填充布拉格球：聚合物折射率（1.55）下的完全三维光子带隙

Alexander Itin[1], 2, *[1]荷兰 *Nijmegen* 拉德堡
德大学[2]德国汉堡独立研究者（2026年11月25日）

arXiv:2611.32789v1 [physics.optics] 24 Nov 2026

迄今为止，只有在约 1.9 及以上的折射率对比度下，才发现完全三维光子带隙；这一折射率对比度通过杆连接金刚石晶格结构实现。倒易空间设计的准周期结构最近在低得多的折射率对比度下实现了显著的发射衰减 [L. Maiwald 等人，《Advanced Optical Materials》10, 2100785（2022）]。在此，我们对具有完全带隙的周期性三维结构实施系统搜索和倒易空间设计，在整数晶格上求解离散优化问题。高能带上方的带隙需要介电材料最强的傅里叶分量接近该能带的布拉格球。具有大单元的晶体以位于该球面上某多面体顶点处的傅里叶峰为初始结构，并针对经过高密度精化的能带边缘进行优化，最终在低至 1.55 的折射率对比度下开启完全带隙；这一数值正是常见聚合物相对于空气的折射率对比度。在所测试的多面体中，二十面体十二面体的有理逼近为傅里叶峰提供了最高效的位置安排。数值计算通过一系列分辨率确认了这些带隙，并在整个布里渊区内搜索能带边缘。最佳设计是连通多孔网络，适合使用打印聚合物进行微波测试。一个适用于任何结构的严格界并未排除在更低折射率下出现带隙的可能性；而二十面体十二面体的下一阶有理逼近，其布拉格区几乎精确匹配第 576 条和第 2440 条能带，指明了寻找更低对比度带隙的方向。

过去几十年来，研究人员对周期性、非周期性和准晶态介电材料中的光子带隙进行了广泛探索 [1–23]。光子带隙为多种限制和引导光的方式奠定了基础，甲虫等生物也能产生光子带隙 [24, 25]。早在1887年，Rayleigh就指出，周期性分层介质中的波会在某些频率能带上发生反射，而且无论分层程度多弱，这样的阻带都会开启 [26]。人们注意到，处于这种结构中的原子辐射会减弱 [27], ；1987年，Yablonovitch和John提出了三维版本：一种能在某个频率带内禁止所有方向和偏振的光传播的晶体，以抑制自发辐射并实现光的局域化 [1, 2]。在三维空间中，所有方向的阻带都必须重叠，这要求构成材料之间具有足够的光学对比度。人们最先在金刚石晶格中预测到完全带隙 [3] ，并在一个沿三个方向钻孔的高折射率介电材料块体中，于微波频率下观察到了这种带隙 [4]。

在普通介电结构中，目前仅在折射率对比度约为 1.9 或更高时，才验证了完全带隙。该阈值属于金刚石族 [3, 5] ，并已在 Sn–S–O 反向杆连接金刚石结构中得到确认 [15]。对每个体素进行拓扑优化，相较于手工设计仅有小幅改进 [13], ，而规模最大的晶体模板调查仅涵盖高对比度和低频带 [16]。可打印的聚合物和玻璃的折射率接近 1。5 [28], ，因此要在其中实现完全带隙，需要用高折射率材料进行回填 [15] ，或使用二氧化钛打印 [21]。1.9 是否是三维结构的极限，还是搜索所针对的低频带的极限 [17], ，仍是一个悬而未决的问题。

在低对比度下，带隙源于布拉格效应，设计思路转向倒易空间：最强傅里叶分量对应的布拉格面应近似包围最低 n 条能带的自由光子态，类似于金属物理学中的琼斯区 [29]。在二维中，一圈布拉格峰即可实现这一点。优化后的准晶体[9, 11], 超均匀图案 [12], 准晶干涉场 [7] 和旋转形态结构 [22] 都具有这样一圈峰值，而超胞显著降低了形成完全二维带隙所需的对比度 [14]。

在三维中，Maiwald 等人 [18] 直接探究了最低对比度。对于由叠加光栅构建的准晶体，他们估算在二维和三维中，任何对比度下都存在有限的完全带隙。在三维模拟中，发射仅受到部分抑制，未达到这一预测；毫米级聚合物打印件则能抑制微波透射 [18, 19]。二十面体准晶体的立方近似晶体在很宽的介电常数范围内具有较大且近乎各向同性的完全带隙 [8], ； 隐形超均匀网络在微波条件下于 n ≈2.1 时呈现各向同性带隙 [20], ； 旋转形态结构则在耦合偶极模型中呈现带隙 [22]。因此，低于 1.9 的完全带隙虽已有预测，但尚未得到证实。

我们寻找具有大单元的晶体中的带隙，这是一个关于能带结构的论断，标准求解器可以
在每个波矢处进行检查。得到以下三个结果。(i) 采用精确梯度针对密集精化的能带边缘进行优化的自由水平集结构，在低于金刚石阈值的情况下开启完全带隙。(ii) 它们的傅里叶功率聚集在布拉格球上的薄壳层中，分散于许多对晶格矢量之间，且没有单个琼斯区能够解释这一现象；最佳设计源于布置在峰值处的

* alexander.itin@ru.nl；https://AI4science.de

该球面上多面体顶点处的峰值。(iii) 独立求解器证实，三种立方晶格均存在完全带隙；对于体心立方晶格，带隙最低可达到常见聚合物的折射率。一个适用于任何结构的严格空晶格界远低于这些对比度，因此并未排除更低折射率下的带隙。该快报内容自洽完整；补充材料（SM[30]）补充了推导、实现细节以及完整的验证记录。

在简单立方、体心立方或面心立方晶格的单位体积原胞中定义两相结构 $\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 + (c - 1)\theta(\mathbf{r})$。晶格只限定平移：不施加点群对称性，最终设计也不具备任何点群对称性；θ是致密相的指示函数，f 是其填充率，折射率对比度为 $\sqrt{c}$。在空晶格中，若计入两种偏振，n 个自由光子态填满半径为 k_n的球面，该球面对应第 n 条能带的特征波矢：

$$n = \frac{8\pi}{3}\,k_n^3, \qquad R \equiv 2k_n = 2\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{1/3} \tag{1}$$

波矢的单位为倒格子单位（不含因子 2π）。傅里叶分量 $\hat{}\theta(\mathbf{G})$ 会耦合波矢相差 G 的自由光子。第 n 条能带上方的带隙需要布拉格球面 $|\mathbf{G}| \approx R$ 上具有较强的分量。完全带隙位于第 n 条能带的最高频率与第 $n + 1$条能带的最低频率之间；两者均取遍整个布里渊区，而非仅取布里渊区的对称线；其相对宽度为

$$\Delta = \frac{2(\omega_+ - \omega_-)}{\omega_+ + \omega_-}, \qquad \omega_- = \max_{\mathbf{k}} \omega_n(\mathbf{k}), \qquad \omega_+ = \min_{\mathbf{k}} \omega_{n+1}(\mathbf{k}). \tag{2}$$

ε 中的极小极大单调性为任何具有 $1 \le \varepsilon \le c$ 的结构给出严格界：相对宽度为 Δ的带隙位于第 n 条能带之上时，需要 $\sqrt{c} \ge R_n\,(1 + \Delta/2)/(1 - \Delta/2)$，其中 R_n 是空晶格中第 n 条能带的最大值与第 n 条能带 $+ 1$ 最小值之比（补充材料 [30], S7）。对于 0.3% 的带隙，界 $c_B(\mathrm{n})$ 强烈依赖于 n：sc 88 给出 1.132，bcc 136 给出 1.112，fcc 190 给出 1.105，而 sc 56 给出 1.46。我们只在 c_B的局部极小值处进行设计。

最强峰的布拉格面界定出一个多面体，即琼斯区的类似物，它近似表示带隙以下的态。在尖锐布里渊区模型中，能带 n 上方的带隙要求其在每个 k 点容纳 n/2 个平面波，因此其体积应为 n/2（二维 TM 中面积为 n），并且在晶格平移 [31] 下铺满倒易空间 n/2 次。在有限反差下，这些模式会混合布里渊区边界两侧的平面波，因此上述两个条件都不是必要条件；区域体积及其平移后格点计数的离散程度，是衡量初始值的诊断指标。在二维中，最强的环状峰重现了面积 n。在三维中，由均匀填充壳层生成的设计的强峰并不形成这样的区域。最佳设计的区域

