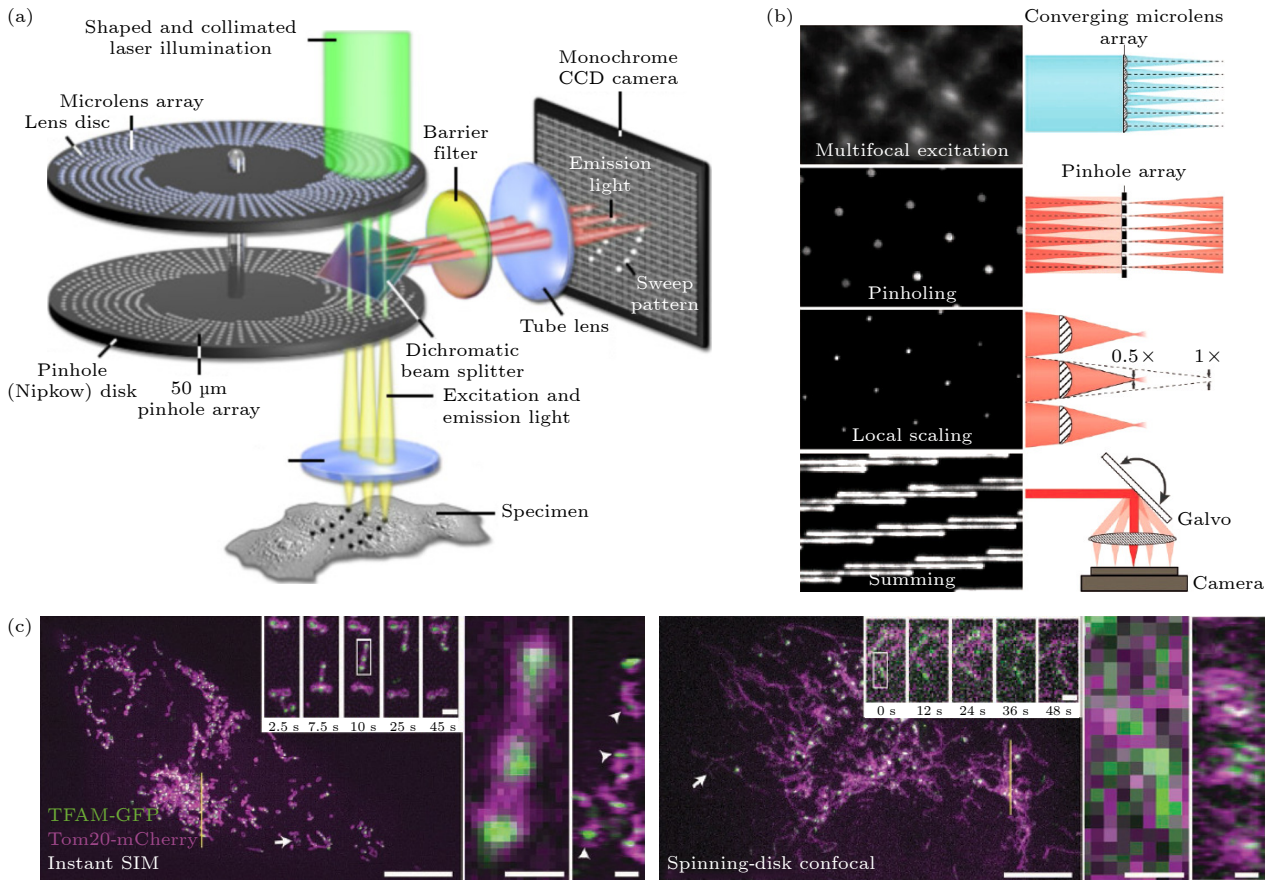


图 3 基于微透镜阵列的快速成像技术示意图 (a) 转盘共聚焦系统简化图; (b) 实现 Instant-SIM 的关键步骤^[32]; (c) Instant-SIM 和转盘共聚焦显微镜的活细胞双色成像对比^[32]

Fig. 3. Schematic diagram of fast imaging technology based on microlens array: (a) Simplified schematic of the spinning disk confocal system; (b) key steps in implementing Instant-SIM^[32]; (c) dual-color imaging comparison of Instant-SIM and spinning disk confocal microscope on live-cell^[32].

1994 年提出了受激辐射损耗显微术 (STED). 该技术通过缩小有效激发光斑的尺寸来实现衍射极限的突破, 其基本原理如图 4(a) 所示, STED 超分辨成像系统通常由两束激光构成, 一束为高斯光, 也称作激发光, 另一束为“甜甜圈”状的空心光, 也称作损耗光, 将两束光在空间上精准耦合对齐, 仅中间空心位置可发出荧光, 实现减小激发光斑的效果, 进而获得超分辨成像能力^[34,35]. STED 分辨率由公式 $d = \lambda_0 / 2NA_{\text{obj}} \sqrt{1 + I_{\text{STED}} / I_{\text{sat}}}$ 所决定, 其中 d 为横向分辨最小距离, I_{STED} 为损耗光光强; I_{sat} 为损耗光的饱和光强, 其含义为使荧光强度降低为初始大小 1/2 时的损耗光强度. 由上述公式可知 STED 光强越高, 则分辨率越高 (图 4(a)). 因此, 理论上 STED 分辨率可达无限小^[36]. 例如, 有研究者利用 NV 色心证实在 3.7 GW/cm² 的损耗光强下实现了 2.4 nm 的分辨率 (图 4(b))^[37]. 传统染料和荧光蛋白饱和光强较高, 其所需损耗光光强

通常在 MW/cm²—GW/cm² 量级, 仅能实现 40—60 nm 的分辨率. 同时, 传统商业染料和荧光蛋白无法承受高光强损耗光, 极易出现光漂白现象, 同时高光强损耗光也会对细胞造成严重光毒性, 影响细胞活性^[38]. 因此, 在实际应用中 STED 的损耗光强难以无限提高.

为了降低损耗光光强, 进而减少光漂白和光毒性, 研究者提出了基态损耗 (ground state depletion, GSD) 技术^[39], 该技术相较 STED 大大降低了光功率, 可以实现连续光激发与损耗. GSD 技术的损耗光强相比传统 STED 功率降低了 3 个数量级^[40], 更适合生物组织细胞成像. 同时, 为了减少扫描成像过程中的无效照明, 研究者探究了许多方法, 如 MINFIELD 成像技术^[41], 通过仅对提前确定的亚衍射区域照射来尽可能地减少光损伤; 又如 DyMIN 成像技术^[42], 使用像素停留时间的一小部分来驱动位于 STED 光束的环形波峰上的荧光团进

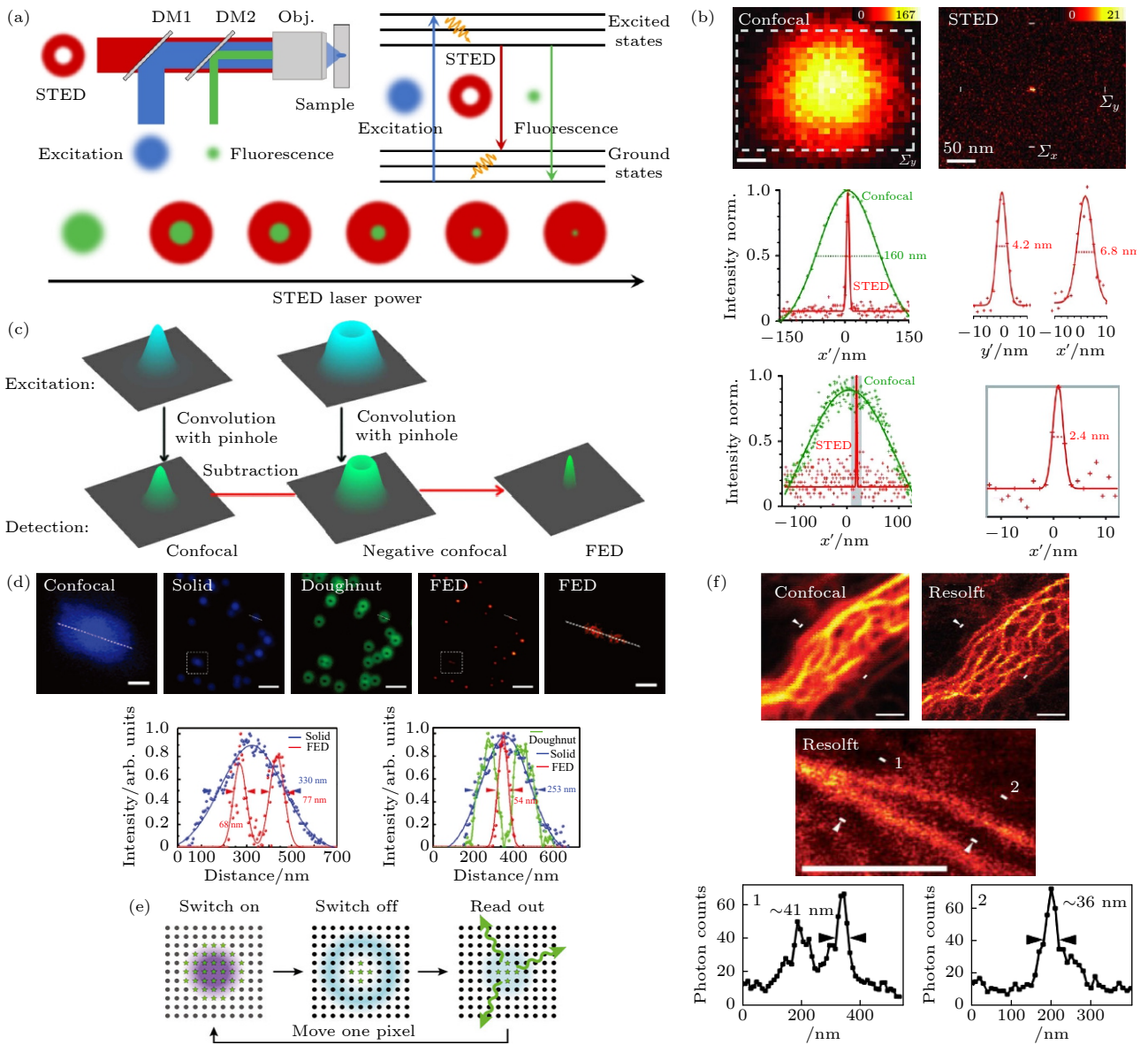


图 4 点扫描超分辨成像技术示意图 (a) STED 原理图; (b) STED 在 NV 色心上实现 2.4 nm 分辨率^[37]; (c) FED 原理图^[43]; (d) 单颗粒 FED 成像^[44]; (e) RESOLFT 原理图^[45]; (f) 共聚焦显微镜和 RESOLFT 的细胞成像对比^[46]

Fig. 4. Schematic diagram of point scanning super-resolution imaging technology: (a) STED schematic; (b) STED achieves 2.4 nm resolution on NV point^[37]; (c) FED schematic^[43]; (d) UCNPs-FED single particle imaging^[44]; (e) RESOLFT schematic^[45]; (f) cell imaging comparison of confocal microscope and RESOLFT^[46].

入暗状态. 相比传统 STED 技术, 该成像技术将损耗光强降低了 1/20. 尽管已提出多种成像技术降低损耗光强, 但是 STED 技术仍然面临着损耗光强高、光路难以校准、成像方法复杂等问题.

为解决上述难题, Kuang 等^[43] 提出荧光差分技术 (fluorescence emission difference microscopy, FED) 来降低空心光光强并降低光路复杂性. 该技术分别利用实心光斑和空心光斑扫描样品获得两张图像, 并将两张图像相减, 最终得到差分超分辨图像 (图 4(c), (d)), 其原理公式可表示为 $PSF_{FED} = PSF_{solid} - rPSF_{doughnut}$, PSF_{FED} , PSF_{solid} , $PSF_{doughnut}$

分别为 FED、实心光斑和空心光斑的点扩散函数 (point spread function, PSF), r 为相减系数^[47,48]. 与 STED 类似, 当产生荧光非线性饱和时, FED 技术的分辨率可进一步提高^[49]. 相比 STED 技术, FED 方法具有无荧光染料限制、成像系统简单、后期处理方便的优势.

FED 技术虽具有光强低的优势, 但存在分辨率相对较低的问题, 一般而言, FED 技术分辨率难以突破 100 nm. 为追求超高分辨率, 进一步降低损耗光强, 研究者提出了基于光开关属性的可逆饱和光转移荧光超分辨显微技术 (reversible saturable

optical fluorescence transitions, RESOLFT)^[50,51], RESOLFT 首先使用 405 nm 激发光激活衍射受限光斑区域内的蛋白分子,使其发光,再使用一束 488 nm 环形光使偏离中心的蛋白分子转化为非发射状态,最后收集荧光信号(图 4(e)).与 STED 相比,在获得相同分辨率的情况下,该技术所需要的光强可降低 8 个数量级.然而,该技术的成像速度取决光开关转换速率.例如,基于绿色荧光蛋白 rsEGFP 实现 RESOLFT 技术,其成像的激发功率密度仅为 1 kW/cm²,实现了约 36 nm 的成像分辨率,但该技术的单像素驻留时间却需 10—20 ms.为提高 RESOLFT 技术成像速度,研究者发展了绿色荧光蛋白 rsEGFP2,该蛋白的光转换速率较快,扫描速度提升 25—250 倍^[52].但是,RESOLFT 荧光探针依然存在着成像时间长、光漂白等缺点.为进一步提高成像分辨率与降低光毒性及光漂白等问题,有研究者提出基于最少光子数的纳米尺度定位技术(minimal photon fluxes, MINFLUX)作为一种新兴纳米级超高分辨显微技术^[53,54],使用空心光束作为泵浦光,调节光束中心的位置,当荧光强度最小时,荧光分子就被认为在空心光束中心位置.其成像方式实现了 1—3 nm 的超高空间分辨率.随后研究者在 MINFLUX 的基础上又发展了 MINSTED 技术,更是让分辨率突破纳米量级,获得 0.23 nm 的定位精度^[55].MINFLUX 和 MINSTED 技术在空间分辨率上有着巨大优势,但耗时很长.

为彻底解决光漂白问题,降低光毒性,实现超长时程的超分辨成像,本课题组提出了上转换超分辨显微技术.上转换荧光纳米探针(upconverting nanoparticles, UCNPs)具有近红外激发、非线性强、光谱丰富可调、无荧光漂白等独特优势,在解决传统 STED 面临的激光光强过高、荧光漂白快、无法长时程观测、光毒性大、超快激光系统复杂等方面问题具有很大的潜力.2015 年, Wu 等^[56]首次实现了近红外光束调控上转换荧光损耗现象,获得了 30% 的荧光损耗效率,为实现超低功率、无光漂白的上转换超分辨开辟了新思路,提供了重要理论基础.2017 年,为实现上转换超分辨显微技术, Zhan 等^[57]利用“同种离子间交叉弛豫”构建了高效的荧光损耗机理(图 5(a)),实现了 96% 的极高损耗效率和分辨率为 66 nm 的超分辨显微成像(图 5(b)),其所需损耗光强相比传统 STED 降低了至少 2 个数量级,克服了光漂白现象,并首次实现了

上转换探针标记的亚细胞结构成像.同年, Liu 等^[58]报道了类似的相关现象和上转换超分辨显微技术.为追求更极致的超分辨成像性能,2022 年, Guo 等^[59]结合上转换发光的多光子非线性泵浦依赖特性,提出了受激辐射诱导激发损耗技术(stimulated-emission induced excitation depletion, STExD),可实现传统 STED 所不具有的荧光损耗非线性放大的独特效应,逐级降低高能级荧光损耗所需要的饱和光强,将损耗饱和光强陡降至 42 kW/cm² 量级,较传统 STED 技术下降 3 个数量级,并获得了 ~34 nm 的超分辨成像结果.同年, Pu 等^[60]基于上转换“光-物质-能量吸收体”的荧光损耗理论,提出了表面迁移荧光损耗技术(surface-migration emission depletion, SMED),将传统的损耗光引起受激辐射与激发光进行低效率竞争,转变为引导荧光能量向高容量能量吸收体转移(图 5(c)),实现了极高效的荧光损耗,损耗效率可达 95%,且饱和光强仅为 18.3 kW/cm² 量级,较传统 STED 技术下降 3—4 个数量级.同时,仅利用毫瓦级、近红外、连续激光实现了分辨率高达 17 nm 的超分辨显微成像(图 5(d)).

上转换荧光除了可以被低光强激光实现高效荧光损耗外,还有具有超饱和和非线性($n < 1$)效应与超高阶多光子非线性($n > 1$)效应.基于上转换非线性效应也可有效调制激发光斑,进而改变成像点扩散函数实现超分辨显微成像. Wu 等^[62]提出了利用单个低功率、波长为 808 nm 激光引发掺铒上转换探针产生超饱和和非线性激发效应($n = 0.59$),实现了无光漂白的荧光差分显微技术的超饱和和激发上转换超分辨成像,分辨率达到了 80 nm.同年, Chen 等^[63]将该成像技术应用深层成像,在 93 μm 厚的组织成像中,实现了 50 nm 的分辨率. Huang 等^[44]构建了激发正交的上转换探针,在低光强、超饱和和非线性激发下,实现了铥-蓝光和铒-绿光双通道、无串扰的检测,实现了单次扫描的荧光差分超分辨成像,分辨率高达 54 nm 的超分辨成像,同时其成像时间缩短了 1/2.为降低饱和和荧光差分超分辨成像技术中对空心光束的依赖,仅用简易的高斯光来实现超分辨成像,有研究者提出基于非线性多光子效应提高成像分辨率,其理论为 $d = \lambda_0 / (2NA_{\text{obj}}\sqrt{N})$,其中 d_{min} 是横向分辨最小距离; λ_0 是光在真空中的波长; NA_{obj} 是物镜数值孔径, N 为非线性多光子数.然而,传统高阶非线性多光子($N > 1$)成像技

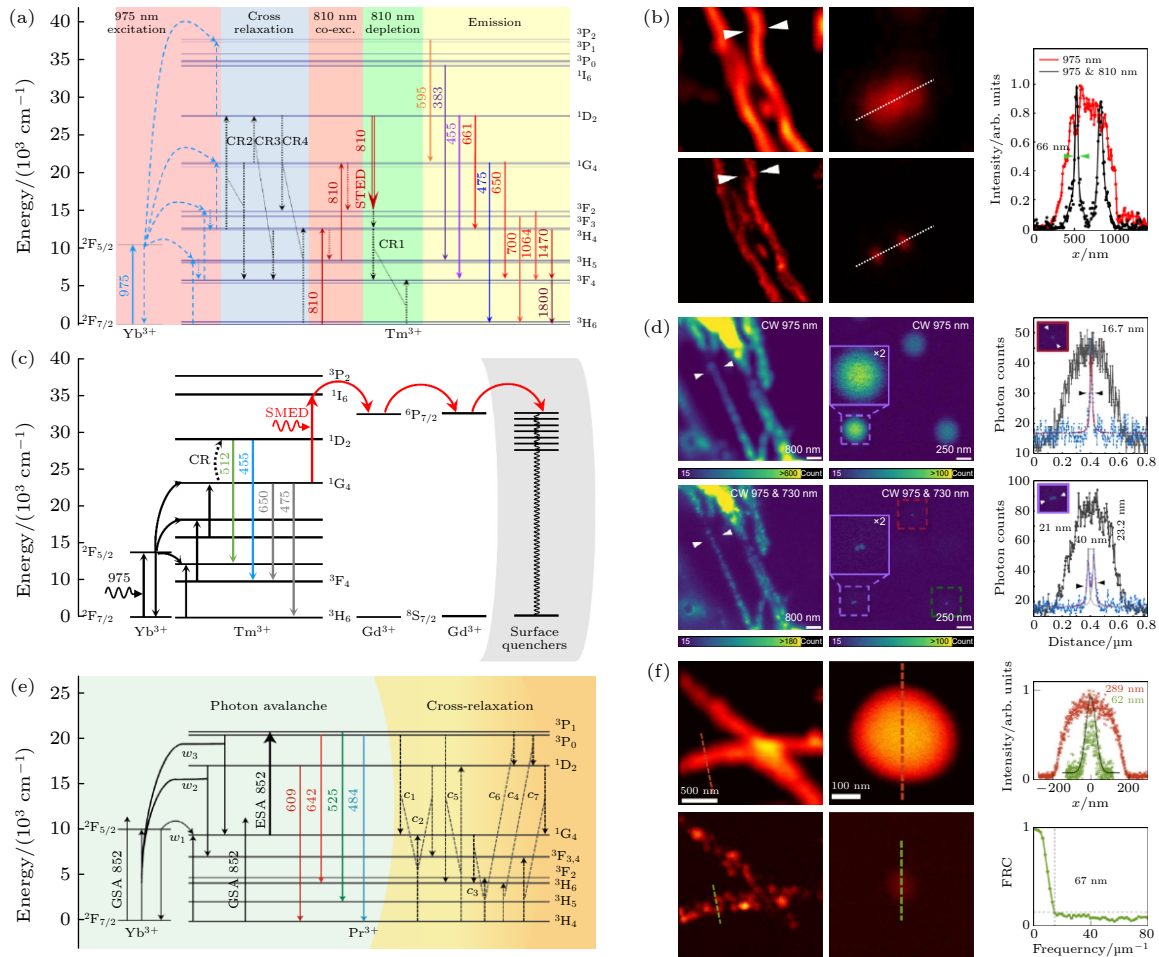


图5 上转换超分辨成像技术示意图 (a) 交叉弛豫传能荧光损耗机制^[57]; (b) 上转换 STED 超分辨成像结果^[57]; (c) 表面迁移荧光损耗机制^[60]; (d) SMED 超分辨成像结果^[60]; (e) $\text{Yb}^{3+}/\text{Pr}^{3+}$ 共掺杂纳米颗粒的光子雪崩机制^[61]; (f) 光子雪崩超分辨成像结果^[61]

Fig. 5. Schematic diagram of up-conversion super-resolution imaging technology: (a) Cross-relaxation energy transfer fluorescence loss mechanism^[57]; (b) up-conversion STED super-resolution imaging results^[57]; (c) surface migration fluorescence loss mechanism^[60]; (d) SMED super-resolution imaging results^[60]; (e) photon avalanche mechanism of $\text{Yb}^{3+}/\text{Pr}^{3+}$ co-doped nanoparticles^[61]; (f) photon avalanche super-resolution Resolution imaging results^[61].

术受限于激发波长与非线性阶数 N 彼此依赖的倍数关系, 在发射波长不变的情况下, 多光子激发过程阶数 N 越高, 则需要波长为 N 倍的高功率脉冲光激发实现, 这对于实现超分辨率成像存在理论上的困境. 为克服这个难题, 本课题组提出基于上转换铽、镱和铕三种掺杂的上转换体系, 实现了短波长激发的高阶非线性多光子发光. 具体地, 利用 $30 \mu\text{W}$, 730 nm 连续光激发实现了超衍射极限的高阶非线性四光子 ($n = 4$) 荧光成像, 分辨率达到了 161 nm . 如同非线性效应可在二维上压缩点扩散函数, 同样也可将该思路扩展至三维成像. Denkova 等^[64] 利用 980 nm 激发实现了非线性四光子荧光, 获得了三维高分辨成像. 基于多光子激发的非线性可直接提高分辨率, 是一个重要的、简单的超分辨成像方法, 但是长久以来传统上转换非

线性阶数并不高, 一般多光子 $n = 4-5$, 进而无法实现 100 nm 以内的超分辨成像. 近期, Lee 等^[65] 在铕离子上转换体系中利用近红外 1064 nm 激发实现了基于纳米光子雪崩效应, 并据此实现了横向 $\sim 70 \text{ nm}$ 的超分辨成像. 但该探针荧光辐射波长为 800 nm , 绝大部分探测器在此波段探测效率较低, 不利于成像, 此外, 该体系雪崩荧光响应时间慢 (608 ms), 难以应用于生物成像. 同一时期, 本课题组基于铽和镨两种掺杂离子实现了非线性阶数为 26 阶的光子雪崩非线性效应, 实现了约 62 nm 的超分辨成像 (图 5(e), (f)), 同时基于铽、镨和铕三种离子掺杂上转换体系提出了迁移光子雪崩概念, 并结合能量传递及级联激发实现了光子雪崩效应放大, 获得了超高 46 阶非线性成像, 实现了多细胞视野的实用超分辨成像技术. 非线性阶

数的大幅提升使多光子成像成为突破衍射极限且分辨率可达 60 nm 的超分辨成像技术, 同时成像系统具有极为简便、激光光强要求极低的优势^[61].

3.2 点扫描三维超分辨成像技术

细胞结构的动态变化并不仅仅局限于二维层面, 而是往往发生在三维层面. 2000 年, Klar 等^[66]提出了利用加载了 $0/\pi$ 环形相位的损耗光对荧光进行受激辐射损耗, 获得 6 倍的轴向分辨率提高, 实现了轴向分辨率为 110 nm. Harke 等^[67]报道的 3D-STED 技术可实现 xyz 三个维度上的超分辨. 通过同时引入 $0-2\pi$ 涡旋相位 (横向调制) 以及 $0/\pi$ 环形相位 (轴向调制) 两束损耗光, 对荧光 PSF 进行三维受激辐射损耗, 如图 6(a), (b) 所示. 3D-STED 实现了横向 43 nm 和轴向 125 nm 的分辨率, 如图 6(d) 所示. 为矫正成像像差, 实现光束调制的灵活性, 耶鲁大学科研团队提出利用两个空间光调制器分别替代 $0-2\pi$ 涡旋相位以及 $0/\pi$ 环形相位板, 实现了具有自适应光学 (adaptive optics, AO) 优化像差能力的 AO-3DSTED, 获得了更高的成像质量, 提高了 3DSTED 深度成像的能力^[68]. 为减少空间光调制器的使用, Lenz 等^[69]更是通过巧妙的光路设计, 仅利用一个 SLM 实现了 AO-3DSTED, 如图 6(c) 所示.

尽管 3D-STED 能实现三维超分辨, 但横向和轴向的分辨率通常相差 2—3 倍. 为解决此难题, 2008 年, Schmidt 等^[70]结合 3D-STED 以及 4π 显微镜的技术优势, 提出了 isoSTED, 可获得 40—45 nm 的各项同性分辨率. 随后, Chmyrov 等^[71]将自适应光学技术加入 isoSTED 中, 实现了 AO-isoSTED 技术. 如图 6(e) 所示, 损耗光的调制采用了单 SLM 方法, SLM 上分别加载了调制 STED_{xy} 的 $0-2\pi$ 涡旋相位以及 STED_z 的离焦相位, 图 6(e) 右上方插图分别展示了 STED_{xy} , STED_z 以及 $\text{STED}_{\text{total}}$ 双物镜干涉的 PSF. 由于自适应光学技术的引入, 使得 AO-isoSTED 技术在实验中从整个 30—35 μm 厚生物样品内稳定获取了三维各向同性亚 50 nm 分辨率, 并藉此对一系列亚细胞结构进行了精细的三维超分辨成像, 如图 6(f) 所示. 此外, Böhm 等^[72]基于更低损耗光强的 RESOLFT 提出了 4Pi-RESOLFT 技术, 实现了 30—50 nm 的三维超分辨成像. 然而, 由于 RESOLFT 可逆光开关荧光蛋白的转换速率较慢, 如对 400 μm^3 体积进行三维成像需要 160 min 之久, 这极大地限制了 RESOLFT 技

术在三维动态成像中的应用.

4 超高时空分辨率点扫描成像技术

4.1 智能扫描超分辨成像技术

上述点扫描成像技术在空间分辨率方面展示了优越的性能, 可实现 20—40 nm 分辨率, 可清晰观测亚细胞细微结构. 但是, 由于点扫描超分辨技术探测体积的缩小, 所能探测的荧光光子数相应减少, 为保证相同的成像信噪比, 一般会增加单像素扫描时间. 同时为满足奈奎斯特采样定理, 同一视野下超分辨所需像素数更多, 最终导致点扫描超分辨技术时间分辨率较差. 为进一步提高时间分辨率, 有研究者提出了可总结为目标引导的智能扫描超分辨成像技术, 其原理为控制扫描振镜跳过视野内没有样品的区域. 基于目标引导的智能扫描方式已有多项代表性技术被报道, 如 Staudt 等^[74]在 2011 年提出减少荧光“开关”状态切换周期的智能点扫描技术. 如图 7(a) 所示, 在决策时间 dT 内, 接收的光子数达到第 1 阈值时激光器才会被接通, 如果达到第 2 阈值且读出时间小于驻留时间, 在剩余驻留时间中激光器会被关闭. 该方法减少了激发光强, 且在保留空间分辨率的同时, 提高了成像速度, 并且减低了高达 8 倍的光漂白现象. 另外, Dreier 等^[75]于 2019 年将智能扫描的概念应用于 RESOLFT 显微术. 这种智能扫描点扫描的方法将 RESOLFT 成像速度提高了 6 倍, 并将体内成像的光剂量降低 70%—90%.

通过目标引导的智能扫描超分辨成像技术, 可提供高时间分辨率. 同时, 由于减少了无效照明, 也有效降低了 STED/RESOLFT 技术的光漂白问题, 使其可实现长时间超时空分辨成像. 然而, 有些亚细胞结构所发生的动态变化是快速的, 可能仅在毫秒至几秒内变化, 成像过程中难以捕捉目标区域. 为此, 有研究者提出了事件触发的智能点扫描超分辨成像技术 (event-triggered STED, etSTED)^[76], 其基本原理如图 7(b) 所示, 先用宽场快速成像对事件进行检测和定位, 当检测到事件发生则切换为 STED 模式, 在事件坐标周围小块区域按照预先设定的参数进行采集. 之后继续宽场成像, 不断重复这个过程. 该技术不仅使细胞整体应力和光损伤最小化, 还能够显著提高时间分辨率. 与手动采集整个研究样本区域的 STED 时间间隔相比, 所选感兴趣区域的成像速度快了 100—5000 倍.

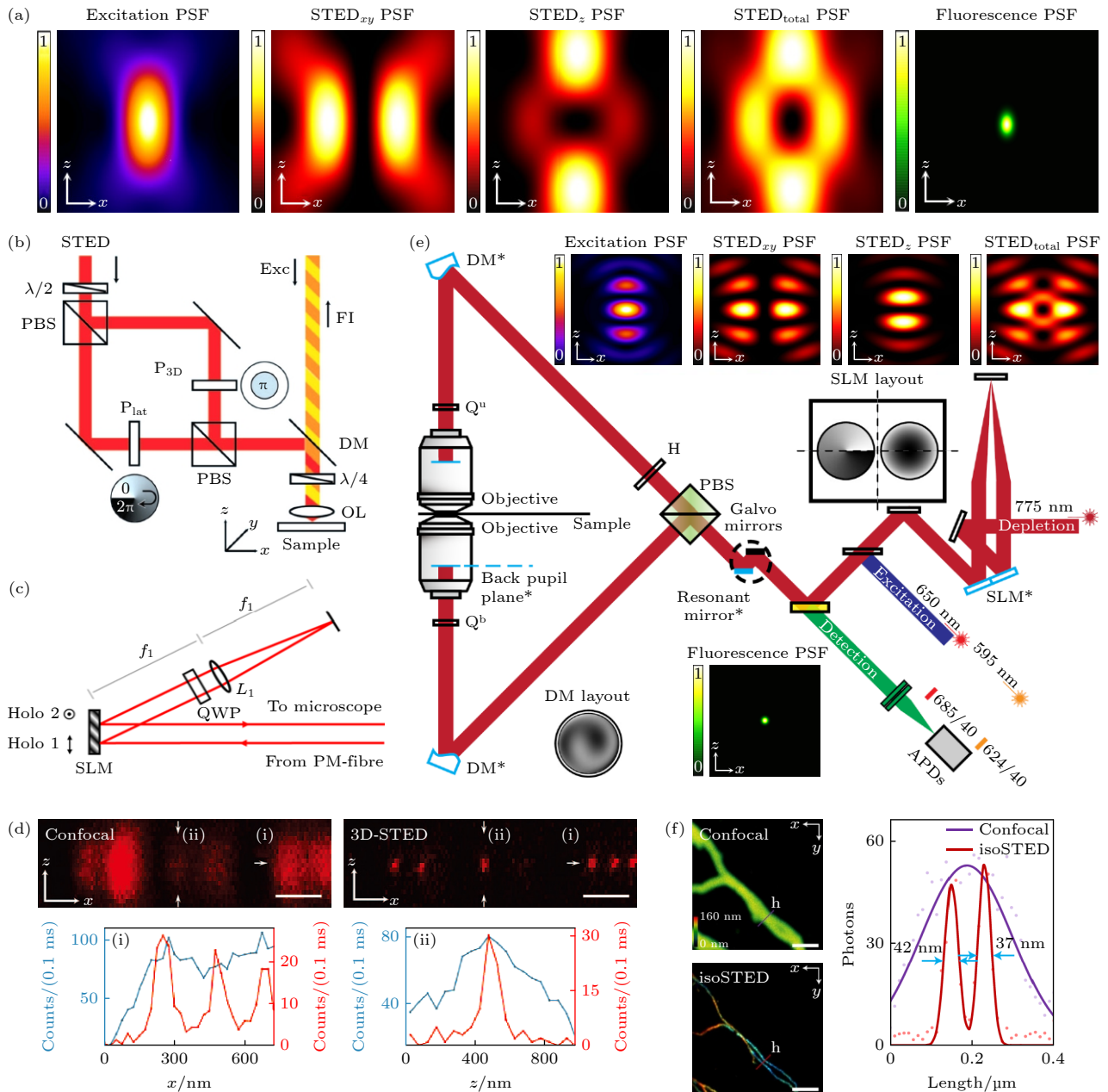


图 6 点扫描三维超分辨成像技术示意图 (a) 3D-STED PSF xz 平面强度分布; (b) 3D-STED 系统简化图^[67]; (c) 单 SLM 实现 AO-3DSTED 装置^[69]; (d) 共聚焦显微镜和 3D-STED 对 20 nm 直径荧光球的成像对比^[67]; (e) AO-isoSTED 系统简化图以及 PSF xz 平面强度分布^[73]; (f) 共聚焦显微镜和 AO-isoSTED 对细胞微管的成像对比^[73]

Fig. 6. Schematic diagram of point scanning 3D super-resolution imaging technology: (a) 3D-STED PSF xz plane intensity distribution; (b) simplified schematic of 3D-STED system^[67]; (c) AO-3DSTED with a single SLM^[69]; (d) imaging comparison of confocal microscope and 3D-STED on 20 nm diameter fluorescent spheres^[67]; (e) simplified schematic of AO-isoSTED system and PSF xz plane intensity distribution^[73]; (f) imaging comparison of confocal microscope and AO-isoSTED on cell microtubules^[73].

4.2 并行扫描超分辨成像技术

智能扫描超分辨技术方案依然依赖单点扫描和单点探测的成像方式, 时间分辨率提升始终有限. 为追求超高时间分辨率, 2011 年, Bingen 等^[77] 率先提出了四光束多点并行扫描的 STED 技术, 该技术将成像速度提升至原来的 4 倍, 同时增大了

扫描视场. 但该技术方案需要每束激发光与空心光严格耦合实现同步扫描, 并依赖多个点探测器, 系统搭建较为复杂. 为此, Bingen 等^[77] 提出了一种能更为简单、高效的产生并行空心光的方法, 利用两个正交且不相干的交叉驻波相叠加, 产生超过 10000 个空心光并行扫描的 pRESOLFT 技术, 其原理如图 8(a) 所示. 与传统 RESOLFT 技术一样,

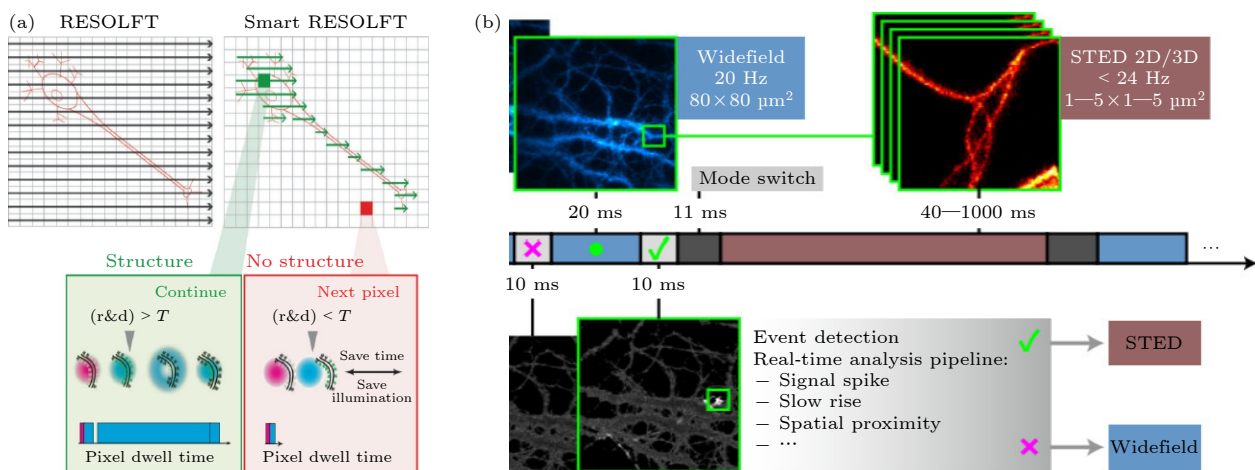

 图 7 智能扫描超分辨成像技术示意图 (a) 智能 RESOLFT 扫描机制^[75]; (b) etSTED 实验方案^[76]

 Fig. 7. Schematic diagram of intelligent scanning super-resolution imaging technology: (a) Smart RESOLFT scanning mechanism^[75]; (b) etSTED experimental scheme^[76].

“ON”状态聚焦光斑尺寸随激发光强 I 与饱和光强 I_s 的比值增大而减小, 如图 8(b) 所示. 由于大部分用于 RESOLFT 技术的可逆蛋白 RSFPs 的“开关”速率相对较慢, 在 $\sim 10 \mu\text{m}$ 成像视野下, 传统点扫描 RESOLFT 技术成像时间所需为 20—30 min^[78,79]. 相比传统点扫描 RESOLFT 技术, 利用上万个空心光并行扫描的成像方式, 可在 $120 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ 的超大视野下, 以 $< 1 \text{ s}$ 的时间分辨率实现 $\sim 77 \text{ nm}$ 超分辨活细胞成像, 如图 8(c) 所示. 同样地, Bergemann 等^[80] 也利用上述基本原理, 将其扩展至多色并行扫描 STED 成像.

上述并行扫描成像技术, 使其在二维上具备了超高空分辨的性能, 为实现各向同性的三维超高空分辨成像, Boden 等^[81] 使用 3 种不同的驻波图案的相干叠加来创建一个蜂窝状的三维照明阵列, 即 3D-pRESOLET 技术, 如图 8(d) 所示. 在 $40 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m}$ 成像视野下, 3D-pRESOLET 技术可实现 1—2 Hz 的时间分辨率, 并具有亚 80 nm 的三维各向同性分辨率. 3D-pRESOLET 与单束点扫描成像方案相比, 扫描步骤大大减少, 将一个体积 ($40 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 1.6 \mu\text{m}$) 的记录时间从 4.4 h 缩短到 78 s, 如图 8(e) 所示.

为了直观对比上述相关技术, 表 2 从空间分辨率、时间分辨率、激光类型及波长、激发光强、光漂白程度、成像深度以及是否需要重构算法等多个方面进行了详细阐述. 例如, STED 技术虽提高了空间分辨率, 但激发光强都需要数倍的提升, 进而导致严重的光漂白, 难以在活细胞成像中应用. RESOLFT 技术基于超低激发光强, 极大地

降低了光毒性和光漂白, 但时间分辨率相对较差, 难以实现快速动态成像. 为提高成像速度, 以并行扫描成像方式为主的 MSIM, pRESOLFT 等技术相继发展, 但该类技术的空间分辨率提升有限. isoSTED 带来了各向同性的超高三维空间分辨率, 但也同样面临着高激发光强、光漂白严重的问题, 同时复杂的光学系统对系统稳定性是极大的挑战. 基于上转换纳米探针的 UCNP-STED 技术相比传统 STED 技术降低激发光强 3—4 个数量级, 极大地降低了光毒性, 同时利用近红外光激发, 降低了光在样品传播中的散射效应, 可提高成像深度, 并且连续光的使用, 极大地简化了系统复杂性, 此外完全无光漂白的独特优势, 使其在超分辨领域有着很大的潜力. MINFLUX 和 MINSTED 虽在严格意义上不属于点扫描成像技术, 但其创新性地结合 STED 技术以及单分子定位技术, 实现了超高的空间分辨率, 使光学显微镜分辨率实现了单纳米尺度的突破, 但时间分辨率相当较慢, 通常为分钟量级, 难以实现快速动态成像.

