三维弹性介质中螺旋高阶拓扑绝缘体的高效设计

Jiachen Luo[1], Zongliang Du[1,2*], Hui Chen[3], Xianggui Ding[1], Chang Liu[1,2],Weisheng Zhang[1,2], Xu Guo[1,2*]

[1]工业装备结构分析国家重点实验室，工程力学系，大连理工大学，中国大连，116023[2]大连理工大学宁波研究院，中国宁波，315016[3]压电器件实验室，机械工程与力学学院，宁波大学，中国宁波，315211

电子邮箱：zldu@dlut.edu.cn（ZD）；guoxu@dlut.edu.cn（XG）

摘要

拓扑材料（TMs）以其拓扑保护性质而闻名。声子系统的优势在于能够在宏观尺度上直接观测和调控拓扑现象。然而，对于连续介质中三维拓扑材料的逆向设计，拓扑性质的分类、计算复杂度的处理以及在无限参数空间中搜索解都极具挑战。本研究结合对称性指标（SI）方法与可移动形态组件（MMC）方法，提出了一种针对三维机械高阶拓扑绝缘体（HOTIs）的系统设计框架。采用MMC方法描述三维晶胞，仅需几十个设计变量。通过评估三维机械系统中的固有奇异性，相应地修正了弹性波拓扑不变量的经典公式。随后，提出一种数学公式，通过约束相应的拓扑不变量并最大化带隙宽度，设计具有角态和螺旋能流的螺旋多极拓扑绝缘体（MTIs）。利用该方法获得了具有不同对称性的机械螺旋高阶拓扑绝缘体，并通过全波仿真进行了验证。这一设计范式还可进一步扩展，用于设计不同对称性类别和空间群中的三维拓扑材料，以及不同物理系统中的拓扑材料。

关键词：拓扑材料、力学高阶拓扑绝缘体、拓扑优化、对称性指标

1. 引言

超材料因其能够在各种应用中对光子、声子和物质波进行新颖调控而广为人知。融入拓扑特征后，便产生了一种新型创新材料——拓扑材料（TMs），其能够抵御各种缺陷[1–3]。近年来，光子和声子拓扑材料在宏观尺度上实现拓扑现象的工程设计方面引起了广泛关注[2–12]。相关的拓扑保护态展现出一些潜在应用[2,3,12–23]。

例如，量子自旋/谷霍尔拓扑绝缘体能够引导能流实现自旋锁定传输，从而使传播波的单向通道交替切换，并不受缺陷影响[6,8,9,24–28]。这是一种提升光机学、当前半导体和集成电路产业应用效能的理想方式[13–22]。高阶拓扑材料（HOTIs）的特征是在边缘和角等低维区域内具有高度局域化的拓扑相[3,7,29–31]。作为高阶拓扑材料的先驱范例，多极拓扑绝缘体（MTIs）也能产生多极矩增强的拓扑相，其中体偶极矩为零[3,30,31]。结合赝自旋现象，螺旋多极诱导拓扑相存在于螺旋多极拓扑绝缘体中[32,33]。高阶拓扑材料中的这些拓扑相能够抵御制造过程中出现的各种缺陷，并在光学/声学亚波长成像、微电子学和激光领域展现出良好的应用前景[3,19,23,31,34–36]。

尽管理论上的紧束缚模型已经建立，但如何高效设计具有所需拓扑行为的三维晶胞，仍是一项重大挑战。典型方案包括追踪狄拉克点附近具有特征性的简并态、利用能带折叠机制限定特殊的能带结构、保持明显的贝里曲率（一个与拓扑相关的量），或在交叉波导中实现最大的赝自旋能流[37–44]。然而，要计算拓扑不变量，对整个布里渊区内的贝里曲率或其相关项进行积分，代价十分高昂。对于三维连续拓扑材料，这一问题尤为突出，因为它们通常覆盖无限的设计参数空间，分析和设计优化的计算成本也更高。

幸运的是，拓扑量子化学领域的理论突破，为这一瓶颈带来了新的思路；这一突破源于化学与物理学在实空间和动量空间中的丰硕交融[45–48]。其基本工具是借助初等能带表示（EBRs）或对称性指标（SIs），计算每条能带对应的实空间轨道。它可以将拓扑表示为某些列出点处对称性

特征的简单线性函数[29,30,46,48]。SI 方法的成功应用包括对全部 230 种空间群和 1651种磁群中的拓扑材料（TMs）进行分类，以及发现数千种拓扑材料，其中许多是首次发现的[47,49,50]。最近，拓扑声子材料目录成为一个备受关注的焦点[4,5,11]。这启发我们利用 SI 方法，高效识别三维机械晶胞的拓扑性质。值得注意的是，在力学系统中，对应于零能态的刚体运动会在某些高对称点产生奇点。因此，首先需要修改在量子力学系统中推导出的经典公式。

此外，如何描述三维晶胞是选择设计优化方法的一个关键因素[39,41,43,44,51]。这是因为拓扑不变量是离散变量，通常无法通过基于梯度的算法得到有效处理。可移动形态组件（MMC）方法仅用少量显式几何参数即可描述三维晶胞，因此适合确保逆向设计公式的求解过程在计算上可行[52,53]。总的来说，我们将拓扑材料理想优化框架的三个特征概括如下：（i）能够有效识别任意晶胞的拓扑特征；（ii）适用于不同类别的拓扑材料和不同的物理系统；（iii）能够高效执行求解过程。

本研究结合 SI 方法和可移动形态组件（MMC）方法，提出了一个适用于三维连续体拓扑材料的统一优化框架。在该设计框架中，通过同时约束修正后的分数角电荷和赝自旋不变量，可以有效获得具有螺旋边缘态和螺旋角态的螺旋型二阶拓扑绝缘体。针对零能量奇点，本研究对三维弹性高阶拓扑绝缘体的拓扑不变量进行了审慎修正，并成功获得了具有不同对称性的优化三维螺旋型机械拓扑绝缘体，其中带隙内角态源自四极矩。透射谱的数值模拟和交叉波导应用验证了显著的角态能量和自旋锁定能流。

本文其余部分安排如下：第 2 节介绍弹性波的控制方程。随后，基于第 3 节和第 4 节中采用 MMC 方法描述三维弹性晶胞的方法以及拓扑不变量的专用公式，提出一种用于设计机械螺旋型二阶拓扑绝缘体的高效范式。第 6 节展示了具有不同对称性的优化设计，并介绍其在一种新型交叉弹性波导中的应用。最后，第 7 节讨论总结性意见。

2. 弹性波的控制方程

在三维弹性力学中，谐波波动公式表示为[54]

$$(\lambda+\mu)\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u})+\mu\nabla^2\boldsymbol{u}=-\omega^2\rho\boldsymbol{u} \tag{1}$$

其中，ω 为角频率，λ、 μ和ρ 为拉梅参数和质量密度，$\boldsymbol{u}=(u,v,w)^{\mathsf{T}}$ 表示位移场。

由于所研究的声子晶体具有周期性，位移场满足平移条件，即$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$，其中$\boldsymbol{R}$ 表示原始晶格矢量。根据布洛赫定理，谐弹性波传播可由以下离散化方程确定

$$\mathbf{K}\mathbf{U}=-\omega^2\mathbf{M}\mathbf{U} \tag{2}$$

这里，矩阵 $\mathbf{K}$ 和 $\mathbf{M}$ 分别表示刚度矩阵和质量矩阵，$\mathbf{U}$ 为特征向量。

为处理上述本征值问题中的周期性约束，采用标准的拉格朗日乘子法[55]。通过定义拉格朗日乘子$\boldsymbol{\Lambda}$，$\mathbf{Eq}$。(2)可改写为

$$\begin{bmatrix}\mathbf{K}+\omega^2\mathbf{M} & \mathbf{N}_{\mathrm{f}}\\ \mathbf{N} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{U}\\ \boldsymbol{\Lambda}\end{bmatrix}=\mathbf{0} \tag{3}$$

其中 t　约束矩阵 $\mathbf{N}$ 和 $\mathbf{N}_{\mathrm{f}}$ 用于将本征值问题齐次化　m.