多面体初始值在 94% 的 200 000 个随机布洛赫矢量处恰好容纳 n/2 = 68 个平面波（范围为 66–68，均方根偏差为 0.27）。对于尝试过的其他所有初始值，均方根偏差为 2.5–7.6，即使其体积与 n 相匹配也是如此，而且它们最终都具有更高的反差（SM [30], S12）。

一阶计数平衡了球面上 N 个峰的布拉格开口，其随 $N^{-1/2}$而减小；同时，峰之间的未覆盖方向随 1/N 而缩小。其最优点位于两项均为对比度的二阶项之处，就像它所忽略的耦合项一样，因此既不能确定 N，也不能确定带隙；这既适用于 [18] 的估计，也适用于我们自己的版本。这些设计只使用壳层的一部分：其有效壳层对数量随球面增大，从 $R = 3.4$ 时的约 18 对增加到 $R \approx 6$时的 100–115 对，相当于该晶格所提供对数的三分之一；弱峰也需要计入：在一个粗略模型中，在填充率固定的情况下，去掉折射率为 1.654 的设计的 313 对中的最弱 63 对（其生成级数功率的 1.6%），就会关闭其带隙（补充材料 [30], S9）。给定 R 时的最优数量仍有待确定。

该结构是实傅里叶级数 $\varphi(\mathbf{r}) = \Sigma_G\, a_G \cos(2\pi \mathbf{G}\cdot\mathbf{r} + \alpha_G)$ 的平滑水平集 $\theta(\mathbf{r}) = S_\tau[\varphi(\mathbf{r})]$，包含 218–313 对系数（$0.15 \le |\mathbf{G}|/2k_n \le 1.06$）。能带由 H 场平面波求解器计算，使用截至 $|\mathbf{k} + \mathbf{G}| \le 2k_n$ 的平面波以及 Ho 逆定则 [3]。能带边缘的 Hellmann–Feynman导数给出关于所有系数的精确梯度。L-BFGS 在逐步降低对比度的同时，最大化第 n 条能带上方的间隙，$c \to 1 + (c - 1) \times 0.96$，初始值为 $c \approx 4$–4.5。初始结构包括：随机壳层、按 Riesz 电荷加权的壳层（振幅 $\sqrt{q_j}$，电荷 $q_j \ge 0$ 位于壳层方向 $\pm G_j/|G_j|$ 上；这些方向在对数排斥作用下最接近平衡，效果略好）、柱面波之和（见下文）或多面体峰集（效果最好）。最后，阈值 τ 逐渐锐化为二值结构。

针对固定 k 集合进行优化的设计会学会将能带极值推向其点之间；我们在折射率 1.58–1.59 处首次观察到的表观带隙，在更精细的网格上关闭了。

每个设计都针对精化能带边缘进行优化：每一轮先在两个 k 网格和布里渊区内的 200 个随机点上进行扫描，随后对第 n 条能带的四个最高极大值和第 n 条能带 $+ 1$ 的四个最低极小值进行 Nelder–Mead 优化，并将点加入工作k点集合。最终设计会在这两个网格、400 个随机点以及十二次加十二次细化上进行检查；该平面波带隙达到 0.3% 时的对比度为 c_{03}。

只有独立求解器 MIT 光子能带（MPB） [32] 在二值结构上得出的结果，才会被声称为带隙；所采用的对比度阶梯从 $0.98\ c_{03}$开始：在两个 k 网格和能带极值集合上以分辨率 40 进行扫描，从扫描点中最高的十个和最低的十个点细化能带边缘，并在分辨率 48、64 和 80 下重新计算边集，再对其关于 $1/\mathrm{res}^2$进行线性外推。只有当精细化带隙超过经验接受裕度，即细化损失与关于 $1/\mathrm{res}^2$ 和 1/res 的线性外推结果之间的离散程度之和的三倍时，才可提出主张；较小的正带隙则

为候选项。主要设计还需通过另外两项检查：从约 1600 个起点进行全局搜索，并使用 MPB 对能带边缘附近的每个极值进行重新细化；以及数值覆盖证书，该证书对整个布里渊区内有限平面波模型的能带给出界限。该证书针对的是该模型，而不是麦克斯韦'方程。以下所有带隙均为精细化能带边缘值；在每种情况下，它们都会随分辨率提高而增大。实施和验证的详细信息见补充材料 [30],S2–S5。

MPB 在三种立方晶格上确认了十八种设计存在完全带隙；表 I 列出了每类中的最佳设计。最低对比度来自一种体心立方设计，其能带高于第 136 带。该设计由布拉格球上一个近似二十面体十二面体的 30 个顶点处的傅里叶峰生成（图 1），并经两轮扰动重启得到改进。在折射率对比度为 1.547 时，其带隙在精化能带边缘下为 0.25 %，在分辨率 80 时增至 0.31 %（图 2）；全局能带边缘搜索重现了这一结果，且其平面波模型通过了数值覆盖证书验证。其折射率比金刚石阈值低 19 %，c − 1 低 47 %。由均匀填充壳层生成的设计，在体心立方晶格上的折射率最低达到 1.584，在面心立方晶格上达到 1.677；多面体初始值在简单立方晶格上达到 1.681。另有八种设计在所有分辨率下均有正带隙，但未达到接受裕度要求，因此被列为候选项。

最低的对比度来自这样一种优化初始化：将傅里叶峰置于布拉格球上某个多面体的顶点处，而不是均匀填充的壳层上（图 1）。在 bcc 136 中，最接近二十面体的 30 个晶格矢量效果最佳。该结构为实数结构，因此峰值成对出现 ±G，而使它们均匀分布则构成塔姆斯问题 [33]：对于穿过原点的直线 [34–36]。将问题限制在晶格矢量上后，它便成为离散问题：我们将起始集合搜索与所有傅里叶系数的连续优化结合起来。二十面体的实体具有最圆的布拉格多面体，但不存在晶格形式，因此其顶点需要采用黄金分割比的有理逼近 φ。由斐波那契数 2、3 和 5 构成的 bcc 矢量 {600} +{532}c（c：仅进行循环置换），其方向与二十面体的 30 个顶点相差不超过 1.2°（图 1b）；它们的长度 6 和 $\sqrt{38}$相差 2.7%。其布拉格平面界定出一个近似的菱形三十面体，其体积加倍为 2038/15 =135.87，对应带隙下方的 136 条能带。对于这一 bcc band-136 结构，未经处理的水平集没有带隙，

但优化后的设计在折射率 1.572 时就已通过声明测试；经过一轮扰动重启后，其带隙可保持到 1.555，第二轮则达到 1.547。同样的轮次使 Riesz 起始设计停留在 1.584。以其他多面体（图 3）以及其他晶格为起点时，最终折射率更高。

这种布里渊区与能带的匹配是算术性的。对于连续的斐波那契数 r < q < p，其中 q = F_m，30 个体心立方矢量 {2q 0 0} + {pqr}c 界定了一个体积加倍的布里渊区

$$N_m = 4F_{3m-3} - \frac{2F_{m-3}}{F_m F_{m+1}} \qquad (3)$$

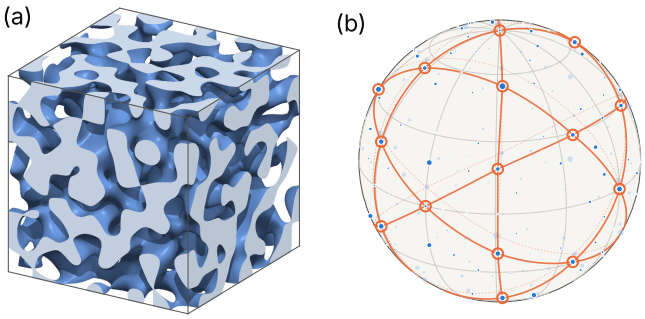


图 1. 折射率为 1.547 时的设计。(a) 在一个 bcc 136 的常规立方晶胞中，其聚合物相（占体积的 37%），边长为 2.6 λ_0，位于带隙中点；浅色面是晶胞边界处穿过聚合物的切面。聚合物和空气各自形成一个连通网络。(b) 其壳层 0.85–1.12 × $2k_n$ 中的傅里叶峰 $\hat{}\theta$(G) 的方向（蓝色，面积 $\propto |\hat{}\theta|^2$；浅色部分：球面的远半部），以及二十面体十二面体起点 {600} + {532} 的 30 个向量（橙色圆环）和二十面体十二面体的边缘；视角与 (a) 相同。起点向量仍对应最强的峰值：446 个壳层向量中最强的一个，以及最强的 40 个中的 26 个。