4.3 深度学习助力超高空分辨成像

深度学习在图像识别和图像重建等方面具有优越性能, 已被应用于点扫描荧光显微成像技术中. 深度学习与 STED 结合, 可以有效克服 STED 技术中光漂白严重, 光毒性高及系统复杂等问题, 并获得超高空分辨 (图 9(a)), 使 STED 技术更有利于应用于活细胞成像. 2019 年, Wang 等^[82] 基于生成对抗网络 (generative adversarial network, GAN) 实现了跨模态超分辨成像技术. 如利用 20 nm

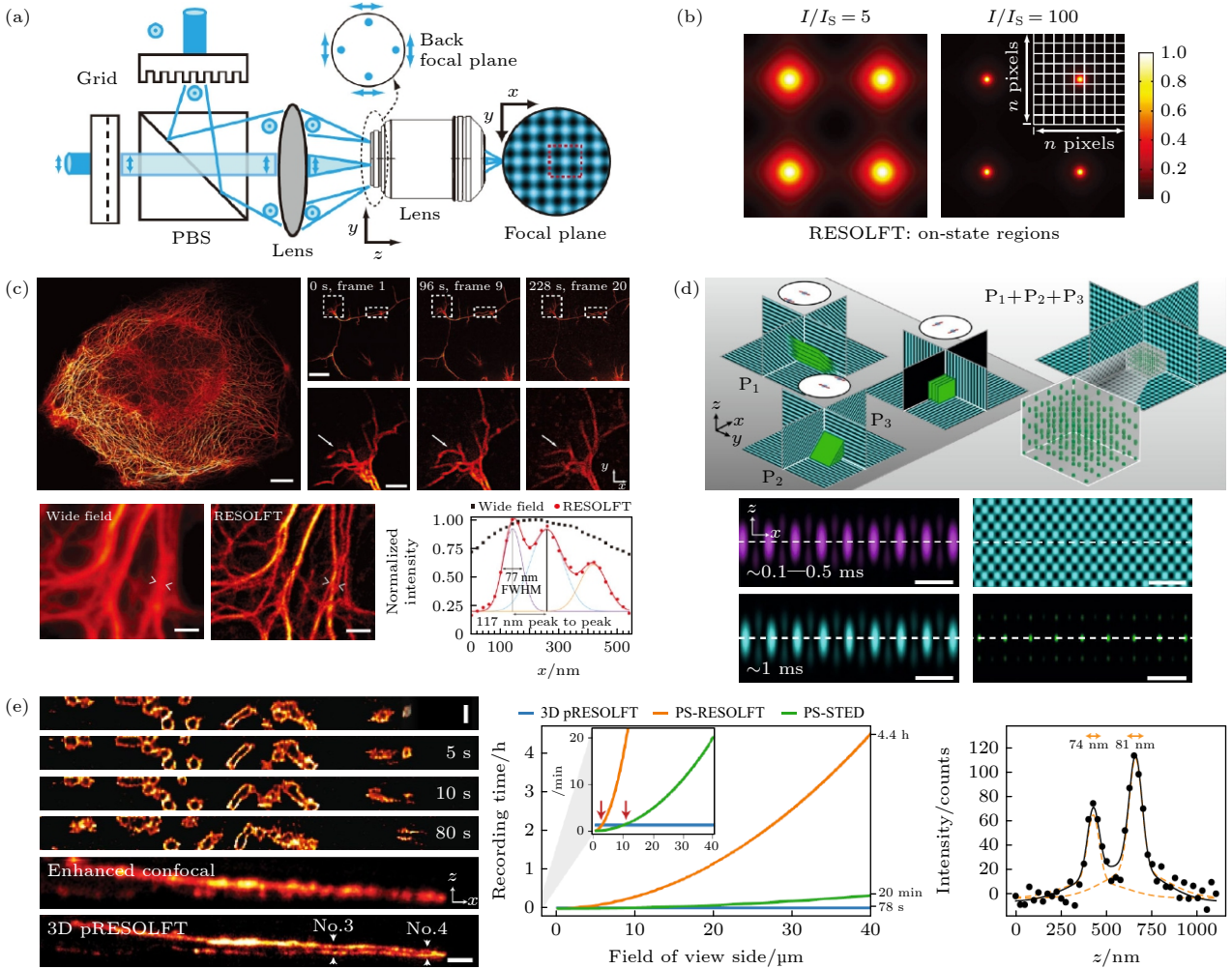


图 8 并行扫描超分辨成像技术示意图 (a) pRESOLFT 系统简化图^[71]; (b) pRESOLFT “ON” 状态下不同 I/I_s 的二维强度分布图^[71]; (c) pRESOLFT 纳米显微镜的活细胞成像^[71]; (d) 3D-pRESOLFT 三种模式的驻波叠加产生蜂窝状照明阵列^[81]; (e) 3D-pRESOLFT 纳米显微镜的活细胞成像^[81]

Fig. 8. Schematic diagram of parallel scanning super-resolution imaging technology: (a) Simplified schematic of pRESOLFT system^[71]; (b) 2D profiles of the on-state probability distribution for different I/I_s ^[71]; (c) live-cell imaging with pRESOLFT nanoscopy^[71]; (d) three patterns of standing waves are superimposed to create a honeycomb lighting array in 3D-pRESOLFT^[81]; (e) live-cell imaging with 3D-pRESOLFT nanoscopy^[81].

荧光珠的共聚焦图像作为输入数据, 通过 GAN 网络输出了与 STED 图像极为接近的结果, 成功分辨间距为 130 nm 的两个小球, 如图 9(b) 所示. 2020 年, Li 等^[83] 基于 GAN 架构, 提出了 SRGAN 方法, 使用 STED 点扩展函数的先验知识和单元格的结构信息来生成用于网络训练的模拟标记数据对, 该方法可以将 60 nm 分辨率的 STED 图像提高到 30 nm 分辨率. 同年, Chen 等^[84] 改良的残差通道注意力网络 (residual channel attention networks, RCAN) 模型用来对 3D 时延图像进行超分辨率的重构或者去噪, 使用 RCAN 在共聚焦显微镜中实现去噪和分辨率的提高, 在 STED 显微成像中实现约 2.5 倍的横向分辨率增强, 如图 9(c) 所

示. 2023 年, Ebrahimi 等^[85] 用深度学习对 STED 图像进行去噪, 通过减少像素停留时间来减轻光漂白和光损伤. 使用 20 个图像数据集, 将短像素停留时间的低信噪比 STED 图像和长像素停留时间的高信噪比 STED 图像作为输入图像对来训练网络. 将 STED 显微镜的像素停留时间缩短 1/40 以上, 同时提高了预测精度, 保持了去相关分析评估的 STED 图像的横向分辨率, 如图 9(d) 所示. 深度学习网络模型的建立可以助力于点扫描成像技术中空间分辨率和时间分辨率的提高, 使得传统点扫描超分辨成像技术具有超高时空分辨成像性能, 更有利于实现亚细胞结构的快速动态成像.

表 2 不同点扫描超分辨成像技术的关键性能指标对比
Table 2. Overview of point-scanning super-resolution fluorescence microscopy techniques.

技术	横向分辨率 /nm	轴向分辨率 /nm	二维时间分辨率	激光类型	激光强度	荧光漂白程度	激光波段	组织成像深度	重构算法
Confocal ^[19]	200	500	0.2—2.0 s (50 μm×50 μm)	CW	40 μW—1 mW	☆☆☆	可见光	中等	无需
Airyscan ^[20]	120—140	400	0.2—1.0 s (50 μm×50 μm)	CW	4—20 μW	☆☆	可见光	低	需要
MSIM ^[22]	145	400	1 s (45.6 μm×45.6 μm)	CW fs/ps	1—25 μW 1.1 W	☆☆	可见光/ 近红外	低	需要
STED ^[6,12,13]	20—50	40—150	13 s (50 μm×50 μm)	fs/ps	1—10 GW/cm ²	☆☆☆☆☆	可见光	中等	无需
UCNPs-STED (SMED ^[60])	17	~45	10—50 s (50 μm×50 μm)	CW	18 kW/cm ²	零漂白	近红外	大	无需
RESOFLT ^[50,52]	~40	~120	100 s (10 μm×10 μm)	fs/ps	1 kW/cm ²	☆☆	可见光	中等	无需
pRESOFLT ^[71,81]	~80	~80	0.4 s (10 μm×10 μm)	fs/ps	1 kW/cm ²	☆☆	可见光	很低	需要
isoSTED ^[70,73]	~40	~40	0.5—5.0 s (50 μm×50 μm)	fs/ps	50—100 mW	☆☆☆☆☆	可见光	中等	无需
MINFLUX ^[53,54]	1—3	1—3	1—2 min (20 μm×20 μm)	CW	10—50 kW/cm ²	☆	可见光	很低	需要
MINSTED ^[55]	0.23	—	68 min (1.37 μm×1.37 μm)	fs/ps	1.5 μW	☆	可见光	很低	需要

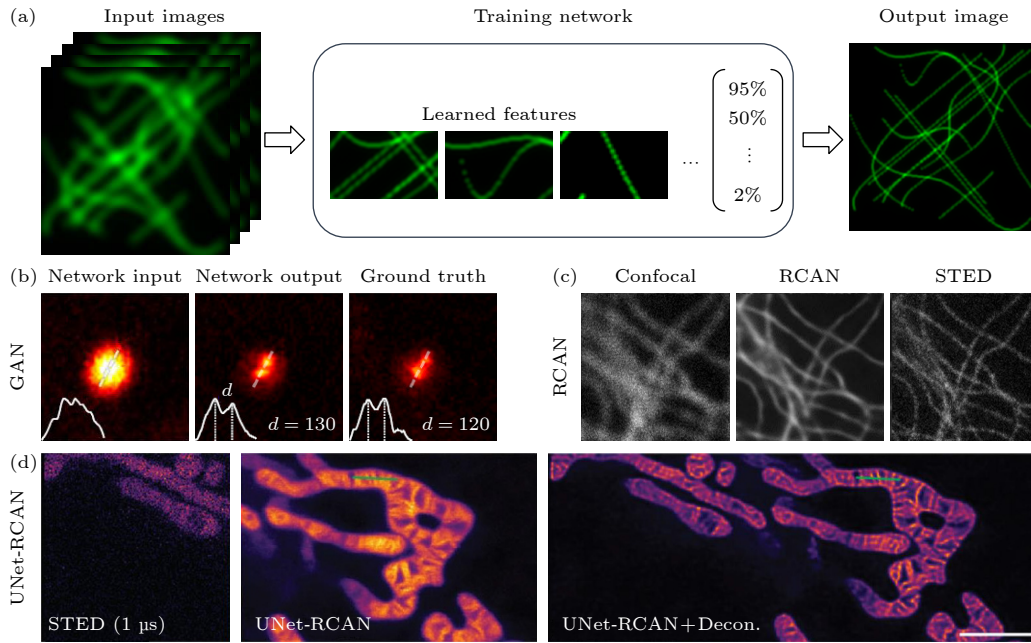


图 9 深度学习助力超高分辨率成像示意图 (a) 深度学习提高图像分辨率; (b) GAN 网络训练结果^[82]; (c) RCAN 网络训练结果^[84]; (d) Unet-RCAN 网络训练结果^[85]

Fig. 9. Schematic diagram of deep learning-assisted ultra-high spatial-temporal resolution imaging: (a) Deep learning improves image resolution; (b) GAN network training results^[82]; (c) RCAN network training results^[84]; (d) Unet-RCAN network training results^[85]

5 总结与展望

本文主要介绍了多种激光点扫描显微成像技术的基本原理和最新研究进展. 传统点扫描显微镜具有分辨率高、信噪比高、可光学层切和动态成像等优势, 已成为科学研究中的重要工具. 但基于

点扫描成像技术还有诸多方面需要进一步探究.

1) 在空间分辨率方面, 传统点扫描显微镜仍未突破衍射极限, 无法观察到亚细胞结构及蛋白分子的相互作用. 同时传统点扫描显微镜由于采用高密度能量的聚焦光斑进行扫描成像, 通常会导致的光漂白和光毒性问题, 在长时间活细胞观测的应用中面临着严峻的挑战. 2) 在时间分辨率方面, 传统点扫

描显微镜基于串行光栅扫描成像模式极大地限制了成像速度. 尤其针对样品进行大视野(高像素)成像时, 点扫描显微镜需要重复数百万次扫描才能遍历整个样品区域, 这无疑限制了其在快速获取大量数据或观察快速动态过程的应用.

为解决上述问题, 在提高空间分辨率方面, 研究人员做出诸多努力, 发展了诸如受激辐射损耗显微镜等突破衍射极限的超分辨率点扫描成像技术. 在提高时间分辨率方面, 研究人员陆续开发出并行扫描的高时间分辨率显微成像技术. 目前, 所报道的多种点扫描成像技术分别在时间分辨率或者空间分辨率方面各有优势, 但如何将二者有机的融合在一起, 发展新一代具备超高时空分辨率的点扫描成像技术是未来研究的重要趋势. 例如, 诸多研究者也在开发并探索新型超分辨技术, 如在超高空间分辨率上, 利用 MINFLUX 技术和 MINSTED 技术可实现纳米级分辨率, 以及毫秒级蛋白追踪. 在超时间分辨率上, 泵浦-探测 (pump-probe) 显微镜结合了超快激光领域的泵浦-探测技术以及显微成像技术, 其时间分辨率达到皮秒甚至飞秒量级, 在生物和化学领域具有重要意义^[86-88], 该技术与现有超分辨技术相结合有望发展为兼顾高时空分辨率的成像技术^[89].

总之, 激光点扫描显微镜在空间分辨率、时间分辨率以及技术融合等方面仍面临着很多挑战, 同时也蕴藏着巨大的发展潜力. 随着技术的不断创新, 兼具超高时空分辨率的点扫描荧光显微镜将持续为生命科学等领域的基础研究和技术进步提供重要的工具, 为人类对生物体的理解和认识带来新的突破.

参考文献

- [1] Abbe E 1873 *Arch. f. Mikr. Anat.* **9** 413
- [2] Zhao G Y, Zheng C, Fang Y, Kuang C F, Liu X 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 148702 (in Chinese) [赵光远, 郑程, 方月, 匡翠方, 刘旭 2017 物理学报 **66** 148702]
- [3] Betzig E, Patterson G H, Sougrat R, Lindwasser O W, Olenych S, Bonifacino J S, Davidson M W, Lippincott-Schwartz J, Hess H F 2006 *Science* **313** 1642
- [4] Rust M J, Bates M, Zhuang X W 2006 *Nat. Methods* **3** 793
- [5] Gustafsson M G 2000 *J. Microsc.* **198** 82
- [6] Hell S W, Wichmann J 1994 *Opt. Lett.* **19** 780
- [7] Jungmann R, Steinhauer C, Scheible M, Kuzyk A, Tinnefeld P, Simmel F C 2010 *Nano Lett.* **10** 4756
- [8] Jungmann R, Avendaño M S, Woehrstein J B, Dai M J, Shih W M, Yin P 2014 *Nat. Methods* **11** 313
- [9] Schermelleh L, Ferrand A, Huser T, Eggeling C, Sauer M, Biehlmaier O, Drummen G P C 2019 *Nat. Cell Biol.* **21** 72
- [10] Huang X S, Fan J C, Li L J, Liu H S, Wu R L, Wu Y, Wei L S, Mao H, Lal A, Xi P, Tang L Q, Zhang Y F, Liu Y M, Tan S, Chen L Y 2018 *Nat. Biotechnol.* **36** 451
- [11] Shao L, Kner P, Rego E H, Gustafsson M G L 2011 *Nat. Methods* **8** 1044
- [12] Nägerl U V, Willig K I, Hein B, Hell S W, Bonhoeffer T 2008 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **105** 18982
- [13] Wildanger D, Medda R, Kastrop L, Hell S 2009 *J. Microsc.* **236** 35
- [14] Nwaneshiudu A, Kuschal C, Sakamoto F H, Anderson R R, Schwarzenberger K, Young R C 2012 *J. Invest. Dermatol.* **132** 1
- [15] Wilson T 1989 *J. Microsc.* **154** 143
- [16] Pawley J 2006 *Handbook of Biological Confocal Microscopy* (Vol. 236) (Berlin: Springer Science & Business Media)
- [17] Muller M 2006 *Introduction to Confocal Fluorescence Microscopy* (Vol. 69) (Bellingham: SPIE Press)
- [18] Sticker M, Elsässer R, Neumann M, Wolff H 2020 *J. Microsc.* **28** 36
- [19] Sheppard C R 1988 *Optik (Stuttgart)* **80** 53
- [20] Huff J 2015 *Nat. Methods* **12** i
- [21] Müller C B, Enderlein J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 198101
- [22] York A G, Parekh S H, Dalle Nogare D, Fischer R S, Temprine K, Mione M, Chitnis A B, Combs C A, Shroff H 2012 *Nat. Methods* **9** 749
- [23] Ingaramo M, York A G, Wawrzusins P, Milberg O, Hong A, Weigert R, Shroff H, Patterson G H 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **111** 5254
- [24] Wu Y C, Shroff H 2018 *Nat. Methods* **15** 1011
- [25] Qin S, Isbaner S, Gregor I, Enderlein J 2021 *Nat. Protoc.* **16** 164
- [26] Gräf R, Rietdorf J, Zimmermann T 2005 *Microscopy Techniques* (Berlin:Springer) -/- 57
- [27] Toomre D, Pawley J B 2006 *Handbook of Biological Confocal Microscopy* (Boston: Springer US) p221
- [28] Inoué S, Inoué T 2002 *Cell Biological Applications of Confocal Microscopy*(San Diego: Academic Press) p88
- [29] Wang E, Babbey C, Dunn K W 2005 *J. Microsc.* **218** 148
- [30] Enoki R, Ono D, Hasan M T, Honma S, Honma K I 2012 *J. Neurosci. Methods* **207** 72
- [31] Abreu-Blanco M T, Verboon J M, Parkhurst S M 2011 *J. Cell Biol.* **193** 455
- [32] York A G, Chandris P, Nogare D D, Head J, Wawrzusins P, Fischer R S, Chitnis A, Shroff H 2013 *Nat. Methods* **10** 1122
- [33] Schulz O, Pieper C, Clever M, Pfaff J, Ruhlandt A, Kehlenbach R H, Wouters F S, Großhans J, Bunt G, Enderlein J 2013 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **110** 21000
- [34] Xu Y Z, Xu R H, Wang Z, Zhou Y, Shen Q F, Ji W C, Dang D F, Meng L J, Tang B Z 2021 *Chem. Soc. Rev.* **50** 667
- [35] Vicidomini G, Bianchini P, Diaspro A 2018 *Nat. Methods* **15** 173
- [36] Westphal V, Hell S W 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 143903
- [37] Wildanger D, Patton B R, Schill H, Marseglia L, Hadden J, Knauer S, Schönle A, Rarity J G, O'Brien J L, Hell S W 2012 *Adv. Mater.* **24** OP309
- [38] Wäldchen S, Lehmann J, Klein T, Van De Linde S, Sauer M 2015 *Sci. Rep.* **5** 1
- [39] Hell S W, Kroug M 1995 *Appl. Phys. B* **60** 495
- [40] Bretschneider S, Eggeling C, Hell S W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 218103
- [41] Göttfert F, Pleiner T, Heine J, Westphal V, Görlich D, Sahl S J, Hell S W 2017 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **114** 2125

- [42] Heine J, Reuss M, Harke B, D'Este E, Sahl S J, Hell S W 2017 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **114** 9797
- [43] Kuang C F, Li S, Liu W, Hao X, Gu Z T, Wang Y F, Ge J H, Li H F, Liu X 2013 *Sci. Rep.* **3** 1441
- [44] Huang B R, Wu Q S, Peng X Y, Yao L Q, Peng D F, Zhan Q Q 2018 *Nanoscale* **10** 21025
- [45] Moeyaert B, Dedecker P 2014 *Photoswitching Proteins: Methods and Protocols*(New York: Humana Press) p261
- [46] Grotjohann T, Testa I, Leutenegger M, Bock H, Urban N T, Lavoie-Cardinal F, Willig K I, Eggeling C, Jakobs S, Hell S W 2011 *Nature* **478** 204
- [47] Wang N, Kobayashi T 2014 *Opt. Express* **22** 28819
- [48] Wang N, Kobayashi T 2015 *Opt. Express* **23** 13704
- [49] Zhao G Y, Kuang C F, Ding Z H, Liu X 2016 *Opt. Express* **24** 23596
- [50] Hell S W, Jakobs S, Kastrop L 2003 *Appl. Phys. A* **77** 859
- [51] Sharma R, Singh M, Sharma R 2020 *Spectrochim. Acta Part A* **231** 117715
- [52] Grotjohann T, Testa I, Reuss M, Brakemann T, Eggeling C, Hell S W, Jakobs S 2012 *Elife* **1** e00248
- [53] Balzarotti F, Eilers Y, Gwosch K C, Gynnå A H, Westphal V, Stefani F D, Elf J, Hell S W 2017 *Science* **355** 606
- [54] Gwosch K C, Pape J K, Balzarotti F, Hoess P, Ellenberg J, Ries J, Hell S W 2020 *Nat. Methods* **17** 217
- [55] Weber M, von der Emde H, Leutenegger M, Gunkel P, Sambandan S, Khan T A, Keller-Findeisen J, Cordes V C, Hell S W 2023 *Nat. Biotechnol.* **41** 569
- [56] Wu R T, Zhan Q Q, Liu H C, Wen X Y, Wang B J, He S L 2015 *Opt. Express* **23** 32401
- [57] Zhan Q Q, Liu H C, Wang B J, Wu Q S, Pu R, Zhou C, Huang B R, Peng X Y, Ågren H, He S L 2017 *Nat. Commun.* **8** 1058
- [58] Liu Y J, Lu Y Q, Yang X S, Zheng X L, Wen S H, Wang F, Vidal X, Zhao J B, Liu D M, Zhou Z G, Ma C S, Zhou J J, Piper J A, Xi P, Jin D Y 2017 *Nature* **543** 229
- [59] Guo X, Pu R, Zhu Z M, Qiao S Q, Liang Y S, Huang B R, Liu H C, Labrador-Páez L, Kostiv U, Zhao P, Wu Q S, Widengren J, Zhan Q Q 2022 *Nat. Commun.* **13** 2843
- [60] Pu R, Zhan Q Q, Peng X Y, Liu S Y, Guo X, Liang L L, Qin X, Zhao Z W, Liu X 2022 *Nat. Commun.* **13** 6636
- [61] Liang Y S, Zhu Z M, Qiao S Q, Guo X, Pu R, Tang H, Liu H C, Dong H, Peng T T, Sun L-D, Widengren J, Zhan Q Q 2022 *Nat. Nanotechnol.* **17** 524
- [62] Wu Q S, Huang B R, Peng X Y, He S L, Zhan Q Q 2017 *Opt. Express* **25** 30885
- [63] Chen C C, Wang F, Wen S H, Su Q P, Wu M C, Liu Y T, Wang B M, Li D, Shan X C, Kianinia M, Aharonovich I, Toth I, Jackson M S, Xi P, Jin D Y 2018 *Nat. Commun.* **9** 3290
- [64] Denkova D, Ploschner M, Das M, Parker L M, Zheng X, Lu Y, Orth A, Packer N H, Piper J A 2019 *Nat. Commun.* **10** 3695
- [65] Lee C, Xu E Z, Liu Y, Teitelboim A, Yao K, Fernandez-Bravo A, Kotulska A M, Nam S H, Suh Y D, Bednarkiewicz A 2021 *Nature* **589** 230
- [66] Klar T A, Jakobs S, Dyba M, Egner A, Hell S W 2000 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **97** 8206
- [67] Harke B, Ullal C K, Keller J, Hell S W 2008 *Nano Lett.* **8** 1309
- [68] Gould T J, Burke D, Bewersdorf J, Booth M J 2012 *Opt. Express* **20** 20998
- [69] Lenz M O, Sinclair H G, Savell A, Clegg J H, Brown A C, Davis D M, Dunsby C, Neil M A, French P M 2013 *J. Biophotonics* **1** 29
- [70] Schmidt R, Wurm C A, Jakobs S, Engelhardt J, Egner A, Hell S W 2008 *Nat. Methods* **5** 539
- [71] Chmyrov A, Keller J, Grotjohann T, Ratz M, d'Este E, Jakobs S, Eggeling C, Hell S W 2013 *Nat. Methods* **10** 737
- [72] Böhm U, Hell S W, Schmidt R 2016 *Nat. Commun.* **7** 10504
- [73] Hao X, Allgeyer E S, Lee D R, Antonello J, Watters K, Gerdes J A, Schroeder L K, Bottanelli F, Zhao J, Kidd P 2021 *Nat. Methods* **18** 688
- [74] Staudt T, Engler A, Rittweger E, Harke B, Engelhardt J, Hell S W 2011 *Opt. Express* **19** 5644
- [75] Dreier J, Castello M, Coceano G, Cáceres R, Plastino J, Vicidomini G, Testa I 2019 *Nat. Commun.* **10** 556
- [76] Alvelid J, Damenti M, Sgattoni C, Testa I 2022 *Nat. Methods* **19** 1268
- [77] Bingen P, Reuss M, Engelhardt J, Hell S W 2011 *Opt. Express* **19** 23716
- [78] Hofmann M, Eggeling C, Jakobs S, Hell S W 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **102** 17565
- [79] Brakemann T, Stiel A C, Weber G, Andresen M, Testa I, Grotjohann T, Leutenegger M, Plessmann U, Urlaub H, Eggeling C 2011 *Nat. Biotechnol.* **29** 942
- [80] Bergermann F, Alber L, Sahl S J, Engelhardt J, Hell S W 2015 *Opt. Express* **23** 211
- [81] Boden A, Pennacchietti F, Coceano G, Damenti M, Ratz M, Testa I 2021 *Nat. Biotechnol.* **39** 609
- [82] Wang H D, Rivenson Y, Jin Y Y, Wei Z S, Gao R, Günaydin H, Bentolila L A, Kural C, Ozcan A 2019 *Nat. Methods* **16** 103
- [83] Li M, Shan H, Pryshchep S, Lopez M M, Wang G 2020 *J. Nanophotonics* **14** 016009
- [84] Chen J J, Sasaki H, Lai H Y, Su Y J, Liu J M, Wu Y C, Zhovmer A, Combs C A, Rey-Suarez I, Chang H Y, Huang C C, Li X S, Guo M, Nizambad S, Upadhyaya A, Lee S J, Lucas L A, Shroff H 2021 *Nat. Methods* **18** 678
- [85] Ebrahimi V, Stephan T, Kim J, Carravilla P, Eggeling C, Jakobs S, Han K Y 2023 *bioRxiv* 2023.01. 26.525571
- [86] Matthews T E, Piletic I R, Selim M A, Simpson M J, Warren W S 2011 *Sci. Transl. Med.* **3** 71ra15
- [87] Simpson M J, Wilson J W, Robles F E, Dall C P, Glass K, Simon J D, Warren W S 2014 *J. Phys. Chem. A* **118** 993
- [88] Simpson M J, Wilson J W, Phipps M A, Robles F E, Selim M A, Warren W S 2013 *J. Invest. Dermatol.* **133** 1822
- [89] Massaro E S, Hill A H, Grumstrup E M 2016 *ACS Photonics* **3** 501

Advances in high spatiotemporal resolution fluorescence microscopic imaging technique based on point scanning*

Pan Bin-Xiong^{1) #} Gong Cheng^{1) #} Zhang Peng¹⁾ Liu Zi-Ye¹⁾
 Pi Peng-Jian¹⁾ Chen Wang¹⁾ Huang Wen-Qiang²⁾
 Wang Bao-Ju^{1) †} Zhan Qiu-Qiang^{1) ‡}

1) (*South China Academy of Advanced Optoelectronics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

(Received 1 June 2023; revised manuscript received 23 August 2023)

Abstract

Laser point-scanning fluorescence microscopy serves as an indispensable tool in the life science research, owing to its merits of excellent resolution, high sensitivity, remarkable specificity, three-dimensional optical-sectioning capability, and dynamic imaging. However, conventional laser point-scanning fluorescence microscopy confronts a series of challenges in the rapidly evolving field of life sciences, because of the limitations imposed by optical diffraction and point scanning detection. Over the past two decades, substantial advancements have been made in super-resolution fluorescence microscopic imaging techniques. Researchers have developed various high spatial and temporal resolution point-scanning microtechniques, which hold great significance for biological optical imaging and other relevant applications. Regrettably, there are still few review articles covering the recent progress of this field. It is essential to provide a comprehensive review of laser point-scanning fluorescence microscopic techniques for their future developments and trends. In this article, the basic principles and recent advances in different point-scanning fluorescence microscopy imaging techniques are introduced from the perspectives of temporal resolution and spatial resolution, and the progress and applications of high spatio-temporal resolution microscopic imaging techniques based on point-scanning mode are summarized. Finally, the development trends and challenges of high spatio-temporal resolution point scanning fluorescence microscopic imaging technique are discussed.

Keywords: laser-scanning confocal microscopy, super-resolution microscopy, fluorescence microscopy, spatio-temporal resolution

PACS: 42.40.Lx, 42.15.Eq, 87.64.M-, 87.64.mk

DOI: 10.7498/aps.72.20230912

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62335008, 62122028, 11974123, 62105106), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2023B1515040018, 2022A1515011395), the Basic and Applied Basic Research Foundation of Guangzhou, China (Grant No. 202201010376), and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant Nos. 2021M691089, 2023T160237).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: baoju.wang@m.scnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhanqiuqiang@m.scnu.edu.cn



基于点扫描的高时空分辨荧光显微成像技术进展

潘彬雄 弓晟 张鹏 刘子叶 皮彭健 陈旺 黄文强 王保举 詹求强

Advances in high spatiotemporal resolution fluorescence microscopic imaging technique based on point scanning

Pan Bin-Xiong Gong Cheng Zhang Peng Liu Zi-Ye Pi Peng-Jian Chen Wang Huang Wen-Qiang
Wang Bao-Ju Zhan Qiu-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204201 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230912

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230912>

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

基于数字微镜器件的数字线扫描荧光显微成像技术

Digital line scanning fluorescence microscopy based on digital micromirror device

物理学报. 2020, 69(23): 238701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200908>

受激辐射损耗超分辨显微成像系统研究的新进展

New advances in the research of stimulated emission depletion super-resolution microscopy

物理学报. 2020, 69(10): 108702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200168>

生成对抗网络加速超分辨率超声定位显微成像方法研究

Accelerating super-resolution ultrasound localization microscopy using generative adversarial net

物理学报. 2022, 71(22): 224301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220954>

基于分形谐振器的远场超分辨率扫描成像

Far-field super-resolution scanning imaging based on fractal resonator

物理学报. 2019, 68(24): 244102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190620>

基于深紫外激光-光发射电子显微技术的高分辨率磁畴成像

High resolution imaging based on photo-emission electron microscopy excited by deep ultraviolet laser

物理学报. 2020, 69(9): 096801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200083>

平场复用多焦点结构光照明超分辨显微成像

Flat-field multiplexed multifocal structured illumination super-resolution microscopy

物理学报. 2022, 71(4): 048704 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211712>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

偏振光声成像技术的研究与发展*

刘劼^{1) #} 陈伟^{2) #} 杨秋琳²⁾ 穆根²⁾ 高昊²⁾申滔²⁾ 杨思华²⁾ 张振辉^{2) †}

1) (华南师范大学信息光电子科技学院, 广州 510006)

2) (华南师范大学生物光子学研究院, 激光生命科学教育部重点实验室, 广州 510631)

(2023 年 5 月 31 日收到; 2023 年 7 月 19 日收到修改稿)

生命体是一个高度有序化的结合体, 细胞和组织的基本生物过程本质上受生物分子构象和排列的控制, 其中生物分子的排列有序度、取向、螺旋和折叠等特征与生物组织的生理功能密切相关. 偏振成像可以获取生命体或材料的微观排列结构, 取向和手性等构象信息, 在材料学检测, 生物影像领域得到了广泛的应用, 但其成像深度和解析偏振信息等方面存在困难. 光声成像以电磁波为激发源, 以超声为载体传递信息, 成为一种结合光学高对比度和超声深穿透性的无损成像方式, 利用扩散光子激发目标并检测由此产生的声响应可以打破光学扩散极限的限制. 近年来一种偏振光声成像技术作为偏振光学成像的补充, 在保证成像深度的同时可以获取介质的三维偏振信息, 为组织的偏振测量提供了一种有效而直接的策略, 预示着在生物成像和材料检测两方面的巨大潜力. 本文总结了偏振光声成像技术的发展, 首先阐明了偏振光声成像的物理原理和技术方法, 随后从生物组织成像和纳米材料检测两个应用领域展开介绍了偏振光声显微成像、偏振光声计算层析成像和偏振光声纳米材料分子成像的相关研究进展, 并且简要论述了偏振光在组织中传播时因颗粒尺寸、密度、排列等因素产生的退偏情况, 最后展望了偏振光声成像的应用前景.

关键词: 各向异性, 分子取向, 手性, 偏振光声成像**PACS:** 42.50.Nn, 81.10.-h, 33.15.Bh, 78.20.pa**DOI:** 10.7498/aps.72.20230900

1 引言

生物医学影像领域起始于 1895 年德国物理学家威廉·伦琴发现 X 射线^[1], 此后的一个世纪里得到了迅速的发展. 在现代生物医学中, 影像技术为科学家提供了可视化的手段用以揭示生物体内部的复杂结构以及动态的生理过程, 在临床上影像技术进一步辅助了医生对病灶区域的医疗诊断, 在基础研究上, 生物医学影像为我们提供了用于探究生物体微观层面生理机制的有利手段. 影像技术主要

分为临床类及基础研究类型, 前者主要包括磁共振成像^[2]、X 射线计算机层析成像^[3]、超声成像^[4]、光学相干层析成像^[5]和基于光学方法的内窥镜检查等, 后者则主要囊括共聚焦、多光子、偏振光、超分辨荧光显微镜^[6,7]、电子显微镜、质谱成像、荧光层析成像、生物发光、光声成像等多种光学显微镜成像技术^[8-10].

生物体是由生物分子有序组装而成的复杂系统, 其分子取向、排列、螺旋和折叠等特征决定了生物组织的功能和性能. 例如, 大脑中的不同区域具有不同的构象, 与其神经活动密切相关^[11]; 皮肤

* 国家自然科学基金 (批准号: 12304483, 62335007)、广东省自然科学基金 (批准号: 2022A1515010548) 和广州市科技计划 (批准号: 2019050001, 202206010094) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: zzh@scnu.edu.cn

和心肌中的胶原纤维具有一定的方向性, 与其力学特性密切相关^[12]; 细胞分裂时微管、DNA 等分子的有序排列和组合, 与其遗传信息表达与传递密切相关. 生物体结构的有序性是生命现象的基础, 一旦发生异常, 往往导致疾病的产生. 例如, 肿瘤细胞基质中胶原纤维的含量和有序性与肿瘤的侵袭性密切相关^[13]; 神经退行性疾病和动脉粥样硬化中出现的淀粉样斑块, 其分子具有明显的各向异性特征^[14,15]; 此外, 肝纤维化、心肌坏死等疾病都伴随着组织结构各向异性的改变^[16]. 因此, 监测生物体结构有序性的动态变化对于揭示生物发育规律和实现疾病早期诊断具有重要意义.

光是一种电磁波, 其具有 4 个基本的特性: 强度、波长、相位和偏振. 偏振是光的矢量特性, 它反映了光的振动方向, 用于研究揭示介质中的矢量信息. 偏振光学成像技术是一种利用偏振光与介质相互作用来探测介质微观结构特征的方法. 这种方法可以利用入射偏振光与介质中亚波长尺度的各向异性结构 (如散射粒子) 产生的退极化效应, 来获取介质的光学性质和结构信息. 然而, 在生物医学应用中, 偏振光学成像技术还面临着很多挑战, 因为光在生物组织传播存在较强的散射^[17], 这会导致信号的衰减和退极化, 限制了成像深度和分辨率, 增加了数据分析的复杂度. 例如: 偏光显微镜和偏振相干拉曼散射成像只能对薄切片或透明培养细胞进行成像^[18]; 穆勒矩阵成像技术虽然可以快速获取块状样品表面或内部的结构信息, 但它是将一定厚度的样品视为一个二维传输矩阵, 在深度方向上不能区分不同层次的结构特征; 偏振荧光成像虽然可以利用荧光标记物来增强信号和选择性, 但是荧光标记物靶向分子存在非刚性和不均匀性, 并且还可能对生物分子产生毒性或干扰作用^[19]. 因此, 需要发展新的成像技术, 能够以清晰、灵敏、可量化的参数来描述深层介质中微观结构的各向异性特征, 实现在体三维、高对比度、多信息成像生物组织.

光声成像技术 (PA) 是一种利用光致超声现象进行生物医学成像的方法, 其发展始于 1880 年 Alexander Graham Bell 的光声效应的发现^[20]. 20 世纪末, 光声成像技术随着激光器和高灵敏度的声学传感器的出现而得到快速的推进, 其在生物医学影像领域表现出了巨大的潜力. 光声成像技术的原理是, 当组织受到电磁波的辐射时, 基态的电子会

跃迁到激发态, 然后通过非辐射跃迁的方式释放热量导致组织温度升高, 使组织发生热弹性膨胀效应产生压力波, 其在 2—3 个波长范围内会衰减消失^[21], 但同时伴随产生的超声波会传播到组织表面被探测器捕获, 最后通过算法重建反演出组织内部的吸收或弹性信息. 光声成像技术将光转化为光声信号 (即声波) 在成像深度上有所突破. 声波是一种机械波, 其在生物组织的散射程度远低于相同传播距离下光的散射程度 (2—3 个数量级), 同时声波在生物组织中的传播速度远小于电磁波^[22], 因此光声成像技术与传统光学成像相比具有更深的检测深度和三维体成像能力, 与传统声学成像技术如超声成像相比, 具有高分辨率高对比度的优势^[23–25]. 在临床医学和生物医学影像领域上填补了“超声看不清, 光学看不深”的临床检测空白. 近年来, 光声成像技术迅速发展, 根据成像方式的不同可以分为光声计算层析成像^[26]、光声显微成像和光声内窥成像^[27–29]; 根据检测参数的不同可以分为光声吸收成像^[24,29,30]、光声血氧、血流、氧代谢成像^[31,32]、光声弹性成像^[33,34]、光声非线性参数成像^[21,35] (如图 1 所示).

之上的光声成像技术通常将生物组织的吸收系数视为各向同性, 即视为标量, 丢失了各向异性生物分子与偏振光相互作用的特征信息. 基于分子对光的矢量吸收, 一种偏振光声成像近几年被提出并快速发展, 其继承了光声成像的三维深层成像能力和偏振光学相应的各向异性组分分析能力, 可以对组织深层偏振信息进行提取并无标记表征其相关分子构象的特征. 本文将从偏振光声成像的原理, 技术发展两个方面阐述该技术的发展历程.

2 偏振光声成像原理

当入射光照射分子或发色团时, 从基态 $|\varphi_a\rangle$ 到激发态 $|\varphi_b\rangle$ 的量子跃迁过程是电磁波与分子的电、磁偶极跃迁矩之间的共振耦合. 分子的空间固定跃迁偶极矩 (TDMs) 是电跃迁偶极矩 (ETDM) $U^{ab} = \langle \varphi_a | \hat{u} | \varphi_b \rangle$ 和磁跃迁偶极矩 (MTDM) $M^{ab} = \langle \varphi_a | \hat{m} | \varphi_b \rangle$ 的组合, 这里的 \hat{u} 和 \hat{m} 分别为电偶极子和磁偶极子. 电子的跃迁概率一方面取决于电磁波的频率是否等于跃迁偶极矩的振荡频率, 另一方面取决于跃迁偶极矩与电矢量 \mathbf{E} 、磁矢量 \mathbf{B} 之间的夹角. 引入分子与电磁波电场 \mathbf{E} 和磁场 \mathbf{B} 之间相互作用的

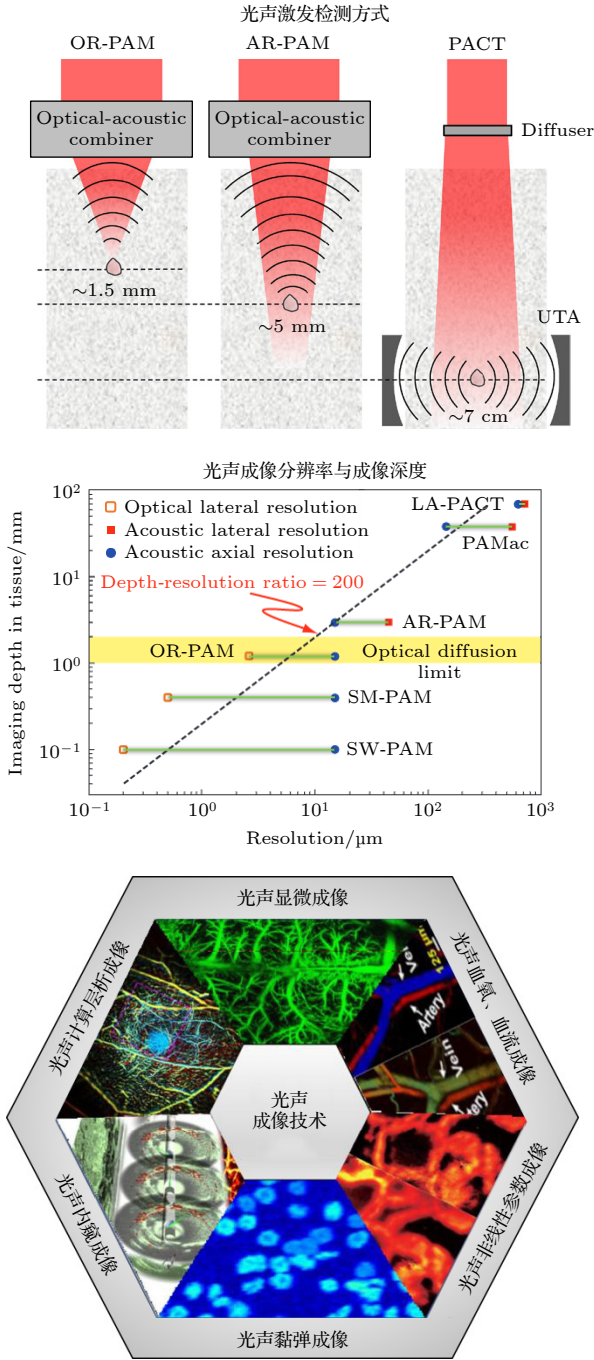


图 1 光声成像技术概述 [24,26–28,34,36–38]

Fig. 1. Schematic diagram of the photoacoustic imaging [24,26–28,34,36–38].