现在，我们将特征向量分解为解 $\mathbf{U}_{\mathrm{c}}$ 的形式 $\mathbf{U}=\mathbf{N}_{\mathrm{null}}\mathbf{U}_{\mathrm{c}}+\mathbf{U}_0$，其中矩阵 $\mathbf{N}_{\mathrm{null}}$ 和向量 $\mathbf{U}_0$ 属于　$\mathbf{N}$　$\mathbf{U}_0=$　的零空间。$\mathbf{0}$　3　$\mathbf{N}_{\mathrm{nullf}}^{\mathsf{T}}$ $\mathbf{N}_{\mathrm{nullf}}$　$\mathbf{N}_{\mathrm{f}}^{\mathsf{T}}$
一个可行的取值为 。将**方程**. () 左乘 (是 的零空间)，得到三维弹性波的最终控制方程:

$$\mathbf{K}_{\mathrm{c}}\mathbf{U}_{\mathrm{c}}=-\omega^2\mathbf{M}_{\mathrm{c}}\mathbf{U}_{\mathrm{c}} \tag{4}$$

其中，消元刚度矩阵为 $\mathbf{K}_{\mathrm{c}}=\mathbf{N}_{\mathrm{nullf}}^{\mathsf{T}}\mathbf{K}\mathbf{N}_{\mathrm{null}}$，消元质量矩阵为 $\mathbf{M}_{\mathrm{c}}=\mathbf{N}_{\mathrm{nullf}}^{\mathsf{T}}\mathbf{M}\mathbf{N}_{\mathrm{null}}$。由于**方程**（3）要求 $\mathbf{N}_{\mathrm{f}}\boldsymbol{\Lambda}=\mathbf{0}$，而$\boldsymbol{\Lambda}$ 没有用处，因此无需对其求解；一种实用的做法是令 $\mathbf{N}_{\mathrm{f}}=\mathbf{N}^{\mathsf{T}}$，则 $\mathbf{N}_{\mathrm{nullf}}=\mathbf{N}_{\mathrm{null}}$。

3. 通过 MMC 方法描述三维晶胞

结构拓扑优化已成功应用于多种拓扑超材料的逆向设计[11, 38–44, 56]。为设计三维弹性拓扑绝缘体，我们采用可移动形态组件（MMC）方法[40,42,52,53,56]，，该方法具有显式几何描述和更高计算效率的优点。

MMC 方法的基本构成是一组可形变组件，由一些几何参数描述，例如中心坐标、长度、宽度和厚度。因此，通过更新这些几何参数，每个组件都可以移动、变形、合并或消失，从而形成优化结构，如**图1** 所示。通过这种方式，可以大幅缩小最优参数空间，并显著提高求解效率。

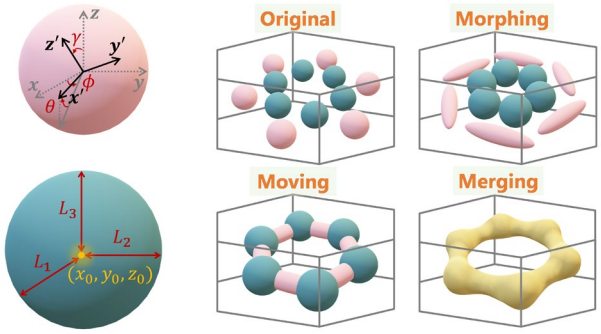
在我们的工作中，每个三维组件（夹杂相）均由椭球明确表征，其设计变量向量为 $\boldsymbol{D}_i = (\boldsymbol{r}_{0i}^{\mathsf{T}}, \boldsymbol{L}_i^{\mathsf{T}}, \boldsymbol{\Phi}_i^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}}$，即中心坐标$\boldsymbol{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$、半轴长度向量 $\boldsymbol{L} = (L_1, L_2, L_3)$以及欧拉旋转角 $\boldsymbol{\Phi} = (\theta, \phi, \gamma)$，如**图**1(a)所示。这样，每个 MMC 仅由 9 个设计变量即可明确确定。此外，在一个晶胞中，每个组件的夹杂相由拓扑描述函数 $g_i(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{D}_i)$ 表征，其覆盖区域为 Ω_i，表示为

$$g_i(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{D}_i) = \|\boldsymbol{r}'\|_2^2 - 1 = \begin{cases} > 0 & \text{if } \boldsymbol{r} \in \Omega_i \\ = 0 & \text{if } \boldsymbol{r} \in \partial\Omega_i \\ < 0 & \text{else} \end{cases} \tag{5}$$

在**式** (5) 中，局部坐标由全局坐标 $\boldsymbol{r}$ 和旋转矩阵 $\mathbf{R}(\boldsymbol{\Phi})$ 确定，如下所示

$$r_i' = \frac{1}{L_i} \mathrm{R}_{ij}(\boldsymbol{\Phi})\left(r_j - r_{0j}\right) \tag{6}$$

根据晶胞的对称性要求，只需优化缩减设计域中的 MMC，并将其变换到其余部分。此外，设计域中由 MMC 表示的所有夹杂物均可通过 K-S 聚合技术[57]或布尔运算（本研究采用的方法）进行平滑处理。



(a) (b)

图1. MMC方法所描述的三维晶胞示意图。(a) 三维组件的几何描述；(b) 优化过程中的一些代表性构型。

4. 螺旋型二阶拓扑绝缘体的对称性指标诱导拓扑不变量

螺旋多极拓扑绝缘体（MTIs）[32,33]，作为一种复合拓扑材料，应同时具有多极矩和赝自旋的特征（或拓扑不变量）。通常，计算连续介质单胞的拓扑不变量需要耗费大量计算资源。然而，拓扑量子化学领域的近期研究揭示了一种通过对称性指标（SIs）[4,5,46,49,50,58]快速识别拓扑不变量的方法。接下来，我们将把 SI 方法引入拓扑不变量的计算，并给出螺旋型二阶拓扑绝缘体的设计方法。

基于 SI 方法，对于具有时间反演对称性（TRS）的无自旋 $C_{n=3,6}$ 对称力学系统，我们将 $\hat{C}_n$ 旋转算符的本征值 $\Pi_p^{(n)}$ 确定为

$$\Pi_p^{(n)} = e^{\mathrm{i}2\pi(p-1)/n} = \langle w(\Pi)|\hat{C}_n|w(\Pi)\rangle, p \in [1,n] \tag{7}$$

其中，$w(\Pi)$表示高对称点Π处位移的z分量。符号$\#\Pi_p^{(n)}$ 表示目标带隙以下$\Pi_p^{(n)}$ 的数量。相较于参考点$\Gamma = (0,0)$，我们将Π 处的对称性指标定义为$\|\Pi_p^{(n)}\| = \#\Pi_p^{(n)} - \#\Gamma_p^{(n)}$。在高对称点处，它满足$\hat{C}_n\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}$，其中$\boldsymbol{G}$ 表示倒格矢。对于C_3对称的六角形晶胞，高对称点包括Γ 和 K（C_3 对称性）；而对于C_6对称的六角形晶胞，高对称点则分别包括Γ （C_6对称性）、K（C_3 对称性）和M（C_2 对称性）。通过这种方式，

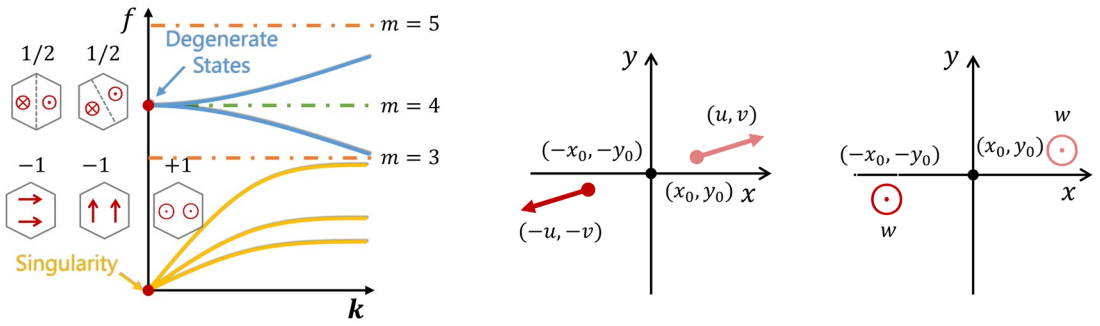
拓扑分类完全由相应的对称性指标决定，例如下文中的分数角电荷和赝自旋不变量。

4.1 分数角电荷不变量

对于机械拓扑绝缘体，分数角电荷 $Q^{(n)}$ 是确定拓扑角态[29–31]的有效拓扑不变量。对于具有时间反演对称性和 C_3 对称性的三维机械拓扑系统，我们提出以下公式

$$\begin{aligned} Q^{(3)} &= \left[\frac{1}{3}\left(\#\mathrm{K}_{q\neq 1}^{(3)} - \frac{1}{2}\#\Gamma^{(3)}\right) \bmod 1\right] \times \left[(\#\Gamma^{(3)} + 1) \bmod 2\right] \\ Q^{(6)} &= \left(\frac{1}{4}\left[\#\mathrm{M}_1^{(2)}\right] + \frac{1}{6}\left[\#\mathrm{K}_1^{(3)}\right]\right) \bmod 2 \end{aligned} \tag{8}$$

这里，在 $Q^{(3)}$ 的函数中引入红色项，以避免对未配对简并态[6,9,10,25]的混淆判别。作为一种替代策略，$\#\Gamma^{(3)}$ 统计 Γ 点处的二阶简并，而 $\#\Gamma^{(3)}/2$ 恒等于 $\#\Gamma_2^{(3)}$ 或 $\#\Gamma_3^{(3)}$。$Q^{(3)}$ 中的红色取模项确保简并态成对出现（即，$\#\Gamma^{(3)}$ 为偶数）。如图示所示，**图 2** 表明，当 $m = 4$时，我们的修正成功避免了对简并态的混淆判别。更多详情请参阅**附录A**。



(a) (b) (c)

图2. 修改过程示意图。(a) 力学中的奇点以及六角形晶胞中的简并态。(b) 和 (c) 位移分量 (u, v) 和 w 的矢量变换。此处，仅计算 $\hat{C}_3$ 算符下的简并态，并将其表示为 $1/2 = (\xi + \xi^*)/2$，其本征值为 ξ ，共轭为 ξ^*；其他态则在 $\hat{C}_2$ 算符下计算。