即 136 − 2/15、576 − 1/20 和 2440 − 1/26 分别形成= 4、5 和 6（证明见补充材料 [30], S12）；能带 576 是否表现更好仍是一个未解决的问题。

更接近的近似结构在半径和方向上都更靠近二十面体十二面体，但其孔仍然存在：五重轴上的孔最宽，半角为 arctan(1/φ) = 31.7°。沿该方向传播的波遇到的最近布拉格平面位于面中心之外 17.6 % 处，而该平面以因子 |cos2θ| = 1/$\sqrt{5}$ 耦合其较弱的偏振。因此，仅有三十个峰会使五重方向的耦合较弱，这与裸起始结构缺少带隙的情况一致。

这三条能带都处于空晶格界的深局部极小值处（图 4）；bcc 136 的界是三者中最低的，也是这些单元中唯一具有接近二十面体十二面体的近似结构的单元。

优化结构是布拉格球的堆积，而非实空间物体的堆积。最佳设计在 0.93–1.0× $2k_n$ 的薄壳层上放置约 18 对强峰，并使其均匀分布于各个方向。折射率为 1.547 的设计展示了这种壳层的来源：它由近似二十面体十二面体顶点处的 30 个峰发展而来，这些峰仍承载着该结构最强的峰值（图1）。它们占图 1(b)壳层中傅里叶功率的 36 %。另外 10 % 位于 6 对 {602}c 中，每个五重孔各一对，偏离其轴线 12.5°，位于 0.991 ×$2k_n$ 处；IDIC 在孔中心处的二十面体（位于 0.914 ×$2k_n$ 处）已被移除（图4；补充材料 [30],S12）。

带隙对每个傅里叶系数的线性响应显示了分工。将所有壳层峰（0.85–1.05 × $2k_n$）统一缩放 1%，会使 Riesz 初始设计中的带隙扩大其自身的 7–9%。内峰同样敏感，但它们的贡献大多相互抵消（SM [30],S9）。

表 I. 每种类型中经 MPB 确认的最佳设计。带隙为 $\Delta\omega/\omega_{\mathrm{mid}}$ 在细化的带边集合上（最多 12 个 k 点），其中 n $+10$ 条能带，容差为 10^{-8}；外推关于 1/分辨率呈线性关系[2]，分辨率范围为 48–80。分辨率 40：细化后的边（*：来自全局搜索）。多面体：多面体初始值；一轮是指一轮扰动重启。所有论断、候选项和带隙开启情况见补充材料 [30], S6。

设计	c（指数）	带隙（%），分辨率 40 / 48 / 64 / 80	分辨率 $\to\infty$
bcc 136 多面体，2 轮次	2.3925（1.547）	0.252 / 0.279 / 0.301 / 0.308	0.326
bcc 136 多面体，1 轮次*	2.4487（1.565）	0.284 / 0.289 / 0.302 / 0.307	0.318
bcc 136 Riesz，2 轮次	2.5084（1.584）	0.250 / 0.286 / 0.327 / 0.343	0.377
bcc 136 Riesz	2.7343（1.654）	0.428 / 0.449 / 0.464 / 0.475	0.488
面心立方 118 Riesz，2 轮次	2.8108（1.677）	0.409 / 0.436 / 0.465 / 0.479	0.503
简单立方 88 多面体，1 轮次	2.8272（1.681）	0.424 / 0.448 / 0.478 / 0.491	0.515
简单立方 88 随机	3.0926（1.759）	0.304 / 0.313 / 0.332 / 0.343	0.358

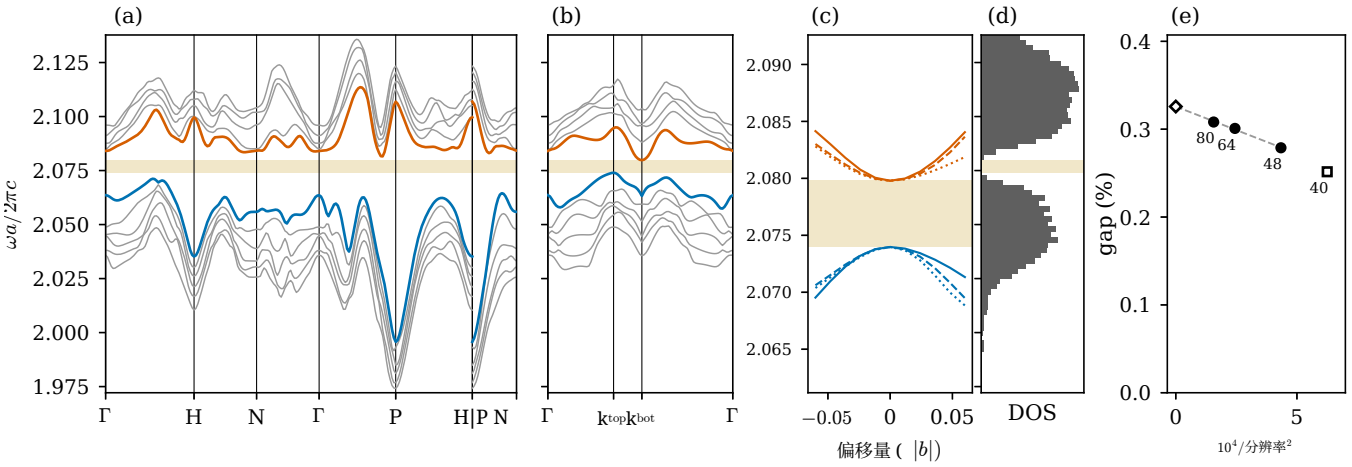


图2. 体心立方 136 设计在 c $=2.3925$（折射率 1.547）时的能带结构。(a) 沿 Γ–H–N–Γ–P–H|P–N 的第 n $-5\ldots$ 第 n $+5$ 条能带；第 n（蓝色）和第 n $+1$ 条能带（橙色）的极值位于这些路径之外，因此该路径上的带隙高估了完全带隙。(b) 穿过精化能带边缘的路径 $\Gamma\to k_{\mathrm{top}}\to k_{\mathrm{bottom}}\to\Gamma$，以及 (c) 穿过这些边缘的六个截面，采用放大比例。(d) 12^3 网格上的态密度；网格未能覆盖第 n $+1$条能带的最小值，因此其带隙更宽。(e) 带隙随 1/res^2 的变化：分辨率 40 时的精化能带边缘（正方形）、48、64 和 80 时的边集（点）、外推（菱形）。阴影部分：分辨率 48 时边缘路径上的完全带隙。

柱面波之和直接检验了覆盖图景。以轴 u 为中心的柱面波 $J_0(K\rho)$，其傅里叶权重位于垂直于 u 的布拉格球大圆上。沿二十面体五重方向的 6 条轴对球面的覆盖最均匀，表现也最佳（bcc 136：$c_{03}=2.805$，接近 Riesz 初始值的 2.790）。3 条立方体轴对球面的覆盖较差，表现最差（bcc 136：$c_{03}=3.20$；fcc 118：无带隙；SM [30], S8）。

同样的方法也能改进二维设计。在 MPB 对四个能带进行检查时，要实现 0.3 % 的 TM 带隙，其所需的 c -1比最佳等杆结构少 8–21 %；这些是单偏振带隙，不同于 [14]的完全带隙。在这里，布拉格圆上的强峰也与较弱的内峰协同作用。三角形 n $=12$杆记录在该圆上带有一个由峰值组成的正十二边形，而其强内部峰——环向量的相位锁定差分——将布里渊区顶点处的态耦合起来；仅从环开始的设计可以达到杆记录，但无法超越它们（SM [30],S13）。

在常见聚合物折射率下实现完整的三维带隙现已通过数值方法得到确立：一方面借助 MPB 进行全局能带边缘搜索，另一方面通过其平面波模型的数值覆盖证书加以证明；倒易空间图景表明，在空晶格界的极小值处会出现更高能带，而在更大的布拉格球面上则有更多峰值。

在高对比度下，人们提出了几种几何思想，用于设计具有大带隙的光子晶体 [10, 23], 其中包括最优堆积，这是数学中最古老的问题之一 [37–40]：将棒置于最优环面圆盘堆积的中心，仅用一个参数，就能与拥有数百个参数的拓扑优化相媲美 [23]。将傅里叶峰堆积在布拉格球上，早已用于准周期结构 [18]；在这里，我们发现了其他更复杂的几何构造方法，用于将傅里叶峰布置在倒易空间的整数晶格上。