哈密顿算符 $\hat{H} = -\hat{u} \cdot \mathbf{E} - \hat{m} \cdot \mathbf{B}$, 并合理地忽略高阶相互作用项, 根据量子力学中的费米黄金法则, 发色团的光吸收强度可以表达为 [39]

$$\begin{aligned}
 & w_{\alpha} (|\varphi_a\rangle \rightarrow |\varphi_b\rangle) \\
 &= \gamma (\mathbf{U}^{ab*} \cdot \hat{\mathbf{E}}^* \mathbf{U}^{ab} \cdot \hat{\mathbf{E}} + \mathbf{M}^{ab*} \cdot \hat{\mathbf{B}}^* \mathbf{M}^{ab} \cdot \hat{\mathbf{B}} \\
 &+ \mathbf{U}^{ab*} \cdot \hat{\mathbf{E}}^* \mathbf{M}^{ab} \cdot \hat{\mathbf{B}} + \mathbf{U}^{ab} \cdot \hat{\mathbf{E}} \mathbf{M}^{ab*} \cdot \hat{\mathbf{B}}^*), \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中, \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 分别为电场强度和磁感应强度, \hat{e} , \hat{b} 分别是沿 \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 方向的单位向量, $\hat{\mathbf{E}} = \mathbf{E} \cdot \hat{e}$, $\hat{\mathbf{B}} = \mathbf{B} \cdot \hat{b}$, γ 是特定的分子常数. 非螺旋结构的分子或无手性的发色团在线性偏振光照射下其磁偶极矩与电磁波的相互作用可以忽略, 此时发色团的光吸收主要由电跃迁偶极矩贡献. 在这种情况下, 等式 (1) 右侧的第 2 项、第 3 项和第 4 项可以忽略. 如图 2(a) 所示, 展现了单个分子的矢量吸收模型, 其中单个分子 (或单个生色团) 的跃迁电偶极矩 \mathbf{U} 具有特定的方向, 当发色团与线偏振光相互作用时, 光吸收概率与电矢量和跃迁偶极矩之间的夹角 θ 相关:

$$w_{\alpha}(\theta) = \gamma |\mathbf{U}^{ab} \cdot \mathbf{E}|^2 = \gamma |\mathbf{U}^{ab}|^2 \cdot \mathbf{E}^2 \cos^2(\theta). \quad (2)$$

等式 (2) 表明吸收概率与角度 θ 之间满足余弦平方的函数关系, 当入射光的电矢量方向与电跃迁偶极矩方向一致时, 电子吸收光子发生跃迁的概率最大 [40], 如图 2(b) 所示. 而对于光的电矢量方向垂直于电跃迁偶极矩方向时, 则情况相反, 此时吸收概率最小. 电子吸收概率受到角度 θ 的调制, 并且单分子跃迁偶极矩取向的摆动角 $\Delta\theta_n$ 越小调制程度越大, 即分子结构的各向异性越明显, $\Delta\theta_n$ 等于 180° , 代表此分子对光的吸收特征为各向同性. 另一方面, 具有手性的光学活性分子或发色团与圆偏振光相互作用时, 电磁感应电荷同时产生线性电荷位移和电荷旋转, 即一个光学活性跃迁实际上将有一个允许的电跃迁偶极矩 (即线性电荷位移) 和一个允许的磁跃迁偶极矩 (电荷旋转). 分子的圆二向色性与所谓的旋转强度有关 [41], 旋转强度 $R_0 = I_m(\langle \varphi_a | \hat{u} | \varphi_b \rangle \cdot \langle \varphi_b | \hat{m} | \varphi_a \rangle)$ 是电跃迁偶极矩和磁跃迁偶极矩点乘的虚数部分.

根据 (1) 式通过左右偏振矢量 \hat{e}_L 和 \hat{e}_R 得到左右圆偏振光的吸收差即圆二色性 (CD) 为

$$\begin{aligned}
 w_{\alpha\text{-CD}} &= 2\gamma (\mathbf{U}^{ab*} \cdot \hat{\mathbf{E}}_L^* \mathbf{M}^{ab} \cdot \hat{\mathbf{B}}_L \\
 &- \mathbf{U}^{ab*} \cdot \hat{\mathbf{E}}_R^* \mathbf{M}^{ab} \cdot \hat{\mathbf{B}}_R^*), \quad (3)
 \end{aligned}$$

其中 $\hat{\mathbf{E}}_{L,R} = \mathbf{E} \cdot \hat{e}_{L,R}$, $\hat{\mathbf{B}}_{L,R} = \mathbf{B} \cdot \hat{b}_{L,R}$. 由 (3) 式所示, 对于手性分子或发色团, 如蛋白质二级结构和 DNA, 左旋圆偏振光激发和右旋圆偏振光激发可以观察到明显的光吸收差异, 如图 2(c) 所示. 得益于光声成像独特的 3D 光学吸收映射能力, 将偏振光激发与光声效应相互结合, 从而通过检测脉冲偏振激光激发产生的光声幅值来呈现光学各向异性

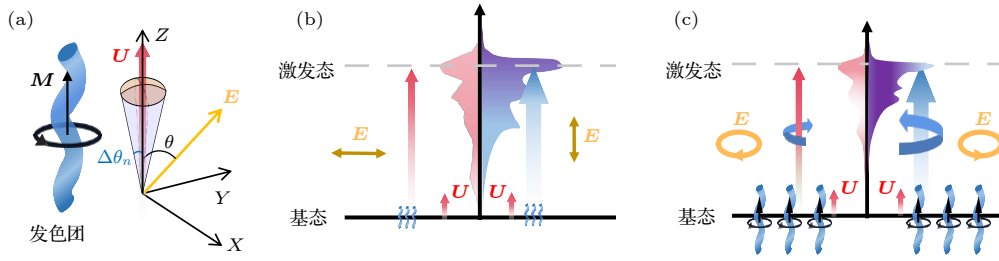


图2 分子矢量吸收原理示意 (a) 单个发色团各向异性吸收示意图, E , U 和 M 分别为入射光的电矢量, 发色团的电跃迁偶极矩 (ETDM) 和磁跃迁偶极矩 (MTDM), θ 为 E 与 U 之间的夹角, $\Delta\theta_n$ 为单分子跃迁偶极矩取向的摆动范围; (b), (c) 分别表示线偏振光和圆偏振光激发各向异性分子的电子能级跃迁示意图

Fig. 2. Schematic of molecular vector absorption principle: (a) Schematic diagram of anisotropic absorption of a single chromophore, E , U and M are the electric vector of incident light, the electric transition dipole moment (ETDM) and the magnetic transition dipole moment (MTDM) of the chromophore, respectively, and θ is the angle between E and U , $\Delta\theta_n$ is the swing range of the single molecule transition dipole moment orientation; (b), (c) schematic diagrams of electronic energy level transitions of anisotropic molecules excited by linearly polarized light and circularly polarized light, respectively.

分子的矢量吸收特征信息, 根据光声理论, 光声信号振幅可以写成:

$$P = \eta_{\text{th}} I_0 \Gamma \mu_{\alpha} (|\phi_a\rangle \rightarrow |\phi_b\rangle), \quad (4)$$

式中, η_{th} , Γ 和 I_0 分别表示光热转换效率、Grüneisen 参数和局部光通量. $\mu_{\alpha} (|\phi_a\rangle \rightarrow |\phi_b\rangle)$ 表示吸收系数, 它满足如下公式:

$$w_{\alpha} = \mu_{\alpha} (|\phi_a\rangle \rightarrow |\phi_b\rangle) \cdot I(\mathbf{E}, \mathbf{B}). \quad (5)$$

通过考虑线偏振光与单轴分子的相互作用, $\mu_{\alpha} (|\phi_a\rangle \rightarrow |\phi_b\rangle)$ 可以表示为

$$\mu_{\alpha} (|\phi_a\rangle \rightarrow |\phi_b\rangle) = \gamma |\overline{U}^{\text{ab}}|^2. \quad (6)$$

进一步分析在激发光照射范围内存在多个分子吸收体的情况, 如图3所示, 这时跃迁电偶极矩 \overline{U} 是多个分子跃迁电偶极矩 U_n 的矢量和, 即 $\overline{U} = \sum_n U_n$, 跃迁电偶极矩 \overline{U} 的分布具有一个弥散角 $\Delta\theta$. 当激光照射范围内分子取向一致的情况下 $\Delta\theta$ 越小, 表现出更强的各向异性吸收特性, 当分子取向有序度越差时 $\Delta\theta$ 越大, 则各向异性吸收特性越弱. 为了研究激发区域内多个分子的线二向色性, 分别定义了平行跃迁偶极矩矢量 i 和垂直跃迁偶极矩矢量 j . U_n 表示单个分子的跃迁偶极矩, 所以平行和垂直方向的平均跃迁偶极矩可以表示为^[42]

$$\overline{U}_{\parallel} = \sum_n U_n \cdot i = \sum_n U_n \cdot \cos(\Delta\theta_n), \quad (7)$$

$$\overline{U}_{\perp} = \sum_n U_n \cdot j = \sum_n U_n \cdot \sin(\Delta\theta_n), \quad (8)$$

其中, 使用 μ_{\parallel} , μ_{\perp} 分别表示平行跃迁偶极矩方向和垂直跃迁偶极矩方向上的光吸收系数, 因此, μ_{\parallel} ,

μ_{\perp} 可以分别表示为

$$\mu_{\parallel} = |\overline{U}_{\parallel}|^2 = \sum_n U_n^2 \cos^2(\Delta\theta_n),$$

$$\mu_{\perp} = |\overline{U}_{\perp}|^2 = \sum_n U_n^2 \sin^2(\Delta\theta_n). \quad (9)$$

则 (4) 式可以表示为^[43,44]

$$\text{PA}(\theta) = \eta_{\text{th}} I_0 \Gamma \left[\frac{\mu_{\parallel} + \mu_{\perp}}{2} + \frac{\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}}{2} \cos(2\theta) \right]. \quad (10)$$

3 偏振光声成像技术的发展与分类

偏振光声成像技术 2012 年首次被提出后沉寂了一段时间^[45], 直到 2018 年 Lihong V. Wang 团队和华南师范大学邢达/杨思华团队^[43,44] 针对偏振光声的采集方式和提取参数进行了开拓式的研究, 分别提出了偏振光声计算层析成像和定量式偏振光声显微成像技术, 之后的几年该技术得到了光声成像领域的重视, 相继有香港城市大学王立代团队和香港理工大学赖溥祥团队^[46] 合作, 于 2019 年提出了一种光纤延时的偏振光声成像系统, 实现了单次扫描即可重建偏振光声图像; 2021 年, 中国科学院深圳先进技术研究院刘成波团队^[47,48] 发展了一种手持偏振光声探测成像方法, 演示了大视野量化各向异性生物组织结构; 2021 年, 华盛顿大学的 Song Hu 团队^[49] 发表了利用刚果红染色实现了偏振光声技术可视化脑中淀粉样蛋白的研究; 2022 年, 北京协和医学院杨军团队^[50] 报道了偏振光声成像三维量化分子排列各向异性度结果, 同年华南师范大学杨思华/邢达团队提出了光声

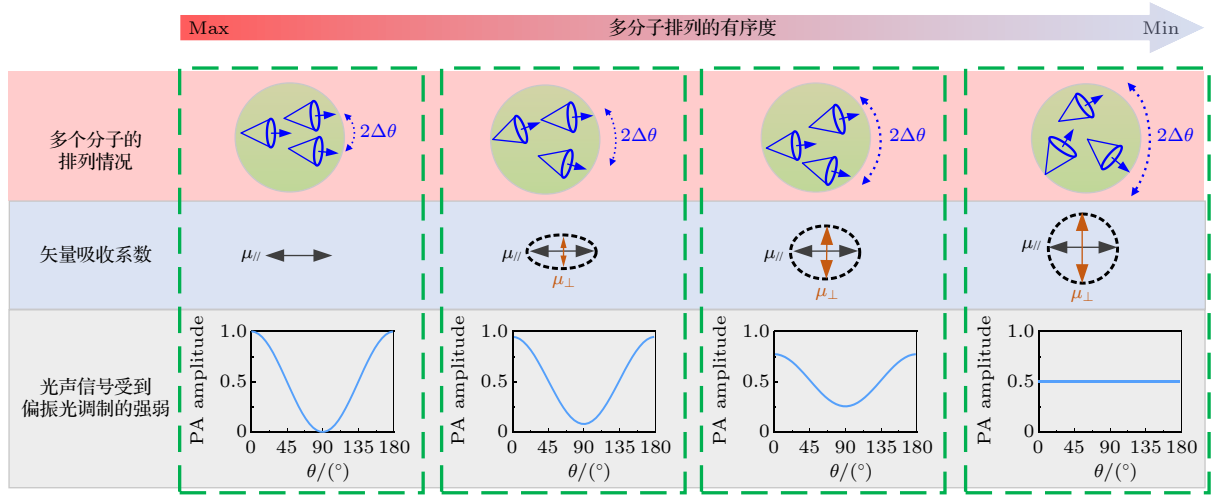


图 3 光激发范围内多个跃迁电偶极矩分布示意图, $\Delta\theta$ 代表平均跃迁电偶极矩弥散角度, $\Delta\theta$ 越大代表多分子排列有序度越小^[42]
 Fig. 3. The schematic diagram of the distribution of multiple transition electric dipole moments in the photoexcitation range, where $\Delta\theta$ represents the average diffusion angle of the transition electric dipole moment, and the larger $\Delta\theta$ represents the smaller order of the multiple molecules^[42].

穆勒矩阵成像技术^[39], 建立了单分子矢量吸收模型, 实现了同时量化各向异性度、分子取向和分子手性的能力; 此外, 苏州大学的刘庄团队^[51]也开展了关于无背景磁控偏振光声分子成像的相关研究. 2023年, 华南师范大学张振辉/石玉娇团队^[42]再次演示了偏振光声成像定量识别胶原纤维各向异性度用于精准评估皮肤烧伤程度的工作, 同时提出了角分辨偏振光声显微镜, 用于二维材料晶轴取向的识别^[52]; 韩国 Chulhong Kim 团队^[53]针对偏振光声成像准确提取分子取向进行了详细的研究, 理论得出最少需要 3 束偏振态不同的激发光重建出分子的取向, 实际成像中 4—6 束偏振态不同的激发光能更准确反演分子取向; 偏振光声成像技术的进展的历程如图 4 所示.

偏振光声成像能特异性地检测生物分子或材料的构象、排列信息, 使其在生物组织成像和纳米材料检测两个领域具有应用潜力, 本文将从生物成像和纳米材料检测两个方面介绍偏振光声技术的最新发展.

3.1 偏振光声技术-各向异性生物组织成像

3.1.1 偏振光声显微成像

2012年, Lihong V. Wang 团队^[45]首次提出了一种基于偏振光声技术的线二向色性光声显微镜系统, 在其实验光路的搭建中, 利用半波片 (HWP) 以及偏振分束器 (PBS) 实现了两束正交偏振光的

生成, 两束激光经光电调制器 (EOM) 的调制后实现了两束激光的能量和延时调控, 对阿尔兹海默症小鼠脑组织切片进行了成像. 基于淀粉样蛋白的线二向色性特征并结合刚果红对淀粉样蛋白进行特异性标记, 以 532 nm 的脉冲激发光进行偏振光声成像, 验证了偏振光声成像能高对比提取矢量吸收物质的线二向色性特征, 结果如图 5(a)—(g) 所示. 在该工作中, 作者使用两束电矢量相互垂直的线偏振光激发样品, 分别得到水平偏振激发产生的光声信号 P_1 和垂直偏振激发产生的光声信号 P_2 , 定义线二向色性:

$$Dic = \frac{P_1 - P_2}{P_1 + P_2}. \quad (11)$$

2021年, 华盛顿大学 Song Hu 团队^[49]沿用上述偏振显微方法并结合光声血红蛋白浓度、血氧饱和度、血流成像技术针对刚果红染色后的小鼠脑进行了多参数成像, 结果如图 5(h)—(n) 所示, 该工作推动了偏振光声显微成像对活体样品的研究. 但上述两个工作, 其激发光只有 2 束电矢量正交的线偏振光, 不足以量化目标样品的线二向色性. 基于此, 2018年华南师范大学杨思华/邢达团队^[43]提出了一种斯托克斯矢量表示方式的偏振光声显微镜 (PPAM). 其原理与实验结果如图 6 所示, 该工作中作者利用 4 束电矢量相差 45°的线偏振光量化样本结构排列的各向异性度 (线二向色性). 其借用光学中用斯托克斯矢量描述激光偏振态的表示方式:

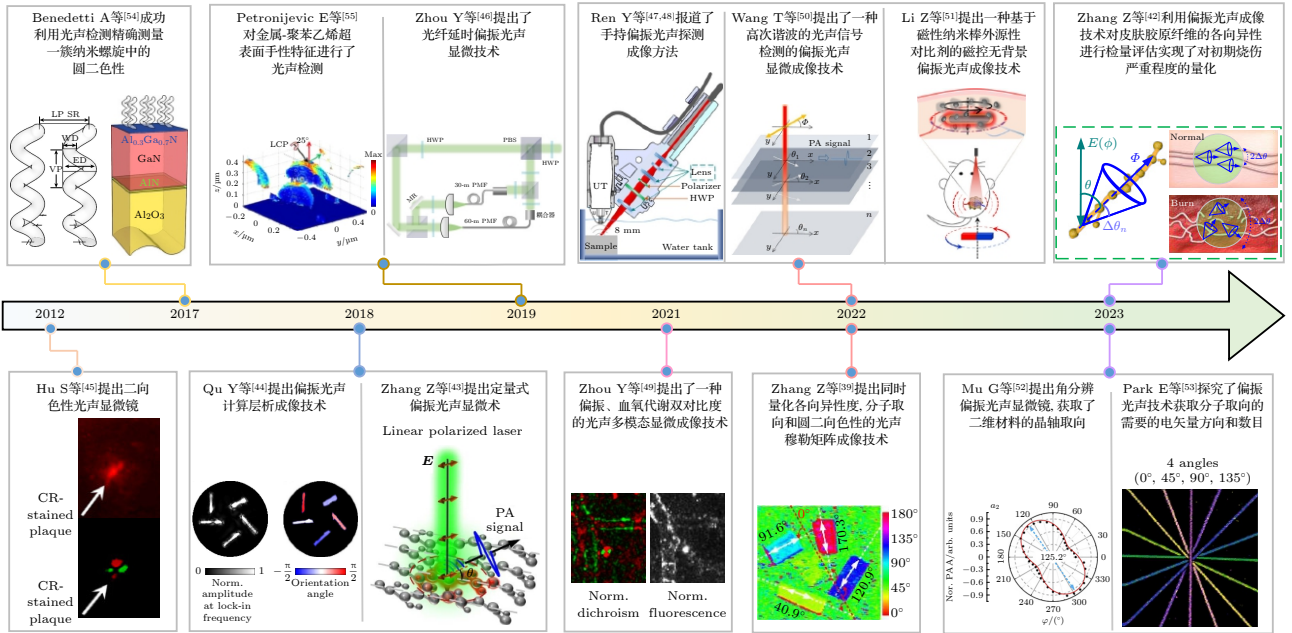


图 4 国内外偏振光声成像技术的发展

Fig. 4. Development of polarized photoacoustic imaging technology at home and abroad.

$$S = \begin{bmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_H + I_V \\ I_H - I_V \\ I_P - I_M \\ I_R - I_L \end{bmatrix}, \quad (12)$$

其中 I_H 和 I_V 分别表示为水平线偏振态以及垂直方向的线偏振光分量, I_P 和 I_M 分别表示为 45° 以及 -45° 下的线偏振光分量, I_R 和 I_L 分别表示右旋以及左旋圆偏振光分量. 描述光的线偏振度的参数可以定义为

$$DLP = \sqrt{Q^2 + U^2}/I, \quad (13)$$

由于光声信号 (即超声波) 的线偏振度的描述方式与 (1) 式和 (2) 式具有相似性, 因此生物分子的各向异性度可以被描述为

$$DOA = \sqrt{Q_{PA}^2 + U_{PA}^2}/I_{PA}, \quad (14)$$

其中, $Q_{PA} = I_{H-PA} - I_{V-PA}$, $U_{PA} = I_{P-PA} - I_{M-PA}$, $I_{PA} = I_{H-PA} + I_{V-PA}$, I_{H-PA} , I_{V-PA} , I_{P-PA} 和 I_{M-PA} 对应偏振方向分别为 0° , 90° , 45° 和 -45° 的线偏振光激发的光声信号振幅. 基于此可以通过 4 束不同偏振方向的激光实现光声信号偏振态的定量检测, 实验装置光路图如图 6 所示. 其中 DOA 本质上反映的是平行方向的光吸收系数 $\mu_{//}$ 和垂直方向的光吸收系数 μ_{\perp} 大小之间的差异, 即 $DOA = \frac{\mu_{//} - \mu_{\perp}}{\mu_{//} + \mu_{\perp}}$, 另外平均跃迁电偶极矩弥散角度 $\Delta\theta (\Delta\theta_n) \propto \sum_n \Delta\theta_n$, 则当 $DOA=1$ 时说明在光激发区域中样品的跃迁

偶极矩取向都一致, 当 $DOA=0$ 时说明光激发区域样品的跃迁偶极矩各个方向取向均匀. 平均跃迁电偶极矩弥散角度 $\Delta\theta (\Delta\theta_n) \propto \sum_n \Delta\theta_n$, 则吸收系数可以表示为 $\mu_{//} = |\bar{\mu}| \cdot \cos^2 (\Delta\theta (\Delta\theta_n))$, $\mu_{\perp} = |\bar{\mu}| \sin^2 (\Delta\theta (\Delta\theta_n))$, 参数 DOA 最后可以表示为

$$DOA = \frac{\mu_{//} - \mu_{\perp}}{\mu_{//} + \mu_{\perp}} = \cos (2\Delta\theta (\Delta\theta_n)). \quad (15)$$

实验层面, 该工作通过对两种各向异性度不同的样品聚氯乙烯 (PVA) 以及聚乙烯醇 (PVC) 在二维平面下的 DOA 成像, 证实了 DOA 参数量化样品分子排列各向异性度的能力, 实验中直观地对两种材料的各向异性度 DOA 进行量化展示. 除了在二维平面下的各向异性度检测, 作者在三维空间下基于 PPAM 对虾姑复眼各向异性进行检测. 实验中展示了 PPAM 对虾姑复眼的三维空间下的偏振光声成像图, 其中在深度 $0.4-1.0$ mm 处的 R1-7 细胞 DOA 较高, 此外实验进一步分别在 460 , 520 以及 580 μm 的深度下对 R1-7 的各向异性度进行了量化的检测. 结果在 3 种不同深度下的 R1-7 细胞所展示的 DOA 存在差异, 这一结果在过去非定量检测的偏振光声显微镜中是难以实现的. 相比传统光学偏振显微镜, 定量检测的偏振光声显微镜提高了活体成像的深度. 相比非定量检测的偏振光声显微镜技术, 其对各向异性度的量化能够提供更多的生物组织信息, 同时使各类生物组织各向异性

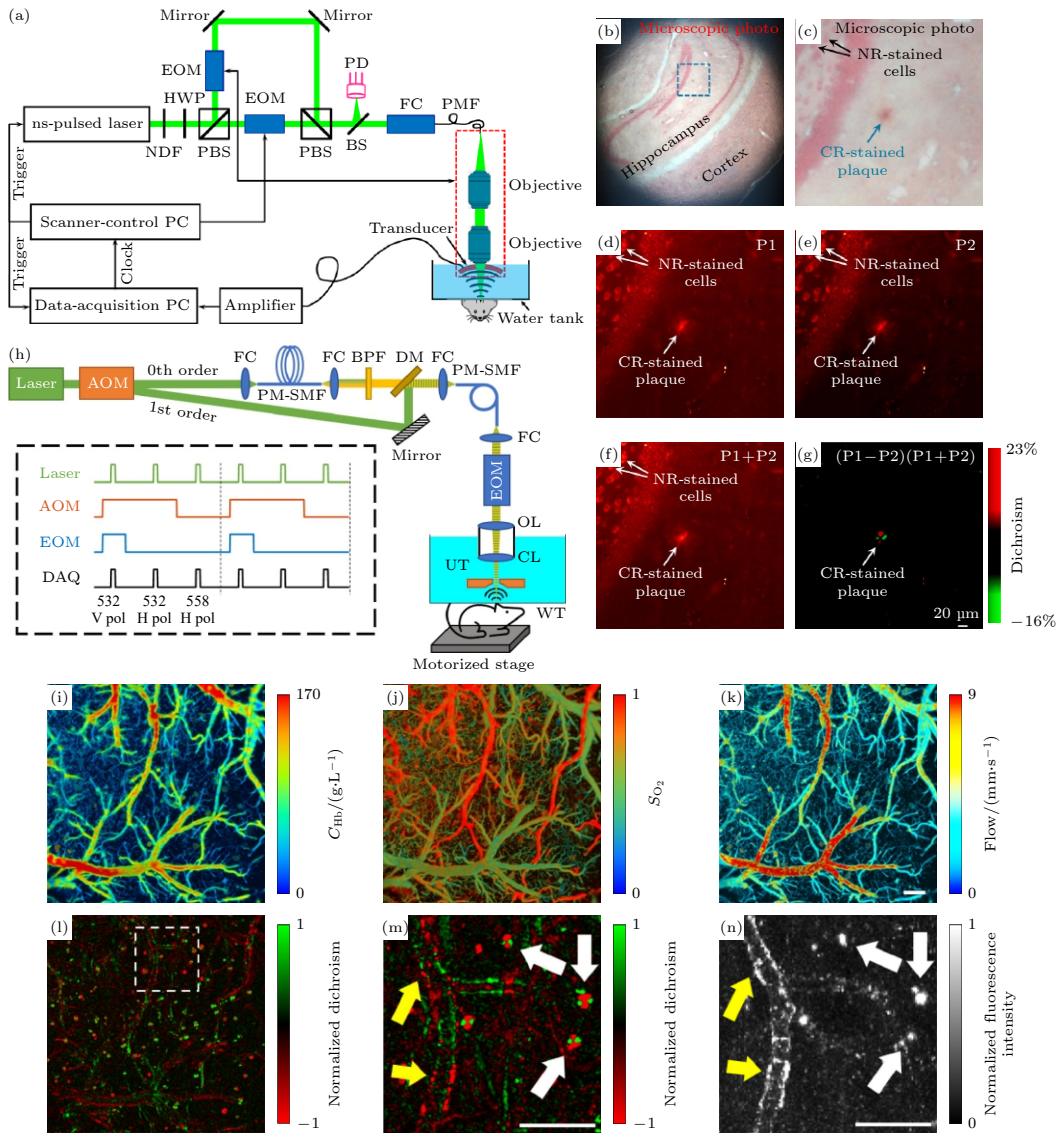


图5 线二向色性光学分辨率光声显微镜及实验结果^[45,49] (a) 线二向色性光学分辨率光声显微镜 (DOR-PAM) 系统原理图; (b) 脑切片的光学显微镜照片, 用刚果红 (CR) 和中性红 (NR) 双染色 APP/PS1 小鼠脑切片; (c) 图 (b) 中蓝色区域的放大图和箭头分别表示 CR 染色的淀粉样斑块和 NR 染色的背景细胞; (d), (e) 在两种正交偏振光照射下获得的 DOR-PAM 图像; (f), (g) 分别为图 (d) 和图 (e) 的总和和差值, 图 (g) 中的差异检测消除了非二向色背景, 并突出了淀粉样斑块的线二向色性对比; (h) 二向色性-血氧血流多参数双对比 PAM 原理图, 框内插图给出了为同时二向色性和多参数 PAM 成像设计的激光激励方案, 其中 AOM 为声光调制器, FC 为光纤耦合器, PM-SMF 为保偏单模光纤, BPF 为带通滤波器, DM 为二向镜, EOM 为电光调制器, OL 为物镜, CL 为矫正镜, UT 为超声波换能器, WT 为水箱, DAQ 为数据采集, 水平/垂直极化; (i)–(k) 10 月龄的小鼠活体脑多参数 PAM 图像, 包括活体鼠脑血红蛋白的总浓度 (C_{Hb})、血红蛋白氧饱和度 (s_{O_2}) 和血流成像; (l) 二向色性 PAM 图像显示刚果红 (CR) 染色的淀粉样斑块和血管壁沉积物的分布; (m) 图 (l) 中矩形框区域放大图; (n) 图 (l) 中矩形框区域共聚焦图像, 比例尺为 200 μm

Fig. 5. The DOR-PAM system and experimental results^[45,49]: (a) Schematic of the DOR-PAM system; (b) optical microscopic photo of the brain section; (c) close-up of the boxed area in Fig.(b), the blue and black arrows indicate the CR-stained amyloid plaque and the NR-stained background cells, respectively; (d), (e) the DOR-PAM images acquired with each of the two orthogonal polarized optical irradiations, respectively; (f), (g) the summation and subtraction of Fig.(d) and Fig.(e), respectively, the differential detection in Fig.(f) eliminates the non-dichroic background and highlights the dichroic contrast of the amyloid plaque; (h) schematic of dual-contrast PAM, the boxed inset illustrates the laser excitation scheme designed for simultaneous dichroism and multi-parametric PAM, where AOM is the acousto-optic modulator; FC is the fiber coupler, PM-SMF is the polarization-maintaining single-mode optical fiber, BPF is the bandpass filter, DM is the dichroic mirror, EOM is the electro-optic modulator, OL is the objective lens, CL is the correction lens; UT is the ultrasonic transducer, WT is the water tank, DAQ is the data acquisition, H/V pol, horizontal/vertical polarization; (i)–(k) multi-parametric PAM images of a 10-month-old APP/PS1 mouse brain in vivo, including the C_{Hb} , s_{O_2} , and blood flow speed; (l) dichroism PAM image showing the distribution of CR stained amyloid plaques and deposits in the vessel wall; (m) close-up of the boxed area in Fig.(l); (n) confocal image of the boxed area in Fig.(l). Scale bars: 200 μm .

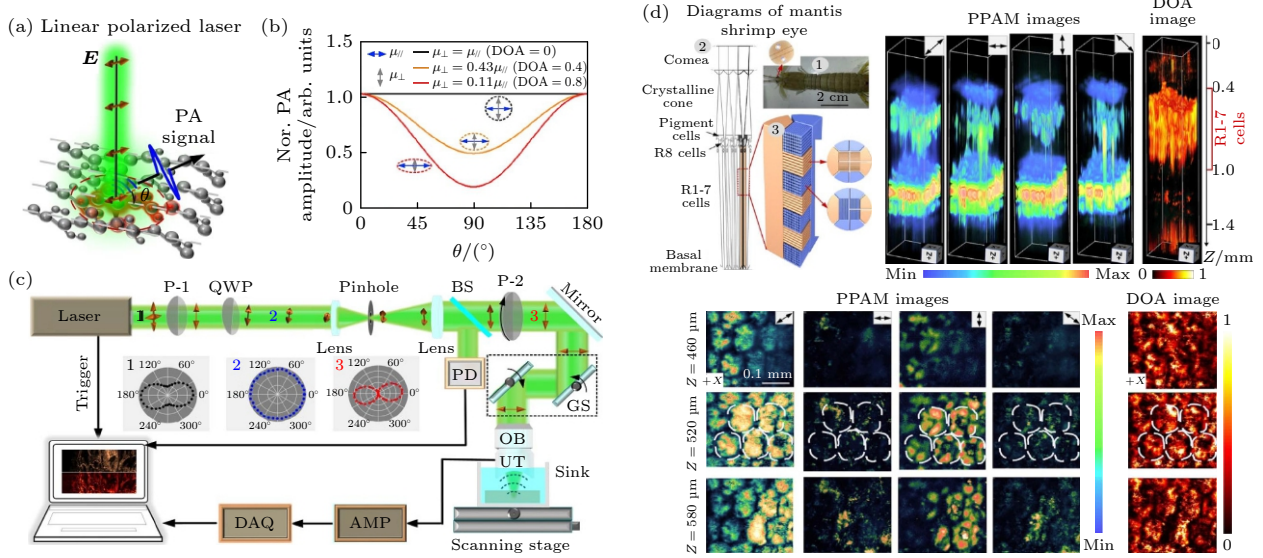


图 6 定量式偏振光声显微镜的原理装置和实验结果^[43] (a) 分子矢量吸收原理示意; (b) DOA 值与偏振光声信号调制强度的关联; (c) PPAM 装置图; (d) PPAM 三维成像螳螂复眼的各向异性特征

Fig. 6. Theoretical setup and experimental results of a quantitative polarized photoacoustic microscopy (PPAM)^[43]: (a) Schematic diagram of molecular vector absorption principle; (b) the correlation between the DOA value and the modulation intensity of polarized photoacoustic signals; (c) PPAM device diagram; (d) the anisotropic characteristics of the compound eyes of praying mantis and shrimp in PPAM three-dimensional imaging.

特征得到更精确的表征.

基于上述工作原理, 科研工作者们又相继提出了更精确的各向异性提取方法, 分子取向重建原理并完善发展了偏振扫描系统. Wang 等^[50] 提出了一种高次谐波的光声信号检测的偏振光声显微成像技术, 偏振光声显微镜, 使用高次谐波方法能够在二维和三维空间下同时适用, 克服了上述定量式偏振光声无法在三维成像中量化各向异性 and 检测光轴的取向. 该工作中分析了激光穿过多层各向异性物质的情况, 既定 $1/2$ 波片的旋转频率为 f , 则第一层各向异性物质产生的光声信号交流部分 (矢量吸收导致的光声信号) 的振荡频率等于 $2f$, 而由于第一层各向异性吸收的影响使得第二层的激光通量不再保持不变, 而是一个满足振荡频率为 $2f$ 的参量, 所以第二层各向异性吸收导致的光声信号的振荡频率将变为 $4f$, 以此类推于激光穿越到 n 层各向异性物质将会产生对应的频率为 $2nf$ 的高频振荡信号. 因此, 频率 $2nf$ 的缺失可以用来区分第 n 层的各向异性和各向同性物体, 另外通过高次谐波的初始相位可以用来检测 n 层的光轴, 并通过

其强度来表征第 n 层的各向异性. 为了验证提出的方法, 实验通过设计的双重聚焦型偏振光声显微镜分别在 2D 和 3D 各向异性体模上进行成像, 其结果如图 7 所示, A, B, C, D, E 是在 3 个各向异性样品的不同位置上选择的 5 个代表性像素. A, D, E 分别是第 1 层、第 2 层和第 3 层各向异性样品上的非重叠区域中选择的. B 和 C 分别来自第 2 层和第 3 层线性偏振器上的重叠区域.

在偏振光声系统和分子取向提取方面, 香港城市大学王立代团队和香港理工大学赖溥祥团队^[46] 合作提出了一种基于保偏光纤和激光分束的线性偏振光声显微镜成像技术. 该实验的实验光路中初始激光经过两个偏振分束器以及半波片将激光分为三束偏振态不同的激光, 这种由同一束激光分离出的激光具有很高的同步性, 能够有效降低激光的能量波动, 提高成像质量. 这项技术通过 3 束偏振角分别为 0° , 45° , 90° 的激光同时入射在样品上产生光声信号, 来提取 DOA 参数, 简化了激发光的数量, 并成功提取了分子排列取向的分布, 其实验装置和结果如图 8 所示. 分子取向方位角 θ :

$$\theta = \frac{1}{2} \arccos \left\{ \frac{p(\theta, 0^\circ) - p(\theta, 90^\circ)}{\left\{ 2 \times [(p(\theta, 0^\circ) - p(\theta, 45^\circ))^2 + (p(\theta, 90^\circ) - p(\theta, 45^\circ))^2] \right\}^{1/2}} \right\}. \quad (16)$$

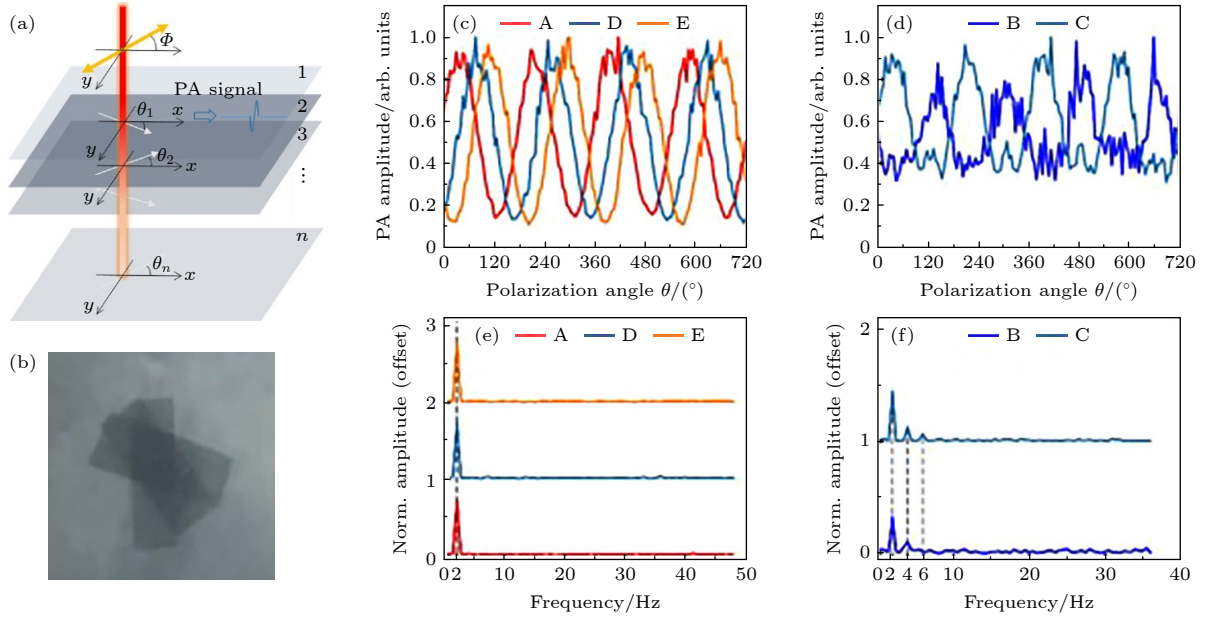


图 7 高次谐波的偏振光声信号检测技术和实验结果^[50] (a) 线性偏振激光在不同层产生的光声信号, 黄色箭头表示激光的电矢量方向, 白色箭头表示光轴的方向; (b) 三维各向异性样品照片; (c) 在非重叠区域的归一化光声振幅; (d) 在重叠区域的归一化光声振幅; (e) 在非重叠区域的归一化光声信号振荡的频域分布; (f) 重叠区域的归一化光声信号振荡的频域分布

Fig. 7. High order harmonic polarized photoacoustic signal detection technology and experimental results^[50]: (a) Photoacoustic signal generated by the linearly polarized laser at different layers, the yellow arrow indicates the polarization angle of the laser, and the white arrow indicates the orientation of the optical axis; (b) 3D anisotropy phantom; (c) normalized photoacoustic amplitude at the non-overlapping area; (d) normalized photoacoustic amplitude at the overlapping area; (e) spectrum of the normalized photoacoustic amplitude at the non-overlapping area; (f) spectrum of the normalized photoacoustic amplitude at the overlapping area.

通过 (16) 式计算出的分子取向角度范围为 -45° — 45° , 而不是 -90° — 90° (或 0° — 180°), 这是由关于 0° 中心对称的数据引起的数据简并, 这源于光声信号幅度的标量特性, 因此, 两个取向相互垂直的分子不能被区分。

从单分子跃迁偶极矩物理模型出发通过斯托克斯矢量的表示方法, Zhang 等^[39]再次提出了光声穆勒矩阵成像的概念, 并解决了分子取向简并的问题, 实现了 0 — 180° 分子取向成像. 为完整表征各向异性分子矢量吸收特征, 该工作中引入 6 束偏振态分别为 0° , 90° , 45° 和 -45° 线偏振光和左、右旋圆偏振光作为激励光束, 并将样品视为三维光学吸收矩阵. 与将样品块视为二维光传输矩阵的光学穆勒矩阵不同, 所提出的偏振光声矩阵成像技术能够提供具有明确物理意义的样品内在偏振特性的三维解析成像. 在偏振光声矩阵成像理论模型中, 6 束激发光的极化状态可以被描述为斯托克斯矢量 $\mathbf{S}_{\text{Laser}} = (S_0 \ S_1 \ S_2 \ S_3)^T$, 通过依次激发样品得到不同偏振激光束下产生的光声信号幅值, 偏振光声矩阵可以表示为

$$\mathbf{S}_{\text{PA}} = \mathbf{M}_{\text{PA}} \cdot \mathbf{S}_{\text{Laser}}, \quad (17)$$

其中 \mathbf{S}_{PA} 和 \mathbf{M}_{PA} 分别表示偏振光声矩阵和样品的光吸收矩阵, \mathbf{M}_{PA} 包含了样品完备的吸收特征, 通过计算可以表示为

$$\mathbf{M}_{\text{PA}} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

结果表明, \mathbf{M}_{PA} 的第 1 行表示受激分子在不同偏振光束下的确切吸收信息.

$$\begin{aligned} & (M_{11} \ M_{12} \ M_{13} \ M_{14}) \\ & = \left(\frac{\text{PA}_H + \text{PA}_V}{2} \ \frac{\text{PA}_H - \text{PA}_V}{2} \ \frac{\text{PA}_P - \text{PA}_M}{2} \ \frac{\text{PA}_R - \text{PA}_L}{2} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

其中, PA_H , PA_V , PA_P , PA_M , PA_R , PA_L 分别表示偏振态为 0° , 90° , 45° , -45° 的线偏振激光, 右旋和左旋圆偏振激光激发产生的光声信号振幅. 根据 (19) 式, 可以定义一个反映分子总吸收的参数:

$$\text{PA} = 2M_{11}. \quad (20)$$

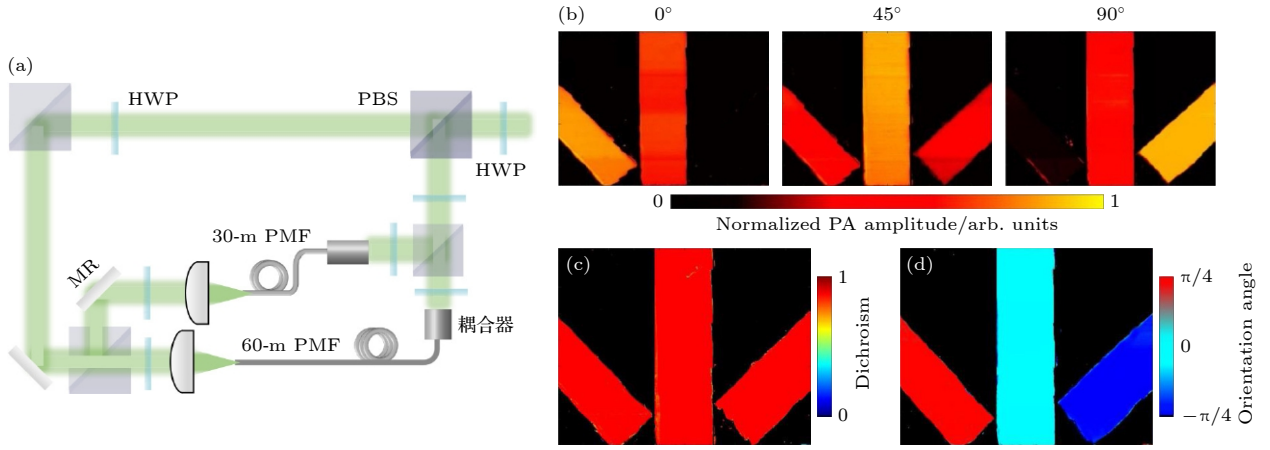


图 8 光纤延时单次扫描的偏振光声技术^[46] (a) 光纤延时线二向色性系统示意图; (b) 电矢量方向为 0° 、 45° 和 90° 的三束线偏振光分别激发得到的光声图像; (c), (d) 计算得到的线二向色性图像和分子取向图像

Fig. 8. Polarized photoacoustic technology for fiber delay single scan^[46]: (a) Schematic of the dual-fiber single-shot dichroism OR-PAM system; WT, water tank; (b) PA images of three linear polarizers excited with polarized light at 0° , 45° , and 90° ; (c), (d) calculated dichroism image and polarization angle of the three linear polarizers.