4.2 赝自旋不变量

对于光子/声子量子自旋/谷霍尔效应，可通过赝自旋涡旋现象清晰地识别受保护的手性能流，并可进一步

通过 Chen 自旋或 Z_2 不变量[6,9,24,25]对其进行量化。在我们这个不具备空间反演对称性的无自旋三维机械系统中，我们采用另一种方法，通过追踪（被破缺的）狄拉克锥和能带反转[9, 10, 25, 38, 40, 42–44]。

实际上，对于三维 C_3 和 C_6 对称晶胞，赝自旋不变量修正为[10,29]

$$\begin{aligned} Z^{(3)} &= \mathrm{sgn}\left(\#\mathrm{K}_2^{(3)} - \#\mathrm{K}_3^{(3)}\right) \\ Z^{(6)} &= \mathrm{sgn}\left(\#\Gamma_{\mathrm{p}}^{(6)} - \#\Gamma_{\mathrm{d}}^{(6)} - 2\right) \end{aligned} \tag{9}$$

这里，$\#\Gamma_{\mathrm{p}}^{(6)}$ 和 $\#\Gamma_{\mathrm{d}}^{(6)}$ 分别表示在$\hat{C}_6$ 算符作用下，Γ 点处的 p 轨道和 d 轨道数目。值得注意的是，减去的红色项是为修正$\#\Gamma_{\mathrm{p}}^{(6)}$ 而引入的，这是由于三维弹性波或横向电磁波中存在奇点（该奇点具有与 p 轨道相同的本征值）[5,59]。对于三维弹性波，该奇点与三个平移运动有关，其位移和矢量变换如**图 2** 所示。此修正基于对目标带隙以下所有占据能带的计数，其中包括穿过奇点的前三条能带。此外，这种计数方法使目标能带与其他能带保持分离，符合 SI 方法的要求。更多详情请参阅**附录 B**。

5. 三维机械螺旋型二阶拓扑绝缘体的高效设计范式

基于上述式（8）和式（9）中给出的拓扑不变量，我们现在可以采用明确的拓扑优化方法设计螺旋型拓扑绝缘体。相应的优化公式和求解过程介绍如下。

5.1 数学公式

结合基于 MMC 的描述方法和弹性介质中拓扑不变量的修正公式，通过求解以下数学公式可以获得优化后的三维螺旋型MTI:

$$\begin{aligned} \text{find} \quad & \boldsymbol{D} = (\boldsymbol{D}_1^{\mathsf{T}}, \ldots, \boldsymbol{D}_N^{\mathsf{T}}, H)^{\mathsf{T}} \\ \max \quad & \min(f_{\mathrm{ref}} - \max_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}}^{m}, \min_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}}^{m+1} - f_{\mathrm{ref}}) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{K}_{\mathrm{c}}\mathbf{U}_{\mathrm{c}} = -\omega^2 \mathbf{M}_{\mathrm{c}}\mathbf{U}_{\mathrm{c}} \\ & \left(Q^{(n)}, Z^{(n)}\right) = \left(Q_{\mathrm{ref}}^{(n)}, Z_{\mathrm{ref}}^{(n)}\right) \\ & \boldsymbol{D}_{\min} \le \boldsymbol{D} \le \boldsymbol{D}_{\max} \end{aligned} \tag{10}$$

在设计变量向量中，$\boldsymbol{D}_i$ 表示板中第i个分量，其厚度为H （沿z轴），如**图1**所示。设第m条能带的本征频率为f^m，则以目标中间频率f_{ref}为中心，使第m条和第（$m+1$）条能带之间的带隙宽度最大化。**公式**（10）中的第三个方程是三维弹性波的控制方程。由于分数角电荷和赝自旋不变量共同决定螺旋角态的存在，因此引入目标拓扑不变量 $\left[Q_{\mathrm{ref}}^{(n)}, Z_{\mathrm{ref}}^{(n)}\right]$作为约束。最后一个不等式限定了设计变量向量的上下界。

原则上，通过更新控制方程和目标拓扑不变量，式**方程**（10）中的数学公式可用于设计不同对称性类别和不同物理系统中的拓扑材料。本研究聚焦于弹性介质中具有C_3 和C_6 对称性的三维螺旋型MTI的逆向设计。

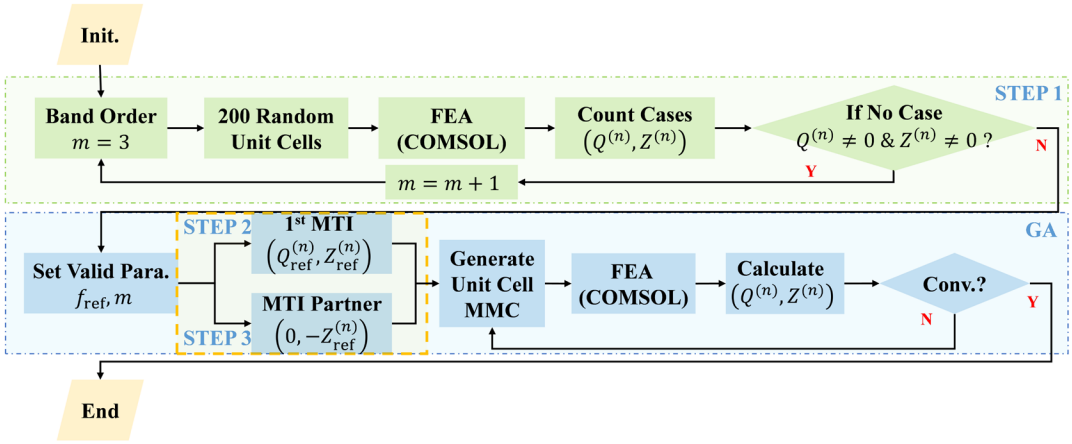


图3. 螺旋型二阶拓扑绝缘体的优化方案。

5.2 求解过程

由于拓扑不变量是量子化的，基于梯度的优化算法无法有效求解式**方程**（10）。得益于MMC方法所需设计变量较少的优势，本研究采用遗传算法（GA），其设置见**附录C**。具体而言，螺旋型二阶拓扑绝缘体的理性设计流程图如**图3**所示，其求解过程概述如下：

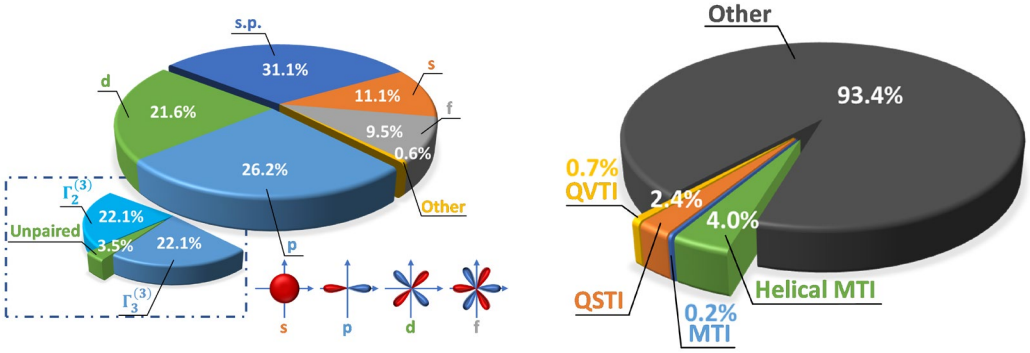
- 步骤 1：初始化MMC方法和遗传算法求解器。首先通过试验过程初始化带隙标签m、中间频率$f$ref以及非零拓扑不变量 $[Q\mathrm{ref}_{(n)}, Z\mathrm{ref}_{(n)}]$，从$m = 3$开始；

- 步骤 2：首个磁性拓扑绝缘体的最优设计。

利用步骤 1 中确定的参数，求解数学规划**方程**。(10)，以获得具有预定义不变量 $\left(Q_{\mathrm{ref}}^{(n)}, Z_{\mathrm{ref}}^{(n)}\right)$ 和中间频率 f_{ref} 的首个优化的磁性拓扑绝缘体；

- 步骤 3：拓扑机械绝缘体配对体的优化设计（如有必要）。

  将所需的拓扑不变量设为 $\left(0, -Z_{\mathrm{ref}}^{(n)}\right)$，并将其他参数设为与步骤 2 相同，求解**方程** (10)，以获得具有反转赝自旋效应的优化拓扑机械绝缘体配对体。



(a) (b)

图 4. 不同态在Γ 点处的统计图 (b)（若不对**方程** (8) 作修改，p 和 d 的分区将分解为方框所示的分区）以及不同拓扑材料的统计图 (c)。提示：s.p. — 奇点。

为说明所提出设计框架的有效性，分别在**图**4(a)和4(b)中展示了Γ 点处各态的统计图（6000个样本）以及不同拓扑材料的统计图（8000个样本）。可以发现，利用**式**（8）能够成功识别出p态和d态，它们分别约占全集的21.6%和26.2%，如**图**4(a)所示。然而，若不对**式**（8）进行修改，这些态就会被分解为$\Gamma_2^{(3)}$ 态（22.1%）、$\Gamma_3^{(3)}$ （22.1%）以及一个未配对集合（3.5%）。这个未配对集合还会给分数角电荷不变量的计算带来困难。**图**4(b)显示，8000个样本中有6.6%属于四种典型拓扑材料（量子谷/自旋霍尔拓扑绝缘体（QVTIs/QSTIs）、拓扑机械绝缘体和螺旋型二阶拓扑绝缘体），而目标螺旋型二阶拓扑绝缘体仅占4.0%。这证实了开发针对螺旋型二阶拓扑绝缘体的逆向设计范式的必要性。