折射率 1.5–1.6 涵盖了空气中的常见聚合物和玻璃，而多面体设计目前已达到这一范围的中部。其他多面体无法进一步推进：迄今为止的所有其他族的折射率终点均为 1.594 或更高（图 3）。填充率和峰值数量也同样如此：

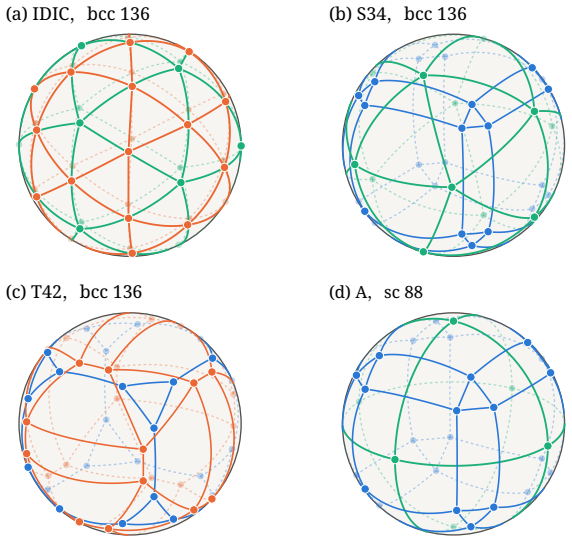


图 3。其他多面体初始点（SM [30], S12）：布拉格球上的峰值方向；每个立方轨道使用一种颜色和一组边集；浅色：远半球。（a）IDIC：图 1(b) 中的二十面体十二面体及其自身的二十面体 {350}c；（b）S34：{433} 及相同的二十面体 {350}c；（c）T42：{442} 和 {541}c；（d）A：八面体 {400} 与 {322}，位于 sc 88 上。最佳主张：IDIC 的折射率为 1.594，T42 为 1.649，S34 为 1.661，A 为 1.681。

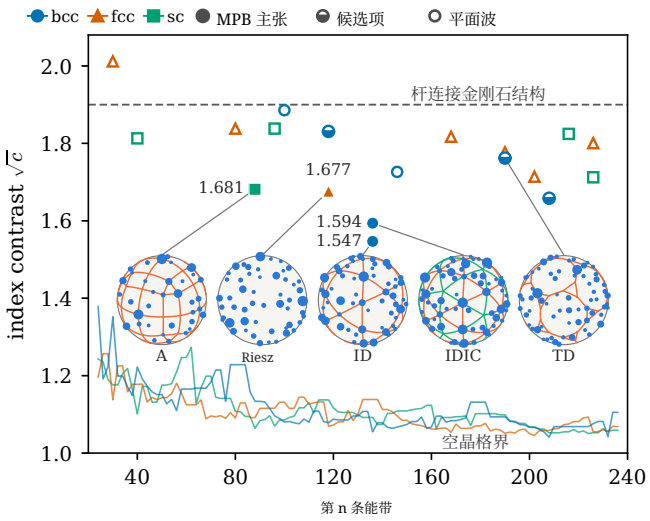


图 4。完全带隙上方第 n 条能带的折射率对比度 $\sqrt{c}$。线条：空晶格界；低于该线时，没有任何结构能在第 n 条能带上方产生 0.3% 的带隙。实心标记：MPB 主张，标注有折射率；半实心标记：MPB 候选项；空心标记：其他能带中最佳的平面波设计。在 bcc 136 中，最佳设计在 c 方向上位于该界之上 12.4 倍 − 1。插图：布拉格球面上五种设计的傅里叶峰（面积$\propto |\hat{\theta}(G)|^2$，接近一半）及其初始多面体（图 3；TD，截角十二面体）；优化会去除部分顶点峰值（例如 IDIC 的二十面体），并增加其他峰值。

当支撑集限制为几十个分布良好的壳层对时，在这些对比度下不会开启带隙；而使用完整支撑集时，无论从何处开始，填充率都会回到 0.33–0.37（SM [30], S9）。一行估算即可得到这一数值：对于阈值化高斯场，壳层峰的布拉格强度 $(c-1)\varphi(t)/[1+(c-1)f]$ with $f = 1-\Phi(t)$（φ、Φ：正态密度和分布）在 $f = 0.36$、$c = 2.39$ 时最大。剩下的问题是较大晶胞，它们尚未在 $n = 136$（图4）基础上实现改进，因此它们是否有所帮助仍有待观察。

这一结果证明，在这种对比度下存在完全带隙，但还不能算是一种器件；目前可实现的实验是在微波频率下打印样品，类似于准晶体的聚合物打印样品 [6, 18]。这种设计不需要特殊材料：其折射率与常见打印丝材（如聚乳酸和高抗冲聚苯乙烯）相同（$\varepsilon \approx 2.4$–2.5，频率为 1–67 GHz） [41], ，而且聚合物和空气各自构成一个连通网络，因此可以打印成一个整体（图 1a）。在几十吉赫兹下，单元的尺寸为厘米级，支柱为毫米级，这正是这类打印样品的特征尺寸。带隙虽窄，但界定它的两个能带近乎平坦，因此带隙内的场在几个单元的距离内便会衰减；约十个单元组成的块应能呈现深阻带（按折射率为 1.654 的设计估算；补充材料 [30],S11）。仍具挑战的是均匀性：在该设计中，填充率或折射率偏差一两个百分点，就会使带隙移动一个带隙宽度；因此必须先测量丝材的折射率，再据此重新调整设计。极小极大论证还保证，若介电常数的晶胞周期误差在相对大小上低于$\varepsilon \approx 2/($ [41], $/4)$，则宽度为 [6, 18]的带隙仍然存在；在这里约为 0.3%；但这一结论不适用于位移界面。在光学波长下，双光子聚合可以加工出这类形状 [42, 43], ，但均匀性尚未达到这一水平。

这些结构是具有大单元的晶体，其傅里叶权重模拟各向同性壳层，正如旋转形态结构和分布式准晶体通过真实无序或准周期性所实现的那样。周期性会牺牲部分各向同性，但也使带隙能够在能带结构中得到验证。

所有设计、超过 80,000 个带有能带的三维结构，以及 MPB 主张数据均予以保留，以供代理模型和机器学习辅助设计使用，并延续参考文献 [44, 45]。

致谢

感谢 M. Titov、M. Katsnelson 和 A. Bagrov 教授在拉德堡德大学给予的热情接待，该校的计算集群完成了大部分数值计算；感谢汉堡工业大学的同事 A. Petrov 教授和 M. Eich 教授提出这一问题，并就倒易空间设计和打印光子结构进行了早期讨论。作者使用了人工智能助手（Anthropic 的 Claude Opus 5.5 和 Fable 5.2；OpenAI 的 Astra 6）进行编程、运行和分析数值计算、审阅草稿以及编辑文本（研究问题、设计原则和对