分子或分子集团的有序度变化反映了它们之间的相互作用、结构和功能的特性. 本项目从 M_{PA} 提取了定量反映组织中分子排列有序程度的各向异性度 (degree of anisotropy, DOA):

$$DOA = \frac{\sqrt{M_{11}^2 + M_{13}^2}}{M_{11}}. \quad (21)$$

DOA 的范围为 $0-1$. 当 $DOA=1$ 时, 光吸收是完全各向异性的, 表明所有受激分子的跃迁偶极矩一致. 在这种情况下, 可以观察到相应的光声信号幅值随激发激光束偏振态的明显变化. 当分子随机分布时, $DOA=0$, 对应的光声信号幅度不会随线偏振激发的偏振角发生变化. 进一步地, 受激发分子的跃迁偶极矩 (OTDM) 取向也可以通过矩阵 M_{PA} 巧妙地得到:

$$OTDM = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{M_{13}}{M_{12}} \right). \quad (22)$$

根据 (22) 式计算出的 OTDM 角度范围为 $-45^\circ-45^\circ$, 如图 9(a) 的 I 区域所示, 而不是 $-90^\circ-90^\circ$ (或 $0^\circ-180^\circ$), 这是由关于 0° 中心对称的数据引起的数据简并, 这源于光声信号幅度的标量特性, 因此, 图 9(a) 所示的 U_1 和 U_2 两个方向

相互垂直的跃迁偶极矩不能被区分. 为了提高分辨率跃迁偶极矩的范围, 通过 PA_V 和 PA_H 之间的关系识别 OTDM 取向的象限, 若 $PA_V > PA_H$ 时, 则 OTDM 应该出现在 $45^\circ-135^\circ$ 的象限内, 故在原始 OTDM 补偿 90° , 将 OTDM 的取向范围角度从 $-45^\circ-45^\circ$ 扩展到 $-45^\circ-135^\circ$, 如图 9(c), (d) 所示. 最后, 将所有角度增大 45° , 以实现 $0^\circ-180^\circ$ 的 OTDM 成像.

除了分子的空间排列信息外, 手性也是自然界和生命中分子最基本的特征之一. 表征分子手性的圆二色性也可以通过矩阵 M_{PA} 计算得到:

$$CD = \left| \frac{M_{14}}{M_{11}} \right|. \quad (23)$$

因此, 通过建立矢量吸收矩阵偏振光声成像理论模型, 该工作获取生物组织中分子各向异性度 DOA、分子空间取向 OTDM 及反映分子手性 CD 三个定量参数表征分子构象. 之后该课题组还利用 DOA 参数量化了烧伤初始时刻的皮肤中胶原纤维的有序性, 实现对烧伤严重程度的准确评估^[42]. Park 等^[53] 针对偏振光声成像准确提取分子取向进行详细的研究, 得到分子取向的数学表达式:

$$\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left(\frac{\frac{1}{N_a} \sum_i \frac{p(\theta, \phi_a(i)) - p(\theta, \pi - \phi_a(i))}{\sin 2\phi_a(i)}}{\frac{1}{N_b} \sum_j \frac{p(\theta, \phi_b(j)) - p(\theta, \pi/2 - \phi_b(j))}{\cos 2\phi_b(j)}} \right), \quad (24)$$

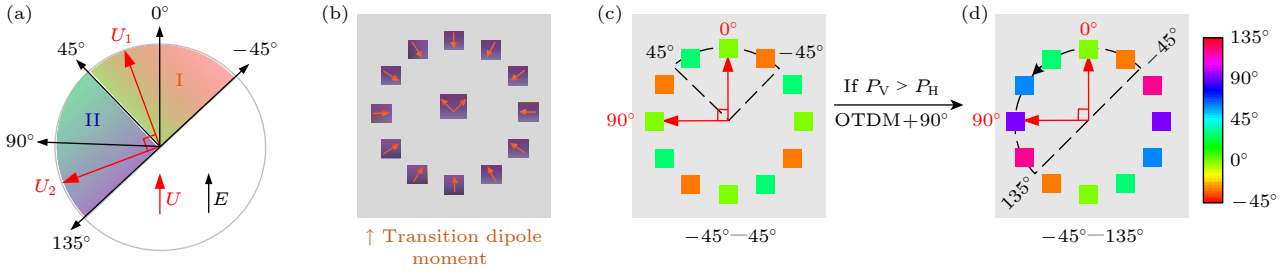


图 9 实现 0—180° 分子跃迁偶极矩取向^[39] (a) OTDM 分布示意图, E 和 U 分别为入射光的电矢量和电跃迁偶极矩; (b) 计算机模拟的虚拟样品 OTDM 分布设置示意图, 这些样品的 DOA 值都设置为 1; (c) 根据 (21) 式计算模拟得到的 OTDM 成像结果; (d) 消除简并效应后得到的 OTDM 成像结果

Fig. 9. Measurement of 0—180° molecular transition dipole moment orientation^[39]: (a) OTDM distribution diagram, E and U are the electric vector and electric transition dipole moment of incident light respectively; (b) schematic diagram of OTDM distribution settings for virtual samples simulated by computer, with DOA values set to 1 for these samples; (c) calculate the simulated OTDM imaging results according to Eq. (21); (d) the OTDM imaging results obtained after eliminating the degeneracy effect.

其中, N 为下标对应的偏振光声信号的个数, i 和 j 为信号的元素指标. 当 $\phi_a = \phi_b$ 时, 求解分子取向角的线性偏振光束的最小数目为 3 个, 例如, 30°, 60° 和 150°. 此外, 来自生物组织的 PA 信号通常较弱, 容易受到环境信号或干扰的影响, 考虑到生物组织的弱各向异性吸收特征实际成像中 4—6 束偏振态不同的激发光能更准确反演分子取向, 其结果如图 10 所示.

基于偏振光声显微成像技术提取样品各向异性、分子取向和手性特征的原理和方法已经被证实, 相信随着偏振光声显微系统的完善, 偏振光声提供的生物组织各向异性特征参数将在多种疾病病理研究和早期诊断发挥作用.

3.1.2 偏振光声计算机层析成像技术

传统光声断层扫描技术与光声显微镜及光声内窥镜相比发展时间最早^[9], 相较于光声显微镜, 光声层析扫描在实验装置上主要的不同在光路末尾的透镜以及传感器的排列, 光声显微镜在光路末尾通常采用凸透镜聚焦光束, 提高局部小区域的成像对比度, 光声计算层析成像在光路末尾通常采用凹透镜实现光束扩束, 提高成像范围. 在传感器的设计上, 光声显微镜由于成像区域较小, 对超声传感器数量上的要求相对较低, 相反对于传感器的性能参数有较高的要求; 光声断层扫描成像由于成像范围大, 使用一个传感器的接收范围无法完全覆盖, 因此多个传感器的不同排列使光声断层扫描成像拥有更多的可能.

2018 年, 基于偏振光声成像, Lihong V. Wang 团队^[44]提出了对各向异性敏感的偏振光声计算层

析成像技术 (DS-PACT). 相比传统的光声计算层析成像, 偏振光声计算层析成像实现了对样品各向异性程度和分子取向的检测. 实验中, 传感器的排列沿样本在半径 5 cm 处呈环状分布, 这种环状的传感器阵列中的元件呈弧形, 使成像平面上产生了 19.8 mm 的轴向焦距. 实验装置如图 11(a) 所示.

后续实验中对 PVA 材料薄膜以及对离体的牛腱进行了成像检测, 证实了偏振光声计算层析成像技术能在 6 个传输平均自由程内表征生物样品的各向异性特征.

2022 年, Ren 等^[47,48]设计了一种手持的偏振光声断层扫描探头, 加速了偏振光声计算层析成像技术在临床应用领域的实际落地, 实验装置和结果如图 12 所示. 该手持探头可大致分为偏振光学系统、偏振光声信号采集系统以及整体外壳. 偏振光学系统为一系列光学镜片组成, 作为改变激光偏振态的半波片通过带有刻度可调整角度的波片架固定, 实现手动调整激光偏振态. 偏振光声信号采集系统为 128 个线阵排列的超声换能器, 实现偏振光声信号的采集. 整体外壳由 3D 打印技术打印完成, 偏振光学系统与偏振光声信号采集系统呈 45° 角组装到一起, 从而达到较好的光激发和声探测效率.

为进一步对该装置的准确性进行探究, 该团队首先对该探头的偏振光学系统进行了校验, 将激光通过偏振光学系统垂直入射于偏振测量仪上进行校验, 随后为验证偏振光声信号采集准确性, 选择具有强各向异性的聚乙烯醇式偏光片 (PVA) 和各向同性的深色塑料片 (PVC) 进行实验, 该探头在两项实验中拥有出色的表现, 展现良好的准确性. 随后团队进行仿体实验, 将 PVC 和光轴方向为 0°,

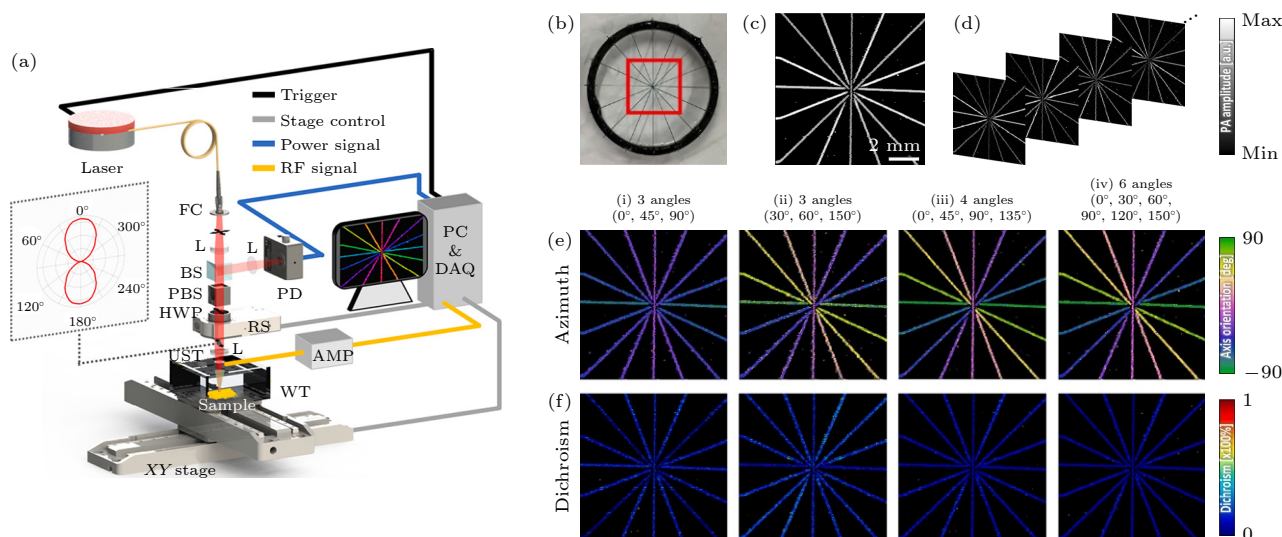


图 10 偏振光声成像分子取向的准确性与激发光电矢量数目的关联^[53] (a) 线二向色性光声显微成像系统装置示意图 (DS-PAM), 其中 FC 为光纤准直器, L 为透镜, BS 为分束器, PBS 为偏振分束器, RS 为旋转台, UST 为超声波换能器, WT 为水箱, AMP 为放大器, PD 为光电探测器, PC 为电脑, DAQ 为数据采集; (b) 交叉导线的照片; (c) 常规光声图像; (d) 根据激发光偏振状不同得到的一系列图像; (e) 分子取向方位角; (f) 线二向色性图

Fig. 10. The correlation between the accuracy of molecular orientation in polarized photoacoustic imaging and the number of excited photoelectric vectors^[53]: (a) The DS-PAM system configuration, FC is fiber collimator, L is lens, BS is beam splitter, PBS is polarizing beam splitter, RS is rotary stage, UST is ultrasonic transducer, WT is water tank, AMP is amplifier, PD is photodetector, PC is personal computer, DAQ is data acquisition; (b) photograph of crossed wires, the red box indicates the FOV for DS-PAM; (c) conventional PA MAP image; (d) series of images according to the polarization states; (e) azimuth and (f) dichroism mapping according to (i)–(iv) the number of angles applied.

45°, 90°, 135°的 PVA 浸入散射介质中检测以及对层叠的不同深度且光轴不同的 PVA 进行深度测试, 最后团队对离体牛腱进行生物组织测试. 实验结果验证了该装置具有良好的成像质量以及准确性.

偏振光声计算层析成像相比于偏振光声显微成像技术可以实现更快的采集速度, 同时避免了复杂的多束激光耦合的问题, 或由于扫描机械抖动带来系统误差, 使偏振光声成像技术推上临床成为可能, 但同时应该认识到由于偏振光声计算层析成像采用大光斑激发, 其激发区域较大, 导致产生的偏振光声信号是多个分子的共同贡献, 所以该成像模式下各向异性度的准确性会下降, 较适用于简单规则的各向异性样品的检测.

3.2 偏振光声技术-纳米材料构象特征检测

基于偏振光声技术对不同各向异性介质有特异性反映的性质, 偏振光声技术也被尝试应用于材料的性能测试. 其中手性是物体在镜像情况下不相同的一种对称性, 一个手性物体的两个镜像仅在空间排列上有所不同, 这导致它们与相反手性的圆偏振光的相互作用不同, 折射率和吸收差异分别反映

了材料的光学活性和圆二色性. 2017年, Benedetti 团队^[54]成功利用光声检测技术精确测量了纳米螺旋中的圆二色性. 由于散射和衍射干扰, 通过传统光学途径测量样本的二向色特性存在细节不足的缺点. 因此该团队尝试通过偏振光声显微镜对纳米螺旋簇的圆二向色性进行表征. 通过比较光学和光声技术, 全光测量受到高衍射效应的影响, 此外, 在样品面积减小的情况下, 空区传输阻碍了场的纯度. 光声成像技术则通过测量与螺旋结构完全相关的独立于散射的吸收来获得了样品的纯净和精确的圆二向色性特征, 其系统与结果如图 13 所示.

2019年, Petronijević团队^[55]就金属-聚苯乙烯 (SNSA) 超表面的手性特性进行偏振光声检测. 他们利用光声光谱来表征右旋和左旋圆偏振的不同吸收, 给出材料的圆二色性作为直接结果, 实验结果与数值计算结果吻合较好. 为了判断光声信号能否反应纳米结构构象特征, 团队对比测量了蒸发过程中沉积在聚苯乙烯二维阵列附近的同一基板上的平坦金属膜的光谱以及 SNSA 的光谱. 结果显示所有样品在 633 nm 处都有显著的增强的光

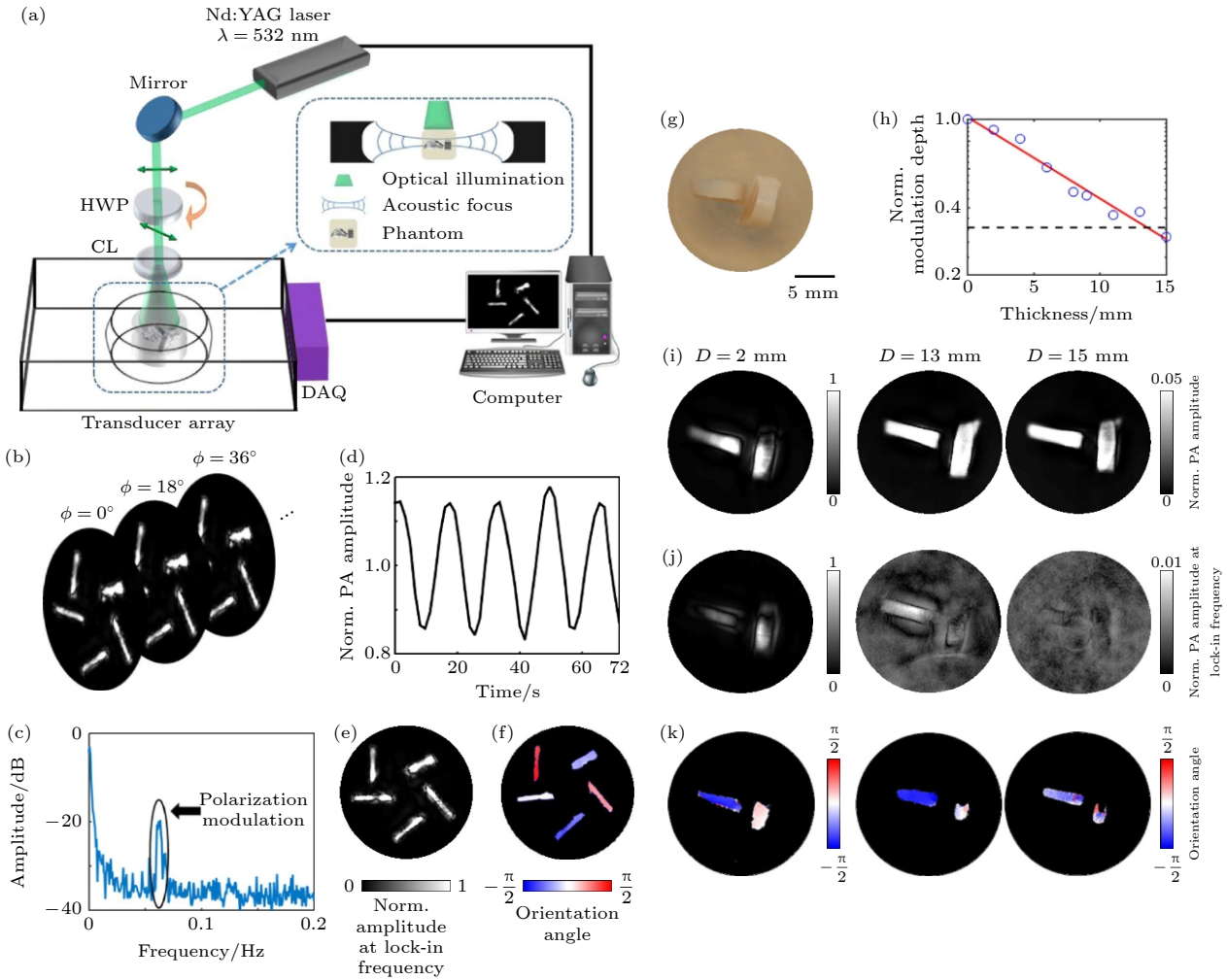


图 11 线二向色性光声计算层析成像系统与实验结果^[44] (a) 线二向色性光声计算层析成像 (DS-PACT) 装置图; (b) 以 0.625 Hz 的帧率获得常规 PACT 图像序列, 使入射光的偏振率旋转为 11.25°/s; (c) 归一化 PA 振幅的时间的函数; (d) 傅里叶光谱位于 0.0625 Hz 的峰值对应于由调制极化引起的交流光声信号; (e) 重建的 DS-PACT 图像; (f) 颜色编码的分子取向方向角度图; (g) 无散射介质的样品照片, 样品包含两块牛腱, 它们相互垂直放置; (h) PA 振幅的调制深度随着散射介质厚度 D 的变化曲线, 高达 15 mm, 红色实线表示与测量数据的指数拟合, 黑色虚线表示噪声水平; (i) 常规 PACT 图像; (j) 使用 DSPACT 的振幅图像; (k) 两块牛肌腱的方位角图

Fig. 11. Linear dichroic photoacoustic computed tomography system and experimental results^[44]: (a) Experimental setup of linear dichroism-sensitive photoacoustic computed tomography (DS-PACT); (b) a sequence of conventional PACT images is acquired at a frame rate of 0.625 Hz, rotating the polarization of the incident light at 11.25°/s; (c) normalized PA amplitude as a function of time at one representative spatial point. PA(t) is normalized with respect to its average; (d) Fourier spectrum of PA(t). The peak located at 0.0625 Hz corresponds to the alternating PA signals due to the modulated polarization; (e) DS-PACT image reconstructed by the amplitude of the lock-in term; (f) color-coded orientation angle map of the sample, which is reconstructed from the phase of the lock-in term; (g) photograph of the sample without any scattering medium. The sample contains two pieces of bovine tendon, which are placed perpendicular to each other; (h) modulation depth of the PA amplitude acquired with increasing thickness D of the scattering medium, up to 15 mm, the red solid line indicates the exponential fit to the measured data. The black dashed line represents the noise level; (i) conventional PACT images; (j) amplitude images using DSPACT; (k) orientation angle maps of the two pieces of bovine tendon.

声信号, 团队进一步选择该波长进行圆二色性表征, 实验装置和结果如图 14 所示. 作者展示了纳米球光刻结合倾斜金属沉积方法产生的超表面的手性检测方法. 应用光声技术表征了 3 种不同金属覆盖的聚苯乙烯纳米球在 633 nm 处的圆二色性 (CD), 覆盖 Au 和 Cr 的样品显示出手性行为, 而

覆盖 Ag 的样品显示出正入射的 CD, 具有本征手性特征. 通过这种优化的设计, 可以获得高效的纳米级圆偏振检测.

各向异性二维材料 (如黑磷、二硫化铼等) 因其低对称的晶格结构, 不仅表现出高迁移率和高开关比, 在光学、热学和电学等方面还具有独特的各

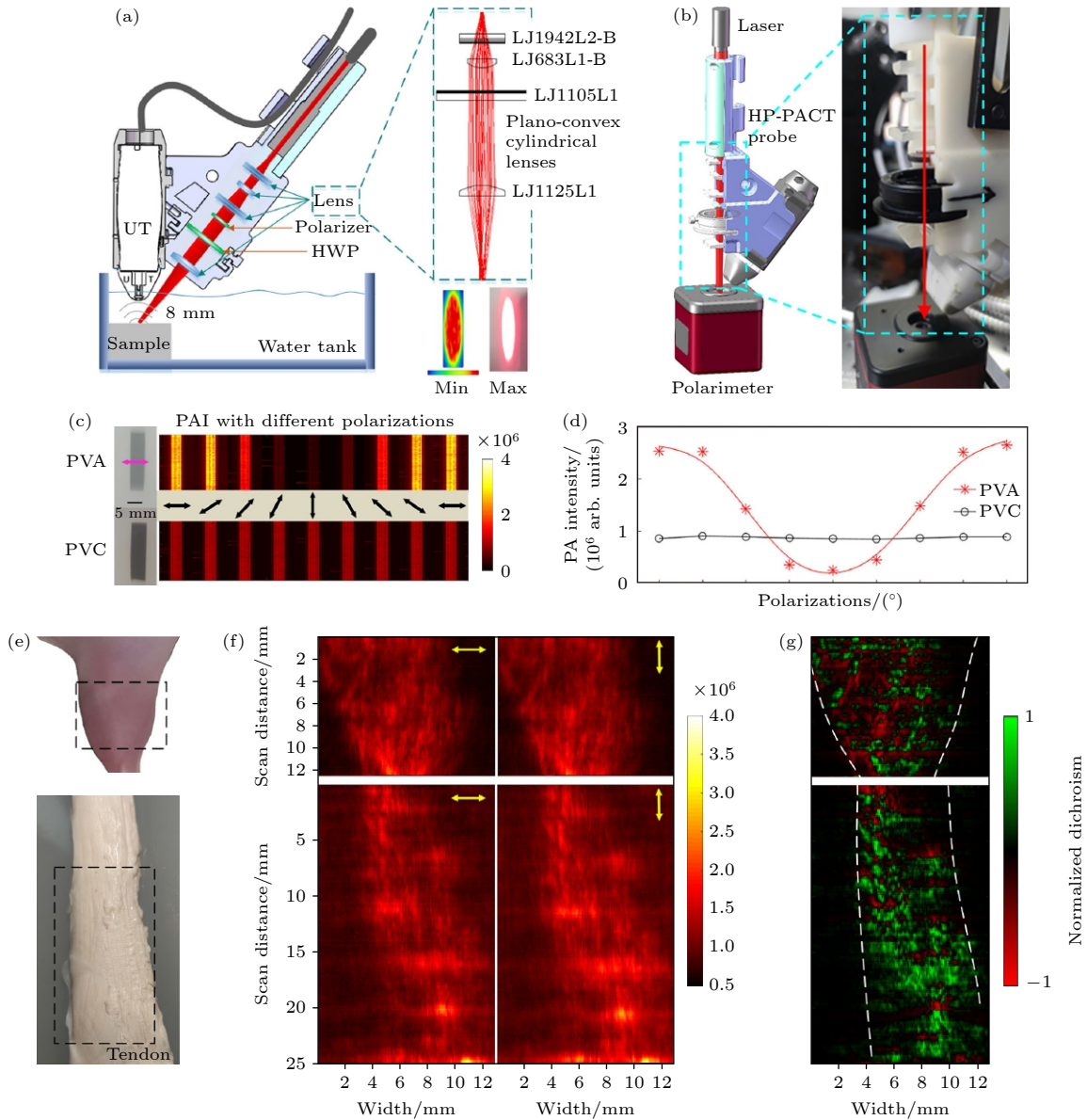


图 12 手持式偏振光声计算机断层扫描系统与结果^[47] (a) 手持式偏振光声探头装置示意, UT 为超声换能器, HWP 为半波片; (b) 校准装置的照片; (c) 不同偏振方向的 PVA 和 PVC 的光声成像; (d) PVA 和 PVC 的偏振光声信号受激发电矢量方向的调制曲线; (e) 小鼠腿 (上) 和牛肌腱 (下) 的照片; (f) 小鼠腿 (上) 和牛肌腱 (下) 的 HP-PACT 图像, 激发电矢量方向为 0° (水平) 和 90° (垂直); (g) 小鼠腿 (上) 和牛肌腱 (下) 线二向色性结果图

Fig. 12. Handheld polarized photoacoustic computed tomography system and results^[47]: (a) Handheld polarized photoacoustic probe, UT is ultrasound transducer, HWP is half wave plate; (b) photograph of the calibration setup; (c) PAI of the PVA and PVC with different polarizations; (d) modulation curve of polarized photoacoustic signals in PVA and PVC excited by photoelectric vector direction; (e) photograph of the mouse leg (upper) and bovine tendon (lower); (f) HP-PACT images of mouse leg (upper) and bovine tendon (lower) with the polarization of the excitation light being 0° (horizontal) and 90° (vertical); (g) dichroic imaging of mouse leg (upper) and bovine tendon (lower) lines.

向异性. 这些各向异性特征为新型光电器件的研发提供了额外的自由度, 可以用来开发偏振敏感光探测器、薄膜偏振器等. 而其各向异性特征及应用与晶轴取向高度相关, 目前晶轴取向的光学检测技术主要有角分辨拉曼光谱、偏振反射技术和偏振透射技术等, 其中激发波长、样品厚度以及衬底性质等均会对检测结果产生影响. 基于偏振光声原理以及各向

异性二维材料的光吸收特性, 2023 年华南师范大学石玉娇/张振辉团队^[52] 进一步发展了角分辨偏振光声显微镜, 通过分析偏振光声信号幅值与入射光偏振方向和晶轴取向之间的夹角的函数关系, 实现了对黑磷晶轴取向的通用性精准检测. 检测结果不受厚度、激发波长以及封装层影响, 其系统和不同厚度黑磷样品的晶轴取向检测结果如图 15 所示.

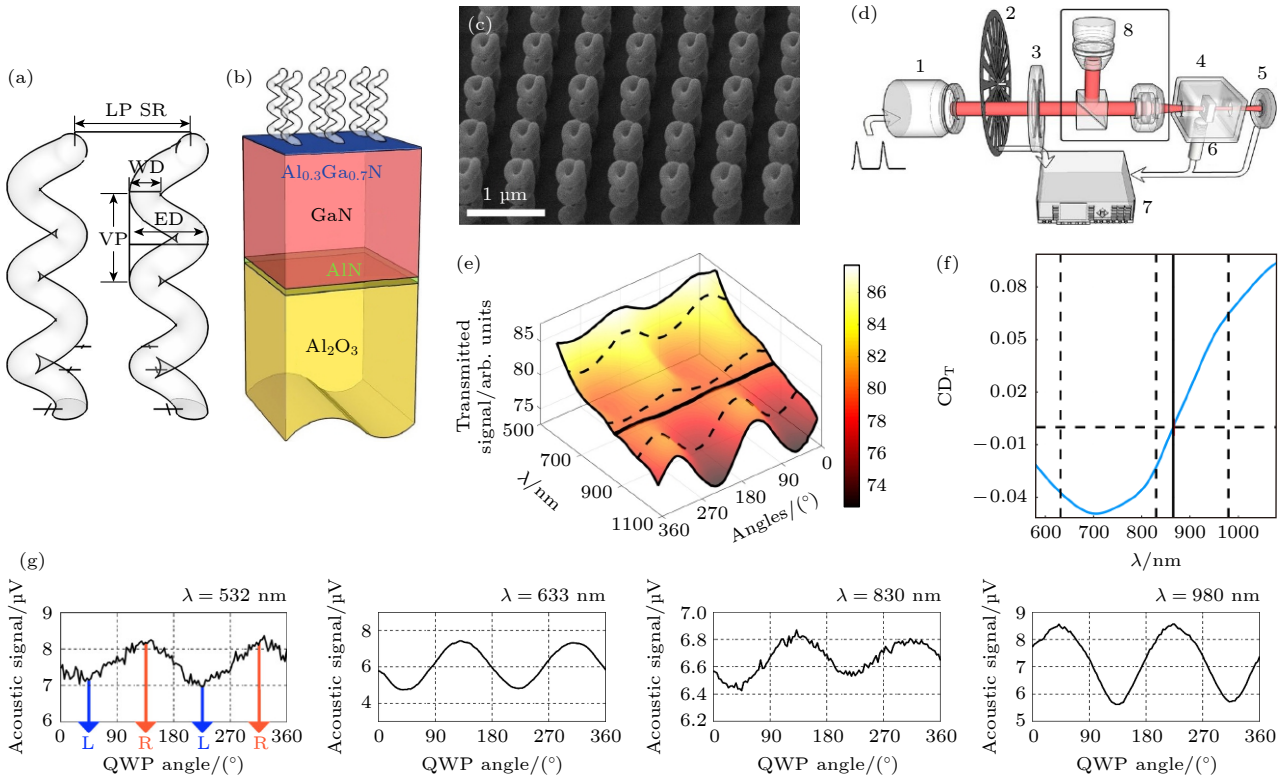


图 13 偏振光声检测纳米螺旋材料中的圆二色性^[54] (a) 单个螺旋纳米材料的结构示意图, 线径(WD)为110 nm, 外径(ED)为300 nm, 垂直间距(VP)为300 nm; (b) 位于螺旋层下的基底的示意图, 它由一个 GaN/AlGaIn 异质结构组成; (c) 扫描电子显微镜(SEM)样品视图; (d) 为 PA 测量的实验装置的示意图, 1 为激光源, 2 为斩波器, 3 为四分之一波片(QWP), 4 为包含所研究样品的 PA 室, 5 为光电探测器用于检测激光功率, 6 为麦克风部分安装在 PA 室内, 此处还有一个锁定装置 7 连接到主装置; (e) 光学技术测量得到的光强(归一化)作为波长(λ)和 QWP 方向角的函数, 被组装在图所示的三维函数中; (f) 从图(e)中在相同波长范围内提取的 CD 数据; (g) 不同波长辐射下产生的光声信号振幅和 QWP 角度之间的关系

Fig. 13. Polarized photoacoustic detection of circular dichroism in nano spiral materials^[54]: (a) Schematic diagram of a single helix, with a wire diameter (WD) of 110 nm, an outer diameter (ED) of 300 nm, and a vertical spacing (VP) of 300 nm; (b) schematic diagram of the base located below the spiral layer, it consists of a GaN/AlGaIn heterostructure; (c) scanning electron microscopy (SEM) sample view; (d) schematic view of the experimental setup for PA measurements, we show the laser source (1), the chopper (2), the QWP (3), the PA chamber (4) containing the studied sample and the PD (5); the microphone (6) is partially installed inside the PA chamber; here again a lock-in (7) is connected to the main set-up; (e) the intensity (normalized) measured by optical technology is used as a function of wavelength and QWP direction angle; (f) extract CD data from (e) within the same wavelength range; (g) the relationship between the amplitude of photoacoustic signals generated under different wavelengths of radiation and the angle of QWP.

在生物分子影像领域, 苏州大学刘庄团队^[51]提出了一种基于磁响应的 $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$ 磁性纳米棒磁控无背景偏振光声成像技术. 该技术通过对光场方向的调控能够使这种纳米棒的表面激发出等离激元, 以及对光声信号产生进行可逆性的调控. 入射光电矢量方向与纳米棒长轴平行时可以获得更大的吸收概率, 激发更强的等离激元, 垂直则相反, 所以可以通过施加磁场使本来无序排列的纳米棒呈现有序排列, 进而调节激发光电矢量的方向可以实现对体内纳米探针光声信号的有效调制. 该工作提出了在交变磁场下同时进行 PA 成像的 FFT 加权成像技术, 其通过采集一段时间内的 PA 图像并

提取出每个像素的 PA 强度. 利用快速傅里叶变换将时域信号转换为频域信号, 在频谱空间内, 周期性信号容易被识别为尖峰, 并与静态和随机噪声区分开来. 最后, 通过对频域峰值强度进行逆傅里叶变换恢复信号, 可以生成无背景的 PA 图像, 从而完全去除噪声, 大大提高了的灵敏度和特异性, 其原理和结果如图 16 所示.

偏振光声成像技术由于避免了光散射的影响, 只依赖于光吸收, 所以在纳米材料构象特征的检测上具有独特优势. 生物外源造影剂相比于生物内源分子具有更强的矢量吸收特点, 可以得到更好的对比度成像, 但其缺失了生物功能参数.

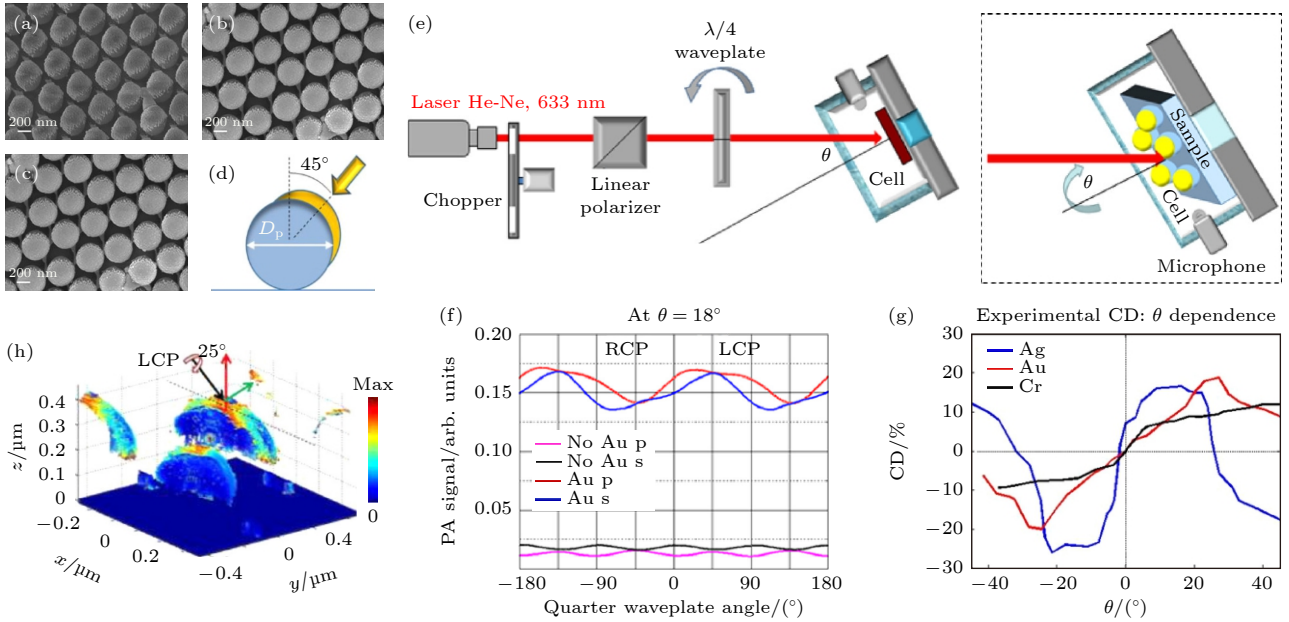


图 14 偏振光声检测金属-聚苯乙烯 (SNSA) 超表面的手性特性^[55] (a)–(c) 分别为 Au-半纳米壳阵列、Cr-半纳米壳阵列、Ag-半纳米壳阵列的场发射扫描电子显微成像 (FESEM); (d) 纳米壳几何参数和蒸发角度草图; (e) 手性-PA 设置装置示意, 插图为入射模式; (f) Au 沉积前后旋转四分之一波片得到的光声信号幅值变化趋势; (g) 不同入射角下 3 个样本 CD 值的变化; (h) Au-SNSA 在最大 CD 条件下吸收密度的分布, 最大吸收密度在金纳米的边界上

Fig. 14. Chiral properties of metal polystyrene (SNSA) metasurfaces detected by polarized photoacoustic detection^[55]: (a) Au-SNSA, (b) Cr-SNSA, and (c) Ag-SNSA and (d) sketch of the geometric parameters and the evaporation angle; (e) schematic diagram of chiral PA setting device, illustration: incidence mode; (f) the amplitude variation trend of photoacoustic signals obtained by rotating a quarter wave plate before and after Au deposition; (g) changes in CD values of three samples under different incident angles; (h) the distribution of absorption density of Au SNSA under maximum CD conditions is shown, with the maximum absorption density at the boundary of gold nanoparticles.

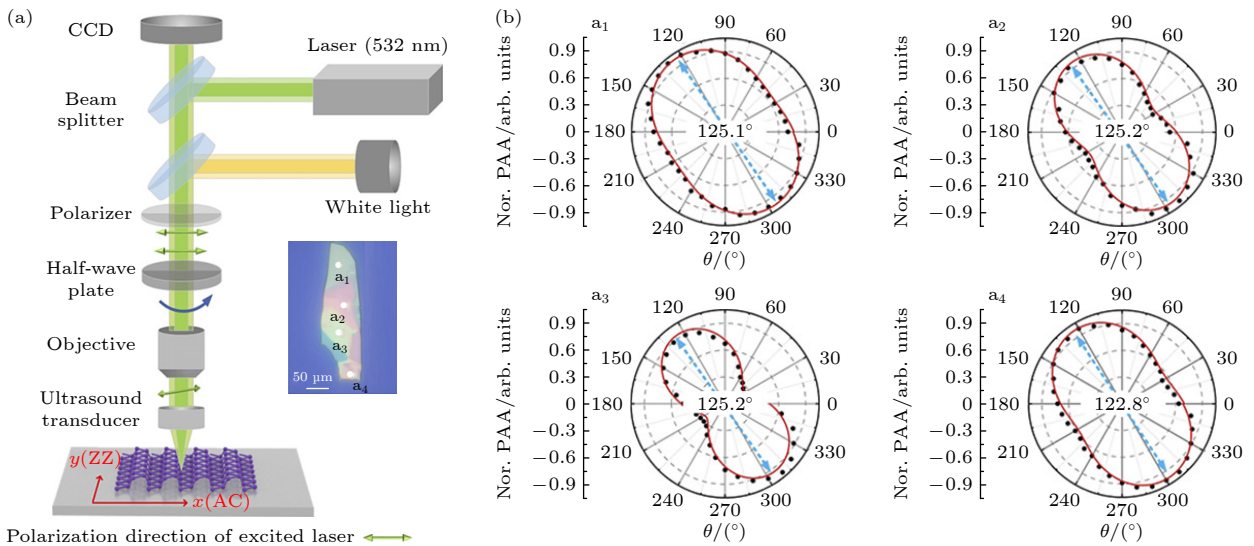


图 15 角分辨偏振光声技术检测二维材料的晶轴取向^[52] (a) 角分辨偏振光声显微镜系统示意图, 插图为黑磷样品的光学照片; (b) a_1 , a_2 , a_3 和 a_4 为 4 个采样点的晶轴 (扶手椅型) 取向检测结果

Fig. 15. Angle resolved polarized photoacoustic technology for detecting the crystal axis orientation of two-dimensional materials^[52]: (a) The diagram of the angle-resolved polarized photoacoustic microscopy (AnR-PPAM) system and the illustration is the optical photo of black phosphorus; (b) a_1 , a_2 , a_3 , and a_4 are the crystal axis (armchair type) orientation detection results of the four sampling points.

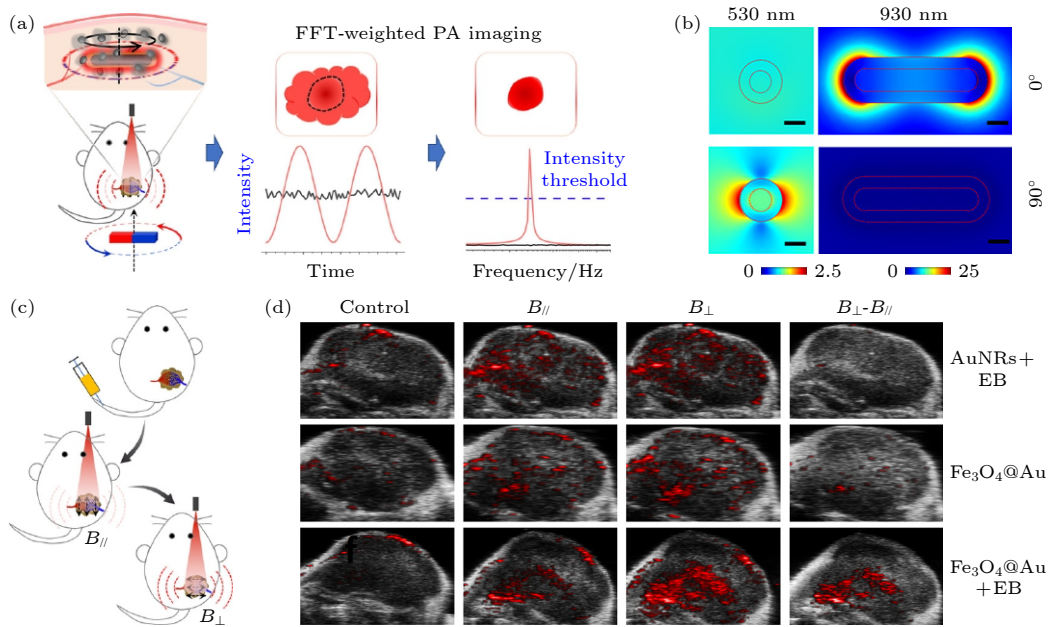


图 16 基于磁响应纳米探针的偏振光声无背景成像^[51] (a) 磁控偏振光声无背景成像的原理示意图; (b) 光激发下不同共振波长纳米棒的电场分布, 比例尺为 20 nm; (c) 静脉肿瘤无背景偏振成像示意图, 注入 $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{@Au}$ NRs; (d) 传统光声成像和偏振光声无背景成像结果

Fig. 16. Polarized photoacoustic background free imaging based on magnetic responsive nanoprobe^[51]: (a) Schematic diagram of the principle of magnetic controlled polarized light acoustic background free imaging; (b) electric field distribution of orientated nanorods under light excitation at resonant wavelength. Scale bars: 20 nm; (c) background free polarization imaging schematic of venous tumors, injection $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{@Au}$ NRs; (d) control photoacoustic imaging and polarized photoacoustic imaging have no background imaging results.