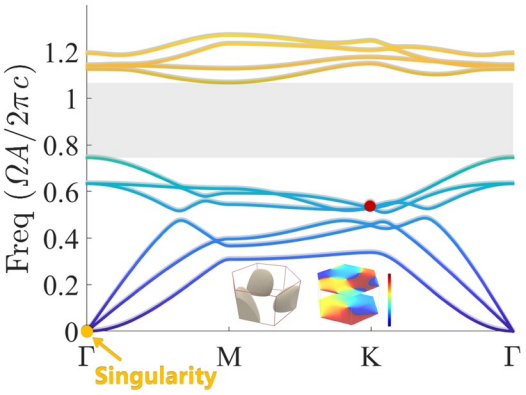
6. 基于MMC的设计框架在弹性介质三维螺旋型MTI中的应用

在本研究中，螺旋型二阶拓扑绝缘体在面内方向上呈周期性，由基础介质EP和散射介质Fe构成（材料参数及更多设置细节请参阅**附录C**）。

6.1 C_3对称机械螺旋型二阶拓扑绝缘体的优化设计

在优化框架下，得到优化后的C_3对称螺旋型机械拓扑绝缘体，如**图**5(a)所示。第6与第7条能带之间存在0.741–1.069的归一化体能带隙（在**图**5(a)中以灰色标示）。高对称点的对称性行为如**图**5(b)所示。目标带隙以下的K点处存在三个劈裂简并态（源自狄拉克锥），其中只有第三个态未配对，这表明可能存在赝自旋涡旋。该未配对态的相位场也插入**图**5(a)中。角电荷和赝自旋不变量分别为(2/3,1)。

为实现能带反转，可以通过施加空间反演操作轻松构造相应的拓扑机械绝缘体配对体；换言之，其不变量设为 $(0,-1)$。一对相反的 $Z^{(3)}$ 不变量将通过体边对应产生螺旋拓扑态。此外，一对为零和非零的分数角电荷表明角态的出现[18],，如图 6(a) 所示，出现在归一化频率 0.894 和 0.966 附近。后者的局域角模显示在插图中。



(a)

Band	$\Gamma_q^{(2)}$	$\Gamma_q^{(3)}$	$K_q^{(3)}$
1	-1	ξ	$\omega^\dagger$
2	-1	ξ	+1
3	+1	+1	ω
4	+1	ξ	+1
5	+1	ξ	+1
6	+1	+1	ω

(b)

图5. 优化后的C_3对称机械螺旋型二阶拓扑绝缘体。(a) 能带结构，并插入晶胞和未配对态的相位场。(b) 对称性-

行为表中，K 点的简并态标记为 $\omega = e^{i2\pi/3}$，而 Γ 点的简并态标记为 ξ。

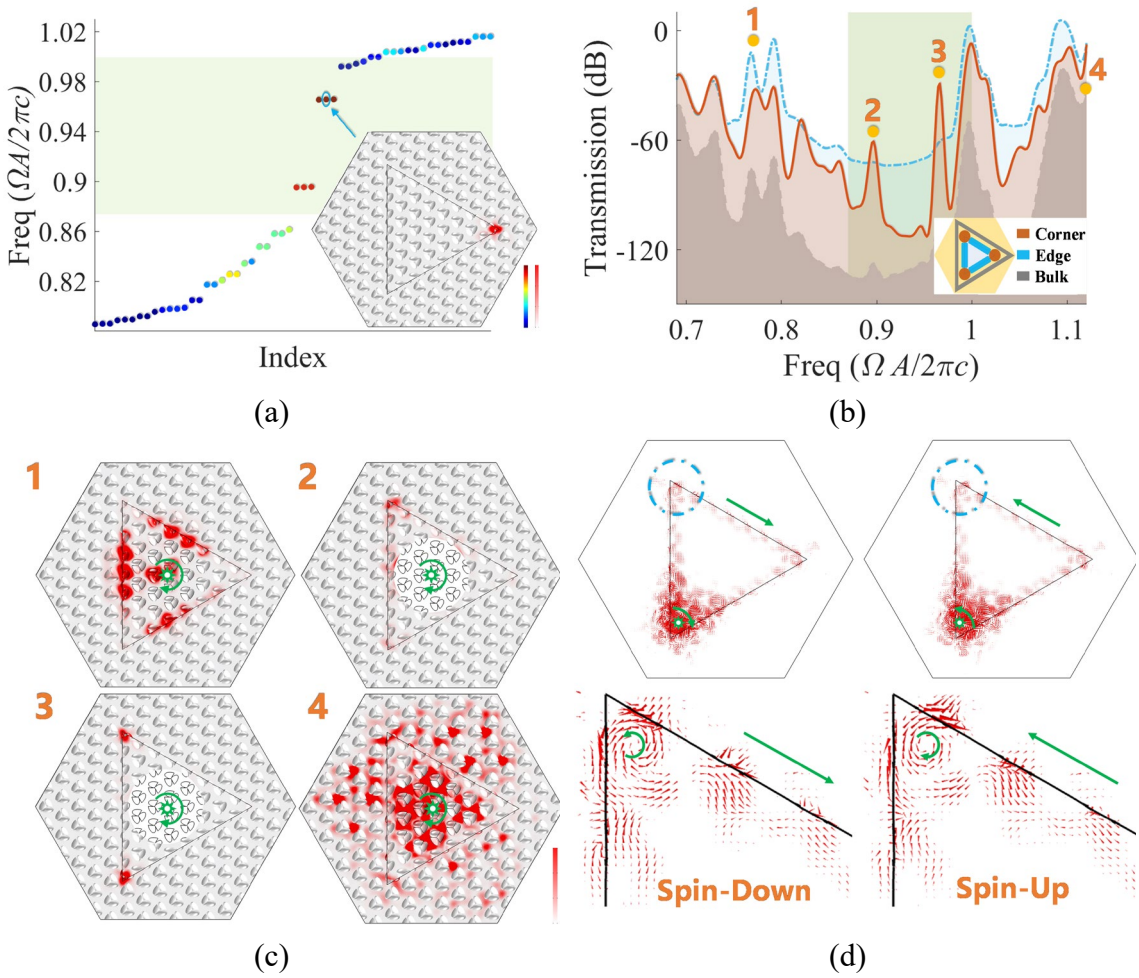


图 6. 优化后的 C_3 对称螺旋型二阶拓扑绝缘体的仿真结果。(a) 本征值谱（点的颜色表示角态能量强度）及一个角态的能量场。(b) 体区、边缘和角区探针的透射谱（颜色见图例）。(c) (b) 中标记的归一化频率为 0.793、0.879、0.966 和 1.121 时的能量场。(d) 归一化频率为 0.862 时螺旋边缘态的能流及其放大图。

此外，图6(b)展示了全波透射，其中能量采集自外部体区、界面边缘和界面角周围的不同区域。在超晶胞中心附近激发了一个自旋向下（顺时针）的螺旋源，如图6(c)中的星号所示。透射结果显示，在归一化频率约为0.793和1.001处出现了一些边缘能量峰，而在归一化频率约为0.879和0.966处则出现了一些高度局域的角态。为便于清晰展示，相应的

体区、边缘和角能量场显示在**图**6(c)中。与归一化频率范围为0.872–1.001（以浅绿色标示）的边缘带隙不同，这些带隙内角态源自四极矩。

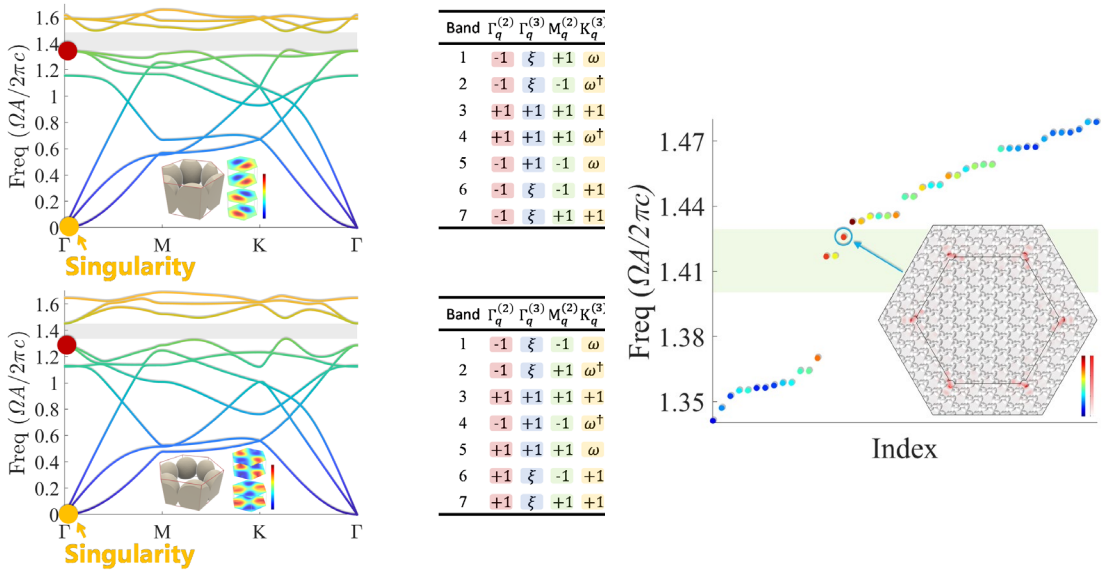
为验证螺旋行为，我们还额外激励了一个偏离中心的偏置螺旋源，如**图** 6(d)所示。插入的箭头示意图展示了其角部和边缘附近的能流。我们发现，在不同的螺旋源（自旋向上或自旋向下）激励下，这两个超胞表现出显著且相反的响应。它们的所有角部均存在清晰的能量涡旋（顺时针或逆时针）。其边缘能流受激励源锁定，只能向前或向后流动。