结果的解读均属于作者本人；作者已核查推导、代码和报告中的数值，并对内容承担全部责任）。

数据可用性

这些设计、其结构和能带图，以及用于重建结构并使用 MPB 检查其带隙的脚本，均可根据合理请求向作者索取；其他代码和数据亦可提供（补充材料 [30], S10）。

[1] E. Yablonovitch，《固体物理和电子学中的受抑制自发辐射》，《物理评论快报》58，2059（1987）。[2] S. John，《某些无序介电超晶格中光子的强局域化》，《物理评论快报》58，2486（1987）。[3] K. M. Ho、C. T. Chan 和 C. M. Soukoulis，《周期性介电结构中光子带隙的存在》，《物理评论快报》65，3152（1990）。[4] E. Yablonovitch、T. J. Gmitter 和 K. M. Leung，《光子能带结构：采用非球形原子的面心立方情形》，《物理评论快报》67，2295（1991）。[5] M. Maldovan 和 E. L. Thomas，《金刚石结构光子晶体》，Nat. Mater. 3，593（2004）。[6] W. Man、M. Megens、P. J. Steinhardt 和 P. M. Chaikin，《二十面体准晶体光子性质的实验测量》，《自然》436，993（2005）。[7] P. N. Dyachenko 和 Y. V. Miklyaev，《通过全息光刻获得的二维光子拟准晶的能带结构计算》，载于 SPIE会议论文集，第6182卷（2006），第61822I页。[8] P. N. Dyachenko、Y. V. Miklyaev 和 V. E. Dmitrienko，《具有完全带隙的三维光子准晶》，《实验与理论物理学快报》86，240（2007）。[9] M. C. Rechtsman、H.-C. Jeong、P. M. Chaikin、S. Torquato 和 P. J. Steinhardt，《光子准晶的优化结构》，《物理评论快报》101，073902（2008）。[10] O. Sigmund 和 K. Hougaard，《最优光子晶体的几何性质》，《物理评论快报》100，153904（2008）。[11] M. Florescu、S. Torquato 和 P. J. Steinhardt，《二维光子准晶中的完全带隙》，《物理评论B辑》80，155112（2009）。[12] M. Florescu、S. Torquato 和 P. J. Steinhardt，《具有大完全光子带隙的设计型无序材料》，《美国国家科学院院刊》106，20658（2009）。[13] H. Men、K. Y. K. Lee、R. M. Freund、J. Peraire 和 S. G. Johnson，《三维光子晶体带隙结构的稳健拓扑优化》，Opt. Express 22，22632（2014）。[14] A. Cerjan 和 S. Fan，《超胞光子晶体中的完全光子带隙》，《物理评论A辑》96，051802(R)（2017）。[15] L. Chen、K. A. Morgan、G. A. Alzaidy、C.-C. Huang、Y.-L. D. Ho、M. P. C. Taverne、X. Zheng、Z. Ren、Z. Feng、I. Zeimpekis、D. W. Hewak 和 J. G. Rarity，《低折射率对比度反向杆连接金刚石结构硫属化物中完全光子带隙的观测》，《ACS光子学》6，1248（2019）。[16] R. K. Cersonsky、J. Antonaglia、B. D. Dice 和 S. C. Glotzer，《三维光子晶体，《自然·通讯》12，2543（2021）。[17] T. Christensen、H. C. Po、J. D. Joannopoulos 和 M. Soljačić，《光子晶体中基本带隙的位置与拓扑》，《物理评论X》12，021066（2022）。[18] L. Maiwald、T. Sommer、M. S. Sidorenko、R. R. Yafyasov、M. E. Mustafa、M. Schulz、M. V. Rybin、M. Eich 和 A. Y. Petrov，《受互易设计启发的低折射率人工材料中的光发射控制》，《先进光学材料》10，2100785（2022）。[19] S. Saha、M. E. Mustafa、M. Eich 和 A. Y. Petrov，《结构化低折射率介质中的 10 分贝发射抑制》，《美国光学学会会刊B辑》40，900（2023）。[20] L. Siedentop、G. Lui、G. Maret、P. M. Chaikin、P. J. Steinhardt、S. Torquato、P. Keim 和 M. Florescu，《三维中的隐形超均匀各向同性光子带隙结构》，《美国国家科学院院刊：Nexus》3，pgae383（2024）。[21] W. Zhang、J. Min、H. Wang、H. Wang、X. L. Li、S. T. Ha、B. Zhang、C.-F. Pan、H. Li、H. Liu、H. Yin、X. Yang、S. Liu、X. Xu、C. He、H. Y. Yang 和 J. K. W. Yang，《在二氧化钛中打印可见光谱范围内具有完全带隙的三维光子晶体》，《自然·纳米技术》19，1813（2024）。[22] M. Casiulis、A. Shih 和 S. Martiniani，《旋转形态结构：一类新型功能性无序材料》，《物理评论快报》135，196101（2025）。[23] A. Itin，《通过最优环面堆积设计光子晶体和超材料的几何方法》，《物理评论B辑》111，L121404（2025），2410.17424。[24] P. Vukusic 和 J. R. Sambles，《生物学中的光子结构》，《自然》424，852（2003）。[25] J. W. Galusha、L. R. Richey、J. S. Gardner、J. N. Cha 和 M. H. Bartl，《在甲虫鳞片中发现一种金刚石基光子晶体结构》，《物理评论E辑》77，050904（2008）。[26]瑞利勋爵，《关于双倍频率力维持振动以及波在具有周期性结构的介质中传播的问题》，《哲学杂志》24，145（1887）。[27] V. P. Bykov，《周期性结构中的自发辐射》，《苏联物理学-实验与理论物理学杂志》35，269（1972）。[28] T. Gissibl、S. Wagner、J. Sykora、M. Schmid 和 H. Giessen，《用于三维直接激光直写的光刻胶折射率测量》，《光学材料快报》7，2293（2017）。[29] H. Jones，《 γ相的合金理论》，《伦敦皇家学会会刊A辑》144，225（1934）。[30] 数值计算工作量（S1）、求解器和优化器（S2、S3）、带边搜索、数值验证和覆盖证书（S4、S5）、每种设计的验证数据（S6）、空晶格界（S7）、倒易空间分析和计数估计（S8、S9）、数据和代码（S10）、带隙内的衰减、连通性和打印样品（S11）、多面体初始点（S12）以及二维设计（S13）的内容，请参阅参考文献之后的补充材料（第 S1–S13 节）。

带隙内的衰减、连通性和打印样品（S11）、多面体初始点（S12）以及二维设计（S13）。[31] N. Gravin、S. Robins 和 D. Shiryaev，《具有重数的多胞体平移铺砌》，Combinatorica 32，629（2012）。[32] S. G. Johnson 和 J. D. Joannopoulos，《平面波基下麦克斯韦方程组的分块迭代频域方法》，Opt. Express 8，173（2001）。[33] O. R. Musin 和 A. S. Tarasov，《 $N = 14$的塔姆斯问题》，Exp. Math. 24，460（2015）。[34] J. H. Conway 和 N. J. A. Sloane，《球堆积、晶格与群》，第 2 版（施普林格，纽约，1993）。[35] J. H. Conway、R. H. Hardin 和 N. J. A. Sloane，《直线、平面等的堆积：格拉斯曼空间中的堆积》，Exp. Math. 5，139（1996）。[36] R. H. Hardin、N. J. A. Sloane 和 W. D. Smith，《具有二十面体对称性的球面码表》，http://neilsloane.com/icosahedral.codes；现由 H. Cohn 维护，https://cohn.mit.edu/sloane（1994）。[37] D. Weaire，《堆积问题简史》，Forma 14，279（1999）。[38] T. Aste 和 D. Weaire，《完美堆积的追寻》（物理学会出版社，布里斯托尔，2000）。[39] O. R. Musin 和 A. V. Nikitenko，《正方形平坦环面上全等圆的最优堆积》，Discrete Comput. Geom. 55，1（2016）。[40] R. Connelly 和 W. Dickinson，《周期性平面圆盘堆积》，Philos. Trans. R. Soc. A 372，20120039（2014）。[41] M. Pérez-Escribano 和 E. Márquez-Segura，《微波和毫米波频段介电材料样品的参数表征》，IEEE Trans. Microwave Theory Tech. 69，1723（2021）。[42] M. Deubel、G. von Freymann、M. Wegener、S. Pereira、K. Busch 和 C. M. Soukoulis，《用于电信的三维光子晶体模板直接激光直写》，Nat. Mater. 3，444（2004）。[43] H. Hu、D. Li、H. Gao、F. Chen、M. Zhang、Z. Li、A. Mao 和 W. Xiong，《可见光谱三维光子晶体的可控制造》，Sci. Adv. 12，eaej0287（2026）。[44] A. Nikulin、I. Zisman、M. Eich、A. Y. Petrov 和 A. Itin，《用于光子晶体能带图预测和带隙优化的机器学习模型》，Photonics Nanos- truct. Fundam. Appl. 52，101076（2022）。[45] I. Schurov、M. Zhdanov、D. Alforov、M. Katsnel- son、A. Bagrov 和 A. Itin，《面向数据稀缺科学应用的不变多尺度神经网络》，arXiv:2406.08318（2024）。[46] V. Hoang、M. Plum 和 C. Wieners，《光子带隙的计算机辅助证明》，Z. Angew. Math. Phys. 60，1035（2009）。[47] M. C. Rechtsman 和 S. Torquato，《获取光子带隙上界的方法》，《物理评论B辑》80，155126 2009（）。

补充材料

S1. 数值计算工作量

所有计算均在拉德堡德大学的 TCM 集群上运行，根据 Slurm 统计，总计约 50 000 核时（表 S1）：其中约 22 300 核时用于平面波设计，22 700 核时用于 MPB，1900 核时用于三维设计的证书，以及 2600 核时用于 S13 的二维设计。我们保留了优化器的路径：在粗网格上具有能带的 84 092 个二元设计和 237 786 个迭代点（1.1 GB）；对于后续的计算批次，还保留了每次扫描、带边搜索和对比度搜索的记录（S10）。