4 结 论

光与生物组织的相互作用是人们所感兴趣的一方面, 主要的一个动机是对浑浊生物物体进行成像的潜力. 光在生物组织中的偏振特性取决于多种因素, 包括入射偏振态、散射体的大小和形状、散射体的浓度. 鉴于许多生物细胞、细胞器和生物大分子的形状接近于球体与椭球体, 生物组织通常被建模为均匀球形颗粒的集合, 瑞利和米氏理论或其组合是计算组织散射特性的基础^[56]. 对于线偏振光来说, 去偏振很大程度上取决于散射体的大小和密度^[57,58], 而在具有不同尺寸的散射混合体中进行传播时, 去偏振行为由较小的散射体主导^[59,60]. 另一方面生物组织中也存在各向异性的结构, 比如心肌和肌腱, 都含有丰富的胶原蛋白, 由于分子各向异性而具有固有的线性双折射, 此类样品中入射偏振态的变化是由于组织双折射以及散射去偏振造成的. 而本文介绍的偏振光声成像, 其模式为偏振光激发和声检测, 相比于偏振光学成像减小一半的光程, 使得其成像深度更深, 特别针对活体浅表的

偏振检测尤为适合.

总之, 本文首先从单分子矢量吸收的理论模型阐明了偏振光声成像的物理机制, 总结了提取样品各向异性度, 取向和手性的技术方法的发展历程. 从生物组织成像和纳米材料检测两个应用领域展开介绍了偏振光声显微成像、偏振光声计算层析成像和偏振光声纳米材料分子成像的相关研究进展. 偏振光声成像技术是近十年才出现的新型技术, 相比于传统的偏振光成像技术, 其具备两个特别优势. 一是物理机制简单明了, 只源于目标物的吸收系数, 二是具备传递目标物深层结构的构象信息能力, 因而近几年得到更广泛的关注. 偏振光声成像技术的物理方法已经得到明确, 将来的突破方向应着眼于二维材料或生物体发育、病变的应用研究, 例如二维材料的分子取向和其光电特性的关联, 生物分子排列取向信息和复杂疾病病理之间的关联. 更快、更稳定的成像系统有待进一步完善, 提取特征参量的算法有待进一步发展. 偏振光声成像技术集合了偏振光学成像的极化信息提取和光声成像的特异性深层成像的能力, 为材料和生物基础研究提供多功能参数.

参考文献

- [1] Röntgen W C 1896 *Science* **3** 227
- [2] Castellanos F X, Giedd J N, Marsh W L, Hamburger S D, Vaituzis A C, Dickstein D P, Sarfatti S E, Vauss Y C, Snell J W, Lange N, Kaysen D, Krain A L, Ritchie G F, Rajapakse J C, Rapoport J L 1996 *JAMA Psychiatry* **53** 607
- [3] Ketcham R A, Carlson W D 2001 *Comp. Geos.* **27** 381
- [4] Chang J H, Kim H H, Lee J, Shung K 2010 *Ultrasonics* **50** 453
- [5] Huang D, Swanson E A, Lin C P, Schuman J S, Stinson W G, Chang W, Hee M R, Flotte T, Gregory K, Puliafito C, Fujimoto J 1991 *Science* **254** 1178
- [6] Hell S, Stelzer E H K 1992 *JOSA A.* **9** 2159
- [7] Huang B, Bates M, Zhuang X 2009 *Annu. Rev. Biochem.* **78** 993
- [8] Torrealba F, Carrasco M A 2004 *Brain. Res. Rev.* **47** 5
- [9] Stuker F, Ripoll J, Rudin M 2011 *Pharmaceutics* **3** 229
- [10] Cox B, Laufer J G, Arridge S R, Beard P C 2012 *J. Biomed. Opt.* **17** 061202
- [11] Axer M, Grassel D, Kleiner M, Dammers J, Dickscheid T, Reckfort J, Hütz T, Eiben B, Pietrzyk U, Zilles K, Amunts K 2011 *Front. Neurol.* **5** 34
- [12] Tang P, Kirby M A, Le N, Li Y, Zeinstra N, Lu G N, Murry C E, Zheng Y, Wang R 2021 *Light Sci. Appl.* **10** 237
- [13] Di Martino J S, Nobre A R, Mondal C, Taha I, Farias E F, Fertig E J, Naba A, Aguirre-Ghiso J A, Bravo-Cordero J J 2022 *Nature Cancer* **3** 90
- [14] Jin L W, Claborn K A, Kurimoto M, Geday M A, Maezawa I, Sohraby F, Estrada M, Kaminsky W, Kahr B 2003 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **100** 15294
- [15] Fitzpatrick A W P, Falcon B, He S, Murzin A G, Murshudov G, Garringer H J, Crowther R A, Ghetti B, Goedert M, Scheres S H W 2017 *Nature* **547** 185
- [16] Zhao M, Wang L, Wang M, Zhou S, Lu Y, Cui H, Racanelli A C, Zhang L, Ye T, Ding B, Zhang B, Yang J 2022 *Signal Transduct Target Ther.* **7** 206
- [17] Yun T L, Zeng N, Li W, Ma H 2009 *Acta Optica Sinica* **29** 1926 (in Chinese) [云天梁, 曾楠, 李伟, 马辉 2009 *光学学报* **29** 1926]
- [18] Rodriguez L G, Lockett S J, Holtom G R 2006 *Cytometry A* **69** 779
- [19] Jameson D M, Ross J A 2010 *Chem. Rev.* **110** 2685
- [20] Bell A G 1880 *J. Soc. Telegr. Eng.* **9** 34
- [21] Zhang Z H, Shi Y J, Yang S H, Xing D 2018 *Opt. Lett.* **43** 2336
- [22] Shen X W, Wu H P, Dong L 2023 *Acta Photonica Sinica* **52** 81 (in Chinese) [申晓雯, 武红鹏, 董磊 2023 *光子学报* **52** 81]
- [23] Liu Y, Nie L, Chen X 2016 *Trends Biotechnol.* **34** 420
- [24] Wang L V, Hu S 2012 *Science* **335** 1458
- [25] Zhao Y, Yang S H, Chen C G, Xing D 2014 *Opt. Lett.* **39** 2565
- [26] Lin L, Hu P, Shi J, Appleton C M, Maslov K, Li L, Wang L V 2018 *Nat. Commun.* **9** 2352
- [27] Wang Z, Yang F, Cheng Z, Zhang W, Xiong K, Yang, S 2021 *Nanophotonics* **10** 3359
- [28] Wen X, Lei P, Huang S, Chen X, Yuan Y, Ke D, Yang S. 2023 *Photonics Res.* **1** 55
- [29] Mu G, Zhang Z H, Shi Y 2022 *Chin. J. Lasers* **49** 2007208 (in Chinese) [穆根, 张振辉, 石玉娇 2022 *中国激光* **49** 2007208]
- [30] Wang Z, Yang F, Zhang W, Xiong K, Yang S 2023 *Fundamental Research online*
- [31] Van den Berg P, Daoudi K, Steenbergen W 2015 *Photoacoustics* **3** 89
- [32] Chen J, Zhang Y, Li X, Zhu J, Li D, Li S, Lee C-S, Wang L 2020 *Photonics Res.* **8** 1875
- [33] Chen C G, Zhao Y, Yang S H 2013 *Acta Laser Biology Sinica* **22** 486 (in Chinese) [陈丛桂, 赵岳, 杨思华 2013 *激光生物学报* **22** 486]
- [34] Yang F, Chen Z, Xing D 2019 *IEEE. Trans. Med. Imaging.* **39** 1791
- [35] Wang L, Zhang C, Wang L V 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 174301
- [36] Wang L V, Yao J 2016 *Nat. Methods.* **13** 627
- [37] Zhang Z H, Shi Y J 2019 *Acta Laser Biology Sin.* **28** 32 (in Chinese) [张振辉, 石玉娇 2019 *激光生物学报* **28** 32]
- [38] Yao J, Wang L V 2013 *Laser Photonics Rev.* **7** 758.
- [39] Zhang Z H, Shi Y H, Shen Q, Wang Z Y, Xing D, Yang S H 2022 arXiv: 2207. 13271v1 [physics. med-ph]
- [40] Rodger A 2006 *Circular Dichroism and Linear Dichroism. Encyclopedia of Analytical Chemistry: Applications, Theory and Instrumentation* pp1—42
- [41] Ma W, Xu L, de Moura A F, Wu X, Kuang H, Xu C, Kotov N A 2017 *Chem. Rev.* **117** 8041
- [42] Zhang Z H, Chen W, Cui D D, Mi J, Mu G, Nie L M, Yang S H, Shi Y J 2023 *Photonics Res.* **11** 817
- [43] Zhang Z H, Shi Y J, Xiang L Z, Xing D 2018 *Opt. Lett.* **43** 5267
- [44] Qu Y, Li L, Shen Y, Wei X, Wong T T, Hu P, Yao J, Maslov K, Wang L V 2018 *Optica* **5** 495
- [45] Hu S, Maslov K, Yan P, Lee J-M, Wang L V 2012 *Biomedical. Optics Miami, USA, April 28—May 2, 2012* pBM2B-8
- [46] Zhou Y, Chen J, Liu C, Liu C, Lai P, Wang L 2019 *Photoacoustics* **16** 100148
- [47] Ren Y, Zhang Y, He H, Liu L, Wu X, Song L, Liu C 2022 *Quant. Imaging Med. Surg.* **12** 2238
- [48] Zhang Y, Wu X J, He H H, Wen B H, Liu C B, Ren Y G 2022 *Journal of Optoelectronics Laser* **59** 0817001 (in Chinese) [张迎, 吴晓君, 何宏辉, 文斌华, 刘成波, 任亚光 2022 *激光与光电子学报* **59** 0817001]
- [49] Zhou Y, Zhong F, Yan P, Lee J-M, Hu S 2021 *Opt. Lett.* **46** 2561
- [50] Wang T, Yang J, Wang W S, Wang L X, Wang X C, Zhou S 2022 *Ann. Transl. Med.* **10** 293
- [51] Li Z W, Meng Z Q, Tian F, Ye Z Y, Zhou X F, Zhong X J, Chen Q, Yang M, Liu Z, Yin Y D 2022 *Nano Lett.* **22** 5158
- [52] Mu G, Zhang Z H, Cui D D, Chen W, Shi Y J 2023 *Opt. Lett.* **48** 2748
- [53] Park E, Lee Y J, Kim C, Eom T J 2023 *Photoacoustics* **31** 100510
- [54] Benedetti A, Alam B, Esposito M, Tasco V, Leahu G, Belardini A, Li Voti R, Passaseo A, Sibilia C 2017 *Sci. Rep.* **7** 5257
- [55] Petronijević E, Leahu G, Li Voti R, Belardini A, Scian C, Michieli N, Cesca T, Mattei G, Sibilia C 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 053101
- [56] Tuchin V V 2016 *J. Biomed. Opt.* **21** 071114
- [57] Schmitt J M, Gandjbakhche A H, Bonner R F 1992 *Appl. Opt.* **31** 6535
- [58] Morgan S P, Khong M P, Somekh M G 1997 *App. Opt.* **36** 1560
- [59] Ghosh N, Patel H S, Gupta P K 2003 *Opt. Express* **11** 2198
- [60] Shen F, Zhang B, Guo K, Yin Z, Guo Z 2017 *IEEE Photonics J.* **10** 1

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Research and development of polarized photoacoustic imaging technology*

Liu Jie^{1) #} Chen Wei^{2) #} Yang Qiu-Lin²⁾ Mu Gen²⁾ Gao Hao²⁾
 Shen Tao²⁾ Yang Si-Hua²⁾ Zhang Zhen-Hui^{2) †}

1) (*School of Information Optoelectronics Technology, South China Normal University, Guangzhou 510006, China*)

2) (*Key Laboratory of Laser Life Sciences, Ministry of Education, Institute of Biological Photonics, South China Normal University, Guangzhou 510631, China*)

(Received 31 May 2023; revised manuscript received 19 July 2023)

Abstract

Life is a highly ordered combination, and the basic biological processes of cells and tissues are essentially controlled by the structural order of biomolecular assembly, in which the conformational characteristics of biomolecule arrangement, orientation, helix, and folding are closely related to the physiological functions of biological tissues. In the skin, muscle, and nerve tissues of living animals, for instance, fibrous proteins, collagen, nerve fibers, and DNA frequently exhibit molecular spatial conformation properties such as particular alignment or helical structure, and such tissues have distinct optical polarization responses. The fundamental structural foundation for tissues to carry out certain activities is provided by molecular conformational characteristics. Early illness diagnosis will be aided by the accurate detection and efficient revelation of molecular conformational characteristics and their changes. The microscopic organization, structure, orientation, chirality, and other structural details of living things or materials can be obtained by using polarization imaging. The analysis of the imaging depth and polarization data is challenging, despite its widespread usage in the fields of material detection and biological imaging. Photoacoustic imaging preserves both the great contrast of optical imaging and the deep penetration of ultrasonic imaging by using light as an excitation source and ultrasound as the carrier for information transmission. While keeping the benefits of non-invasiveness, it is capable of high-resolution imaging, deep penetration, and functional imaging. A polarized photoacoustic imaging technology has recently been developed to complement polarization optical imaging and allow the collection of three-dimensional polarization data from deeper layers of the medium. This provides a straightforward and efficient method of measuring the polarimetry of tissues, suggesting substantial promise for both biological imaging and substance detection. The evolution of polarized photoacoustic imaging technology is outlined in this paper. First, the technical underpinnings of polarized photoacoustic imaging are described. Then, from the two applications of biological tissue imaging and nanomaterial detection, the related research progress of polarized photoacoustic microscopic imaging, polarized photoacoustic computational tomography, and polarized photoacoustic nanoparticles' molecular imaging is presented. We briefly explain the depolarization that results from particle size, density, and organization as polarized light travels through tissue. In an anisotropic medium, the change in the mid-incident polarization state of such a sample is caused by tissue birefringence and scattering because of the inherent birefringence effect of molecules, whereas in the isotropic medium, depolarization is largely determined by the density and size of the scatter. The potential applications of polarized photoacoustic imaging are then discussed.

Keywords: anisotropy, molecular orientation, chirality, polarized photoacoustic imaging

PACS: 42.50.Nn, 81.10.-h, 33.15.Bh, 78.20.pa

DOI: 10.7498/aps.72.20230900

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12304483, 62335007), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2022A1515010548), and the Science and Technology Project of Guangzhou, China (Grant Nos. 2019050001, 202206010094).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: zzh@scnu.edu.cn



偏振光声成像技术的研究与发展

刘劫 陈伟 杨秋琳 穆根 高昊 申滔 杨思华 张振辉

Research and development of polarized photoacoustic imaging technology

Liu Jie Chen Wei Yang Qiu-Lin Mu Gen Gao Hao Shen Tao Yang Si-Hua Zhang Zhen-Hui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204202 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230900

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230900>

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

黑磷各向异性拉曼光谱表征及电学特性

Anisotropic Raman characterization and electrical properties of black phosphorus

物理学报. 2021, 70(3): 037801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201271>

二硫化铼的原位高压偏振拉曼光谱

In-situ high pressure polarized Raman spectroscopy of rhenium disulfide

物理学报. 2022, 71(14): 140702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220053>

GeSe₂中强各向异性偏振相关的非线性光学响应

Polarization-dependent nonlinear optical response in GeSe₂

物理学报. 2020, 69(18): 184212 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200443>

各向异性三维非对称双锥五模超材料的能带结构及品质因数

Phononic band structure and figure of merit of three-dimensional anisotropic asymmetric double-cone pentamode metamaterials

物理学报. 2020, 69(13): 134302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200364>

基于声学扫描振镜的超声/光声双模态成像技术

Ultrasound/photoacoustic dual-modality imaging based on acoustic scanning galvanometer

物理学报. 2022, 71(5): 050701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211394>

黑磷纳米通道内压力驱动流体流动特性

Pressure-driven fluid flow characteristics in black phosphorus nanochannels

物理学报. 2019, 68(17): 170202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190531>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

掺铥镧铝硅酸盐玻璃光子晶体 光纤制备及光学特性*

夏长明 卢家澳 黄卓元 刘建涛 侯峙云 周桂耀†

(华南师范大学信息光电子科技学院, 广州 510006)

(2023 年 5 月 11 日收到; 2023 年 6 月 20 日收到修改稿)

镧铝硅酸盐玻璃具有稀土离子溶解度高、热稳定性好等优异的光学性能和优良的物理化学性质, 其部分物理化学性质与石英相近, 易与石英玻璃结合进行特种光纤制备, 被认为是一种理想的激光玻璃基质材料. 本文采用传统高温熔融法成功研制出一系列不同浓度 Tm^{3+} 掺杂镧铝硅酸盐玻璃, 以掺铥镧铝硅酸盐玻璃为纤芯, 采用管棒堆叠法制备出掺铥双包层光子晶体光纤. 实验研究了掺铥镧铝硅酸盐玻璃及其光纤的吸收、荧光、激光等光学特性, 研究结果表明, 掺铥镧铝硅酸盐玻璃及其光子晶体光纤适于 $2\ \mu m$ 波段激光输出, 为 $2\ \mu m$ 波段高功率光纤激光器的研究提供了一种新的途径.

关键词: 掺铥玻璃光纤, 镧铝硅酸盐玻璃, 光子晶体光纤, $2\ \mu m$ 激光**PACS:** 42.81.Bm, 42.55.Wd, 42.55.Xi, 42.81.Cn**DOI:** 10.7498/aps.72.20230766

1 引言

$2\ \mu m$ 波段激光处于大气窗口附近及人眼安全波段, 在生物医疗^[1-4]、激光雷达^[5]、光通信^[6,7]、材料加工^[8-10] 等多个领域具有十分广泛的应用^[11]. 掺铥 (Tm^{3+}) 光纤作为 $2\ \mu m$ 光纤激光器核心增益介质^[12], 近年来一直是研究热点领域. 由于传统掺铥石英光纤在高掺杂浓度上存在局限性^[13], 高浓度掺杂镨酸盐玻璃、碲酸盐玻璃和硅酸盐玻璃^[14] 成为新的研究热点.

2010 年, 上海光学精密机械研究所李科峰等^[15] 制备了 Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 1% 的掺铥碲酸盐玻璃光纤, 获得中心波长为 1937 nm 的 1.46 W 激光, 斜率效率为 20%. 2021 年, 华南理工大学涂乐等^[16] 通过高温熔融法成功制备了高浓度掺铥镨酸盐玻璃及光纤, Tm^{3+} 浓度高达 9.8×10^{20} ions/cm³. 2022 年, 南京邮电大学沈晓等^[17] 利用溶胶凝胶法

和高温烧结工艺制备了掺杂摩尔分数为 2.3% 的高硅氧玻璃及光纤, 获得波长为 1947 nm 的激光, 斜率效率为 14.1%. 从以上文献可以看出, 采用高浓度掺铥玻璃代替掺铥石英作为纤芯可以有效解决石英光纤掺杂浓度较低的问题, 但是其玻璃基质熔点低, 与传统石英光纤熔接耦合面临困难. 因此, 本文提出以镧铝硅酸盐玻璃作为掺铥玻璃基质, 其部分物理化学性质与石英物理化学性质相近, 易于与石英玻璃结合进行特种光纤制备^[18], 被认为是一种理想的激光玻璃基质材料^[19-22]. 此外, 利用光子晶体光纤结构灵活可调优势, 进行双包层掺铥镧铝硅酸盐玻璃光子晶体光纤制备, 既可以提高光纤中 Tm^{3+} 掺杂浓度, 也可以充分发挥双包层光子晶体光纤的数值孔径大的优势, 可有效提高泵浦光的利用效率^[23]. 实验结果表明, 以掺铥镧铝硅酸盐玻璃光子晶体光纤搭建的光纤激光器在 $2\ \mu m$ 波段的实现了激光输出, 适于 $2\ \mu m$ 波段掺铥光纤激光器研制.

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 61935010, 61735005) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zguyao@163.com

2 掺铥镧铝硅酸盐玻璃光纤制备及光纤光学特性测试方法

为研究 Tm^{3+} 掺杂浓度对掺铥玻璃光学特性的影响, 本文采用高温熔融法制备了一系列不同浓度的掺铥镧铝硅酸盐玻璃, 配方为 $x\text{Tm}_2\text{O}_3-(70-x)\text{SiO}_2-21\text{Al}_2\text{O}_3-9\text{La}_2\text{O}_3$ ($x=0.2\%, 0.4\%, 0.6\%, 0.8\%, 1.0\%$, 摩尔分数). 根据玻璃配方, 首先将原料充分混合, 然后在 $1720\text{ }^\circ\text{C}$ 高温下, 经过 3 h 的熔融烧制, 制备出掺铥镧铝硅酸盐玻璃. 为研究掺铥镧铝硅酸盐玻璃的吸收、荧光等特性, 将制备的掺铥镧铝硅酸盐玻璃切割、打磨抛光成 5 mm 厚的玻璃样品, 玻璃样品如图 1(a) 所示. 以掺杂摩尔分数为 0.6% 的掺铥镧铝硅酸盐玻璃为纤芯, 结合管棒套管工艺, 利用堆叠法制备掺铥双包层光子晶体光纤预制棒, 然后将其置于特种光纤拉丝塔, 通过控制光纤拉制工艺各项参数, 成功制备出掺铥镧铝硅酸盐玻璃双包层光子晶体光纤, 如图 1(b) 所示, 掺铥镧铝硅酸盐玻璃双包层光子晶体光纤的纤芯直径约为 $21.7\text{ }\mu\text{m}$, 内包层直径约为 $119.3\text{ }\mu\text{m}$, 外径约为 $236.8\text{ }\mu\text{m}$.

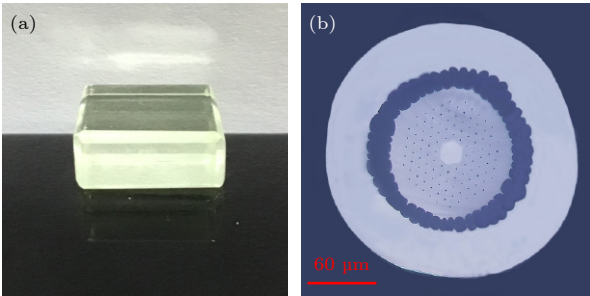


图 1 (a) 掺铥镧铝硅酸盐玻璃样品; (b) 掺铥光子晶体光纤端面图

Fig. 1. (a) Glass samples of Tm^{3+} doped glass; (b) optical micrograph of Tm^{3+} -doped fiber cross section.

为了分析掺铥玻璃及光纤的吸收、荧光、损耗等特性, 采用波长范围 $200\text{--}2500\text{ nm}$ 宽带光源 (LS-3000, 广州标旗) 作为参考光源, 泵浦源用 793 nm 半导体激光器 (M793±3-50-F105//22-DK-P, 大族天成), 用可见近红外光谱仪 (Maya 2000 Pro, Ocean Optics, 波长范围 $400\text{--}1100\text{ nm}$) 记录可见及近红外光谱, 用近红外光谱仪 (NIRQUEST 256, Ocean Optics, 波长范围 $1100\text{--}2500\text{ nm}$) 记录近红外光谱. 所有的性能测试都在室温下进行.

3 结果讨论

图 2 为不同摩尔分数掺杂的掺铥玻璃的吸收光谱, 从图 2 可以看到, 不同摩尔分数 Tm^{3+} 掺杂的玻璃吸收峰位置基本相同. Tm^{3+} 离子在可见及近红外波段共存在 4 个吸收峰, 中心波长分别位于 $684, 791, 1204$ 和 1674 nm , 分别对应能级 $^3\text{H}_6 \rightarrow ^3\text{F}_2/^3\text{F}_3$, $^3\text{H}_6 \rightarrow ^3\text{H}_4$, $^3\text{H}_6 \rightarrow ^3\text{H}_5$ 和 $^3\text{H}_6 \rightarrow ^3\text{F}_4$ 的跃迁. 在波长 1386 nm 的吸收峰为 OH^- 吸收峰, 说明在现有玻璃制备工艺条件下, 并没有完全消除 OH^- . 此外, 随着铥离子掺杂浓度的增大, 各吸收峰强度增大. Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 0.2% 玻璃吸收强度最低, Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 1% 玻璃吸收强度最大, 其中 791 nm 吸收峰吸收强度最强, 这也为采用低成本商业化的 793 nm 激光器作为泵浦源提供了便利.

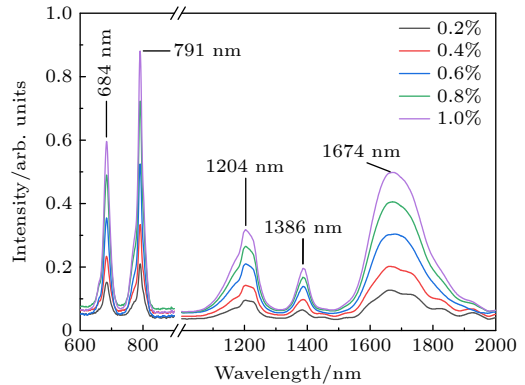


图 2 掺铥镧铝硅酸盐玻璃的吸收光谱
Fig. 2. Absorption spectrum of Tm^{3+} -doped glasses.

图 3 为在 793 nm 激光的激发下, 掺铥玻璃样品的荧光光谱. 从图 3 可以看出, 掺铥玻璃在 $1500\text{--}2050\text{ nm}$ 波长范围内出现了一宽带荧光光谱, Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 0.6% 的掺铥玻璃发出中心波长为 1782 nm 的荧光, 与能级 $^3\text{F}_4 \rightarrow ^3\text{H}_6$ 跃迁相对应, 其荧光强度最强, 荧光半高范围位于 $1679\text{--}1902\text{ nm}$, 光谱半高全宽达到 223 nm . 说明 Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 0.6% 的玻璃较为适合用作掺铥光纤的纤芯. 荧光强度随着 Tm^{3+} 掺杂浓度的增大而变强, 掺杂摩尔分数为 0.2% 的玻璃荧光强度最弱, Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 0.6% 时, 荧光强度最强. 并且当掺杂浓度继续提高时, 荧光强度反而下降, 其原因为 Tm^{3+} 掺杂浓度过高时, 发生浓度淬灭现象, 影响发光强度. 基于以上分析, Tm^{3+} 掺杂摩尔分数为 0.6% 的玻璃作为光纤纤芯为最佳.

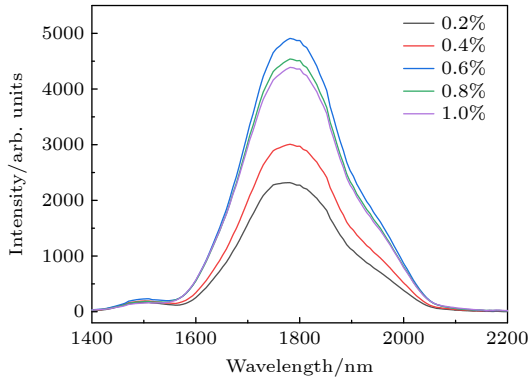


图 3 掺铥镧铝硅酸盐玻璃荧光光谱图

Fig. 3. Fluorescence spectra of Tm^{3+} -doped glass under 793 nm laser excitation.

图 4 为掺杂摩尔分数为 0.6% 掺铥光纤吸收损耗谱. 从图 4 可以看出, 光纤在可见及近红外波段有 5 个强吸收峰, 中心波长分别为 681, 790, 1196, 1407 和 1643 nm, 其中波长 1407 nm 为 OH^- 的吸收损耗峰, 其余为 Tm^{3+} 的吸收峰, 在 790 nm 处吸收最强, 吸收系数高达 10.94 dB/m, 这为光纤激光器高效泵浦奠定基础.

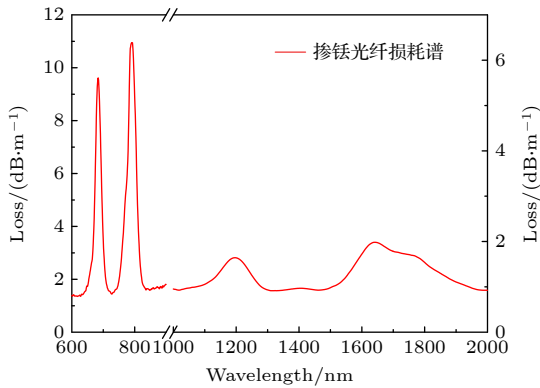


图 4 掺铥光纤的损耗谱图

Fig. 4. Loss spectrum of Tm^{3+} -doped optical fiber.

为了研究掺铥光纤激光特性, 自主搭建了一套光纤激光器如图 5 所示. 793 nm 的泵浦光经过 4f 耦合系统耦合进入掺铥光纤. 二色镜 M1 和 M2 构成激光器的谐振腔, M1 参数为: HT@793 nm, HR@2000 nm, 793 nm 透过率为 99.8%, 2000 nm 反射率为 99.9%; M2 参数为: HR@793 nm, HT@2000 nm, 793 nm 反射率为 99.8%, 2000 nm 透过率为 15%.

图 6 为长度为 62.2 cm 掺铥光纤在 793 nm 激光的激发下的发射光谱. 从图 6 可以看出, 入纤功率低于 2.107 W 时, 光纤的输出带宽较宽的荧光,

中心波长约为 1923 nm, 带宽高达 130 nm. 入纤功率功率到 2.107 W 时, 光谱中出现窄线宽尖峰震荡, 中心波长为 1935 nm, 说明此时泵浦功率接近激光阈值. 继续增大泵浦功率到 2.450 W 时, 此时泵浦功率超过阈值. 尖峰强度急速上升, 谱宽急剧窄化, 带宽从 129 nm 减小到 53 nm, 中心波长从 1923 nm 变为 1955 nm, 光谱的明显变化说明激光产生, 这证明了制备的掺铥镧铝硅酸盐光子晶体光纤可用于 2 μm 波段激光研制.

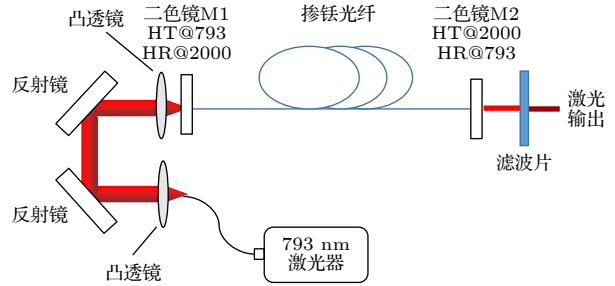


图 5 光纤激光器空间光路示意图

Fig. 5. Schematic diagram of Tm^{3+} -doped optical fiber laser.

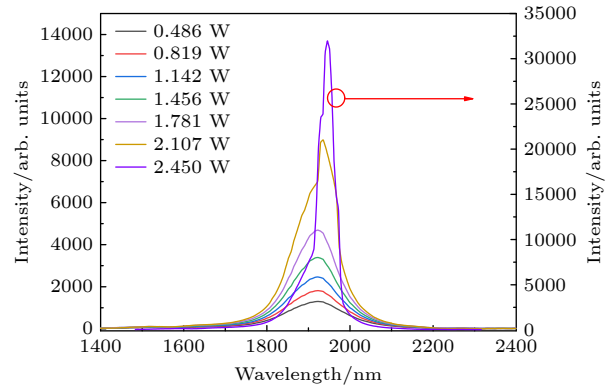


图 6 掺铥光纤的荧光及激光光谱

Fig. 6. Fluorescence and laser spectrum of Tm^{3+} -doped optical fiber.

为了研究不同长度对激光特性的影响, 在不同泵浦功率条件, 分别对长度为 24.8, 34.9, 52.4 和 62.2 cm 的光纤进行激光性能的测试, 如图 7 所示.

从图 7 可以看出, 随着光纤长度增大, 激光中心波长向长波方向移动分别为 1923, 1936, 1948 和 1955 nm. 此外, 光纤越长, 激光阈值越高, 产生激光所需要的泵浦功率越大. 图 8 为不同长度光纤的斜率效率, 在现有实验条件下, 获得激光功率最高为 253 mW, 34.1 cm 长的光纤获得斜率效率最高为 9.67%, 与目前文献报道的掺铥玻璃光纤激光器斜率效率接近.

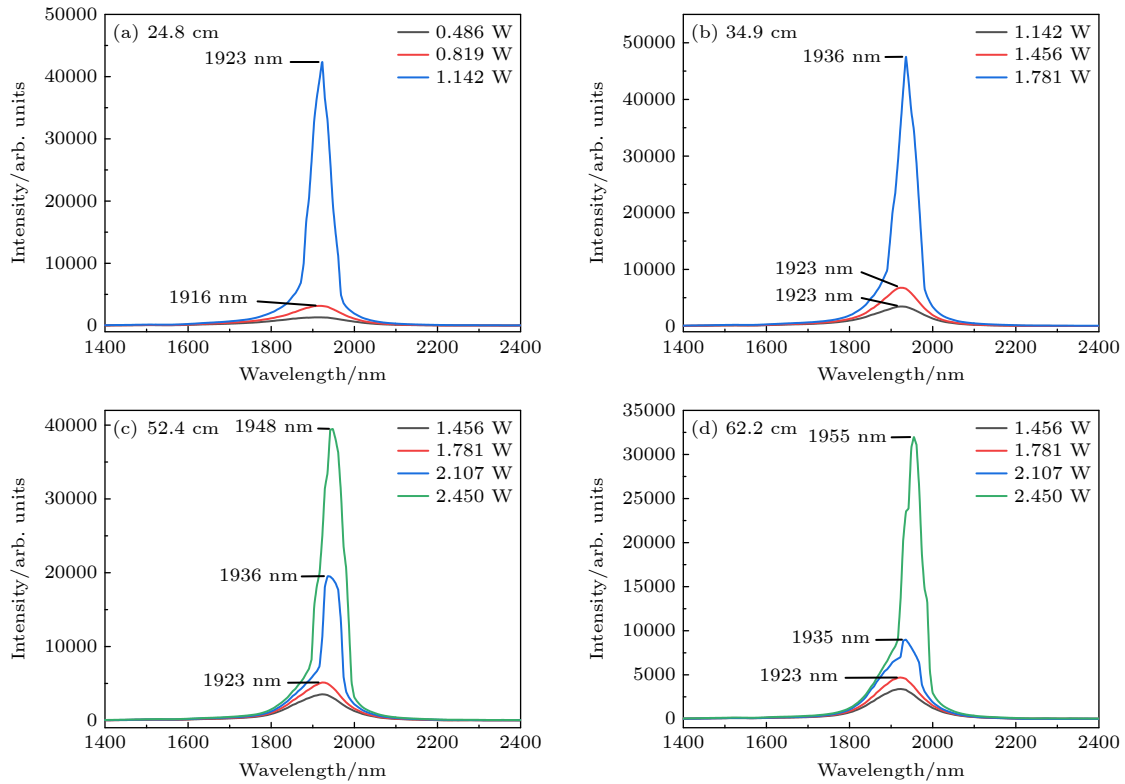


图 7 不同长度掺铥光纤的激光输出光谱

Fig. 7. Laser spectrum with different length of Tm^{3+} -doped optical fiber.

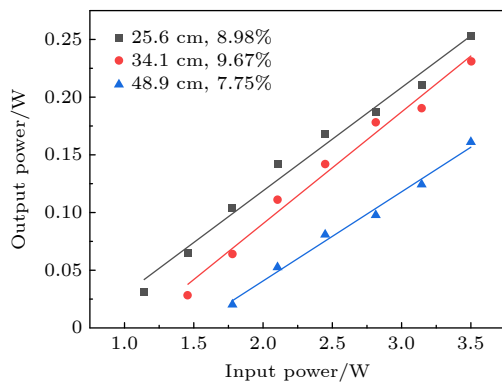


图 8 不同长度为掺铥光纤的斜率效率

Fig. 8. Slope efficiency of Tm^{3+} -doped fiber with different length.

4 总结

本文采用高温熔融法制备出一系列不同浓度的掺 Tm^{3+} 镧铝硅酸盐玻璃, 并以掺铥镧铝硅酸盐玻璃为纤芯, 利用套管法和堆积法制备了大芯径掺铥镧铝硅酸盐光子晶体光纤, 纤芯直径达 $21.7 \mu m$. 在 793 nm 激光的激发下, 掺铥镧铝硅酸盐玻璃在 $1550\text{--}2050 \text{ nm}$ 波长范围内获得荧光带宽高达 223 nm 超宽带荧光. 以掺铥镧铝硅酸盐玻璃光纤

搭建的光纤激光器在 $2 \mu m$ 波段实现了激光输出, 在现有实验条件下, 激光功率最高为 253 mW , 斜率效率最高为 9.67% , 与目前文献报道的掺铥玻璃光纤激光器斜率效率接近, 并实验分析了不同长度激光性能, 研究发现随着光纤长度增大, 激光中心波长向长波长方向移动. 实验证明, 我们制备的掺铥镧铝硅酸盐玻璃及光纤适于 $2 \mu m$ 光纤激光器研制.

参考文献

- [1] Zhang A J, Duan J L, Xing Y B, Li J Y 2022 *Laser Opto. Pro.* **59** 50 (in Chinese) [张安军, 段嘉霖, 邢颖滨, 李进延 2022 *激光与光电子学进展* **59** 50]
- [2] Yang K, Ren Q S, Wei S G, Li W R 2005 *Laser Opto. Pro.* **42** 52 (in Chinese) [杨昆, 任秋实, 魏石刚, 李万荣 2005 *激光与光电子学进展* **42** 52]
- [3] Cauni V, Mihai B, Tanase F, Persu C, Irina C 2022 *Rev. Roum. Sci. Tech. El.* **67** 85
- [4] Cao Z G, Tian C, Jiang M L, Zhong S Q, Zhou L X, Chen G L 2022 *J. Cont. Uro. and Repro. Onco.* **14** 156 (in Chinese) [曹正国, 田超, 蒋茂林, 钟苏权, 周琳雄, 陈桂柳 2022 *现代泌尿生殖肿瘤杂志* **14** 156]
- [5] McComb T S, Sims R A, Willis C C C, Kadwani P, Shah L, Richardson M 2010 *Conference on Lasers and Electro-Optics* San Jose, CA, USA, May 16–21, 2010 p2
- [6] Hemming A, Simakov N, Davidson A, Bennetts S, Hughes M,

- Carmody N, Davies P, Corena L, Stepanov D, Haub J, Swain R, Carter A 2013 *Conference on Lasers and Electro-Optics* San Jose, CA, USA, June 9–14, 2013 p2
- [7] Fu Q, Xu L, Liang S J, Shardlow P C, Shepherd D P, Shaiful Alam, Richardson D J 2020 *Opt. Express* **28** 5741
- [8] Li S, Zhang Z H, Han S G, Ren X H, Liu D, Xin Y G, Gao S Y 2020 *J. Nets. Form. Eng.* **12** 76 (in Chinese) [李苏, 张占辉, 韩善果, 任香会, 刘丹, 辛杨桂, 高世一 2020 *精密成形工程* **12** 76]
- [9] Dong Y J, Bai X T, Zheng Y 2023 *Laser Opto. Pro.* **60** 1 (in Chinese) [董亚举, 白雪涛, 郑义 2023 *激光与光电子学进展* **60** 1]
- [10] Zhang J X, Fu S J, Sheng Q, Zhang L, Shi W, Yao J Q 2022 *Opt. Laser Technol.* **158** 108882
- [11] Li X, Yang C, Li Y L 2022 *Laser J.* **43** 1 (in Chinese) [李鑫, 杨超, 李永亮 2022 *激光杂志* **43** 1]
- [12] Qian G Q, Tang G W, Wu M B, Qian Q, Chen D D, Yang Z M 2021 *Bull. Chi. Ceramic. Soc.* **40** 2471 (in Chinese) [钱国权, 唐国武, 吴敏波, 钱奇, 陈东丹, 杨中民 2021 *硅酸盐通报* **40** 2471]
- [13] Liu Y Z, Xing Y B, Liao L, Wang Y B, Peng J G, Li H Q, Dai N L, Li J Y 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 259 (in Chinese) [刘茵紫, 邢颖滨, 廖雷, 王一礴, 彭景刚, 李海清, 戴能利, 李进延 2020 *物理学报* **69** 259]
- [14] Gao S, Wang X, Fan X K, Li K F, Liao M S, Hu L L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 323 (in Chinese) [高松, 王欣, 范小康, 李科峰, 廖梅松, 胡丽丽 2014 *物理学报* **63** 323]
- [15] Li K F, Zhang G, Hu L L 2010 *Opt. Lett.* **35** 4136
- [16] Tu L, Tang G W, Qian Q, Yang Z M 2020 *Opt. Lett.* **46** 310
- [17] Shen X, Yang G L, Wang Y F, Chen Y G, Yu C L, Wei W, Hu L L 2023 *Acta Opti. Sin.* **43** 112 (in Chinese) [沈骁, 杨广利, 王亚飞, 陈应刚, 于春雷, 韦玮, 胡丽丽 2023 *光学学报* **43** 112]
- [18] Schuster K, Unger S, Aichele C, Lindner F, Grimm S, Litzkendorf D, Kobelke J, Bierlich J, Wondraczek K, Bartelt H 2014 *Advan. Opt. Tech.* **3** 447
- [19] Liang L B, Mo Z F, Ju B, Xia C M, Hou Z Y, Zhou G Y 2021 *J. Non-Cryst. Solids* **557** 120578
- [20] Huang Z Y, Yang J H, Mo Z F, Lu J A, Xia C M, Hou Z Y, Zhou G Y 2022 *J. Non-Cryst. Solids* **591** 121718
- [21] Huang Z Y, Ma W C, Wu T, Lu J A, Liu J T, Xia C M, Hou Z Y, Zhou G Y 2022 *IEEE 7th Optoelectronics Global Conference* Shenzhen, China, December 6–11, 2022 pp22–24
- [22] Kang J J, Mo Z F, Huang Z Y, Yang J H, Ma W C, Liu J T, Xia C M, Hou Z Y, Zhou G Y 2022 *J. Non-Cryst. Solids* **596** 121869
- [23] Zhou P, Huang L J, Leng J Y, Xiao H, Xu J M, Yao T F 2020 *Sci. Sini. Tech.* **50** 123 (in Chinese) [周朴, 黄良金, 冷进勇, 肖虎, 许将明, 姚天甫 2020 *中国科学: 技术科学* **50** 123]

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Preparation and optical properties of thulium doped lanthanum aluminum silicate glass photonic crystal fiber*

Xia Chang-Ming Lu Jia-Ao Huang Zhuo-Yuan
Liu Jian-Tao Hou Zhi-Yun Zhou Gui-Yao[†]

(School of Information Optoelectronics Technology, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 11 May 2023; revised manuscript received 20 June 2023)

Abstract

Lanthanum aluminum silicate glass has excellent optical properties, such as high solubility of rare earth ions, good thermal stability, and excellent physicochemical properties. Some of its physicochemical properties are similar to those of silica glass, so it is easy to combine with silica glass to fabricate special optical fibers. It is considered to be an ideal laser glass matrix material. In this paper, a series of Tm^{3+} doped lanthanum aluminum silicate glasses with different concentrations for $x\text{Tm}_2\text{O}_3-(70-x)\text{SiO}_2-21\text{Al}_2\text{O}_3-9\text{La}_2\text{O}_3$ ($x = 0.2\%$, 0.4% , 0.6% , 0.8% , 1% , mole fraction) are successfully developed by the traditional high-temperature melting method. Using thulium-doped lanthanum aluminum silicate glass as the fiber core, thulium-doped double-cladding photonic crystal optical fibers are prepared by the stack-and-draw technique and rod in tube method. The core diameter of the thulium-doped lanthanum aluminosilicate glass double-clad photonic crystal fiber is as long as $21.7\ \mu\text{m}$, the inner cladding diameter is about $119.3\ \mu\text{m}$, and the outer diameter is about $236.8\ \mu\text{m}$. The optical properties of thulium-doped lanthanum aluminum silicate glass and its optical fiber are studied experimentally. Under the excitation of a 793 nm laser, the fluorescence bandwidth of thulium-doped lanthanum aluminum silicate glass reaches 223 nm in a wavelength range of 1550–2050 nm. The fiber laser constructed with thulium-doped lanthanum alumino-silicate glass fiber achieves a laser operating at around $2\ \mu\text{m}$. The fiber laser resonant cavity consists of a pair of dichroic mirrors. The front dichroic mirror has high transmittance for light at 793 nm and high reflectivity (99.9%) for the light within a wavelength range of 1850–2050 nm. The back dichroic mirror has high reflectivity (99.9%) for light at 793 nm and high transmittance ($\sim 15\%$) at 2050 nm. Under the experimental conditions in our laboratory, the laser power reaches 253 mW. The highest slope efficiency is 9.67%, which is close to that of the thulium-doped glass fiber laser reported in the literature. It is also found that the central wavelength of fiber laser is shifted toward the longer wavelength with the increase of the optical fiber's length. These results suggest that thulium-doped lanthanum aluminum silicate glass and thulium-doped photonic crystal fiber are suitable for $2\text{-}\mu\text{m}$ fiber laser.