6.2 CC6 对称机械螺旋型二阶拓扑绝缘体的优化设计

对于优化后的 C_6 对称 MTI 对，如**图** 7(a)所示的能带结构表明，归一化频率范围 1.344-1.489（上方）和 1.332-1.450（下方）内分别存在带隙。在带隙下方，两种情况下的 Γ 点均发现了四个简并态，但只有最后两个态形成了具有赝自旋涡旋特征的非成对双狄拉克锥。这些未配对态的相位场插图见**图** 7(a)，其中清晰地显示了能带反转。**图** 7(a)中的对称性行为表明，角电荷和修正赝自旋不变量分别为 $(1/2,1)$ 和 $(0,-1)$。具体而言，这对相反的 $Z^{(6)}$ 不变量通过赝自旋现象锁定能流。相比之下，一对为零和非零的角电荷预示着拓扑角态（根据 C_6 对称晶胞中消失的体极化，这些非零角电荷仅由四极矩[30]导出）。结合这两种拓扑特征，拓扑角态也将具有赝自旋行为，并表现为螺旋角态。为验证这一螺旋角态，**图** 7(b)展示了超胞模拟的本征值谱，其在归一化频率 1.426 处的能量密度分布高度局域于角部。

6.3 优化的螺旋型拓扑绝缘体在交叉波导中的应用

作为螺旋多极拓扑绝缘体的一种应用，图 8(a) 展示了一种交叉波导（单层），由第6.1节中两个经过优化的 C_3 对称螺旋拓扑机械绝缘体构成（上文所述的原始/反演拓扑机械绝缘体分别以蓝色/黄色表示）。由于额外的赝自旋自由度会锁定波导中的能流，当依次激励端口 1 和端口 2 时，会观察到方向相反的传输。逐渐调节激励频率后，能量将穿过中心壁并激发输出角态。



(a) (b)

图 7. 优化后的 C_6 对称螺旋型二阶拓扑绝缘体的模拟结果。(a) 优化后的 MTI 对的能带结构和对称性行为表。插图包括优化后的晶胞以及未配对态的 z 方向位移场。在这些表中，K 点的简并态标记为 $\omega = e^{i2\pi/3}$，而 Γ 点的简并态标记为 ξ。(b) 角态的本征值谱及其插入的能量场（数据点根据角态能量强度着色）。

为测试波导的性能，我们对归一化频率范围 0.7-1.1 内的情况进行了仿真，如**图** 8(b)所示。显然，当以归一化频率 0.776 激励端口 1 时，能量仅传输至端口 2 和端口 3；而从端口 2 激励时，能量仅传输至端口 1 和端口 4。这一现象揭示了预期的锁定螺旋能流。在归一化频率 0.897 下，两种情况下波导下半部分的角态都会被激发。此处，这些态位于边缘态的带隙内（即 0.872-1.001，更多细节请参阅**附录 D**），其能量仅局域于角部，且不存在边缘态。

为测试该波导中单向传输的工作范围，我们区分了来自不同端口（端口 3 或端口 4）的能量，如**图** 8(c) 和 8(d) 所示。这里，浅绿色区域和黄色实心点分别表示**图** 8(b) 中边缘态的带隙和各态。在这个宽得多的 0.749–0.861 频率范围内，两个端口之间的平均差值高于 10 dB。当我们反转激励端口时，传输较高的输出端口也随之切换，如**图** 8(d) 所示。在此频率范围内，**附录 D** 所示的前两条边缘能带将被激发。

因此，这些单向传输结果源于螺旋边缘态。此外，标记为 2 和 4 的角态位于边缘态带隙中，但会呈现出来自激励源的明显能量集中。

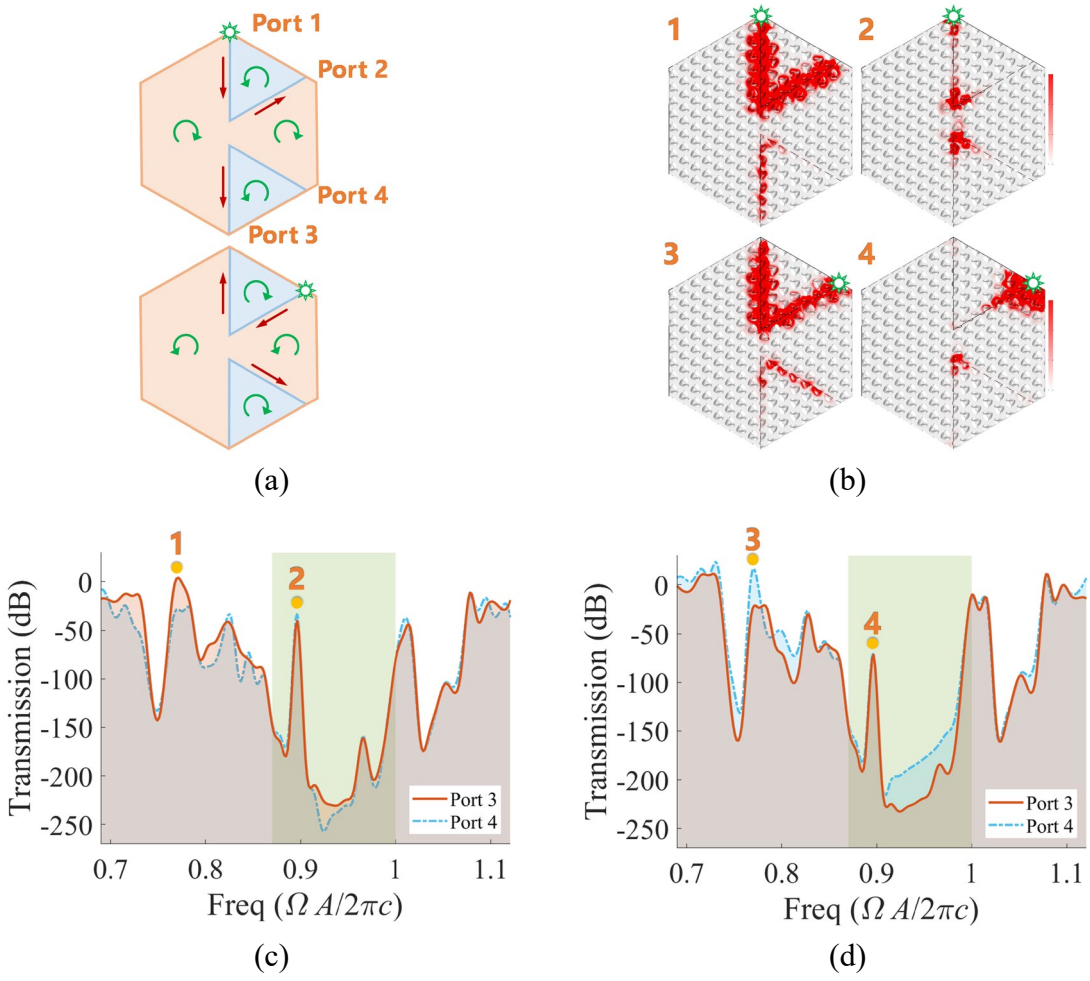


图 8. 由优化后的 C_3 对称螺旋型二阶拓扑绝缘体构成的交叉波导。(a) 波导示意图及不同激励情况下的能流（激励线源以星号标记）。(b) 归一化频率为 0.776 和 0.897 时的能量场。从激励端口 1 (c) 或激励端口 2 (d) 测得的端口 3 和 4 的传输。这里，边缘态的带隙（浅绿色区域）和典型态（黄色实心点）以颜色标示。

7. 结论

在本研究中，我们提出了一种优化框架，用于逆向设计三维连续介质中的多功能拓扑材料。通过精确呈现弹性波中的简并态和奇点，三维螺旋多极

拓扑绝缘体可通过分数角电荷和赝自旋不变量进行明确分类。借助显式拓扑优化和对称性指标方法，所提出的设计范式具有以下优势：（1）快速分类三维拓扑材料；（2）在更小的显式参数空间中高效优化三维连续介质单胞。该框架非常适用于三维拓扑系统，也可推广至其他对称性类别和空间群。此外，在连续介质中建立拓扑材料库将是一个值得进一步研究的方向。