表 S1. 各阶段的 Slurm 核时。

阶段	计算批次	核时
稀疏 k 点集上的初始设计，已被取代（S4）	6	6530
对上述设计进行密集复核（S4）	1	390
采用密集能带边缘的设计：Riesz、壳层、随机和柱面波初始值；两轮推动	4	3500
较大晶胞（n = 146–226）；在体心立方 208 处进行两轮推动	4	3810
多面体初始点、裸集合筛选、推动轮次（S12）	9	6110
受限支撑序列（S9）	1	1920
首次 MPB 检查、对比度阶梯、分辨率研究	9	1890
MPB 声明（S5、S6）	16	11 460
MPB 开启对比度（S6）	1	600
MPB 全局边缘搜索和探针（S5）	7	4870
MPB 能带结构和态密度	4	3910
平面波模型的覆盖证书（S5）	4	1900
所有三维计算任务	66	46 880
二维计算任务（S13）	3	2570
所有计算批次	69	49 450

核时是 Slurm 分配给每项研究计划作业的 CPU 时间（CPU 数 ×墙钟时间），并四舍五入到 10。它们包括单节点作业的空闲核心，以及已停止或尚未完成的案例，因此实际使用的计算资源更少。提交时仍在进行的运行以及最早期的测试，使总量达到约 50 000 核时

提交时的进展和最早期的测试使总量达到约 50 000 核时。

硬件和软件。节点配备 20–40 个核心和 22–204 GB 内存，通过 Meep 1.35.0 Python 接口运行 MPB 1.12.0；以及我们自行编写的平面波代码（NumPy、SciPy）。每项研究计划都以单节点作业的形式运行（每个节点和研究计划最多一个作业），并通过共享案例表依次处理各案例。

S2. 结构与平面波求解器

设计是在单位体积原胞上截断的傅里叶级数，并使用 $2k_n$ 处截断的平面波基底求解全矢量场；截断值通过截断研究选定。

单元与单位。简单立方、面心立方和体心立方原胞均缩放至单位体积。倒格矢 G = m·B（m 为整数）不带因子 2π，因此平面波为 exp(2πi G·r)，而 k 以倒易分数坐标表示。空晶格的第 n 条能带位于 $|\mathrm{k}| = k_n = (3\mathrm{n}/8\pi)^{1/3}$；布拉格球的半径为 $\mathrm{R} = 2k_n$。

对称性。晶格是唯一施加的对称性。傅里叶支撑由所选单元的倒格矢组成，因此每个设计都严格保持其平移对称性，但系数是自由的，初始结构的点群对称性和反演对称性均未在优化过程中保留。对于 48 个立方对称操作 R 中的每一个，我们计算了 θ(r) 与 θ(Rr + t) 在所有网格平移 t 下的最佳重叠，并进行了缩放，使得精确对称性对应于 1。在折射率为 1.547、索引为 1 的设计中，最佳非恒等操作达到 0.42（反演：0.21）；在折射率为 1.594 的 IDIC 设计中为 0.30；在 fcc 118、sc 88 和 bcc 190 中分别为 0.24、0.36 和 0.17，而 47 个非恒等操作的中位数为 0.11–0.18。因此，这些设计是在立方平移晶格上的三斜结构（空间群 P1）；诸如 bcc 136 这样的标签表示该晶格及其能带。在 bcc 上具有周期性的结构，在其常规立方晶胞对应的简单立方晶格上也具有周期性；该常规立方晶胞包含两个原胞，因此 bcc 的能带 136 相当于该描述中的能带 272；bcc 标签表示最小单元。由于不存在点群对称性，不可约区仅为布里渊区的一半，这仅来自时间反演（k → –k）；这就是为何能带边缘要在整个布里渊区内进行搜索（S4），以及为何如图 S1 所示的高对称路径只能用于展示能带。

水平集。其中，s 表示单元中的分数位置：

$$g(s) = \sum_{j=1}^{P} \mathrm{Re}\big[c_j\, e^{2\pi i\, m_j \cdot s}\big]\,, \qquad \rho(s) = \sigma\!\left(\frac{g(s)/g_{\mathrm{rms}} - t}{\tau}\right), \qquad \varepsilon = 1 + (c-1)\,\rho \tag{S1}$$

支撑集在每一对 ±m 中保留一个向量，满足 $0.15 \times 2k_n \le |\mathrm{G}| \le 1.06 \times 2k_n$；bcc 136 中有 313 对，fcc 118 中有 268 对，sc 88 中有 218 对，面心立方 168 中有 410 对。变量为 Re c_j、Im c_j 和阈值 t。二值结构（经过验证的结构）为 $\theta = [\mathrm{g}/g_{\mathrm{rms}} > \mathrm{t}]$； σ 为逻辑函数， τ 退火至 0.02。傅里叶系数取自 $\mathrm{a}48^3$ 体素网格，并包含体素平均的 sinc 因子。

求解器。 我们在横向基底中采用 H 形式：每个波有两个单位向量 $e_{\mathrm{ip}} \perp \mathrm{k} + G_i$ ，所有波 $|\mathrm{k} + \mathrm{G}| \le (1 + \mathrm{w})\ k_n$。当 $\mathrm{w} = 1$ （截断 $2k_n$）时，这约为 4n 个波和 8n 个基态，在 $\mathrm{n} = 136$时约为 1090。采用 Ho'的逆规则 [3]:

$$E_{ij} = \delta_{ij} + (c-1)\,\hat{\theta}(m_i - m_j), \qquad \eta = E^{-1}, \qquad H_{ip,jq} = |k + G_i|\,|k + G_j|\,\eta_{ij}\,(e_{ip} \cdot e_{jq}) \tag{S2}$$

特征值为（$\omega\mathrm{a}/2\pi\mathrm{c}$）^{2} ，其中 a 为单位长度。在 fcc 118 中，一个 k 点约需 0.3 秒，在 sc 216 中约需 1.7 秒。**截断**。在所关注的对比度下，波矢达到约 $\sqrt{\mathrm{c}}\ k_n \approx 1$的波会下降到带隙频率，因此首轮计算中采用的 $1.4k_n$ 截断会夸大带隙：

表 S2a。两个设计的平面波带隙与平面波基底截断的关系。

设计、对比度 带隙 截断	1.4 k_n	1.7 k_n	2.0 k_n
bcc 136 , $\mathrm{c} = 2.8$	+0.46 %	+0.32 %	+0.27 %
fcc 118 , $\mathrm{c} = 3.2$	+0.70 %	+0.43 %	+0.38 %

所有后续设计均在 2.0 k_n 下进行优化，并在 2.3 k_n 下再次检查。报告的平面波对比取两者中较差的结果（c_{robust}）。

与 MPB 的一致性。两个求解器彼此趋于收敛。相同的二值结构（bcc 136，c =2.7343）及其主张中的 12 个边缘 k 点：

表 S2b。一个二值结构（bcc 136，$\mathrm{c} = 2.7343$）在其主张中的 12 个边缘 k 点处的能带边缘，包括平面波模型和 MPB 中的结果。

模型	最大能带 n	最小能带 n + 1	Gap
MPB，分辨率 48 / 64 / 80	2.00249 / 2.00140 / 2.00084	2.01150 / 2.01070 / 2.01037	0.449 / 0.464 / 0.475 %
MPB，1/res^2 外推	~	~	0.488 %
平面波， 48^3 体素，截断 2.0 / 2.3 k_n （设计模型）	1.97760 / 1.97945	1.98296 / 1.98665	0.271 / 0.363 %
平面波， 192^3 体素，截断 2.0 / 2.3 k_n	1.97729 / 1.97920	1.98353 / 1.98743	0.315 / 0.415 %
平面波， 96^3 体素，截断 2.6 / 3.0 k_n	1.98220 / 1.98200	1.98975 / 1.99072	0.380 / 0.439 %