Keywords: thulium-doped glass fiber, lanthanum aluminum silicate glass, photonic crystal fiber, $2\ \mu\text{m}$ laser

PACS: 42.81.Bm, 42.55.Wd, 42.55.Xi, 42.81.Cn

DOI: 10.7498/aps.72.20230766

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61935010, 61735005).

[†] Corresponding author. E-mail: zguyao@163.com



掺铥镧铝硅酸盐玻璃光子晶体光纤制备及光学特性

夏长明 卢家澳 黄卓元 刘建涛 侯峙云 周桂耀

Preparation and optical properties of thulium doped lanthanum aluminum silicate glass photonic crystal fiber

Xia Chang-Ming Lu Jia-Ao Huang Zhuo-Yuan Liu Jian-Tao Hou Zhi-Yun Zhou Gui-Yao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204206 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230766

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230766>

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

一种可用于轨道角动量的受激布里渊放大的光子晶体光纤放大器

Design of photonic crystal fiber amplifier based on stimulated Brillouin amplification for orbital angular momentum

物理学报. 2022, 71(7): 074206 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211909>

一种基于三芯光子晶体光纤的宽带模分复用器的设计与研究

Design and research of a broadband mode-division multiplexer based on three-core photonic crystal fiber

物理学报. 2022, 71(4): 044206 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211187>

基于光子晶体光纤交叉敏感分离的磁场温度传感研究

Simultaneous measurement of magnetic field and temperature based on photonic crystal fiber with eliminating cross-sensitivity

物理学报. 2018, 67(18): 184212 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180680>

六重准晶涡旋光光子晶体光纤特性

Transmission characteristics of vortex beams in a sixfold photonic quasi-crystal fiber

物理学报. 2019, 68(11): 114209 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190381>

基于宽带可调谐、窄线宽掺铥光纤激光器的2 μm 波段水的超光谱吸收测量

Hyperspectral absorption of water around 2 μm based on a broadband tunable, narrow linewidth Tm-doped fiber laser

物理学报. 2022, 71(11): 114203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212127>

Xe离子束辐照硼硅酸盐玻璃和石英玻璃效应对比研究

Comparative studies of irradiation effects in borosilicate glass and fused silica irradiated by energetic Xe ions

物理学报. 2018, 67(3): 038101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172117>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

基于准正则模式的全电介质超材料 宽带反射器机理*

蒋乐昕# 谢振龙# 郭泽虹 丘伊宁 陈溢杭†

(华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广东省高等学校
物质结构与相互作用基础研究卓越中心, 广州 510006)

(2023 年 6 月 1 日收到; 2023 年 7 月 15 日收到修改稿)

全电介质超材料宽带反射器具备损耗低、反射效率高、结构紧凑等优点, 深入理解其反射带的形成机理对超材料结构和性能的优化、以及进一步设计新型光子器件均具有重要意义. 本文利用离散的硅纳米柱阵列和硅膜底层连接的硅纳米柱阵列分别构造了两个全电介质超材料宽带反射器, 通过求解其准正则模式, 结合散射矩阵理论拟合出了超材料的反射谱. 发现零频准正则模式对拟合准确性有重要影响, 并提出了用色散关系分析法准确求解零频准正则模式. 进一步用高 Q 值和低 Q 值准正则模式分别拟合出共振反射谱和背景反射谱. 结果表明, 超材料反射器的宽带反射源于低 Q 值的准正则模式造成的背景反射. 本文提出的研究方法可进一步拓展, 用于分析 Mie 共振、准连续域束缚态等共振现象, 为超材料光谱特性的解释提供新的思路.

关键词: 全电介质超材料, 宽带反射, 准正则模式, 散射矩阵**PACS:** 78.20.Bh, 42.79.Fm, 77.84.-s**DOI:** 10.7498/aps.72.20230915

1 引言

超材料宽带反射器在许多领域有重要的应用, 包括激光反射镜、热光伏器件、表面增强拉曼散射等^[1-3]. 研究人员致力于设计反射率高、工作带宽大、结构紧凑的近红外反射器, 以提高器件的工作效率. 基于表面等离子激元效应的金属结构可实现宽带的电磁波反射, 然而金属结构在可见及近红外波段的欧姆损耗较大, 反射效率较低^[4,5], 难以满足实际应用的需求. 尽管有研究提出用金属和电介质的复合谐振结构可降低损耗^[6], 但仍无法实现宽带近完美反射. 由高、低折射率电介质薄膜交替堆叠形成的布拉格反射器, 具有损耗低、反射带较宽的优点, 然而工作在可见及近红外波段的布拉格反射器需要

层数较多 (通常是几十层) 的薄膜堆叠才能获得理想的反射性能^[7,8], 其结构厚度远超工作波长, 在实际应用中受到了限制. 由高折射率电介质微结构组成的超材料可在亚波长的厚度实现宽带近完美反射, 因此受到了广泛的关注^[9-11]. 以往研究大多采用导模共振 (guide mode resonance, GMR)^[9-14] 来解释这类反射器的工作机理. 为方便理解 GMR, 假设超材料反射器为一维光栅结构, 如图 1(a) 所示, 它沿 x 方向呈周期性, 沿 y 方向无限长, 由高折射率 (n_H) 电介质单元在基底 (折射率为 n_S) 上排列构成, 厚度为 d , 背景介质折射率为 n_L , I , R 和 T 分别表示入射光、反射光和透射光, 在正入射情况下, 反射率随角频率 ω 的变化如图 1(b) 所示, 从图中可看出存在共振线型, GMR 理论对此的解释是: 入射光能激发出光栅中的泄露模式 (leaky

* 广东省自然科学基金 (批准号: 2017A030313036) 和广州市科技计划 (批准号: 2019050001) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: yhchen@scnu.edu.cn

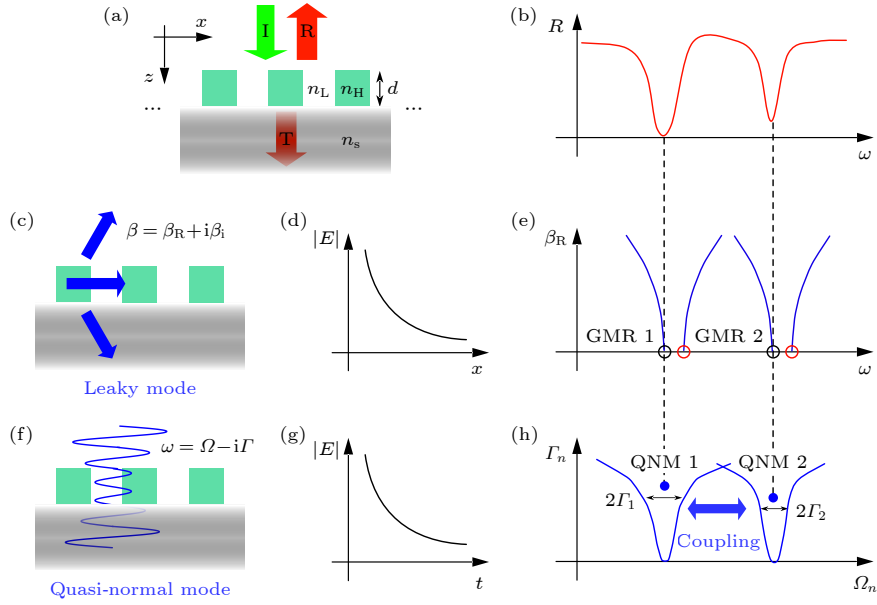


图 1 全电介质超材料反射器的结构示意图 (a) 与其反射谱 (b), 及两种物理机制描述: 导模共振 (c)—(e) 与准正则模式 (f)—(h). (a) 光栅结构超材料反射器示意图; (b) 正入射时的反射谱; (c) 泄露模式的示意图, 模式沿 x 轴传播, 同时向光栅上下两侧泄露; (d) 泄露模式随传播距离指数衰减; (e) 泄露模式的色散关系, 其中 GMR1 和 GMR2 分别对应图 (b) 中两处反射谷的共振; (f) 准正则模式的示意图, 模式随 $|z|$ 指数发散, 代表能量泄露到外界; (g) 准正则模式随时间指数衰减; (h) 准正则模式的共振频率及它们单独形成的反射谱线型, 由于模式之间的耦合最终会形成图 (b) 所示的反射谱

Fig. 1. Schematic diagram (a) and reflection spectrum (b) of the all-dielectric metamaterial reflector, and two physical mechanisms are described: guided mode resonance (c)—(e) and quasi-normal mode (f)—(h). (a) The schematic diagram of the metamaterial reflector with grating structure; (b) the reflection spectrum at normal incidence; (c) the schematic diagram of the leaky mode, propagating along the x -axis and simultaneously leaking to the upper and lower sides of the grating; (d) the leaky mode decays exponentially with the propagation distance; (e) the dispersion relation of the leaky mode, where GMR1 and GMR2 correspond to the resonances of the two reflection dips in Figure (b), respectively; (f) the schematic diagram of the quasi-normal mode, the diverge of the mode with increasing $|z|$ represents the leakage of energy; (g) the quasi-normal mode decays exponentially with time; (h) the eigenfrequencies of the quasi-normal modes and the reflection spectra formed by them alone will eventually form the reflection spectra shown in Fig. (b) due to the coupling between the modes.

modes)^[9], 从而产生窄带或宽带共振线型, 这种模式是在光栅内沿 x 方向传播的布洛赫模, 由于该模式能与外界耦合, 其能量会在传播过程中向光栅上下两侧泄露, 如图 1(c) 所示, 其传播常数 β 为复数 $\beta_R + i\beta_i$, 虚部 β_i 代表模式会随传播距离指数衰减, 如图 1(d) 所示. 该模式的色散关系 $\beta_R - \omega$ 如图 1(e) 所示, 在正入射情况下 ($\beta_R = 0$), 当满足位相匹配条件 (如对应图 1(c) 中 GMR1 和 GMR2) 时能激发出泄露模, 并在反射谱相应的频率位置附近形成共振线型, 如图 1(b) 所示, 此外, 图 1(e) 中两处红色标记处同样满足位相匹配, 但相应模式的对称性与自由空间中模式不匹配, 导致这类模式在正入射下无法被激发^[9]. GMR 理论能较好解释弱对比结构 (n_H 和 n_L 数值接近) 的共振现象, 但无法准确描述强对比结构 (n_H 和 n_L 差异较大) 中宽带共振现象的物理来源^[11].

最近, 准正则模式 (quasi-normal modes, QNMs)

的概念被拓展到了光子学领域^[15–17], 它是指满足无源麦克斯韦方程组且本征频率为复数 $\Omega - i\Gamma$ 的本征态, 这些模式随时间呈指数衰减, 如图 1(g) 所示, 虚部 Γ 代表衰减速率, 且由于 QNMs 在自由空间中的辐射具有 $e^{\pm i\omega z/c}$ (c 为光速) 的形式 (\pm 代表沿 z 轴正方向或负方向辐射), 其振幅随着远场传播距离 $|z|$ 增大而指数发散, 同时也意味着模式的能量会随时间推移而泄露到外界, 如图 1(f) 所示. QNMs 与散射过程密切相关, 结合时域耦合模方程 (temporal coupled-mode theory, TCMT)^[18–20] 能拟合出散射矩阵及相应的反射谱或透射谱. 图 1(h) 展示了两个 QNMs 的复本征频率及它们分别独立形成的反射谱线型, 在仅考虑单个 QNM 的情况下, 其谱线为洛伦兹线型, 共振频率为 Ω_n ($n = \dots, -1, 0, 1, \dots$), 半高宽为 $2\Gamma_n$. 但 TCMT 会考虑到 QNMs 之间的耦合作用, 从而拟合出如图 1(b) 中的谱线, 其共振频率相比于 Ω_n 略有偏移, 共振带

宽接近 $2\Gamma_n$. 相比 GMR 理论, QNMs 的优势在于不仅能预测共振频率和共振带宽, 且能进一步拟合出反射谱. 文献 [18–23] 报道的拟合结果均与数值仿真结果吻合, 但它们讨论的范围仅限于单个或少量的 QNMs, 一般只用于解释窄带共振现象. 最近, Alpeggiani 等 [24] 对基于 TCMT 的散射矩阵理论 (scattering matrix theory, SMT) 进行拓展, 使其能够同时考虑多个 QNMs, 揭示出复杂散射是由若干 QNMs 之间相互耦合形成的. 但 Benzaouia 等 [25] 指出以上 SMT 的拟合结果违背了能量守恒 (即在无源结构中出现了反射率大于 1 的情况), 并对其进行修正, 进一步应用于微波段超表面结构的优化设计 [26]. 然而当前仍缺乏运用 QNMs 对宽带共振现象的分析研究.

本文运用 QNMs 对超材料宽带反射的形成机理进行研究. 首先利用硅纳米柱阵列构造了超材料反射器, 在近红外波段实现了宽带近完美反射. 接着, 运用基于 QNMs 的 SMT 对结构的反射谱进行了拟合, 发现零频 QNM (频率实部为 0, 虚部不为 0) 对反射谱拟合的准确度影响较大, 进一步用色散关系分析法准确求解零频 QNM. 接着, 利用低 Q 值和高 Q 值的 QNMs 分别拟合出背景反射谱和共振反射谱, 揭示了宽带反射主要源于低 Q 值 QNMs 提供的背景反射. 最后讨论了引入硅薄膜底层对超材料反射性能的影响.

2 基于准正则模式的散射矩阵理论

2.1 准正则模式

QNMs 与正则模式 (normal modes, NMs) 类似, 它们都是所研究结构在外界无激励情况下支持的本征模式 $[\mathbf{E}_n(\mathbf{r}) \mathbf{H}_n(\mathbf{r})]^T e^{-i\omega_n t}$, 满足无源麦克斯韦本征方程 [15]:

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} i(\varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega_n))^{-1} \nabla \times \\ -i\mu_0^{-1} \nabla \times \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \mathbf{E}_n(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}_n(\mathbf{r}) \end{array} \right] \\ & = \omega_n \left[\begin{array}{c} \mathbf{E}_n(\mathbf{r}) \\ \mathbf{H}_n(\mathbf{r}) \end{array} \right]. \end{aligned} \quad (1)$$

当所研究结构具有损耗或处于开放的空间时, 方程 (1) 描述的将是一个非厄密系统, 其本征频率用复数 $\omega_n = \Omega_n - i\Gamma_n$ 表示, 虚部 Γ_n 是模式的衰减速率, $Q_n = \Omega_n/2\Gamma_n$ 是模式的品质因子, 根据 Γ_n 是否为零, 本征模式可划分为 NMs 和 QNMs. $\Gamma_n = 0$

对应 NMs, 其振幅不随时间衰减, 共振线宽为 0, 在光谱中无法形成共振线型, 但实际结构均有损耗且处于开放的空间中, 因此 NMs 仅存在于理想情况. 在无损结构中的波导导模和连续域束缚态均属于 NMs. 而 $\Gamma_n \neq 0$ 对应 QNMs, 其振幅随时间指数衰减, 具有共振线宽, 能在光谱上形成相应的共振线型. 法布里-珀罗共振模式、泄露模式、准连续域束缚态和 Mie 共振模式等均属于 QNMs. 通常采用有限元 (finite element method, FEM) 法求解 QNMs, 通过引入完美匹配层 (perfect matching layers, PMLs) 来截断仿真区域并将空间离散化, 方程 (1) 将由微分方程变为有限维矩阵的特征方程, 通过数值方法即可对 QNMs 进行求解.

2.2 散射矩阵理论

根据 Benzaouia 等 [26] 所提出的 SMT, 若只考虑包含两个端口的线性光学系统, 则分别在两端口的入射光振幅 $\mathbf{s}_+ = [s_{+1} \ s_{+2}]^T$ 和散射光振幅 $\mathbf{s}_- = [s_{-1} \ s_{-2}]^T$ 满足线性变换关系 $\mathbf{s}_- = \mathbf{S}(\omega) \mathbf{s}_+$, 其中 $\mathbf{S}(\omega)$ 为与入射光角频率相关的散射矩阵. 假设光在端口 1 入射, 即 $\mathbf{s}_+ = [1 \ 0]^T$, 则反射率和透射率分别为 $|S_{11}|^2$ 和 $|S_{12}|^2$. \mathbf{S} 可做进一步的矩阵分解:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}'\mathbf{C}, \quad (2)$$

其中 \mathbf{S}' 和 \mathbf{C} 分别是由较高和较低 Q 值的 QNMs 所构成的共振散射矩阵和背景散射矩阵, 在光谱中分别产生较窄或较宽的共振线型, 它们的表达式分别为

$$\mathbf{S}' = \bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n^H, \sigma_n^H\}}(\omega), \quad (3)$$

$$\mathbf{C} = -\bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n^L, \sigma_n^L\}}(\omega), \quad (4)$$

$$\bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n, \sigma_n\}}(\omega) = \mathbf{I} + \mathbf{D}(i\omega\mathbf{I} - i\Omega)^{-1}\mathbf{K}^T, \quad (5)$$

其中, ω_n 是 QNMs 的复本征频率, σ_n 是 QNMs 在两端口处的远场复振幅比, 即 E_{2n}/E_{1n} , 上标 H 或 L 代表 QNMs 是高 Q 值或低 Q 值 (若将所有 QNMs 都界定为高 Q 或低 Q , 则 $\mathbf{S} = -\bar{\mathbf{S}}_{\{\omega_n, \sigma_n\}}(\omega)$, 相当于不对 \mathbf{S} 进行分解, 此时拟合最准确 [26], 但无法提取出背景反射谱和共振反射谱), \mathbf{I} 为单位矩阵, Ω 是由 QNMs 的复频率 $\{\omega_n\}$ 构成的对角矩阵, 对无损系统有 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \cdots & 1 & \cdots \\ \cdots & \sigma_n & \cdots \end{bmatrix}$, $\mathbf{K}^T = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{D}^\dagger$, \mathbf{M} 的矩阵元为 $M_{nm} = \frac{1 + \sigma_m \sigma_n^*}{i(\omega_m - \omega_n^*)}$. 需要注意的是, 若存在一组解为 $\{\omega_n, \sigma_n\}$, 那么

$\{-\omega_n^*, \sigma_n^*\}$ 也是一组有效的解, 这在拟合散射矩阵的过程中是需要的^[25].

3 超材料宽带反射器的理论解释

3.1 基于硅纳米柱阵列的超材料反射器

如图 2(a) 所示, 超材料宽带反射器由硅柱阵列构成, 晶格常数 $\Lambda = 0.65 \mu\text{m}$, 硅柱直径为 D , 高度为 H . 硅折射率 $n_{\text{H}} = 3.464$, 背景介质折射率 $n_{\text{L}} = 1$. 采用有限时域差分法 (finite-difference time-domain, FDTD) 对硅柱的高度、直径做多次扫描得到反射谱的变化规律, 以优化超材料的结构参数, 最终确定圆柱的参数为 $H = 0.41 \mu\text{m}$, $D = 0.48 \mu\text{m}$. 数值仿真中光源设置为平面波, 沿 z 轴入射, 电场偏振方向沿 x 轴. 图 2(b) 显示了当硅柱直

径固定为 $D = 0.48 \mu\text{m}$ 时, 反射谱随硅柱高度的变化规律. 定义近完美反射带需满足反射率 $R > 0.95$, 从图 2(b) 可见, $H = 0.41 \mu\text{m}$ 对应的近完美反射带宽达到极大. 随后固定 $H = 0.41 \mu\text{m}$, 数值仿真了超材料的反射谱随硅柱直径的变化关系, 如图 2(c) 所示. 从图中可见, 当 $D = 0.48 \mu\text{m}$ 时, 近完美反射带宽达到极大. 结构参数优化后的超材料反射谱如图 2(d) 所示 (对应图 2(b), (c) 中的白色虚线), 阴影区域表示近完美反射波段 ($1.35\text{--}1.59 \mu\text{m}$).

接着对优化后超材料结构的 QNMs 的 $\{\omega_n, \sigma_n\}$ 进行求解. 因 QNMs 具有一定带宽, 处在拟合频段外的 QNMs 也会影响拟合频段内的反射谱, 在拟合过程中需考虑该影响以确保拟合结果的准确性^[24]. 这里设置拟合频率 ω 为 $0\text{--}1.8 \times 10^{15}$ Hz, 覆盖了图 2(d) 中近完美反射带频段, 同时计算了频率在

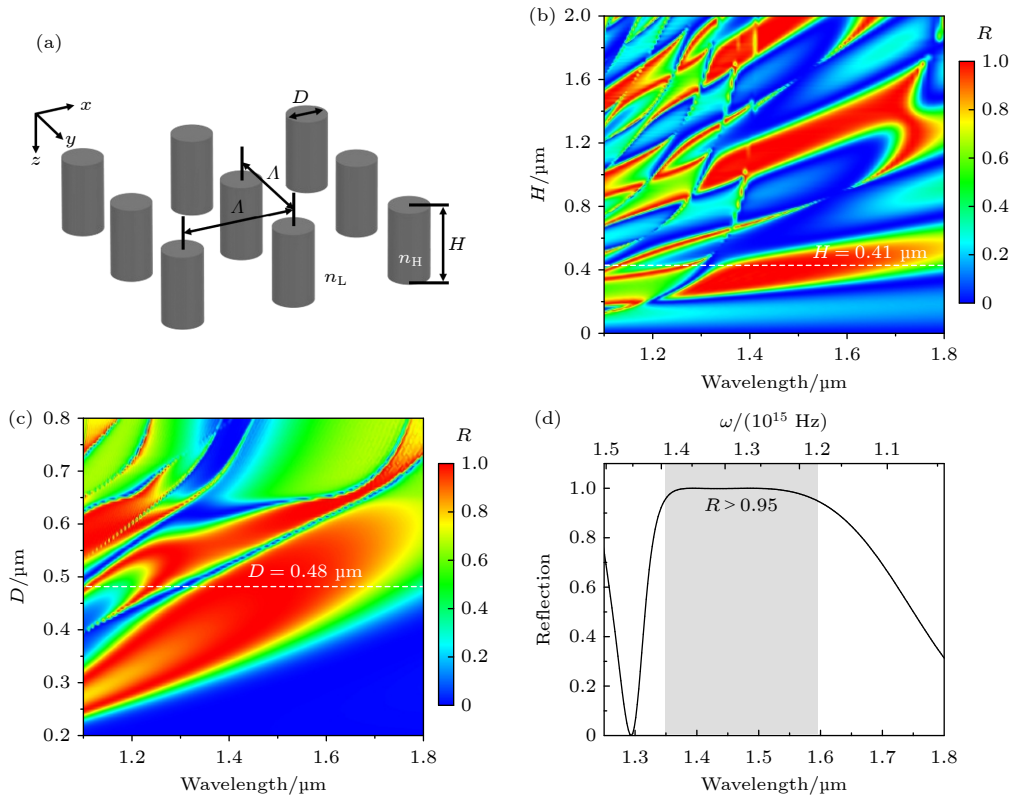


图 2 (a) 离散硅纳米柱阵列构造的超材料反射器示意图; (b) 固定硅柱直径 $D = 0.48 \mu\text{m}$, 对应的反射谱随硅柱高度 H 的变化, 当 $H = 0.41 \mu\text{m}$ 时, 近完美反射带宽达到极大; (c) 固定硅柱高度 $H = 0.41 \mu\text{m}$, 对应的反射谱随硅柱直径 D 的变化, 当 $D = 0.48 \mu\text{m}$ 时, 近完美反射带宽达到极大; (d) 优化后结构 ($H = 0.41 \mu\text{m}$, $D = 0.48 \mu\text{m}$) 的反射谱 (对应图 (b), (c) 的白色虚线), 阴影部分为近完美反射波段 ($1.35\text{--}1.59 \mu\text{m}$)

Fig. 2. (a) Schematic of the metamaterial reflector composed of discrete silicon (Si) cylinders with the lattice constant $\Lambda = 0.65 \mu\text{m}$; (b) simulated reflection spectrum as a function of the cylinder height H when the cylinder diameter is fixed as $D = 0.48 \mu\text{m}$, a widest near-perfect reflection band is observed when $H = 0.41 \mu\text{m}$; (c) simulated reflection spectrum as a function of the cylinder diameter D when the cylinder height is fixed as $H = 0.41 \mu\text{m}$, it can be seen that the near-perfect reflection band reaches a maximum bandwidth when $D = 0.48 \mu\text{m}$; (d) the reflection spectrum of the optimized structure with $H = 0.41 \mu\text{m}$ and $D = 0.48 \mu\text{m}$, corresponding to the white dashed lines in Figs. (b), (c), and the shadow region corresponds to the near-perfect reflection band where $R > 0.95$.

0— 2.3×10^{15} Hz 内的 QNMs (见附录 A). 值得注意的是, 在 FEM 求解过程中使用了离散化的网格, 并采用 PMLs 对仿真区域进行截断, 这使得零频 QNM 难以求解^[24,25], 然而零频 QNM 具有较大的线宽, 对散射谱拟合的影响较大, 因此需对其精确求解. 在低频情况下, 可将单层超材料等效为均匀薄膜, 根据单层薄膜的本征方程可得到零频解^[25]:

$$\left\{ \omega_0 = -i \frac{2c}{n_{\text{eff}} d} \operatorname{atanh} \left(\frac{1}{n_{\text{eff}}} \right), \sigma_0 = 1 \right\}, \quad (6)$$

其中 n_{eff} 为有效折射率, d 为薄膜厚度. 文献^[25]通过平均折射率法近似得到结构的有效折射率, 进而获得零频 QNM 解, 并采用 FEM 对求解结果作高精度优化, 然而该方法求解时间长且结果误差较大.

为准确得到超材料的有效折射率, 使用严格耦合波分析 (rigorous coupled wave analysis, RCWA) 计算了参数优化后的超材料反射器的色散关系, 如图 3(a) 所示 (G 为倒格矢 $2\pi/\Lambda$), 当 k_0 趋于 0 时 $n_{\text{eff}} = k/k_0 = 1.58$. 将硅柱层厚度 $d = 0.41 \mu\text{m}$ 和 n_{eff} 代入 (6) 式即可求得 $\omega_0 = -i \cdot 6.91 \times 10^{14}$ Hz. 而平均折射率法的计算结果为 $n'_{\text{eff}} = 2.39$, 对应 $\omega'_0 = -i \cdot 2.54 \times 10^{14}$ Hz. 为了对比两种方法的计算误差, 将色散关系分析法计算得到的零频 QNM 以及所有非零频 QNMs 代入 (2) 式—(5) 式, 得到拟合的反射谱 $|S_{11}|^2$ (这里不对 S 进行分解以确保拟合准确), 如图 3(b) 中绿色虚线所示, 该拟合结果与 FDTD 的仿真结果 (黑色实线) 完美吻合. 而采用平均折射率法得到的拟合反射谱如红色虚线所示, 相比 FDTD 仿真结果的误差较大. 若忽略零频 QNM, 所得到的拟合反射谱如蓝色虚线所示, 与 FDTD 仿真结果同样存在较大误差.

为分析硅柱阵列超材料的宽带反射形成机制, 将 S 分解为 $S'C$ 做进一步探究. 图 4(a) 展示了 QNMs 的复本征频率, 其数字编号代表相应的 QNMs 序号 n . 图 4(b) 中黑色实线为超材料反射谱的数值仿真结果, 可以初步判定, 在 1.45×10^{15} Hz 和 1.73×10^{15} Hz 附近存在明显的窄带共振, 分别对应图 4(a) 中的 $n = 2$ 和 $n = 4$ 的 QNMs 位置, 如图中双向箭头所示, 这些模式的半高宽 $2\Gamma_n$ 较小, 可形成清晰的窄带共振线型, 因此将它们界定为高 Q 值 QNMs. 同理, 在拟合频段外 (1.8×10^{15} — 2.3×10^{15} Hz), 除了 $n = 7$ 的 QNM, 其余均为高 Q 值 QNMs. 因此, 将 $n = 0, 1, 3, 5, 7$ 界定为低 Q 值 QNMs, 其余为

高 Q 值 QNMs, 将它们代入 (3) 式—(5) 式可得到背景反射率 $|C_{11}|^2$ 和共振反射率 $|S'_{11}|^2$, 如图 4(b) 中绿色、红色虚线所示, 阴影部分表示近完美反射频段. 当入射光频率为 0— 1.3×10^{15} Hz 时, 由于远离高 Q 值 QNMs 的共振频率, 即 $|\omega - \Omega_n^{\text{H}}| \gg 2\Gamma_n^{\text{H}}$, 根据 (3) 式和 (5) 式可得 $S' \approx I$, 因此共振反射率 $|S'_{11}|^2 \approx 1$, 即不存在变化剧烈的共振线型, 高 Q 值 QNMs 对散射过程的贡献可忽略, 此时 $S \approx C$, 总反射近似等于背景反射. 当入射光频率接近高 Q 值 QNMs 的频率时, 会使得总反射形成窄带线型, 而低 Q 值 QNMs 形成的背景反射随频率变化平缓, 是造成宽带反射的主要原因.

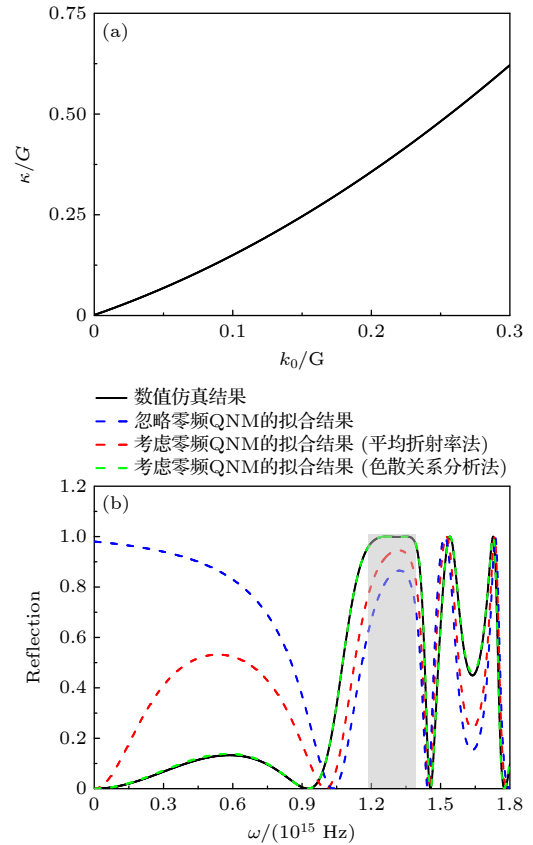


图 3 (a) 结构参数优化后的超材料反射器的色散关系, 其中 k 为 z 方向的波矢分量, $k_0 = \omega/c$, $G = 2\pi/\Lambda$; (b) 数值仿真得到的反射谱, 忽略零频 QNM 拟合得到的反射谱, 分别用色散关系分析法和平均折射率法得到的零频 QNM 代入 SMT 进行拟合所得到的反射谱

Fig. 3. (a) Dispersion relationship of the metamaterial reflector with optimized structural parameters, where k is the wave vector component along z direction, $k_0 = \omega/c$, $G = 2\pi/\Lambda$; (b) the reflection spectrum obtained by FDTD simulation, the fitting spectrum when the zero-frequency QNM is ignored, and the fitting spectrum when the zero-frequency QNM is obtained by dispersion relation analysis method and average refractive index method, respectively.

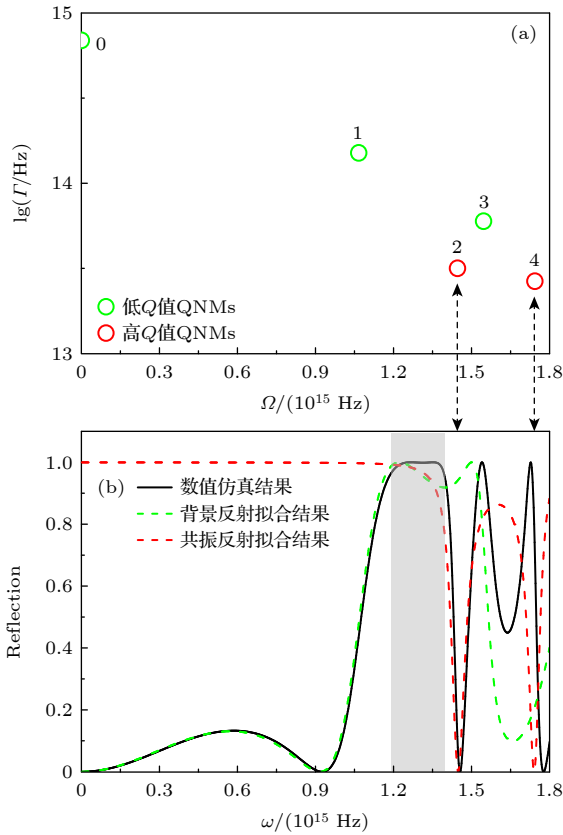


图 4 (a) 硅柱阵列超材料反射器的 QNMs 复本征频率; (b) 分别用低 Q 、高 Q 值 QNMs 进行拟合得到的背景反射谱和共振反射谱, 以及数值仿真得到的反射谱

Fig. 4. (a) Complex frequencies of the QNMs for the meta-material reflector composed of Si cylinder array; (b) the background reflection spectra and resonance reflection spectra fitted by low- Q and high- Q QNMs, respectively, and the reflection spectrum obtained by FDTD simulation.

为分析低 Q 值 QNMs 形成背景反射的过程, 首先根据 SMT 拟合出了部分低 Q 值 QNM 独立形成的反射谱, 如图 5(a) 所示. 图中红色、绿色和蓝色实线分别代表 $n = 0$, $n = 1$ 和 $n = 3$ 的 QNM 拟合结果, 随后考虑低 Q 值 QNMs 之间的耦合作用, 分别将 $n = 0, 1$; $n = 0, 1, 3$ 和 $n = 0, 1, 3, 5$ 的 QNMs 代入 SMT 进行拟合, 得到如图 5(b) 中绿色、蓝色和紫色实线所示的反射谱, 对比图 5(a) 和图 5(b) 可见, QNMs 在发生耦合之后所形成谱线保留了单个 QNM 的谱线特征. 例如图 5(b) 中任一耦合反射谱在 $n = 1$ 的 QNM 本征频率附近均存在共振线型, 随着参与拟合的 QNMs 数目增多, 拟合结果会逐渐接近背景反射谱. 综上所述, 超材料的宽带反射来源于若干低 Q 值 QNMs 之间相互耦合形成的背景反射, 单个 QNM 的谱线能反映背景反射谱的部分特征.

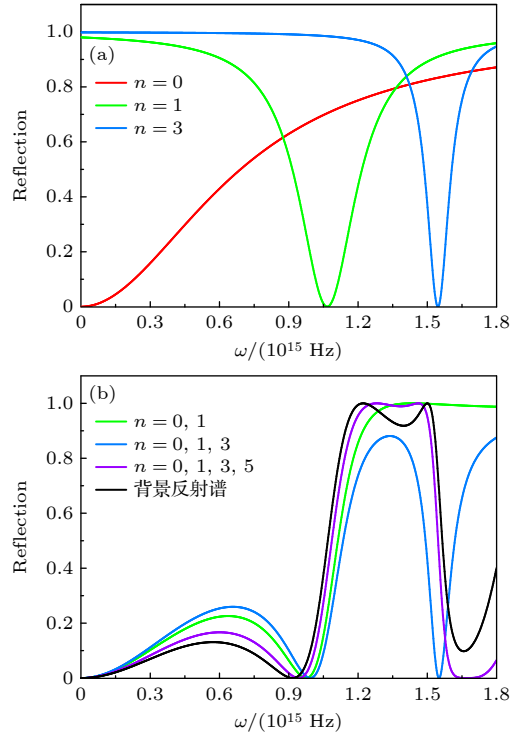


图 5 (a) 单个低 Q 值 QNM 形成的反射谱, 红色、绿色和蓝色实线分别为 $n = 0$, $n = 1$ 和 $n = 3$ 的 QNM 代入 SMT 拟合得到的反射谱; (b) 多个低 Q 值 QNMs 耦合形成背景反射的过程, 绿色、蓝色和紫色实线分别对应将 $n = 0, 1$; $n = 0, 1, 3$ 和 $n = 0, 1, 3, 5$ 的 QNMs 代入 SMT 拟合得到的反射谱, 随着参与拟合的 QNMs 数目增加, 拟合反射谱逐渐贴近背景反射谱 (黑色实线)

Fig. 5. (a) The reflection spectra formed by individual low- Q QNM. The red, green, and blue solid lines represent the fitted spectra obtained by substituting QNMs with $n = 0$, $n = 1$, and $n = 3$ into SMT, respectively; (b) the process of multiple low- Q QNMs forming the background reflection. The green, blue, and purple solid lines represent the fitted reflection spectra obtained by substituting QNMs with $n = 0, 1$; $n = 0, 1, 3$; and $n = 0, 1, 3, 5$ into SMT, respectively. As the increase of the QNMs involved in the fitting process, the fitted reflection spectrum approaches the background reflection spectrum (black solid line).

3.2 含硅膜底层的超材料反射器

进一步考虑将厚度为 d_s 的硅薄膜沉积在结构参数优化后的硅柱阵列下方, 实现近完美反射带的拓宽, 如图 6(a) 所示. 对不同硅膜底层厚度 d_s 的超材料进行数值仿真, 得到反射谱的变化规律, 如图 6(b) 所示. 当 $d_s = 0.24 \mu\text{m}$ 时, 近完美反射带宽达到极大, 相应的反射谱如图 6(c) 黑色实线所示, 阴影部分为近完美反射波段 ($1.33 - 1.65 \mu\text{m}$). 对比无硅膜底层结构的反射谱 (蓝色实线) 可发现, 硅膜底层的引入拓宽了超材料的近完美反射带.