方法

固体力学仿真在商业软件 COMSOL MULTIPHYSICS 中进行。默认开放表面设置为自由边界。布洛赫定理通过弗洛凯周期边界以数值方式实现。通常，固体力学中的能量分布与总位移 $\|(u, v, w)\|_2^2$ 的幅值一致。

致谢

衷心感谢国家自然科学基金（11821202、11732004、12002073、12002077、12272075、11922204）、国家重点研发计划（2020YFB1709401）、大连市人才创新计划（2020RQ099）、中央高校基本科研业务费（DUT20RC(3)020、DUT21RC(3)076）以及111计划（B14013）的资助。

作者贡献

X. G. 和 Z. D. 提出了研究构想并启动了该项目。J. L. 和 Z. D. 建立了理论。J. L 和 X. D. 完成了数值计算与仿真。其他所有作者均参与了结果讨论和论文撰写。

利益冲突声明

作者声明不存在任何利益冲突。

数据可用性

数据可根据请求提供。

附录

附录A：分数角电荷不变量的修正

根据文献[30]，中的结果，C_3对称六角晶胞的分数角电荷不变量为

$$Q_q'^{(3)} = \frac{1}{3}\left[\mathrm{K}_{q\neq 1}^{(3)}\right] \bmod 1 \tag{A.1}$$

其中，下标 q 取决于所构造超晶胞的对称性，为 2 或 3。由于 TRS 和 C_3 对称性，Γ点处有一些受到保护的二阶简并态，例如由 $\Gamma_2^{(3)}$ 和 $\Gamma_3^{(3)}$ 线性组合而成的态；这些态很难清晰识别，尤其是未配对简并态[6,9,10,25,28]。因此，我们将不变量定义为二阶简并态的数量 $\#\Gamma^{(3)}$。具体而言，C_3对称六角形晶胞的拓扑特征为

$$\bar{\chi}^{(3)} = \left(\#\Gamma^{(3)}, \#\mathrm{K}_2^{(3)}, \#\mathrm{K}_3^{(3)}\right) \tag{A.2}$$

根据公式 (A.2)，某些可能情形下修正后的分数角电荷不变量及其对称性行为列于表 A.1。

表 A.1. 具有 TRS 的 C_3对称晶胞的对称性行为（关于分数角电荷不变量）

$Q_{q=2}^{(3)}$	$Q_{q=3}^{(3)}$	$\#\mathrm{K}点_2^{(3)}$	$\#\mathrm{K}点_3^{(3)}$	$\#\Gamma^{(3)}$	$\#\Gamma_2^{(3)}$	$\#\Gamma_2^{(3)}$
1/3	0	1	0	0	0	0
0	1/3	0	1	0	0	0
0	2/3	1	0	2	1	1
0	0	1	1	2	1	1
0	0	1	0	1	1	0
0	0	0	1	1	0	1
0	0	1	0	1	0	1
0	0	0	1	1	1	0

在**表** A.1 中，红色的不变量 $Q_q^{(3)}$ 由**公式**（A.2）修改而来。这一修改源于这样一个事实：简并态 $\#\Gamma^{(3)}$ 总是出现在一个

无论是否配对，都是无能隙的[6,9,10,25,28]。对于未配对情形，将其标记为$\Gamma_2^{(3)}$ 或 $\Gamma_3^{(3)}$ 存在歧义，因此，最后四种情形中的不变量$Q_q^{(3)}$ 无法仅通过**公式** (A.2)中的 $\chi^{(3)}$ 来确定。因此，当 $\#\Gamma^{(3)}$ 为奇数时，在无能隙能带的情况下，相应的分数角电荷应修正为零。当 $\#\Gamma^{(3)}$ 为偶数时，数值 $\#\Gamma^{(3)}$ 可以等价地写为：$\#\Gamma_2^{(3)} = \#\Gamma_3^{(3)} = \#\Gamma^{(3)}/2$。

因此，修正后的分数角电荷不变量为

$$Q^{(3)} = \left[\frac{1}{3}\left(\#\mathrm{K}_{p\neq 1}^{(3)} - \frac{1}{2}\#\Gamma^{(3)}\right) \bmod 1\right] \times \left[\left(\#\Gamma^{(3)} + 1\right) \bmod 2\right] \tag{A.3}$$

其中红色模项旨在避免出现未配对的二阶简并态。

附录 B：赝自旋不变量的修正

对于具有时间反演对称性的 C_3 或 C_6对称晶胞，求得赝自旋不变量的另一种方法是追踪 K 点或 Γ 点处破缺的（双）狄拉克锥[9,10,25,38,40,42–44]。因此，它们的拓扑特征为

$$\begin{aligned} \bar{\chi}^{(3)} &= \left(\#\mathrm{K}_2^{(3)}, \#\mathrm{K}_3^{(3)}\right) \\ \bar{\chi}^{(6)} &= \left(\#\Gamma_1^{(2)}, \#\Gamma_2^{(2)}, \#\Gamma^{(3)}\right) \end{aligned} \tag{B.1}$$

这里，$\#\Gamma^{(3)}$ 表示算符 C_3 中 Γ 点的二阶简并态数。修正后的赝自旋不变量及其对称性行为在**表** B.1 和**表** B.2 中列出了若干可能情况。

不同于对函数进行缩放，[5,59], 对矢量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r})$ 施加对称算符 $g\hat{}$ 后，其变换形式为 $g\hat{}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}) = R\hat{}\boldsymbol{f}(g\hat{}^{-1}\boldsymbol{r})$，其中 $R\hat{}$ 是 $g\hat{}$ 中的旋转算符。对于本文中的对称群（C_3 或C_6），所有群元素均表现为绕 z 轴旋转，因此变换可简化为 $g\hat{}\mathbf{U}(\boldsymbol{r}) = R\hat{}\mathbf{U}_{\mathrm{T}}(g\hat{}^{-1}\boldsymbol{r}) + R\hat{}\mathbf{U}_{\mathrm{L}}(g\hat{}^{-1}\boldsymbol{r})$，其中 $\mathbf{U} = \mathbf{U}_{\mathrm{T}} + \mathbf{U}_{\mathrm{L}} = (u, v, 0)^{\mathsf{T}} + (0,0,w)^{\mathsf{T}}$ 是力学中的位移矢量。这个分解方程表明，$\mathbf{U}_{\mathrm{T}}$ 和$\mathbf{U}_{\mathrm{L}}$ 具有相同的对称性，但位移分量为 $\mathbf{U}_{\mathrm{T}} = \mathbf{0}$ 或$\mathbf{U}_{\mathrm{L}} = \mathbf{0}$的奇异情形除外。

表 B.1. 具有时间反演对称性（用于赝自旋不变量）的 C_3-对称晶胞的对称性行为

$Z^{(3)}$	$\#\text{K点}^{(3)}_{2}$	$\#\text{K点}^{(3)}_{3}$
1	1	0
1	2	0
-1	0	1
0	1	1

表 B.2. 具有时间反演对称性（用于赝自旋不变量）的 C_6-对称晶胞的对称性行为

$Z^{(6)}$	$\#\Gamma^{(2)}_{1}$	$\#\Gamma^{(2)}_{2}$	$\#\Gamma^{(3)}$	轨道
-1	2	0	2	2d
1	0	2	2	2p
0	2	2	4	2p + 2d
0	1	0	0	1s
0	0	1	0	1f
0	1	2	2	2 s.p.

在原始 SI 理论中，[29,30], SI 方法所统计的占据能带应与其他能带隔离开来；另一种方法是统计目标带隙以下的所有能带。然而，对于光子和声子系统，当 $|\boldsymbol{k}| \to 0$时，前两条或前三条能带总是趋于平面波，此时横向模式会产生两个奇点，分别位于 $\mathbf{U}_{\mathrm{L}} = \mathbf{0}$[5, 59]。在**表** B.2 中，红色数据揭示了前三条能带的对称性行为：它们总是在零能量附近穿过奇点。因此，我们定义了修正赝自旋不变量，以便将这些奇点计入过多，具体如下：

$$\begin{aligned} Z^{(3)} &= \mathrm{sgn}\left(\#\mathrm{K}_2^{(3)} - \#\mathrm{K}_3^{(3)}\right) \\ Z^{(6)} &= \mathrm{sgn}\left(\#\Gamma_{\mathrm{p}}^{(6)} - \#\Gamma_{\mathrm{d}}^{(6)} - 2\right) \end{aligned} \tag{B.2}$$

其中红色项是对奇点的修正。对于光子学情形，公式 (B.2) 应进一步按照 work[5] 进行修正。项 $\#\Gamma_{\mathrm{p}}^{(6)}$ 和 $\#\Gamma_{\mathrm{d}}^{(6)}$ 分别统计 Γ 点处的 p 态和 d 态。