各点的平面波频率均比 MPB 的结果低 1.1%，但第 n 条能带和第 $\mathrm{n} + 1$ 条能带同步移动，偏差在 0.03% 以内。带隙的差异仅由截断和体素化造成：设计模型将其低估了约 0.2 个百分点；在 2.3 k_n 处， 192^3体素造成的偏差为 0.06；在 3.0 k_n 处，相对于 MPB 的分辨率极限，偏差为 0.05。设计模型是保守的，且每项主张均以 MPB 为依据（S5）。我们还在该结构上测试并否决了另外两种规则。使用 MPB 平滑后的逆介电张量（Laurent 规则）时，在 2.0–2.6 k_n 处，频率高出 4–7%，且未出现带隙。法向量分解在 2.0 k_n 处的 12 个边缘点上给出的结果为 0.39%，但在固定平面波集合后与 Ho 规则一致（扫描点范围内分别为 0.30% 和 0.31%）。因此，设计和证书均采用 Ho 规则。

S3. 优化器

优化器逐轮降低对比度，同时 L-BFGS 在不断增加的 k 点集合上保持带隙开启，并对所有系数使用精确梯度。

目标 **ve.** 在工作k点集合 K 上，优化器最小化一个平滑的带隙度量（$\beta = 400$）：

$$J = \frac{1}{\beta}\log\sum_{k\in K} e^{\beta\log\omega_n(k)} \;+\; \frac{1}{\beta}\log\sum_{k\in K} e^{-\beta\log\omega_{n+1}(k)} \tag{S3}$$

J <0 表示 K 上的带隙。Hellmann–Feynman 给出 dλ = v†dH v。对于 d$\eta = -\eta$ dE η，伴随快速傅里叶变换将 ˆ 导数传递穿过 θ、Sigmoid函数、均方根归一化和合成，因此计算全部 2P 个 $+1$ 变量的梯度，成本约相当于额外进行一次求解。

轮次。每轮分为四步：

1. 将设计二值化，并找出 $c_{\min}$，即在 K 上具有 0.3% 带隙的最低对比度；2. 在 c0 $= 1 +$ ($c_{\mathrm{cur}} - 1$) $\times$ 0.96 下，对平滑设计运行 L-BFGS（40 次迭代），其中 τ = max(0.02, 0.05 $\times$0.6ˆ轮次)；3. 在 k 网格(8) $\cup$ k 网格(12) $\cup$ 200随机波矢上扫描二元设计，并细化 $4+4$能带边缘（S4）；4. 将细化后的边缘和 $4+4$ 最差原始点加入 K。

初始K为 k 网格(4)。v2设计从 c $= 4.0$ 开始，运行了 14 轮。若初始点始终无法开启带隙，优化过程就会停滞；因此，较大晶胞（r6b）在每轮未出现带隙后将 c $-$ 1增加 1.25，初始值为 c $= 4.5$。

表S3a。初始构造。

开始	构造
随机	$2k_n$周围的随机系数高斯环
壳层	晶格矢量，0.88 $\leq$ G /$2k_n \leq$ 1.04，等幅度，相位为 0 或 π 随机
Riesz	相同的向量，振幅为 $\sqrt{q_j}$，其 q_j 对数Riesz平衡电荷对应方向 G_j/ G_j 及其对跖点（非负最小二乘，S8）
柱面波	Σ_a J$_0$(Kρ_a) 关于 u_a轴，K $= 0.97 \times 2k_n$；角半宽为 0.12 弧度的大圆上的权重；3, 4、6 或 10 条轴（立方体轴、立方体对角线、二十面体的五重轴和三重轴）
暖启动 / 推送	一个已完成的设计，可选择加入系数均方根 10–30% 的高斯噪声，并继续使用 c $-$ 1 $\times$ 0.97 每轮
多面体的（S12）	布拉格球上多面体顶点附近一个或多个轨道的晶格矢量，等幅度 采用轨道符号（sym），或每对采用随机符号（rand）；还可选择在峰值振幅 0.3 处使用 Riesz加权壳层（bg）；壳层附近加入 5% 复噪声 峰值振幅的 0.3 处的Riesz加权壳层（背景）；壳层附近 5 % 的复噪声

剪枝。为检验弱分量是否重要，保留已完成设计中 K $= 60$、40 或 25 个最大的对，并从 1.1 c_{03} 重新优化；其余项固定为零（L-BFGS-B 边界）。没有任何剪枝后的设计能保留带隙（S8）。

输出。最终二元设计进行稠密检查（S4），得出 c_{open}, c_{03} 以及极值 k 集，MPB 主张会再次使用该结果。检查在截断 2.3 k_n 下重复进行。每次 L-BFGS 迭代都会保存（系数、 J 、平滑设计间隙）。每三次迭代以及每轮结束时，还会将其保存为二元设计，并记录 k 网格(4)上从能带 n $-$ 4 到 n $+$ 5 的能带：这些就是 S1 中的 84 092 个设计，用于代理训练。一个 v2 案例在 4 个核心上耗时约 6 小时；一个 r6b 案例最多耗时 16 小时。

初始值比较。在均匀填充壳层的初始值中，Riesz 加权壳层在三个单元中均给出最低对比度，但仅比次优初始值低 0.02–0.03，且每种只有 1–3 个种子：这一结果具有提示性，但尚无定论。多面体初始值在 bcc 136 和 sc 88 上表现更好（正文，图 1）。最佳稠密 c_{03} 平面波，均采用相同的方案（圆柱来自 `p3d_gopt3d_cyl`，其余来自 `p3d_gopt3d_v2`）：

表 S3b。按初始值类型列出的最佳稠密平面波 c_{03} ，均采用相同的方案。

晶格，n	Riesz加权壳层（3 个种子）	等权壳层（1 个种子）	随机（2 个种子）	柱面波，6 二十面体轴（1 个种子）
bcc 136	2.790	2.868	2.885	2.805
fcc 118	2.947	3.223	2.972	3.063
sc 88	3.140	3.163	3.224	3.506

在柱面波求和中，沿 6 个二十面体五重方向的轴效果最好，而立方体对齐轴最差（S8）。

S4. 寻找带边

自由形式设计没有点群对称性，因此其能带极值可能出现在布里渊区的任意位置。若优化器只看到一组固定的 k 点，就会学着将极值放在这些点之间。因此，每次检查都会结合两种网格：随机点网格和用于连续搜索极值的网格。

网格。 kgrid(g) 是在倒易分数坐标中由 g × g × g t_i = j/g − 1/2 构成的网格，仅通过时间反演进行约化（k ∼ –k）。

表 S4. 带边搜索的 k 点网格和集合。

网格或集合	k 点包含	
kgrid(4)	36	2 网格
k 网格(6)	112	2 网格和 3 网格
k 网格(8)	260	2 网格和 4 网格
k 网格(12)	868	2 网格、3 网格、4 网格和 6 网格，而不是 8 网格
k 网格(8) ∪ k 网格(12) + 400 随机（平面波密集检查）	1492	∼
k 网格(6) ∪ k 网格(8) +极值集合（MPB 主张扫描）	433–470	∼

细化。 取第 n 条能带的 12 个最高点和第 n 条能带 + 1的 12 个最低点，在 k 空间中使用 Nelder–Mead（无约束，并折回布里渊区；初始单纯形为 0.03，k 中的容差为 10^{-3}，频率容差为 10^{-7}，最多进行 60 次评估）使第 n 条能带最大化或使第 n 条能带 + 1最小化。极值集合由细化后的点以及每个边缘处最差的 20 个原始点组成。

对比度搜索。 在极值集合上，将 c 按 4% 的步长提高，直到带隙达到目标值，然后进行二分：带隙为 $> 10^{-5}$时，c_{03} 为 0.3%。极值会随 c 移动，因此在 c_{03} 处重复扫描和细化，并在两个极值集合的并集上重新进行搜索。

原因：撤回的首批主张。我们的首批设计针对 k 网格(4)、k 网格(8)和随机点进行了优化和检查。其中两个设计似乎在折射率 1.578（bcc 136，c = 2.49）和 1.594（fcc 118，c = 2.54）处开启了带隙。密集检查则发现两者的带隙均已关闭:

- **fcc 118** （设计 `p20_s3`）在直线（–t, 0, –t）上的 t = 1/3 和 t = 1/6 处带隙关闭。这些点位于 6 网格上，但不在 4 网格或 8 网格上。分辨率为 48、c = 2.644 时，MPB 验证了这一结果：带隙为 −0.007 %。
- **bcc 136** （设计 `p0_s0`）在其设计对比度 2.4857 下：在 6 网格和 8 网格上为 +0.32 %，在 12 网格上为 −0.06 %，细化后为 −0.23 %。