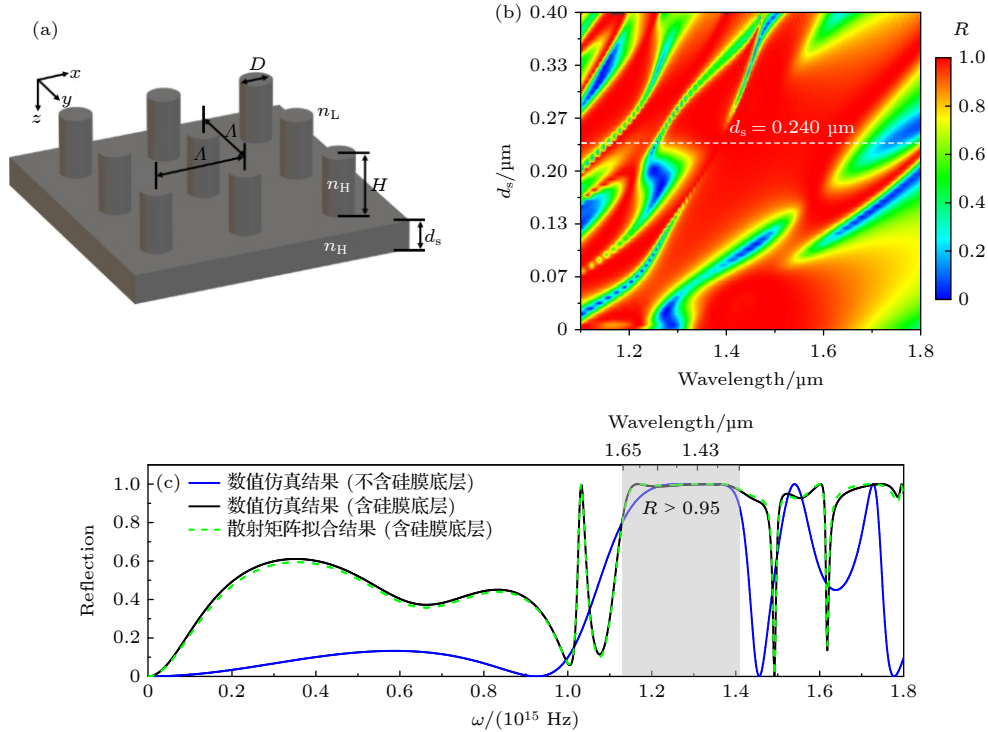


图 6 (a) 含硅膜底层的超材料结构示意图; (b) 固定硅柱高度 $H = 0.41 \mu\text{m}$ 和直径 $D = 0.48 \mu\text{m}$, 反射谱随硅膜厚度 d_s 的变化规律, 当 $d_s = 0.24 \mu\text{m}$ 时, 近完美反射带宽达到极大; (c) 无硅膜底层的超材料结构反射谱 (蓝色实线), 硅膜底层 $d_s = 0.24 \mu\text{m}$ 的超材料结构反射谱 (黑色实线, 对应图 (b) 中白色虚线) 及其拟合反射谱 (绿色虚线)

Fig. 6. (a) Schematic of the Si-cylinders-based metamaterial reflector with a Si sublayer; (b) simulated reflection spectrum as a function of the thickness of the Si sublayer d_s when fixing $H = 0.41 \mu\text{m}$ and $D = 0.48 \mu\text{m}$. When $d_s = 0.24 \mu\text{m}$, the bandwidth of the near-perfect reflection band ($R > 0.95$) reaches a maximum; (c) the simulated reflection spectrum of the metamaterial reflector without Si sublayer (blue solid line), the simulated reflection spectrum of the metamaterial reflector with a $0.24 \mu\text{m}$ -thick Si sublayer (black solid line, corresponding to the white dashed line in figure (b)) and its fitting result (green dashed line).

为分析含硅膜底层结构反射带的形成机理, 对其 QNMs 进行了求解 (结果见附录 B). 由于此时超材料可视为双层结构 (硅柱层和硅膜层), (6) 式不再适用求解其零频 QNM, 这里采用搜寻散射矩阵极点的方法 [27] 得到零频 QNM: $\{\omega_0 = -i \cdot 1.68 \times 10^{14} \text{ Hz}, \sigma = 0.86\}$. 将所有的 QNMs 代入 (2) 式—(5) 式进行拟合得到了结构的反射谱, 如图 6(c) 中绿色虚线所示, 与其数值仿真结果高度吻合.

图 7(a) 展示了含硅膜底层超材料的 QNMs 的复本征频率, 对比图 4(a) 可发现, 硅底层薄膜的引入会使得结构的 QNMs 数量变多, 图 7(b) 中黑色实线为数值仿真结果, 在频率为 $1.03 \times 10^{15} \text{ Hz}$, $1.49 \times 10^{15} \text{ Hz}$, $1.62 \times 10^{15} \text{ Hz}$, $1.79 \times 10^{15} \text{ Hz}$ 附近处均存在明显的窄带共振线型, 分别对应图 7(a) 中 $n = 2, 8, 10, 11$ 的 QNMs (如双向箭头所示), 因此将其界定为高 Q 值 QNMs, 其余为低 Q 值 QNMs. 将它们代入 (3) 式—(5) 式可得到背景反射谱和共振反射谱, 如图 7(b) 中绿色、红色虚线所示, 阴影

部分表示近完美反射频段. 从图中可见背景反射谱与数值仿真结果在阴影部分内高度重合, 这同样说明了超材料的宽带近完美反射主要来源于背景反射, 在硅柱阵列的基础上引入底层薄膜会使得低 Q 值 QNMs 数目增多, 从而拓宽近完美反射带.

4 结论

本文运用基于 QNMs 的 SMT 分析了基于硅纳米柱阵列的超材料的宽带反射形成机理, 指出宽带反射来源于若干低 Q 值 QNMs 提供的背景反射, 单独 QNM 的谱线能反映出背景反射谱的部分特征. 硅膜底层的引入使得低 Q 值 QNMs 数目增大, 从而拓宽了反射带. 运用色散关系获得了超材料的有效折射率, 进而精确求出零频 QNM, 使得 SMT 拟合出的反射谱线完美贴合 FDTD 仿真结果. 本文提出的研究方法能拓展至其他宽带共振现象的分析, 为理解超材料的光谱特性提供了新的思路.

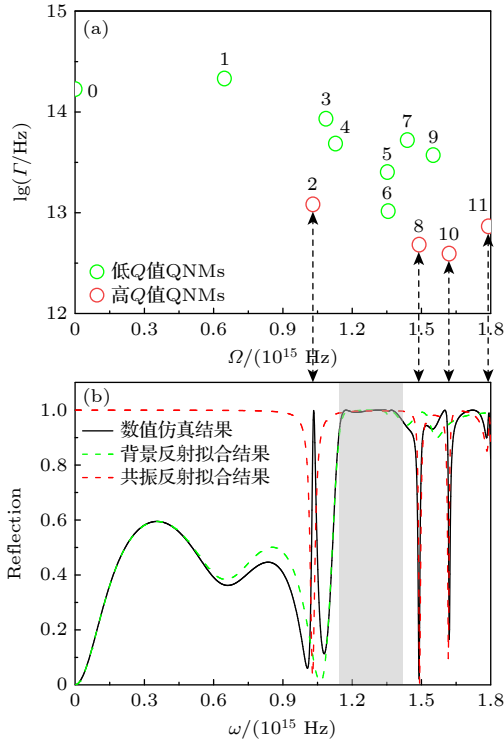


图 7 (a) 含硅膜底层的超材料的 QNMs 复本征频率; (b) 分别用低 Q 、高 Q 值 QNMs 进行拟合得到的背景反射谱 (绿色虚线) 和共振反射谱 (红色虚线) 及数值仿真得到的反射谱 (黑色实线)

Fig. 7. (a) Complex frequencies of QNMs for the metamaterial with a Si sublayer; (b) the background reflection spectra (green dashed line) and resonance reflection spectra (red dashed line) fitted by low- Q and high- Q QNMs, respectively, and the reflection spectrum obtained by FDTD simulation (black solid line).

附录 A 硅柱阵列结构的 QNMs 求解结果

对图 2(a) 所示的超材料结构的 QNMs 进行求解, 得到的复本征频率 ω_n 、品质因子 Q_n 、远场复振幅比 σ_n 如表 A1 所示, 其中加粗字体表示低 Q 值 QNMs. 因结构在 z 方向上具有镜像对称性, QNMs 可以被分为关于 z 方向的奇模式或偶模式, 对应 σ_n 为 -1 或 1 .

附录 B 含硅膜底层的硅柱阵列结构的 QNMs 求解结果

对图 6(a) 所示的含硅膜底层结构的 QNMs 进行求解, 得到的复本征频率 ω_n 、品质因子 Q_n 、远场复振幅比 σ_n 如表 B1 所示 (加粗字体表示低 Q 值 QNMs). 因硅膜底层的引入导致结构在 z 方向的镜像对称性打破, QNMs 在 z 方向上的分布不再是对称的, 此时 $\sigma_n \neq \pm 1$.

表 A1 图 2(a) 所示结构的 QNMs 的复本征频率 ω_n 、品质因子 Q_n 和远场复振幅比 σ_n
Table A1. The complex eigen-frequencies ω_n , quality factor Q_n , and ratio of far-field complex amplitude σ_n of QNMs.

序号 n	复本征频率 ω_n/Hz	品质因子 Q_n	远场复振幅比 σ_n
0	$0 - 6.91 \times 10^{14}i$	0	1
1	$1.07 \times 10^{15} - 1.51 \times 10^{14}i$	3.53	-1
2	$1.45 \times 10^{15} - 3.17 \times 10^{13}i$	22.8	1
3	$1.55 \times 10^{15} - 5.98 \times 10^{13}i$	12.9	1
4	$1.74 \times 10^{15} - 2.66 \times 10^{13}i$	32.8	-1
5	$1.81 \times 10^{15} - 2.67 \times 10^{14}i$	3.38	-1
6	$1.92 \times 10^{15} - 2.13 \times 10^{11}i$	4510.0	-1
7	$2.17 \times 10^{15} - 1.88 \times 10^{14}i$	5.75	-1
8	$2.17 \times 10^{15} - 3.39 \times 10^{13}i$	32.1	-1
9	$2.18 \times 10^{15} - 4.21 \times 10^{11}i$	2580.0	1
10	$2.19 \times 10^{15} - 1.17 \times 10^{12}i$	932.0	1
11	$2.3 \times 10^{15} - 4.11 \times 10^{13}i$	28.0	1

表 B1 图 6(a) 所示结构的 QNMs 的复本征频率 ω_n 、品质因子 Q_n 和远场复振幅比 σ_n
Table B1. The complex eigen-frequencies ω_n , quality factor Q_n , and ratio of far-field complex amplitude σ_n of QNMs.

序号 n	复本征频率 ω_n/Hz	品质因子 Q_n	远场复振幅比 σ_n
0	$0 - 1.68 \times 10^{14}i$	0	0.857
1	$6.46 \times 10^{14} - 2.14 \times 10^{14}i$	1.51	$-0.38 + 0.0356i$
2	$1.03 \times 10^{15} - 1.2 \times 10^{13}i$	42.9	$0.754 + 0.377i$
3	$1.09 \times 10^{15} - 8.53 \times 10^{13}i$	6.36	$0.601 - 0.108i$
4	$1.13 \times 10^{15} - 4.84 \times 10^{13}i$	11.7	$0.12 - 0.421i$
5	$1.35 \times 10^{15} - 2.52 \times 10^{13}i$	26.8	$3.79 - 30.3i$
6	$1.36 \times 10^{15} - 1.03 \times 10^{13}i$	65.6	$-11.8 - 26.7i$
7	$1.44 \times 10^{15} - 5.23 \times 10^{13}i$	13.8	$0.128 - 0.072i$
8	$1.49 \times 10^{15} - 4.83 \times 10^{12}i$	155.0	$-0.96 - 0.188i$
9	$1.55 \times 10^{15} - 3.72 \times 10^{13}i$	20.9	$0.133 + 0.0279i$
10	$1.62 \times 10^{15} - 3.9 \times 10^{12}i$	207.0	$0.963 + 1.04i$
11	$1.79 \times 10^{15} - 7.3 \times 10^{12}i$	123.0	$0.0814 + 0.18i$
12	$1.82 \times 10^{15} - 2.02 \times 10^{13}i$	45.2	$0.909 + 0.429i$
13	$1.85 \times 10^{15} - 3.78 \times 10^{12}i$	245.0	$0.911 + 0.725i$
14	$1.87 \times 10^{15} - 3.9 \times 10^{12}i$	239.0	$-0.536 + 1.57i$
15	$1.92 \times 10^{15} - 4.41 \times 10^{11}i$	2180.0	$-0.425 - 0.198i$
16	$1.97 \times 10^{15} - 6.83 \times 10^{12}i$	144.0	$-0.182 - 0.306i$
17	$2.02 \times 10^{15} - 4.37 \times 10^{11}i$	2310.0	$-0.494 - 0.302i$
18	$2.03 \times 10^{15} - 5.79 \times 10^{11}i$	1750.0	$-0.617 - 0.195i$
19	$2.04 \times 10^{15} - 8.33 \times 10^{11}i$	1220.0	$-0.38 - 0.415i$
20	$2.07 \times 10^{15} - 2.8 \times 10^{11}i$	36.9	$-0.634 - 0.121i$

参考文献

- [1] Ren R, Guo Y, Zhu R 2012 *Opt. Lett.* **37** 4245
- [2] Mbakop F K, Tom A, Dadjé A, Vidal A K C, Djongyang N 2020 *Chin. J. Phys.* **67** 124
- [3] Kim J, Baek S, Park J Y, Kim K H, Lee J L 2021 *Small* **17** 2100654
- [4] Sun S, Yang K-Y, Wang C-M, Juan T-K, Chen W T, Liao C Y, He Q, Xiao S, Kung W-T, Guo G-Y, Zhou L, Tsai D P 2012 *Nano Lett.* **12** 6223
- [5] Pors A, Nielsen M G, Eriksen R L, Bozhevolnyi S I 2013 *Nano Lett.* **13** 829
- [6] Li Z, Palacios E, Butum S, Aydin K 2015 *Nano Lett.* **15** 1615
- [7] Tripathi D K, Silva K K M B D, Bungarner J W, et al. 2015 *J. Microelectromechanical S.* **24** 1245
- [8] Wu F, Chen M, Liu D, Chen Y, Long Y 2020 *Appl. Opt.* **59** 9621
- [9] Magnusson R, Shokooh-Saremi M 2008 *Opt. Express* **16** 3456
- [10] Ko Y H, Shokooh-Saremi M, Magnusson R 2015 *IEEE Photonics J.* **7** 1
- [11] Ko Y H, Magnusson R 2018 *Optica* **5** 289
- [12] Quaranta G, Basset G, Martin O J F, Gallinet B 2018 *Laser Photonics Rev.* **12** 1800017
- [13] Zhou J, Sang T, Li J, Wang L, Wang R, Wang Y, Wang J 2019 *Optik* **181** 231
- [14] Ko Y H, Razmjooei N, Hemmati H, Magnusson R 2021 *Opt. Express* **29** 26971
- [15] Lalanme P, Yan W, Vynck K, Sauvan C, Hugonin J P 2018 *Laser Photonics Rev.* **12** 1700113
- [16] Kristensen P T, Herrmann K, Intravaia F, Busch K 2020 *Adv. Opt. Photon.* **12** 612
- [17] Both S, Weiss T 2022 *Semicond. Sci. Tech.* **37** 013002
- [18] Fan S, Joannopoulos J D 2002 *Phys. Rev. B* **65** 235112
- [19] Fan S, Suh W, Joannopoulos J D 2003 *J. Opt. Soc. Am. A* **20** 569
- [20] Wonjoo S, Zheng W, Shanhui F 2004 *IEEE J. Quantum Elect.* **40** 1511
- [21] Lepetit T, Akmansoy E, Ganne J P, Lourtioz J M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 195307
- [22] Wang K X, Yu Z, Sandhu S, Fan S 2013 *Opt. Lett.* **38** 100
- [23] Heo H, Lee S, Kim S 2019 *J. Lightwave Technol.* **37** 4244
- [24] Alpeggiani F, Parappurath N, Verhagen E, Kuipers L 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021035
- [25] Benzaouia M, Joannopoulos J D, Johnson S G, Karalis A 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 033228
- [26] Benzaouia M, Joannopoulos J D, Johnson S G, Karalis A 2022 *Phys. Rev. Appl.* **17** 034018
- [27] Song A Y, Kalapala A R K, Zhou W, Fan S 2018 *Appl. Phys. Lett.* **113** 041106

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Mechanism study of all-dielectric metamaterial wideband reflector based on quasi-canonical mode*

Jiang Le-Xin[#] Xie Zhen-Long[#] Guo Ze-Hong
Qiu Yi-Ning Chen Yi-Hang[†]

(Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 1 June 2023; revised manuscript received 15 July 2023)

Abstract

All-dielectric metamaterial broadband reflectors have the advantages of low loss, high reflection efficiency, and compact structure. An in-depth understanding of the formation mechanism of their reflection bands is of great significance in optimizing metamaterial structure and performance, and in further designing novel photonic devices as well. In this work, two all-dielectric metamaterial broadband reflectors are constructed by using discrete silicon nanopillar array and silicon nanopillar array connected with a silicon sublayer. The quasi-normal modes of the metamaterial reflectors are solved. Combining the quasi-normal modes with the scattering matrix theory, we obtain the fitted reflection spectra of the metamaterial, and then reveal that the zero-frequency quasi-normal mode has a substantial influence on the accuracy of the fitting results. A dispersion relation analysis method is proposed to accurately solve the zero-frequency quasi-normal mode. Furthermore, the fitted resonance reflection spectrum and background reflection spectrum are obtained by using high- Q -value quasi-normal mode and low- Q -value quasi-normal mode, respectively. Our results show that the broadband reflection of the considered metamaterial reflectors should be attributed to the background reflection induced by the low- Q quasi-normal modes. The research method proposed in this paper can also be used for discussing quasi bound states in the continuum, Mie resonances, and other resonance phenomena, which provides a new way for interpreting the spectral characteristics of metamaterials.

Keywords: all-dielectric metamaterials, wide-band reflection, quasi-normal mode, scattering matrix

PACS: 78.20.Bh, 42.79.Fm, 77.84.-s

DOI: [10.7498/aps.72.20230915](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230915)

* Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2017A030313036) and the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 2019050001).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: yhchen@scnu.edu.cn

基于准正则模式的全电介质超材料宽带反射器机理

蒋乐昕 谢振龙 郭泽虹 丘伊宁 陈溢杭

Mechanism study of all-dielectric metamaterial wideband reflector based on quasi-canonical mode

Jiang Le-Xin Xie Zhen-Long Guo Ze-Hong Qiu Yi-Ning Chen Yi-Hang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204205 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230915

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230915>

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

基于非对称结构全介质超材料的类电磁诱导透明效应研究

Research on analogue of electromagnetically induced transparency effect based on asymmetric structure all-dielectric metamaterial
物理学报. 2021, 70(19): 194201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210070>

涂覆石墨烯的椭圆形电介质纳米线光波导的模式特性分析

Mode characteristic analysis of optical waveguides based on graphene-coated elliptical dielectric nanowire
物理学报. 2019, 68(5): 058101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182090>

基于涂覆石墨烯的三根电介质纳米线的THz波导的模式特性分析

Modes characteristics analysis of THz waveguides based on three graphene-coated dielectric nanowires
物理学报. 2018, 67(10): 108101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180036>

涂覆石墨烯的非对称并行电介质纳米线波导的模式特性分析

Mode properties analysis of graphene-coated asymmetric parallel dielectric nanowire waveguides
物理学报. 2018, 67(3): 038102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172016>

涂覆石墨烯的非对称椭圆电介质纳米并行线的模式分析

Mode characteristics of asymmetric graphene-coated elliptical dielectric nano-parallel wires waveguide
物理学报. 2020, 69(23): 238102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201041>

一种准零刚度声学超材料板的低频宽频带隔声行为

Broadband low-frequency sound insulation performance of quasi-zero stiffness local resonant acoustic metamaterial plate
物理学报. 2021, 70(24): 244302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211203>

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

纯四次孤子光纤激光器研究进展*

罗民 张泽贤 陈乃妙 刘萌 罗爱平 徐文成 罗智超†

(华南师范大学信息光电子科技学院, 广州 510631)

(2023 年 5 月 26 日收到; 2023 年 6 月 28 日收到修改稿)

纯四次孤子光纤激光器是一种新型的超短脉冲激光器, 能够在四阶色散和自相位调制效应平衡下保持脉冲形状稳定传输. 相比于二阶色散主导下的常规孤子激光器, 纯四次孤子激光器输出的锁模脉冲能量可以高出 1—2 个数量级, 这将为研制高能量、高峰值功率的光纤激光器提供新思路. 本文系统地回顾了近年来在光纤激光器等非线性光学系统中纯四次孤子的产生以及传输特性, 并探讨了纯四次孤子中已观察到的一些特殊瞬态动力学现象. 同时, 介绍了笔者所在课题组在该研究方向上的最新成果. 最后, 本文对纯四次孤子光纤激光器的应用前景以及发展趋势进行展望, 为相关领域未来的研究提供有价值的参考. 这些结果将有助于更全面认识纯四次孤子光纤激光器的基本物理特性.

关键词: 纯四次孤子, 光纤激光器, 动力学, 四阶色散, 自相位调制效应**PACS:** 42.55.Wd, 42.65.-k, 42.65.Tg, 42.81.-i**DOI:** 10.7498/aps.72.20230868

1 引言

光孤子作为非线性系统中稳定局域结构的一种有趣现象, 在光频梳^[1,2]、超快激光技术^[3-5]以及非线性成像^[6,7]等前沿科学技术的发展中具有重要的推动作用. 通常情况下, 光孤子的稳定传输需要非线性效应如自相位/交叉相位调制与光纤色散相平衡^[8,9]. 为了实验研究光孤子的形成和动力学特性, 光纤激光器一直被认为是较为理想的平台. 目前, 光纤激光器具有高可靠性、优质光束质量、高稳定性以及易于与光纤系统兼容等性能优势, 是超快激光技术未来发展的重要载体^[10]. 在实际应用中, 为了提高孤子光纤激光器的性能参数, 可以通过调节多种灵活的参数来实现, 如光纤色散、非线性效应、腔内增益以及损耗等. 通过调控光纤谐振腔内的色散量, 孤子光纤激光器可以实现不同工作状态之间的转换. 在早期的研究中, 孤子光纤激光

器主要集中于反常色散区域^[11,12]. 然而, 输出的传统孤子脉冲能量受到孤子面积理论的限制^[13,14], 在峰值功率较高的情况下, 孤子脉冲会发生分裂或坍塌现象, 从而限制了孤子脉冲能量在皮焦量级. 色散参量通常决定孤子脉冲传输过程中的压缩或展宽, 对激光器的峰值功率具有极大的影响. 为了避免腔内因峰值功率过高积累过多的非线性效应, Tamura 等^[15]提出将腔内正、反常色散光纤交替排列的色散管理方法, 以获得脉冲能量更高、脉宽更窄的色散管理孤子. 受色散管理思想的引导, 2006 年 Chong 等^[16]在腔内加入滤波器, 实现在 1.0 μm 波段全正色散掺镱光纤激光器, 获得了稳定的耗散孤子锁模脉冲. 因此, 通过腔内色散调控, 可以实现在传统孤子、色散管理孤子和耗散孤子之间的转化, 同时, 孤子脉冲能量也实现了从传统孤子的皮焦量级提升到耗散孤子的纳焦量级.

通常情况下, 超快光纤激光器中超短脉冲稳定传输只需考虑非线性效应和二阶色散之间的平衡.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874018, 11974006, 61805084, 61875058) 和广东省自然科学基金 (批准号: 2022A1515011760, 2021A1515012315) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zclu@scnu.edu.cn

高阶色散往往会对孤子激光器的性能产生不利影响,如导致脉冲畸变以及色散波发射等.然而,最近的实验表明,基于四阶色散主导的纯四次孤子可以实现.更为重要的是,相比传统孤子,纯四次孤子锁模脉冲能量可以提高几个数量级,这为直接产生高能量变换极限的短脉冲光纤激光器的研制提供了新的契机.实际上,高阶色散对孤子传输的影响的相关研究早已广泛开展,甚至可以追溯到20世纪80年代. Blow等^[17]在研究中发现,即使存在反常四阶色散的影响,短脉冲仍能够通过色散和自相位调制效应平衡而实现稳定传输,这是在不考虑光纤中增益的条件下实现的.随后,在1994年, Karlsson和 Höök^[18]进一步详细研究了四阶反常色散作用下的脉冲非线性动力学过程,理论预言了四阶反常色散条件下存在类孤子脉冲,并观察到脉冲前后沿具有振荡结构.同年, Christov等^[19]通过数值模拟四阶反常色散对脉冲窄化的影响.1996年, Piché等^[20]在理论上证明了孤子脉冲在四阶反常色散情况下仍具有稳定的孤子解.此外,2013年, Roy和 Biancalana^[21]发现孤子脉冲在仅存在四阶反常色散和自相位调制效应平衡的情况下仍可以实现稳定的传输,并提出“四次孤子”的概念.四次孤子概念的提出引起了极大关注,科学家们将纯四次孤子概念与光纤激光器相结合,提出了一种新型孤子光纤激光器——纯四次孤子光纤激光器^[22–24].近年来,国内外对纯四次孤子光纤激光器的研究取得了极大进展,包括传统纯四次孤子光纤激光器^[23]、自相似纯四次孤子光纤激光器^[25]以及耗散纯四次孤子光纤激光器^[26].同时,光纤激光器实际上也是一个耗散光学系统,在二阶色散主导下的此类非线性系统中,观察到了许多有趣的孤子动力学现象,例如孤子脉动^[27–30]、孤子爆炸^[27,28,31–34]以及孤子碰撞^[35,36]等.理论表明,高阶色散效应同样对孤子动力学具有重要影响,如三阶色散导致孤子不稳定性^[37,38],四阶色散可以产生特定频率的辐射^[39–41].因此,纯四次孤子光纤激光器作为一种由四阶色散主导的光纤激光器,将会产生更为奇特和复杂的动力学现象,对其研究也将进一步揭示孤子的物理本质.

本文综述了国内外关于纯四次孤子光纤激光器的最新研究进展.同时,介绍了笔者课题组在该领域的最新成果,并对未来的发展前景进行了展望.这些工作有助于优化纯四次孤子光纤激光器的

性能,深入了解其物理特性,为未来的研究提供参考.笔者相信,随着技术的不断发展,纯四次孤子光纤激光器将会成为超快光纤激光技术中的重要组成部分,展现更加广阔的应用前景.

2 纯四次孤子光纤激光器研究进展

纯四次孤子是由四阶色散和自相位调制相互作用产生.为研究这种现象,需要使用具有特殊性质的材料.这种材料需要同时具有大的四阶色散、较小的二阶色散和可忽略的三阶色散特性.研究人员最初将目光聚焦在光子晶体上,但由于其存在光子带隙,使得光在其中传播变得非常困难.然而,在周期性结构中引入线性缺陷形成光子晶体波导,可以观察到孤子现象.在波导中,光与物质相互作用时会发生双光子吸收,这会导致自由载流子密度增大,进而影响波导的折射率.这相当于在波导中引入非线性诱导的自由载流子色散效应.通过色散工程的手段可以控制波导中有效折射率、群速度色散以及高阶色散,这为光子晶体波导在纯四次孤子领域的应用提供了有效的手段^[42].2014年, Blanco-Redondo等^[43]通过使用色散管理光子晶体波导成功实现了皮秒脉冲的高阶孤子压缩.2016年,他们利用这种特殊设计的光子晶体波导,首次在实验上实现了由四阶反常色散主导的纯四次孤子传输^[22].图1(a)展示了纯四次孤子产生的原理.负四阶色散会导致脉冲的时间展宽,但不会改变光谱形状.自相位调制则会导致光谱的展宽,但不会影响脉冲的形状.当这两种效应相互作用时,可以实现纯四次孤子的稳定传输.实验中使用的装置包括锁模激光器、光子晶体波导、可调谐延时线、超快光电二极管、马赫-曾德尔调制器以及光谱分析仪,如图1(b)所示.通过这些装置可以对在光子晶体波导传输过程中脉冲的强度和相位信息进行测量.图1(c)为扫描电子显微镜下光子晶体波导图像.此外,基于干涉技术测量的光子晶体波导色散结果也显示出这种特殊光子晶体波导具有较小的二阶正色散和大的负四阶色散特性,如图1(d)所示.

实验中将脉宽为1.3 ps,中心波长为1550 nm的高斯脉冲注入图1(b)的实验装置中,并在不同输入峰值功率下得到了实验和模拟结果,如图2所示.图2展示了输出的时域脉冲和频域光谱图像.在功率为0.07 W时,由于非线性效应可以忽略不

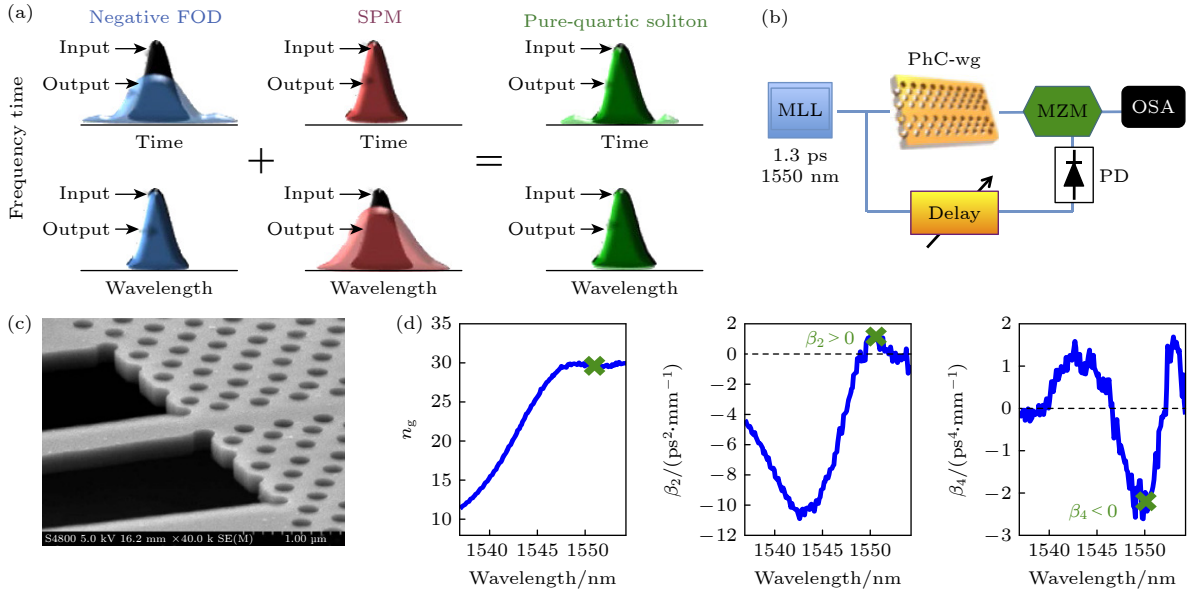


图 1 纯四次孤子概念及其及实验证明^[22] (a) 纯四次孤子原理图; (b) 频率分辨电开关; (c) 扫描电子显微镜下的样品图像; (d) 光子晶体波导的色散测量

Fig. 1. Concept of pure-quartic solitons and their experimental demonstration^[22]: (a) Schematic of pure-quartic solitons; (b) frequency-resolved electrical gating; (c) scanning electron microscopy image of the sample; (d) measured dispersion of the photonic crystal waveguides.

计且光谱不受色散效应的影响, 因此没有显著的光谱效应. 在功率增大为 0.7 W 情况下, 非线性可以平衡四阶色散并观察到基阶的纯四次孤子, 测量结果 (红色) 与模拟 (蓝色) 结果一致, 并且脉冲具有平坦的相位, 这是孤子的基本特征^[44]. 在较高功率 2.5 W 和 4.5 W 条件下, 光谱会展宽并分裂成两个峰值, 具有高阶孤子的光谱特征. 同时, 光谱发生蓝移并表现出不对称特性. 此外, 脉冲的相位在高功率下会出现明显的非线性时域窄化现象. 在该系统中, 二阶色散并不起主要作用, 而由于三阶色散可以忽略不计, 孤子行为完全由四阶色散和自相位调制的相互作用形成. 2018 年, Lo 等^[45] 表明纯四次孤子也可以存在于二氧化硅光子晶体光纤中. 也就是说, 纯四次孤子可以存在于任何具有四阶色散主导的非线性介质中.

2019 年, Tam 等^[46] 通过数值模拟发现, 纯四次孤子脉冲具有近似高斯时域剖面, 并伴随着振荡尾, 如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 此外, 图 3(c) 和图 3(d) 线性和对数尺度上显示了相关的归一化光谱. 典型特征是纯四次孤子光谱在峰值附近平缓, 这是由时域振荡尾造成的. 值得注意的是, 纯四次孤子的时间带宽积为 0.53, 与传统孤子的 0.32 不同.

2020 年, Runge 等^[23] 进一步将纯四次孤子的概念与光纤激光器相结合, 通过使用光谱脉冲整形

器控制四阶反常色散, 在掺铒光纤激光器内首次实现了纯四次孤子模式的运转. 光谱脉冲整形器的基本单元是像素, 每个像素在外加电场的作用下, 其折射率可以被调控. 通过将许多这样的像素排列在一起, 并通过编程方式改变施加在每个像素上的电压, 可以形成任意的位相掩模. 这样的装置可以实现对特定阶次色散 (例如群速度色散、三阶色散和四阶色散) 的补偿. 图 4 展示了纯四次孤子光纤激光器的原理示意图. 其中, 图 4(a) 为实验装置图. 图 4(b) 为光谱脉冲整形器可以补偿腔内色散相反的二阶相位掩模, 从而使腔内净二阶色散补偿为零. 同时, 光谱脉冲整形器可以提供较大的负四阶色散相位掩模, 如图 4(c) 所示.

研究人员对纯四次孤子光纤激光器的输出特性进行测量. 在光谱脉冲整形器不提供相位补偿时, 该激光器工作在常规孤子区域, 实验和理论模拟结果如图 5(a)—(d) 所示, 光谱具有 Kelly 边带^[47], 为典型的传统孤子. 当通过脉冲整形器补偿相位并引入大量负四阶色散后, 实验和理论模拟结果如图 5(e)—(h) 所示. 与传统孤子相比, 纯四次孤子频率的四次方和其阶次对应, 且满足线性关系. 通常情况下, 孤子会以色散波的形式释放能量, 这些色散波与光谱中的某些频率满足相位匹配条件从而相长干涉, 从而在孤子谱中形成一个强而窄的边带.

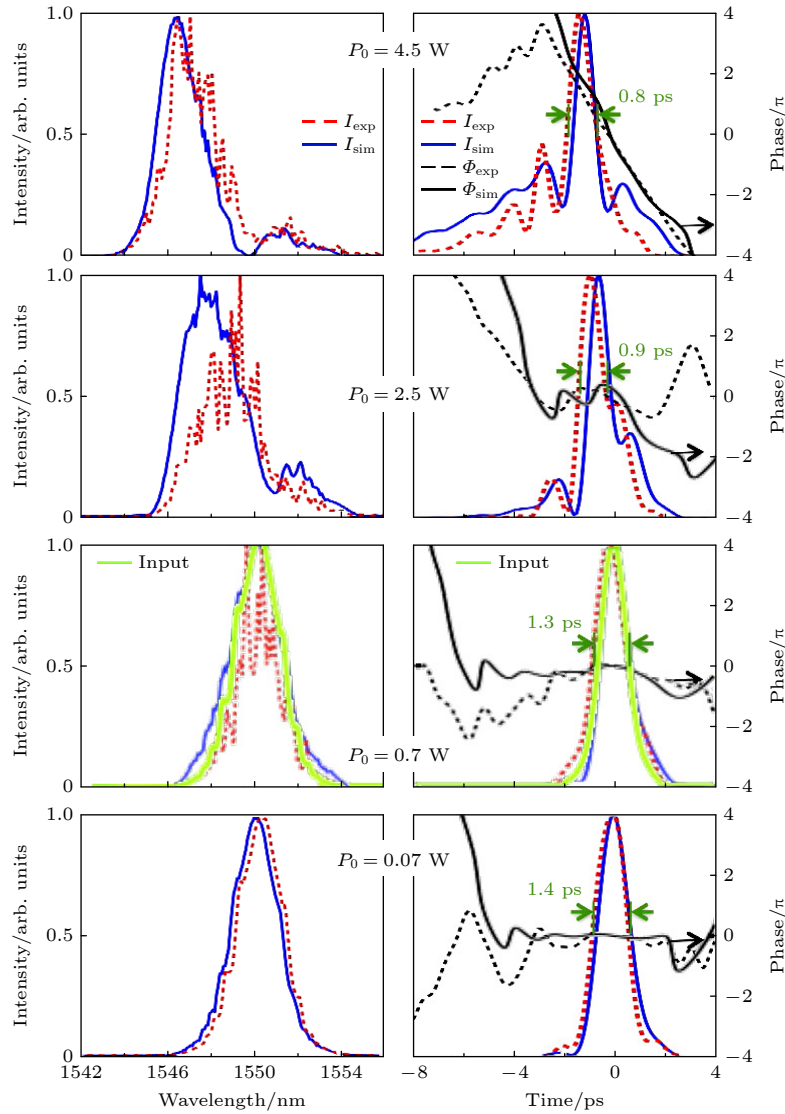


图 2 不同输入功率下的频域和时域结果 (红色虚线为实验结果, 蓝色实线为模拟结果)^[22]

Fig. 2. Frequency domain and time domain results at different input powers (the red dashed line is the experimental result, and the solid blue line is the simulation result)^[22].

边带理论通常被用来确认净色散值^[12], 并为此提供理论依据. 通过测量光谱边带位置, 可以计算出腔内的净色散大小. 在纯四次孤子中, 最重要特征是能量尺度得到提升, 研究人员计算纯四阶孤子脉冲能量和脉冲宽度的关系, 结果表明纯四阶孤子能量与脉冲宽度的三次方成反比, 因此其脉冲分裂阈值高. 也就是说, 在脉冲宽度足够窄的条件下, 可以大幅度提升反常色散光纤激光器中脉冲峰值功率, 为孤子激光器输出高能量的变换极限脉冲提供了一种全新的思路.

通常情况下, 二阶色散主导的孤子激光器除了基于反常色散的传统孤子激光器外, 还包括正色散区域的自相似孤子激光器和耗散孤子激光器. 在考

虑到纯四次孤子和传统孤子物理相似性的情况下, Runge 等^[25]于 2020 年基于分步傅里叶法研究了基于正四阶色散中的自相似演化. 图 6(a) 展示了模拟中激光器系统结构图, 包括 7 m 长的无源四阶色散光纤、1 m 长的有源四阶色散光纤、可饱和吸收体、输出耦合器以及滤波器. 脉冲形状和光谱如图 6(b) 和图 6(c) 所示, 时域上呈三角形脉冲, 频域上表现为双峰结构. 可以看出, 在四阶正色散作用下, 脉冲向新的渐进解演化, 其时域和频域曲线与二阶色散情况下有着显著差异. 理论结果表明, 自相似纯四次孤子脉冲在传输过程中保持形状不变, 脉冲强度与时间 $T^{4/3}$ 成正比, 并且瞬时频率变化与时间 $T^{1/3}$ 成正比, 这对应于双峰光谱的产生.

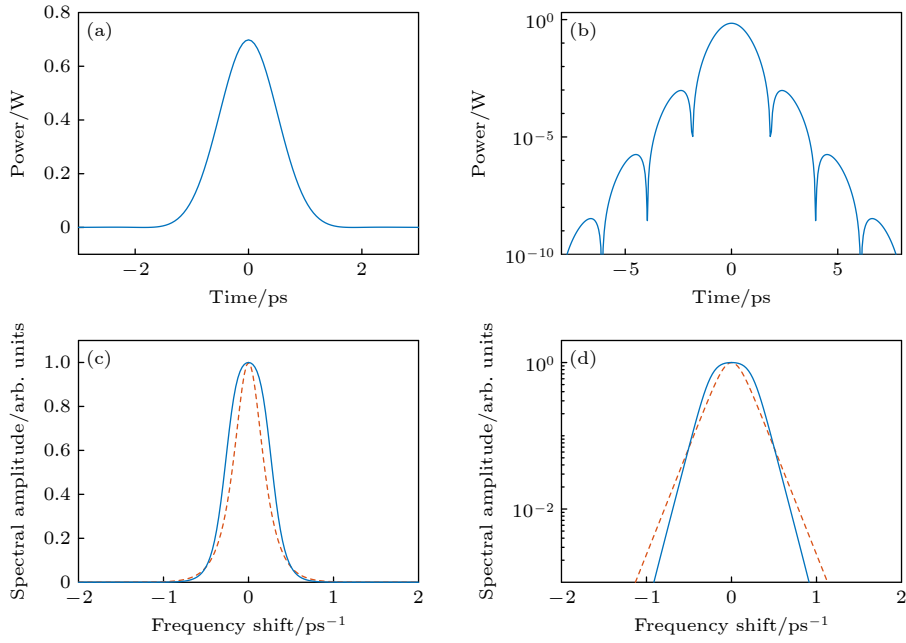


图 3 纯四次孤子输出特性 (a) 线性坐标下的时域脉冲; (b) 对数坐标下的时域脉冲; (c) 线性坐标下的频域光谱; (d) 对数坐标下的频域光谱 (红色为常规孤子光谱)^[46]

Fig. 3. Output characteristics of pure-quartic solitons: (a) Time domain pulses at linear coordinates; (b) time domain pulses at logarithmic coordinates; (c) frequency domain spectrum in linear coordinates; (d) frequency domain spectrum in logarithmic coordinates (red is the spectrum of traditional soliton)^[46].

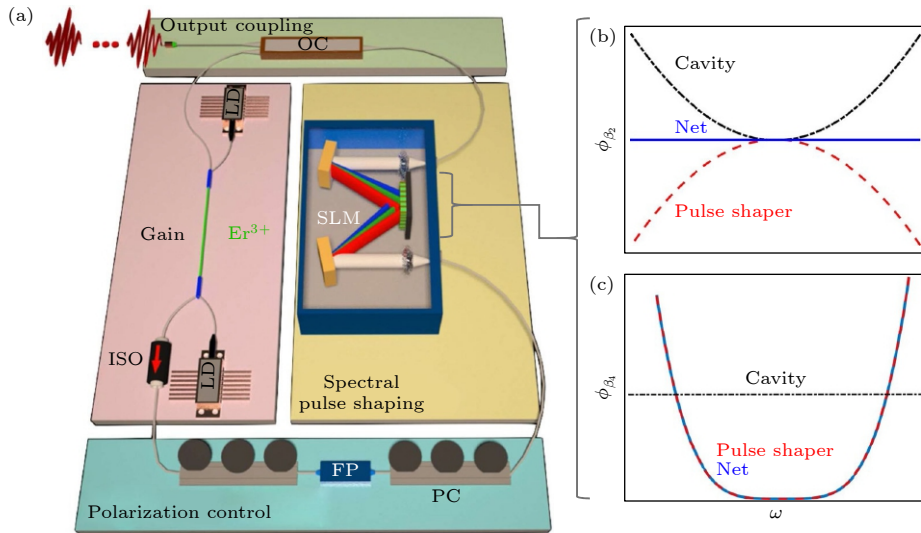


图 4 纯四次孤子光纤激光器原理示意图 (a) 实验装置图; (b) 二阶色散相位; (c) 四阶色散相位^[23]

Fig. 4. Schematic diagram of pure-quartic fiber soliton laser: (a) Experimental setup; (b) second-order dispersion phases; (c) fourth-order dispersion phases^[23].