表 C.1. C_3 和C_6对称拓扑材料的一些典型优化后的晶胞。（此处红色数据指的是我们论文中展示的示例）

C_n	$\boldsymbol{r}\{A\}$	$\boldsymbol{L}\{A\}$	$\boldsymbol{\Phi}$\{deg\}	$H\{A\}$ $Q^{(n)}, Z^{(n)}$	$f_{\max}^{(m)} \sim f_{\min}^{(m+1)}$
C_3	(0.7217,0.95,0.0275)	(0.3382,0.5073,0.1691)	(108,18,126)	0.55 (2/3, 1)	0.741~1.069
	(0.4041,1.00,0.0900)	(0.3082,0.3082,0.2568)	(144,72,90)	0.45 (2/3, -1)	0.772~1.000
C_6	(0.9238,0.90,0.3250)	(0.3682,0.2455,0.3068)	(90,108,0)	0.65 (1/2, 1)	1.344~1.489
	(0.8776,0.90,0.1750)	(0.2155,0.3232,0.2693)	(90, 144, 72)	0.50 (0, -1)	1.332~1.450
	(0.9584,0.80,0.1800)	(0.1766,0.4121,0.2355)	(126,126,72)	0.60 (1/2, 1)	1.254~1.319
	(0.8603,0.95,0.1575)	(0.2055,0.3596,0.3082)	(108,144,90)	0.45 (0, -1)	1.249~1.344

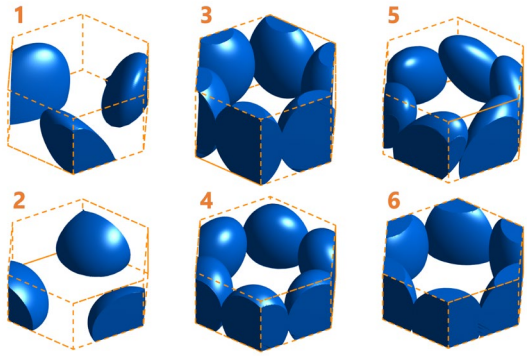


图 C.1. 一些具有C_3 和C_6 对称性的优化后的晶胞。顺序对应表 C.1 的行号。

附录C：优化设置与遗传算法求解器

本文中材料和优化求解器的参数设置如下：基本介质为环氧树脂（EP），弹性模量为 $E_0 = 4.35$ GPa，泊松比为$\nu_0 = 0.37$，质量密度为 $\rho_0 = 1180\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$。散射介质为钢（Fe），弹性模量为 $E = 200$ GPa，泊松比为 $\nu = 0.2$，质量密度为 $\rho = 7800\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$。遗传算法（GA）求解器的设置如下：种群规模为 100，交叉比例为 0.9，迁移比例为 0.3，精英数量为 5，目标函数容差为 1e-5，停滞代数限制为 15。晶格常数为 $A = |\boldsymbol{R}| = 1\text{m}$。

表 C.1 和 **图** C.1 列出了一些典型的优化后晶胞。**表**C.1 中的行号与**图** C.1 中晶胞的顺序一致。对于正文中的示例，我们将其优化过程设置为

- 对于 C_3 对称的螺旋型二阶拓扑绝缘体，狄拉克锥的破缺出现在 K 点。第一个晶胞的优化设置为 $m = 6$，拓扑不变量非零 (2/3,1)，且未指定特定的 $f$ref; 该值将自动更新为目标带隙的中间频率。

- 对于 C_6 对称的螺旋型二阶拓扑绝缘体，破缺的狄拉克锥出现在 Γ 点。第一个晶胞的优化设置为 $m = 7$，$\boldsymbol{Q}\mathrm{ref}_{(n)}$，$Z\mathrm{ref}_{(n)}$ =(1/2,1)，且$f$ref = 1.4。随后，以 $m = 7$ 为设置优化其磁性拓扑绝缘体配对体，$\boldsymbol{Q}\mathrm{ref}_{(n)}$，$Z\mathrm{ref}_{(n)}$ = $(0, -1)$，以及 $f$ref = 1.4。

附录 D：边缘态和角态的超晶胞设置

下面详细介绍两个超晶胞示例的设置

- 对于正文中的 C_3 对称晶胞，截断超晶胞的示意图如**图** D.1 所示，其中提供了一种调节边缘态频率的方法。此截断不会破坏晶体对称性，因此拓扑边缘态不会消失。**图** D.1(a) 和 D.1(b) 中的截断设置为 $T = 1/4 \times 2A/\sqrt{3}$，边缘带隙位于 0.872-1.001 之间。**图** D.1(c) 和 (d) 展示了在截断设置为 $T = 1 \times 2A/\sqrt{3}$ 时模拟得到的本征值谱和交叉波导。**图** D.1 中的浅蓝色区域表示正文中的超晶胞结构。

- 对于 C_6 对称晶胞，晶胞对之间的内部界面也可以像**图** D.2 那样进行截断。**图** D.2(a) 和 D.2(b) 显示，截断设置为 $T = 1/2 \times A$ 时，边缘态的带隙位于 1.398-1.425 之间。本征值谱对应的超晶胞示意图如**图** D.2(c) 所示，截断设置为 $T = 1 \times 2A/\sqrt{3}$。在**图** D.2(c) 中，除内部六边形界面外，还添加了六个直径为 $0.4A$ 的基底介质圆柱，以调整超晶胞的角部。**图** D.2 中的浅蓝色区域表示正文中的超晶胞结构。

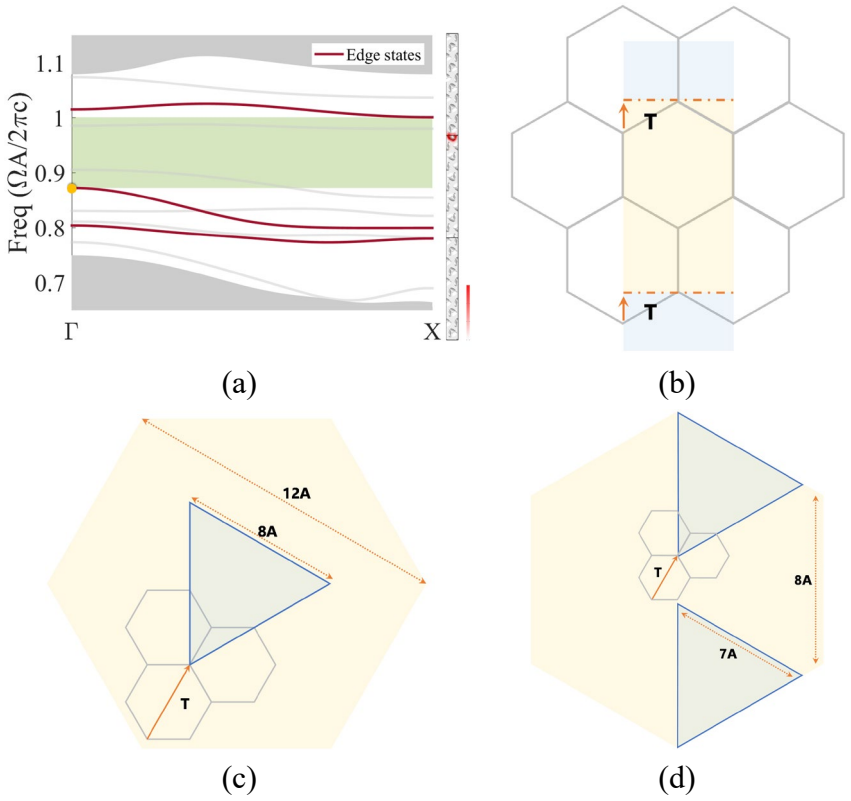


图 D.1. C_3 对称晶胞的超晶胞脚本。(a) 边缘态的能带（浅灰色能带属于下界面对应态），以及 (b) (a) 中带状超晶胞的脚本。用于本征值谱的超晶胞脚本 (c)，以及用于交叉波导仿真的超晶胞脚本 (d)。

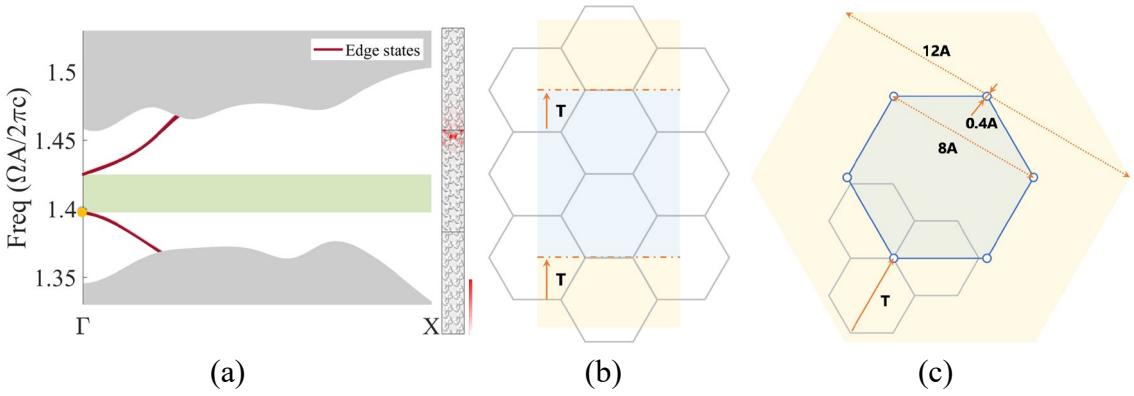


图 D.2. C_6 对称晶胞的超晶胞脚本。(a) 边缘态的能带，(b) (a) 中带状超晶胞的脚本，以及 (c) 用于交叉波导仿真的超晶胞脚本。

参考文献

1. Hasan, M. Z. & Kane, C. L. 专题综述：拓扑绝缘体。《现代物理评论》 **82**, 3045 (2010). 2. Lu, L., Joannopoulos, J. D. & Soljačić, M. 拓扑光子学。《自然·光子学》 **8**, 821 829 2014– ( ). 3. Xie, B. 等。高阶能带拓扑。《自然综述·物理学》 **3**, 520–532 (2021). 4. Xu, Y. 等。拓扑声子材料目录。*arXiv* (2022). 5. Christensen, T., Po, H. C., Joannopoulos, J. D. & Soljačić, M. 光子晶体中基本带隙的位置与拓扑。《物理评论*X*》 **12**, 21066 (2022). 6. Ma, T. & Shvets, G. 全硅谷霍尔光子拓扑绝缘体。《新物理学杂志》 **18**, 025012 (2016). 7. Wu, Q., Chen, H., Li, X. & Huang, G. 弹性 Kagome 晶格中的面内二阶拓扑保护态。《物理评论应用》 **14**, 014084 (2020). 8. Süsstrunk, R. & Huber, S. D. 机械拓扑绝缘体中声子螺旋边缘态的观测。*Science (1979)* **349**, 47–50 (2015). 9. Wu, L. H. & Hu, X. 利用介电材料实现拓扑光子晶体的方案。《物理评论快报》 **114**, 223901 (2015). 10. Košata, J. & Zilberberg, O. 二维连续介质中的二阶拓扑模态。《物理评论研究》 **3**, L032029 (2021). 11. Peano, V., Sapper, F. & Marquardt, F. 利用深度学习快速探索拓扑能带结构。《物理评论*X*》 **11**, 21052 (2021). 12. Long, Y., Ren, J. & Chen, H. 弹性波的内禀自旋。《美国国家科学院院刊》 **115**, 9951–9955 (2018). 13. Zhang, Z. 等。基于谷霍尔拓扑绝缘体的定向声学天线。《先进材料》 **30**, 1803229 (2018). 14. Zhang, Z. 等。拓扑声学延迟线。《物理评论应用》 **9**, 34032 (2018). 15. Nii, Y. & Onose, Y. 利用微波阻抗显微术成像图案化基底上的声学拓扑边缘模。*arXiv* (2022). 16. Kumar, A. 等。硅芯片上的拓扑传感器。《应用物理快报》 **121**, 11101 (2022). 17. Hafezi, M., Demler, E. A., Lukin, M. D. & Taylor, J. M. 鲁棒光学延迟线

s

具有拓扑保护。《自然·物理》**7**, 907–912（2011）。

18. Gong, Y. 等 利用谷霍尔光子晶体实现拓扑绝缘体激光器。《ACS Photon》**7**, 2089–2097（2020）。19. Bandres, M. A. 等 拓扑绝缘体激光器：实验。《Science (1979)》**359**, eaar4005（2018）。20. Yu, S. Y. 等 面向可集成拓扑声子电路的弹性赝自旋输运。《自然·通讯》**9**, 3072（2018）。21. Ma, T. X. 等 利用声子晶体梁的拓扑界面态采集弯曲波能量。《Extreme Mech Lett》**50**, 101578（2022）。22. Zhou, W. 等 均匀压电杆系统中可主动控制的拓扑相变。《J Mech Phys Solids》**137**, 103824（2020）。23. Zhang, Z. 等 深亚波长多孔声学二阶拓扑绝缘体。《先进材料》**31**, 1904682（2019）。24. Chen, Y., Liu, X. 和 Hu, G. 机械蜂窝中的拓扑相变

b

晶格。《J Mech Phys Solids》**122**，54–68（2019）。25. Xu, L. 等二维核壳介质光子晶体中光子能带的偶然简并与拓扑相变。《Opt Express》**24**，18059（2016）。26. Kang, Y. 等光子拓扑绝缘体中的赝自旋-谷耦合边缘态。《自然·通讯》**9**，3029（2018）。27. Mousavi, S. H.、Khanikaev, A. B. & Wang, Z. 声子超材料中的拓扑保护弹性波。《自然·通讯》**6**，8682（2015）。28. Zhang, Z. 等无流动对称性破缺超材料晶格中声学赝自旋多极子的拓扑产生。《物理评论快报》**118**, 84303（2017）。29. Schindler, F. 等自旋轨道耦合晶体中的分数角电荷。《物理评论研究》**1**，33074（2019）。30. Benalcazar, W. A.、Li, T. & Hughes, T. L. 分数角电荷的量子化

e

在 Cn 对称的高阶拓扑晶体绝缘体中。《物理评论B辑》**99**, 245151 13 2019– ( ). 31. Benalcazar, W. A., Bernevig, B. A. & Hughes, T. L. 量子化电多极绝缘体。*Science (1979)* **357**, 61–66 (2017). 32. Yang, Z. Z. 等 声学晶体绝缘体中的螺旋高阶拓扑态。《物理评论快报》 **125**, 255502 (2020). 33. Liu, F., Deng, H. Y. & Wakabayashi, K. 四极相中的螺旋拓扑边缘态。《物理评论快报》 **122**, 86804 (2019).

34. Zhang, X. 等 声子晶体中的二阶拓扑与多维拓扑转变。《自然·物理》 **15**, 582–588 (2019). 35. Fan, H. 等. 具有拓扑保护角态的弹性高阶拓扑绝缘体。《物理评论快报》 **122**, 204301 (2019). 36. Kim, M., Jacob, Z. & Rho, J. 二维、三维及高阶拓扑光子学的最新进展。《光：科学与应用》 **9**, 130 (2020). 37. Lu, Y. & Park, H. S. 连续方形对称 C4(v) 和 C2(v) 晶胞中的双狄拉克锥与拓扑非平庸声子。《物理评论*B*辑》 **103**, 64308 (2021). 38. Zhu, X. 等 连续形变光子晶体中的拓扑转变。《物理评论*B*辑》 **97**, 85148 (2018). 39. Chen, Y. 等 . 高阶光子拓扑绝缘体的逆向设计。《物理评论研究》 **2**, 23115 (2020). 40. Du, Z., Chen, H. & Huang, G. 通过合理设计贝里曲率和能带结构，获得最优量子谷霍尔绝缘体。*J Mech Phys Solids* **135**, 103784 2020( ). 41. Dong, H. W. 等 通过拓扑优化定制方形晶格中的声学狄拉克锥和拓扑绝缘体。《声学与振动杂志》 **493**, 115687 (2021). 42. Luo, J. 等 面向量子谷/自旋霍尔绝缘体的基于可移动形态组件的逆向设计公式。*Extreme Mech Lett* **45**, 101276 (2021). 43. Nanthakumar, S. S. 等 基于量子自旋霍尔效应的声子拓扑绝缘体的逆向设计。*J Mech Phys Solids* **125**, 550–571 (2019). 44. Christiansen, R. E., Wang, F., Sig mund, O. & Stobbe, S. 利用拓扑优化设计具有量子自旋霍尔边缘态的光子拓扑绝缘体。《纳米光子学》 **8**, 1363–1369 (2019). 45. Hoffmann, R. 化学与物理如何在固态中交汇。《德国应用化学》 **26**, 846–878 (1987). 46. Bradlyn, B. 等 拓扑量子化学。《自然》 **547**, 298–305 (2017). 47. Po, H. C., Vishwanath, A. & Watanabe, H. 230 种空间群中的基于对称性的能带拓扑指标。《自然·通讯》 **8**, 50 (2017). 48. Fu, L. & Kane, C. L. 具有反演对称性的拓扑绝缘体。《物理评论*B*辑》 **76**, 45302 (2007). 49. Watanabe, H., Po, H. C. & Vishwanath, A. 1651个磁空间群中能带结构的结构与拓扑。《科学进展》 **4**, eaat8685 (2018).

50. Tang, F., Po, H. C., Vishwanath, A. & Wan, X. 基于高阶对称性指标发现拓扑材料。《科学进展》 **5**, eaau8725 (2019). 51. Bendsøe, M. P. & Sigmund, O. 拓扑优化：理论、方法与应用。（Springer Berlin Heidelberg, 2004）。52. Guo, X., Zhang, W. & Zhong, W. 显式且几何化地进行拓扑优化——一种基于可移动形态组件的新框架。*J Appl Mech* **81**, 81009 (2014). 53. Du, Z. 等 一种高效且易于扩展的 MATLAB 代码，用于实现可移动形态组件（MMC）方法进行三维拓扑优化。*Struct Multidiscip Optim* **65**, 158 (2022). 54. J.D. Achenbach. 弹性固体中的波传播。（Elsevier Science Publishing Co Inc, 1973）。55. Strang, G. 线性代数导论。（Wellesley Cambridge Press, 1993）。56. Luo, J. 等 通过合理的对称性指标工程，对光子拓扑绝缘体进行多类别、多功能设计。《纳米光子学》 **10**, 4523–4531 (2021). 57. Kreisselmeier, G. & Steinhauser, R. 通过优化向量性能指标进行系统化控制设计。控制系统计算机辅助设计 113–117 (1980). 58. Po, H. C., Vishwanath, A. & Watanabe, H. 能带拓扑基于对称性指标的完整理论。《自然·通讯》 **8**, 50 (2017). 59. Watanabe, H. & Lu, L. 光子能带的空间群理论。《物理评论快报》 **121**, 263903 2018( )。