自相似孤子光纤激光器的脉冲演化与正四阶色散的时频特性密切相关. 在受到正四阶色散下形成自相似孤子的启发后, 笔者课题组在分布式正四阶色散光纤激光器模型中, 利用分步傅里叶方法, 发现了耗散纯四次孤子的形成^[26]. 图 7 展示了耗散纯四次孤子激光器的输出结果. 其中, 图 7(a) 为线性和对数坐标下的光谱, 光谱呈现

“M”型. 图 7(b) 为脉冲强度和啁啾, 与二阶色散主导下的耗散孤子时域脉冲轮廓不同, 耗散纯四次孤子时域脉冲有对称基座. 这是由于正四阶色散会导致脉冲在两侧的拉伸速度高于中心部分. 此外, 频率啁啾在中心部分几乎是线性的, 在两侧会发生变化. 图 7(c) 和图 7(d) 分别为 1000 圈下的频域和时域演化图.

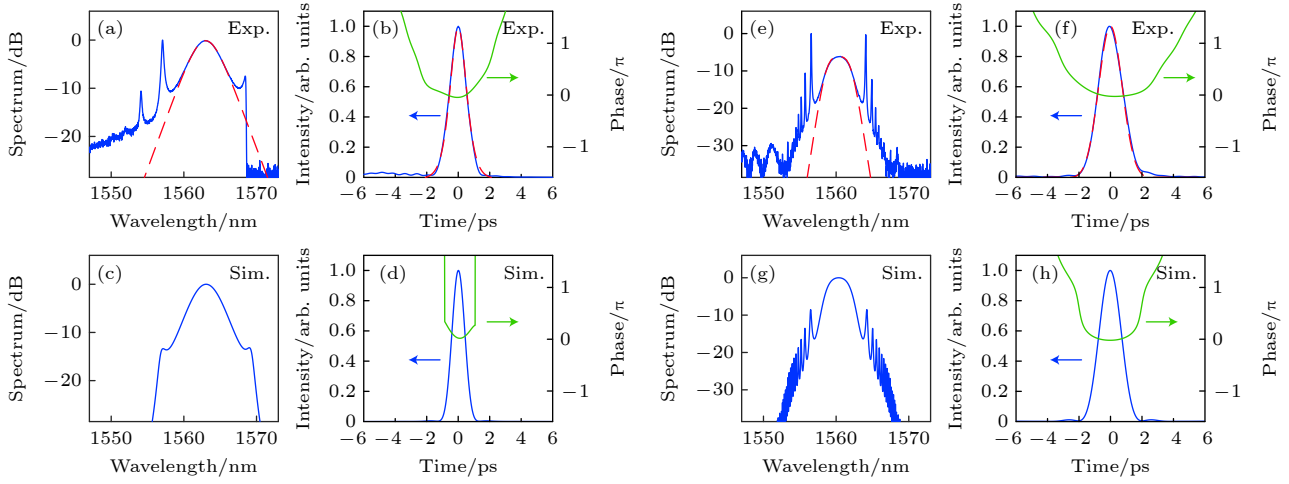


图 5 实验和模拟上的光谱和时域曲线 (a)—(d) 传统孤子; (e)—(h) 纯四次孤子^[23]

Fig. 5. Experimental (exp.) and simulated (sim.) spectra and time-domain curves: (a)—(d) Conventional solitons; (e)—(h) pure-quartic solitons^[23].

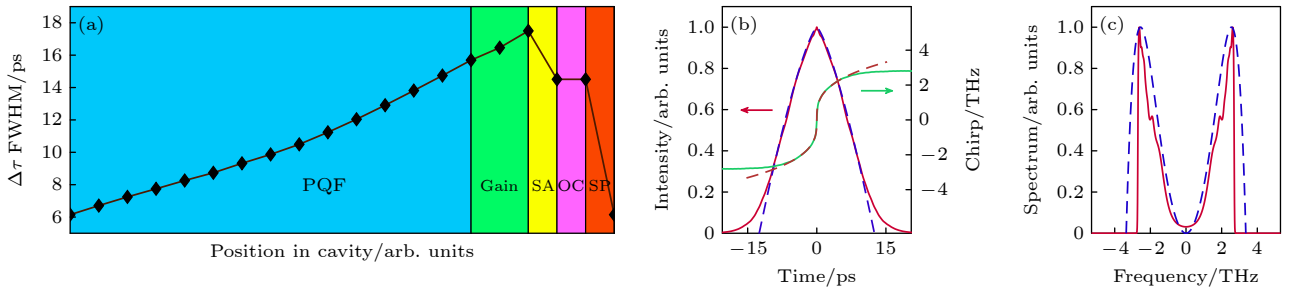


图 6 自相似纯四次孤子激光器 (a) 模拟结构图; (b) 时域曲线; (c) 频域曲线^[25]

Fig. 6. Self-similar pure-quartic soliton laser: (a) Simulation structure diagram; (b) time domain curves; (c) frequency domain curves^[25]

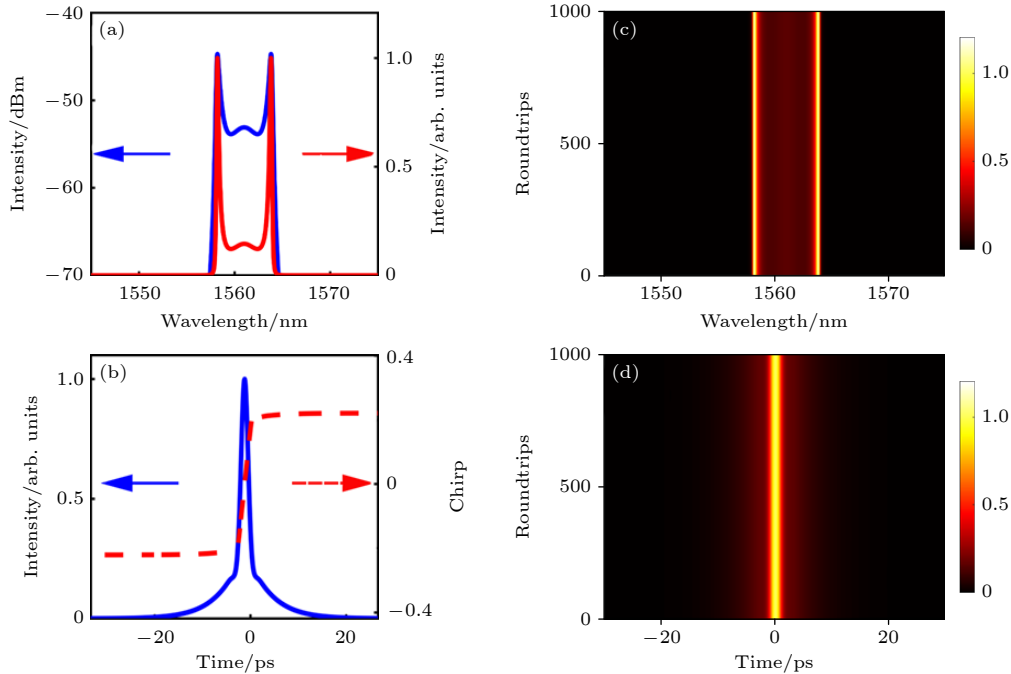


图 7 耗散纯四次孤子^[26] (a) 线性与对数坐标下的光谱; (b) 脉冲和啁啾; (c), (d) 1000 圈下的频域和时域演化

Fig. 7. Dissipative pure-quartic solitons^[26]: (a) Spectrum with log and linear coordinates; (b) pulse and chirp; (c), (d) evolution of frequency domain and time domain with 1000 roundtrips.

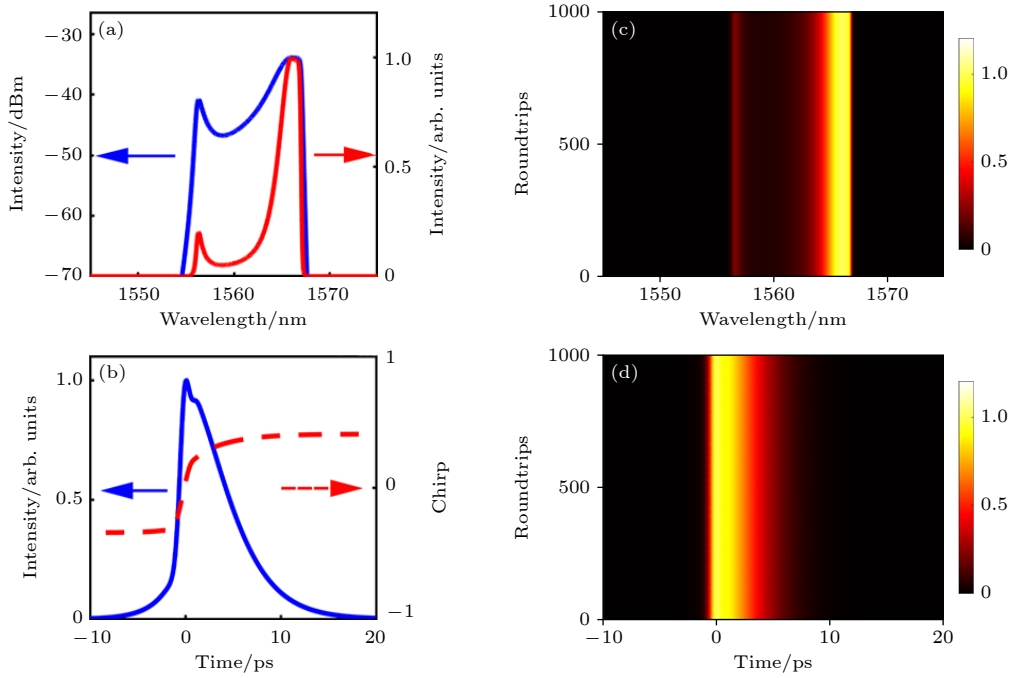


图 8 非对称“M”型耗散纯四次孤子^[26] (a) 线性与对数坐标下的光谱; (b) 脉冲 (蓝色) 和啁啾 (红色); (c), (d) 1000 圈下的频域和时域演化

Fig. 8. Asymmetric “M” type dissipative pure-quartic solitons^[26]: (a) Spectrum with log and linear coordinates; (b) pulse (blue) and chirp (red); (c), (d) evolution of frequency domain and time domain with 1000 roundtrips.

通过增大增益饱和功率, 观察到了一种非对称“M”型光谱, 如图 8 所示. 图 8(a) 展示了线性和对数坐标下的光谱, 呈现出非对称的“M”型. 这是由于腔内能量过高导致脉冲在演化过程中积累的非线性效应增大, 自相位调制和四阶正色散引起的相移不匹配所导致的结果. 图 8(b) 显示了脉冲强度和啁啾, 时域脉冲同样表现出非对称的特性. 图 8(c) 和图 8(d) 展示了 1000 圈下的频域和时域演化图.

研究表明二阶色散以及四阶主导下的孤子可以实现激光器的稳定传输. 但是, 是否可以在光纤中实现更高阶的偶次阶色散与非线性之间的匹配呢? 研究人员发现, 纯高阶色散孤子同样可以实现与非线性之间的平衡, 因此被命名为纯高次孤子^[48]. 图 9 展示了纯六次、纯八次和纯十次孤子的频域和时域图. 其中, 图 9(a)—(c) 为测量光谱 (蓝色) 和数值计算光谱 (红色虚线), 光谱相比图 5 中纯四次孤子更加平坦. 图 9(d)—(f) 为测量频谱图. 此外, 图 9(g)—(i) 为时域强度 (蓝色)、相位 (橙色) 和相应的计算时域形状 (红色虚线). 实验结果与数值计算结果在高阶色散孤子光纤激光器中吻合良好.

3 瞬态动力学研究进展

孤子光纤激光器不仅能产生高性能的超短脉冲光源, 还是研究非线性现象和孤子动力学的理想平台. 传统孤子激光器中, 研究已经揭示了光孤子在激光腔内的许多不同寻常的瞬态动力学特性, 这些特性有助于深入探索孤子的本质特征. 纯四次孤子属于孤子家族中的成员, 很多物理性质与传统孤子相似. 然而, 纯四次孤子也会表现出一些特有的属性, 例如脉冲振荡尾行为. 这里, 笔者希望从纯四次孤子独特动力学现象出发, 来进一步探究孤子的本质.

2021 年, Widjaja 等^[49]指出纯四次孤子不具有伽利略不变性. 通常情况下, 自相位调制和二阶色散相互作用产生的光孤子具有伽利略不变性, 因为它们的性质不依赖于群速度. 然而, 在四阶色散主导下的纯四次孤子中, 群速度的变化必然会影响非零二阶和三阶色散, 从而不符合伽利略不变性. 为了验证, 研究人员在数值模拟中保持设置的非线性效应参数恒定, 在改变两个脉冲初始的相位差时, 发现各种不同类型的碰撞动力学结果, 如图 10 所示.

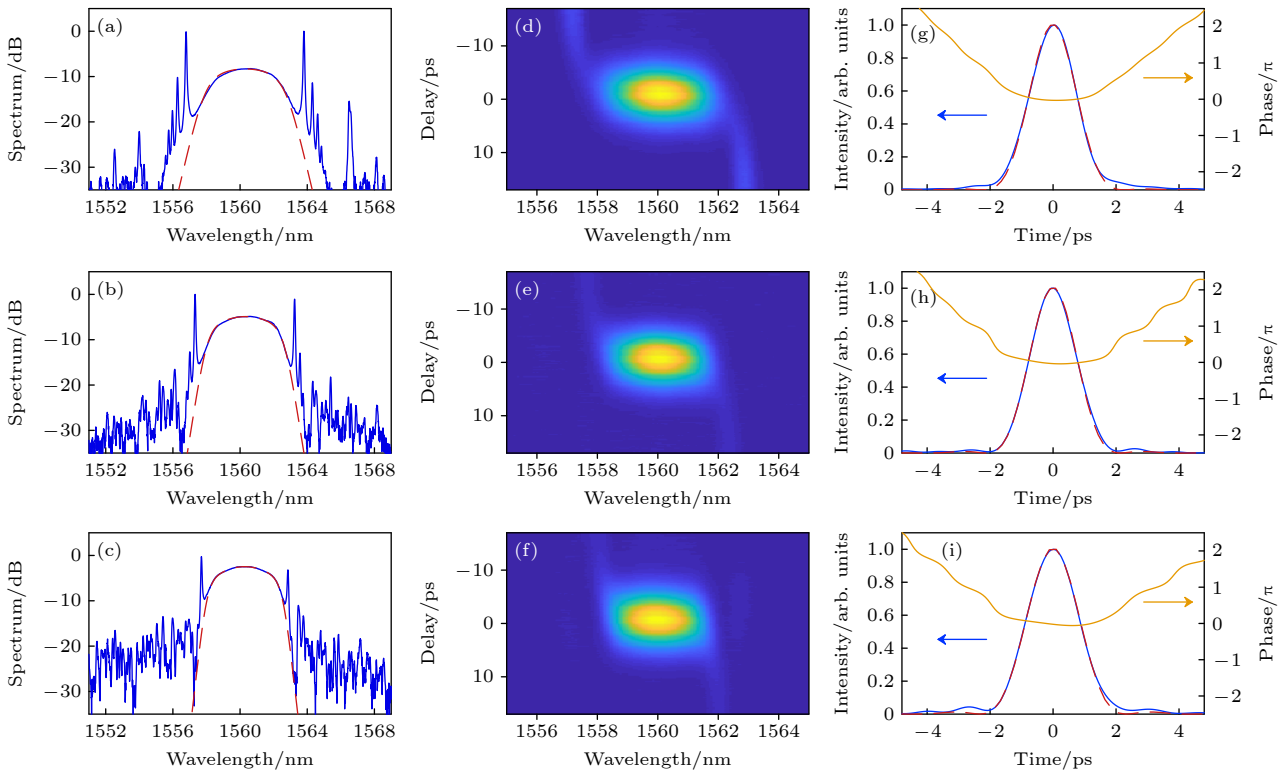


图 9 纯高阶色散孤子六次色散(上行)、八次色散(中行)和十次色散(下行)的频域和时域测量 (a)—(c) 测量光谱(蓝色)和计算光谱(红色虚线); (d)—(f) 频谱图; (g)—(i) 时域强度(蓝色)、相位(橙色)以及相应的计算时域形状(红色虚线)^[48]

Fig. 9. Spectral and temporal measurements of pure high-order dispersion solitons sextic (top row), octic (middle row), and decic (bottom row) dispersion: (a)—(c) Measured (blue) and calculated (red-dashed) spectrum; (d)—(f) spectrograms; (g)—(i) temporal intensity (blue), phase (orange), and corresponding calculated temporal shapes (red-dashed)^[48].

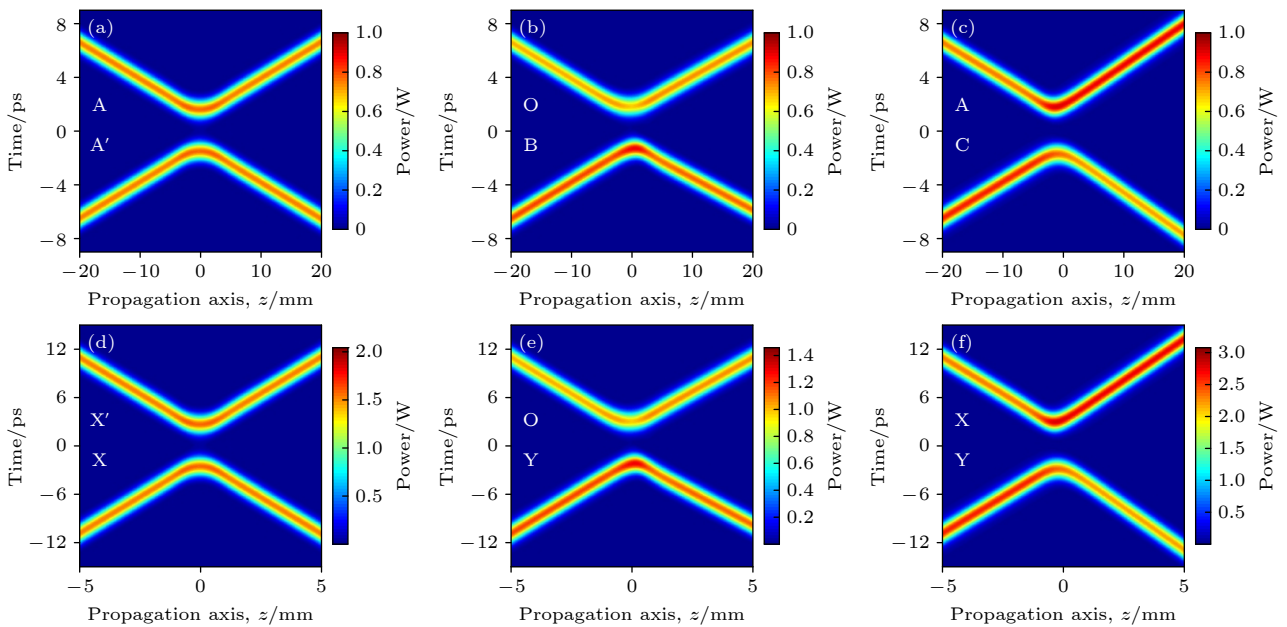


图 10 纯四次孤子在不同初始相位差条件下碰撞动力学^[49]

Fig. 10. Collision dynamics of pure-quartic solitons with different initial phase differences^[49].

纯四次孤子还有一个独特的特性, 即脉冲振荡尾. 自相位调制和四阶色散引起的相移不完全匹配, 导致纯四次孤子在时域上显示出振荡尾特性,

这可能会导致能量重新分布. 然而, 在以二阶色散为主导的常规孤子激光器中, 群速度色散与自相位调制之间实现了完美的相位抵消. 这种平衡状态的

实现有效抑制了孤子振荡尾的出现. 2022年, 笔者课题组^[50]通过数值研究纯四次孤子光纤激光器中的脉动动力学现象. 在稳定锁模状态条件下, 通过增大系统的饱和能量, 纯四次孤子将变成具有周期性振荡的状态, 如图 11 所示. 其中图 11(a) 展示了纯四次孤子脉动区的时域演化, 呈脉动状态并随时间偏移, 周期为 70 个腔往返, 也称为爬行孤子状态. 图 11(a) 中的两条最下方曲线显示了脉动纯四次孤子的中心部分 (绿色) 和振荡尾部 (白色) 的能量演化, 展示了脉动过程中的能量分配过程. 图 11(b) 则展示了频域光谱演化过程, 可以观察到纯四次孤子的周期性波长偏移.

通常情况下, 倍周期分岔 (脉动区) 是通向混沌状态的重要途径^[51]. 对于二阶色散主导的传统孤子, 随着峰值功率的增大, 在经历脉动状态后,

孤子往往会进入混沌状态. 然而, 由于四阶色散和自相位调制引起的相移之间的不完全平衡, 会导致孤子主峰和振荡尾进行能量交换, 从而使纯四次孤子的振荡尾中产生的色散波部分恢复. 此外, 由于自组织效应, 脉动孤子的振幅和轮廓会因为色散波辐射而产生周期性振荡. 因此, 考虑到纯四次孤子独特的时域特性, 了解纯四次孤子随着峰值功率增大的脉动动力学具有重要意义. 为了研究纯四次孤子光纤激光器中的脉动动力学现象, 通过增大系统的饱和能量, 观察纯四次孤子在稳定锁模状态下的脉冲演化. 在这里, 我们观察到一个不同于传统孤子的现象, 纯四次孤子不会在脉动区域之后直接演化为混沌状态. 相反, 当饱和能量设置为较高值时, 纯四次孤子光纤激光器再次变得稳定. 图 12(a) 为纯四次孤子的峰值强度随着饱和能量增大的演化.

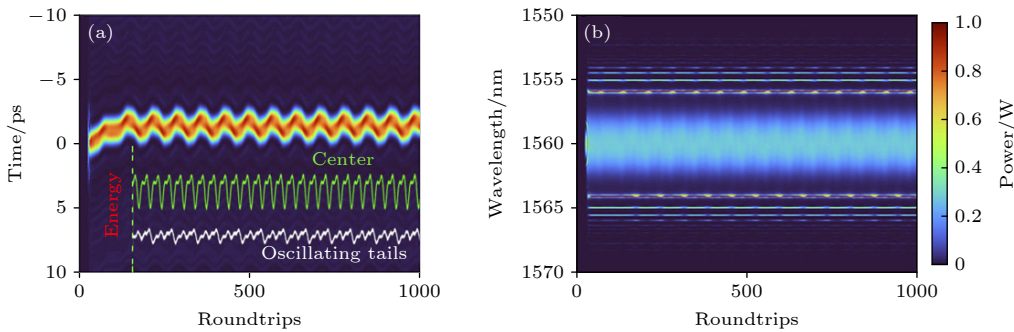


图 11 纯四次孤子的脉动状态^[50] (a) 时域的演化 (插图为纯四次孤子中心部分 (绿色) 和振荡尾 (白色) 的能量演化); (b) 光谱域的演化

Fig. 11. Pulsation state of pure-quartic solitons^[50]: (a) Evolution of the time domain (energy evolution of the pure quadruple soliton center (green) and oscillating tail (white)); (b) evolution of the spectral domain.

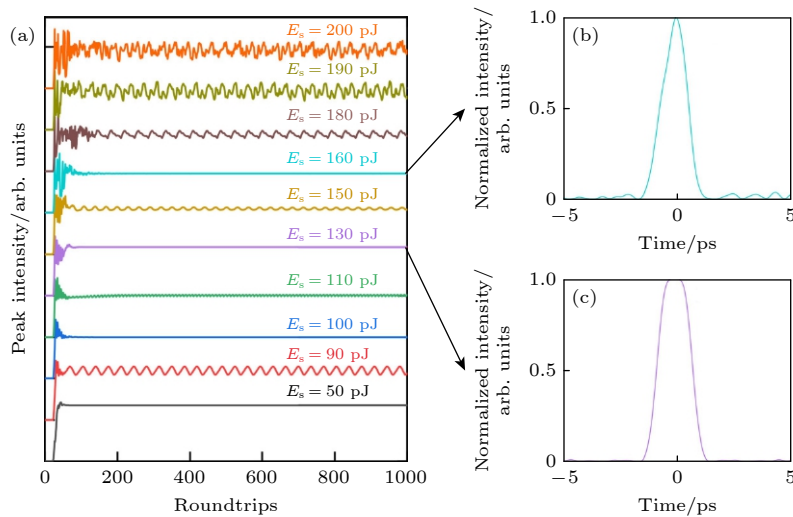


图 12 (a) 具有不同饱和能量值的纯四次孤子的归一化峰值强度演化; (b), (c) 不同饱和能量下脉冲的两个典型分布^[50]

Fig. 12. (a) Normalized peak intensity evolution of pure-quartic solitons with different saturation energy values; (b), (c) two typical pulse distributions under different saturated energies^[50].

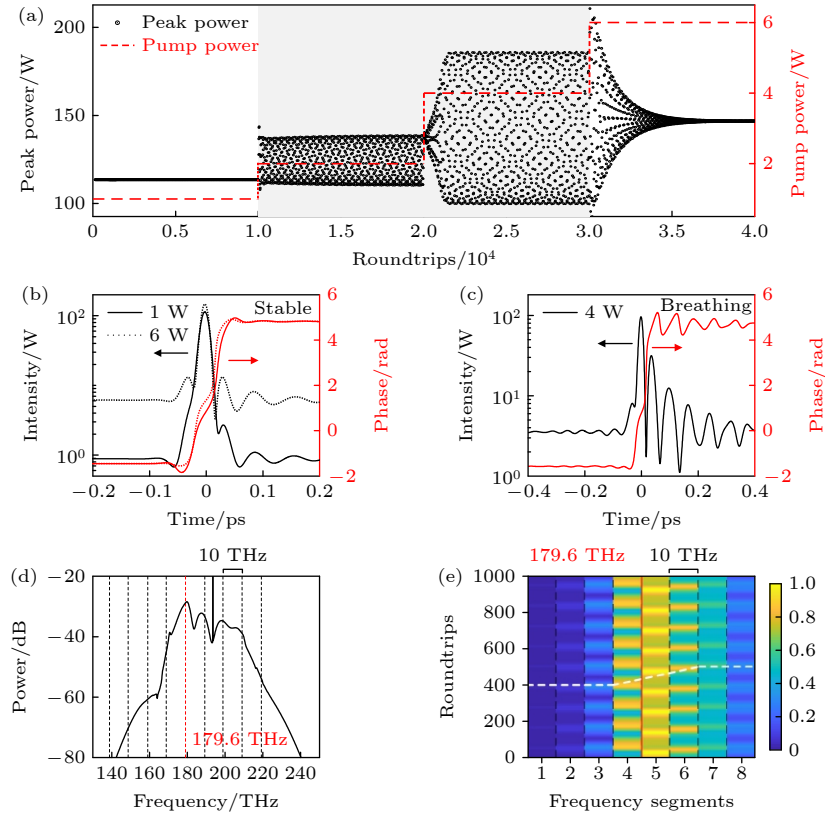


图 13 (a) 拉曼效应下纯四次孤子的峰值功率 (黑点) 与泵浦功率 (红色虚线) 的关系 (呼吸状态由灰色区域显示); (b) 稳定状态 (泵浦功率为 1 W, 6 W) 和 (c) 呼吸状态 (泵浦功率为 4 W) 的时域脉冲及其相应相位 (红线); (d) 4 W 泵浦功率下拉曼纯四次孤子呼吸的典型频谱; (e) 呼吸状态谱能量演化 (白色虚线表示不同段的光谱能量峰值)^[52]

Fig. 13. (a) The relationship between peak power (black dot) and pump power (red dashed line) of Raman pure-quartic solitons (the breathing state is shown by the gray area); (b) time domain pulses in stable state (pump powers are 1 W and 6 W) and (c) breathing state (pump power is 4 W) and corresponding phases (red line); (d) typical breathing spectrum of Raman pure-quartic solitons at pump power of 4 W; (e) energy evolution of the breathing spectrum (the white dotted lines indicate the spectral energy peaks in different segments)^[52].

可以看出, 纯四次孤子光纤激光器在进入混沌状态之前, 表现出稳定的单孤子态和脉动态之间的多重交替行为. 研究表明, 四阶色散会导致孤子的对称振荡尾产生. 在不同的孤子峰值功率下, 可以观察到纯四次孤子的中心部分和振荡尾部的能量再分配. 图 12(b) 和图 12(c) 为多次交替过程中纯四次孤子的两个典型分布, 展示了随着饱和和能量的增大而发生的能量再分配, 这种能量再分配导致纯四次孤子峰值功率的动态变化. 纯四次孤子光纤激光器的脉动动力学表现出独特的特性, 对于实际应用中的纯四次孤子激光器的设计和优化具有重要意义.

同样地, Liu 等^[52] 也研究了拉曼效应下的纯四次孤子, 发现这种特殊的动力学现象. 通过改变泵浦功率在 1—6 W 区间内观察纯四次孤子的演化. 结果显示, 当泵浦功率低于 1 W 时, 孤子处于稳定状态. 在泵浦功率为 2—4 W 时, 孤子会出现呼吸

行为. 而当泵浦功率进一步提升至 6 W 时, 孤子仍然处于稳定状态, 而不是混沌状态. 这种演变过程是可逆的, 结果如图 13(a) 所示. 图 13(b) 为泵浦功率为 1 W 和 6 W 时稳定状态下的时域脉冲轮廓和相位, 而图 13(c) 则为泵浦功率为 4 W 时呼吸状态下的时域脉冲轮廓和相位. 图 13(d) 为呼吸状态下的典型频谱. 同时, 图 13(e) 为呼吸状态下的能量演化过程, 其中白色虚线表示不同段的光谱能量峰值. 这些研究结果表明, 纯四次孤子在不同条件下将表现出不同的动力学特性.

4 结论与展望

近年来, 随着应用基础研究的深入, 超快光纤激光技术面临着新增的需求和挑战. 纯四次孤子激光器这种新颖工作模式为超快激光器注入新的活力, 吸引了众多研究者的关注. 本文聚焦于最近纯四

次孤子光纤激光器的研究进展,总结了传统纯四次孤子、自相似纯四次孤子以及耗散纯四次孤子激光器的输出特性.同时,总结了纯四次孤子中的独特的动力学现象,有助于进一步揭示纯四次孤子的本质.在以往的理论中,四阶色散的作用通常被视为次要的色散效应,因为高阶色散可能导致孤子不稳定性 and 能量损失.然而,随着纯四次孤子的出现,这种观点得到了很大改变.常规孤子和纯四次孤子都属于孤子家族成员,具有很多类似的特征.但是,纯四次孤子脉冲有着最显著优点,主要体现在脉冲能量提升上.在常规孤子激光器中,能量与其脉宽成反比;也就是说,在脉冲宽度减少一半的情况下,就会提升2倍的能量.而对于纯四次孤子激光器,能量与脉宽的三次幂成反比.这样在脉冲宽度减小一半的情况下,能量将提高8倍.目前,纯四次孤子光纤激光器的研究仍处于起步阶段,许多有意义的工作亟待突破,如在正色散区的纯四次自相似孤子以及耗散纯四次孤子激光器的深入实验研究.需要注意的是,与反常色散区域的传统纯四次孤子激光器不同,正常色散区域的纯四次自相似孤子和耗散纯四次孤子主要依赖于四阶色散和非线性效应之间的相互作用,但其他物理效应也会发挥着重要作用,例如光纤的增益和损耗.因此,在实验中实现脉冲的稳定传输,还需要考虑参数增益和损耗作用下的新的平衡机制.此外,关于纯四次孤子激光器的瞬态动力学特性的研究仅停留在理论阶段.首先,纯四次孤子激光器不具有伽利略不变性,这为后续在纯四次孤子激光器中研究孤子碰撞动力学的多样性提供了依据.另外,纯四次孤子脉冲的振荡尾特性会导致能量的重新分配,为孤子瞬态动力学的研究提供一条新思路.我们相信,纯四次孤子光纤激光器的研究将推动超快光纤激光器输出脉冲能量和峰值功率方面的突破,并对孤子瞬态动力学基础理论和超快激光调控都具有极为重要的意义.目前,纯四次孤子激光器是一个新颖的研究领域,尚处于起步阶段,但未来有望取得进一步的发展.首先,可以通过完善色散补偿和非线性效应机制进一步压缩脉宽,实现更短的脉冲输出,从而获得更高能量和更高峰值功率.另外,实现小型化、高集成度的纯四次孤子激光器系统,为纯四次孤子激光器在医学成像、生物传感、光通信等领域的应用打开新的可能性.

参考文献

- [1] Cundiff S T, Ye J 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 325
- [2] Yi X, Yang Q F, Yang K Y, Suh M G, Vahala K 2015 *Optica* **2** 1078
- [3] Okhotnikov O, Grudinin A, Pessa M 2004 *New J. Phys.* **6** 177
- [4] Wise F W, Chong A, Renninger W H 2008 *Laser Photon. Rev.* **2** 58
- [5] Grellu P, Akhmediev N 2012 *Nat. Photonics* **6** 84
- [6] Xu C, Wise F W 2013 *Nat. Photonics* **7** 875
- [7] Wang K, Horton N G, Charan K, Xu C 2014 *IEEE J. Sel. Top. Quant.* **20** 50
- [8] Mollenauer L F, Stolen R H, Gordon J P 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 1095
- [9] Agrawal G P 2007 *Nonlinear Fiber Optics* (4th Ed.) (Academic Press)
- [10] Fermann M E, Hartl I 2013 *Nat. Photonics* **7** 868
- [11] Dennis M L, Duling I N 1994 *IEEE J. Quantum Elect.* **30** 1469
- [12] Nelson L E, Jones D J, Tamura K, Haus H A, Ippen E P 1997 *Appl. Phys. B* **65** 277
- [13] Shabat A, Zakharov V 1972 *Sov. Phys. JETP* **34** 62
- [14] Renninger W H, Chong A, Wise F W 2010 *J. Opt. Soc. Am. B* **27** 1978
- [15] Tamura K, Ippen E P, Haus H A, Nelson L E 1993 *Opt. Lett.* **18** 1080
- [16] Chong A, Buckley J, Renninger W, Wise F 2006 *Opt. Express* **14** 10095
- [17] Blow K J, Doran N J, Wood D 1988 *J. Opt. Soc. Am. B* **5** 381
- [18] Karlsson M, Höök A 1994 *Opt. Commun.* **104** 303
- [19] Christov I P, Murnane M M, Kapteyn H C, Zhou J, Huang C P 1994 *Opt. Lett.* **19** 1465
- [20] Piché M, Cormier J F, Zhu X 1996 *Opt. Lett.* **21** 845
- [21] Roy S, Biancalana F 2013 *Phys. Rev. A* **87** 025801
- [22] Blanco-Redondo A, de Sterke C M, Sipe J E, Krauss T F, Eggleton B J, Husko C 2016 *Nat. Commun.* **7** 10427
- [23] Runge A F J, Hudson D D, Tam K K K, de Sterke C M, Blanco-Redondo A 2020 *Nat. Photonics* **14** 492
- [24] de Sterke C M, Runge A F J, Hudson D D, Blanco-Redondo A 2021 *APL Photonics* **6** 091101
- [25] Runge A F J, Alexander T J, Newton J, Alavandi P A, de Sterke C M 2020 *Opt. Lett.* **45** 3365
- [26] Qian Z C, Liu M, Luo A P, Xu W C, Luo Z C 2022 *Opt. Express* **30** 22066
- [27] Soto-Crespo J M, Akhmediev N, Ankiewicz A 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 2937
- [28] Akhmediev N, Soto-Crespo J M, Town G 2001 *Phys. Rev. E* **63** 056602
- [29] Zhao L M, Tang D Y, Lin F, Zhao B 2004 *Opt. Express* **12** 4573
- [30] Liu M, Wei Z W, Li H, Li T J, Luo A P, Xu W C, Luo Z C 2020 *Laser Photonics Rev.* **14** 1900317
- [31] Akhmediev N, Soto-Crespo J M 2003 *Phys. Lett. A* **317** 287
- [32] Liu M, Luo A P, Yan Y R, Hu S, Liu Y C, Cui H, Luo Z C, Xu W C 2016 *Opt. Lett.* **41** 1181
- [33] Luo M, Zhang Z X, Liu M, Luo A P, Xu W C, Luo Z C 2022 *Opt. Express* **30** 22143
- [34] Luo M, Zhang Z X, Chen N M, Liu M, Luo A P, Xu W C, Luo Z C 2023 *Adv. Phys. Res.* **2** 2200103
- [35] Aossey D W, Skinner S R, Cooney J L, Williams J E, Gavin M T, Andersen D R, Lonngren K E 1992 *Phys. Rev. A* **45** 2606

- [36] Liu M, Li T J, Luo A P, Xu W C, Luo Z C 2020 *Laser Photon. Rev.* **14** 1900317
- [37] Wai P K A, Chen H H, Lee Y C 1990 *Phys. Rev. A* **41** 426
- [38] Kodama Y, Romagnoli M, Wabnitz S, Midrio M 1994 *Opt. Lett.* **19** 165
- [39] Höök A, Karlsson M 1993 *Opt. Lett.* **18** 1388
- [40] Karpman V I 1996 *Phys. Rev. E* **53** R1336
- [41] Roy S, Bhadra S K, Agrawal G P 2009 *Opt. Commun.* **282** 3798
- [42] Blanco-Redondo A, Eades D, Li J, Lefrancois S, Krauss T F, Eggleton B J, Husko C 2014 *Optica* **1** 299
- [43] Blanco-Redondo A, Husko C, Eades D, Zhang Y, Li J, Krauss T F, Eggleton B J 2014 *Nat. Commun.* **5** 3160
- [44] Hasegawa A, Tappert F 1973 *Appl. Phys. Lett.* **23** 142
- [45] Lo C W, Stefani A, de Sterke C M, Blanco-Redondo A 2018 *Opt. Express* **26** 7786
- [46] Tam K K K, Alexander T J, Blanco-Redondo A, de Sterke C M 2019 *Opt. Lett.* **44** 3306
- [47] Kelly S M J 1992 *Electron. Lett.* **28** 806
- [48] Runge A F J, Qiang Y L, Alexander T J, Rafat M Z, Hudson D D, Blanco-Redondo A, de Sterke C M 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 013166
- [49] Widjaja J, Kobakhidze E, Cartwright T R, Lourdesamy J P, Runge A F J, Alexander T J, de Sterke C M 2021 *Phys. Rev. A* **104** 043526
- [50] Zhang Z X, Luo M, Chen J X, Liu M, Luo A P, Xu W C, Luo Z C 2022 *Opt. Lett.* **47** 1750
- [51] Soto-Crespo J M, Grapinet M, Grellu P, Akhmediev N 2004 *Phys. Rev. E* **70** 066612
- [52] Liu K W, Yao S Y, Yang C X 2021 *Opt. Lett.* **46** 993

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Research progress of pure quartic soliton fiber laser*

Luo Min Zhang Ze-Xian Chen Nai-Miao Liu Meng
Luo Ai-Ping Xu Wen-Cheng Luo Zhi-Chao[†]

(School of Information and Optoelectronic Science and Engineering, South China Normal University, Guangzhou 510631, China)

(Received 26 May 2023; revised manuscript received 28 June 2023)

Abstract

The pure-quartic soliton fiber laser is an innovative ultra-short pulse laser that can maintain a stable pulse shape through a balance between fourth-order dispersion effect and self-phase modulation effect. Comparing with traditional soliton laser that is dominated by second-order dispersion, the mode-locked pulse energy of pure-quartic soliton laser can be 1–2 orders of magnitude higher. This provides researchers with new ideas for developing high-energy and high-peak-power fiber lasers. Here, the generation and transmission characteristics of pure-quartic solitons in nonlinear optical systems such as fiber lasers in recent years are systematically reviewed. It also explores some special transient dynamic phenomena. Furthermore, in this article, the latest achievements of our research group in this area are also presented. Finally, the application prospect and development trend of pure-quartic soliton fiber lasers are prospected. These results will contribute to a more comprehensive understanding of the basic physical properties of pure-quartic soliton fiber lasers.

Keywords: pure-quartic solitons, fiber laser, dynamics, fourth-order dispersion, self-phase modulation effects

PACS: 42.55.Wd, 42.65.–k, 42.65.Tg, 42.81.–i

DOI: [10.7498/aps.72.20230868](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230868)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874018, 11974006, 61805084, 61875058) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2022A1515011760, 2021A1515012315).

[†] Corresponding author. E-mail: zcluo@scnu.edu.cn

纯四次孤子光纤激光器研究进展

罗民 张泽贤 陈乃妙 刘萌 罗爱平 徐文成 罗智超

Research progress of pure quartic soliton fiber laser

Luo Min Zhang Ze-Xian Chen Nai-Miao Liu Meng Luo Ai-Ping Xu Wen-Cheng Luo Zhi-Chao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 204203 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230868

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230868>

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

偏振动态可调耗散孤子光纤激光器实验研究

Experimental study on dissipative soliton fiber laser with dynamically tunable polarization trajectory

物理学报. 2020, 69(18): 184218 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201305>

多孤子和类噪声脉冲共存的锁模光纤激光器

Mode-locked fiber laser with coexistence of multiple solitons and noise-like pulses

物理学报. 2022, 71(13): 134205 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220250>

1064 nm固体激光器和光纤激光器在制备压缩真空态光场实验中的对比研究

Comparative study of squeezed vacuum states prepared by using 1064-nm solid-state and fiber-laser as pump source

物理学报. 2019, 68(12): 124201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182304>

光纤激光器中包层功率剥离器散热性能的优化

Optimization of thermal performance of cladding power stripper in fiber laser

物理学报. 2020, 69(1): 014204 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191093>

530 W全光纤结构连续掺铥光纤激光器

530 W all-fiber continuous-wave Tm-doped fiber laser

物理学报. 2020, 69(18): 184209 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200466>

基于偏振依赖多模-单模-多模光纤滤波器的波长间隔可调谐双波长掺铒光纤激光器

Continuously spacing-tunable dual-wavelength erbium-doped fiber laser based on polarization-dependent in-line multimode-single-mode-multimode fiber filter

物理学报. 2019, 68(15): 154202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190297>