以这种方式重新检查全部 92 个早期设计（`p3d_recheck3d`）后，最佳值变为 $c_{03} = 3.03$（fcc 118）、3.16（sc 88）、3.29（bcc 118）和 3.38（bcc 136）。在循环中细化边缘的重新设计（S3，从 v2 起）使 bcc 136 的值降回 2.79，这一数值经受住了之后的所有检查；随后，多面体初始点和两轮推动将其降至 2.44（S12）。

S5. 数值验证 与有限平面波模型的全区域覆盖 E 模型

一项主张指出，对于对比度为 c 的二值结构，在整个布里渊区内，两种偏振下均有 $\max_k \omega_n$(k) < $\min_k \omega_{n+1}$(k)。我们通过 MPB 采用四个受控步骤来验证这一主张：k 扫描、能带边缘的连续搜索、分辨率序列以及外推。这是有力的数值证据，而非计算机辅助证明；局限性列于文末。

声称内容。带隙比为

$$\Delta = \frac{2\left(\min_k \omega_{n+1} - \max_k \omega_n\right)}{\min_k \omega_{n+1} + \max_k \omega_n} \tag{S4}$$

对于 ε = 水平集 {g/g_{rms} > t} 内部的 c，外部为 1。该集合作为材料函数传递给 MPB [32]，因此 MPB 使用亚像素平均对连续表面进行采样，而不是使用固定的体素图像。原胞的体积为单位体积，与 S2 中相同。

求解器设置。

- **能带：** n + 10， 因此，带隙能带远离计算结果的顶部，在那里 MPB 的能带收敛得很差 y.

•**容差：** 10^{-8}。

• **块大小：** MPB 按块求解能带，并根据每个块的本征值之和测试收敛性，因此块边缘处的能带收敛最差。块大小 B 是满足以下条件的最小 B： ≥ 12 带隙两侧各至少有同一块中的 3 条能带：bcc 136 和 sc 88 为 12，fcc 118 为 14。

• **并行性：** MPB 采用单线程进程，每个进程求解其分配的 k 点。每个进程的内存约为 0.45 GB$\times$ (res/32)^3 $\times$ (bands/142)，在分辨率 80 时约为 7 GB。

流程 (`mpb3d_proof.py`；每项主张在 24–32 个核心上耗时 4–29 小时)：

1.**初始对比度**。 在平面波极值集合（S4）以及 24 个平面波最差点上，以分辨率 40 运行 MPB，从 c $= 0.98$、1.02、.....、$1.2 \times c_{03}$开始逐步增加，直至该处带隙达到 0.1%。第一个通过的对比度就是主张中的对比度。2. **扫描**。 在 433–470 个 k 点上计算所有能带，在极值集合处使用 kgrid(6) $\cup$kgrid(8) $\cup$，分辨率为 40。均匀部分还会给出态密度。3. **连续边缘搜索**。 从第 n 条能带的 10 个最高点和第 n $+ 1$条能带的 10 个最低点出发，使用 Nelder–Mead 在 k 空间中搜索，并由 MPB 自身完成（每次 ≤ 40 次评估，总计约 820 次）。每次搜索都会使用上一次搜索的 k 为一个求解器进行暖启动。记录每次评估，并根据所有评估结果及扫描结果确定带隙。4.**分辨率序列**。 取每个带边上精细化后的 4 个最佳极大值和极小值，以及网格中的 2 个最佳点（≤ 12个 k 点），在分辨率 48、64 和 80 下进行冷启动，并在线性外推 1/res^2 方面进行外推（同时以 1/res 作为检查）。

接受标准。 只有满足以下所有条件，才能声称存在带隙：

1. 第 3 步之后的带隙为正；2. 第 4 步的每个分辨率下带隙均为正；3. 随着分辨率提高，带隙不会缩小；4. 带隙至少是细化损失（扫描带隙减去精细化带隙）与两次外推之间差值之和的三倍（1/res^2 和 1/res）。对于折射率为 1.547 的设计，该值为 0.252，而 3×0.034。该裕量是经验性的：这两项既不是相互独立的统计误差，也不是对未采样极值或离散化误差的保证界。表 S6 给出了每次运行的阈值；未达到该阈值的设计列为候选项。

引用值是分辨率 40 下的第 3 步间隙，这是最保守的数值；其旁边列出了外推间隙。

表 S5。主张的误差来源、各项的控制方法及其证据。

错误来源	控制方法	证据
在两个网格采样的 k 点之间的带边、平面波和 MPB	极值点，连续搜索于两个求解器	细化使带隙降低了 0.02–0.07 个百分点（S6），且没有关闭任何论断
本征求解器收敛	容差 10^{-8}、10 个保护带、带隙保持在一个块内	在分辨率 32 下，（n $+ 6, 10^{-5}$）、（n $+ 10, 10^{-7}$）和（n $+ 14$、10^{-8}) 在频率上与 3×10^{-5} 一致
离散化	分辨率 $40 \to 80$和外推	在每项主张中，带隙都会随着分辨率的提高而增大；在其中两个早期设计中，它会平滑收敛至 res 96（sc 88：$0.387 \to 0.452$ %；fcc 118：$0.301 \to 0.394$ %）
表示结构	采用亚像素平均的连续水平集而非体素图像	对体素化设计使用平面波会得到更小的带隙 (S2)
模型	线性、各向同性、无损两相介电材料	标准；色散和损耗不在主张范围内

开启对比度 (`mpb3d_open.py`)。在主张的边缘集合以及 $20 + 20$个最极端的扫描点上，以 48 的分辨率为步长，每步将 c 降低 3%，直到带隙关闭，然后再进行两次二分。这是基于固定 k 集合的估计：在较低的 c 下，其他 k 点可能成为极值点。只有在该对比度下运行完整流程后，开启值才会成为主张（对于 c $= 2.55$ 时的 bcc 136，这得到了一个候选项，S6）。

不严谨之处。

• **边缘搜索起点**。 Nelder–Mead 从扫描点中最高的 10 个和最低的 10 个开始。避免交叉处形成的最大值在 k 空间中的宽度约为 gap/(2v) ≈ 0.01，而网格留下的带隙最大约为 0.07，因此最近的扫描点可能低于前 10 个点，从而遗漏该极值。对于 Riesz 起始体心立方 136 设计（折射率 1.654；研究计划 `p3d_mpb3d_verify`），使用 Hellmann–Feynman 的群速度进行平面波梯度搜索已关闭

从 1596 个起点（1492 个扫描点、布拉格多面体的顶点和面中心、主张中的边）出发的群速度搜索，找到了 322 个和 304 个不同极值；MPB 在分辨率 40 下，使用其自身的群速度和牛顿步，对 $24 + 24$ 最极端的极值以及主张中的 12 个边缘点进行了精修。全局带隙为 0.4283%，而主张值为 0.4284%。v3 候选项（折射率 1.587）：0.1691%，与 0.1691% 一致。体心立方 136 v4（折射率 1.584）：从 1620 个起点出发，得到 0.2498%，而主张值为 0.2499%；在分辨率 48、64 和 80 下重新精修后分别为 0.2861%、0.3269% 和 0.3429%（主张值为 0.286%、0.327% 和 0.343%），在容差 10^{-9} 和 10^{-10}下保持不变；第二种块尺寸使第 n 条能带和第 n 条能带 $+1$ 移动了 3×10^{-10}。分辨率 96 和 112 下分别为 0.3513% 和 0.3567%；外推值为 0.371%（1/res^2）和 0.391%（1/res）。该搜索只精修了 301 / 280 个不同平面波极值中 $24 + 24$ 最极端的一个，而平面波模型对极值的排序相差约 0.2 个带隙宽度：认证模型的第 n 条能带$+$ 1最小值（见下文）在设计模型中排在第 50 位。因此，探测器在分辨率 40 下使用 MPB 进一步评估了 178 个候选项（所有未精修且位于边缘 0.5 个带隙宽度以内的设计模型极值、认证模型的极值及其局部搜索极值；`p3d_mpb3d_probe_v4`），并精修了其中位于边缘半个带隙宽度以内的 87 个：没有任何一个通过主张中的边缘条件（带隙为 0.2498%）；在认证模型的最小值附近，MPB 得到一个第 n 条能带 $+1$ 最小值，其位置高于底部边缘 0.36 个带隙宽度。多面体起始设计采用相同方式进行搜索，对所有位于边缘 0.6 个带隙宽度以内的不同极值进行精修，其中包括探测器：折射率 1.547，0.2515%（主张值为 0.2515%；分辨率 48 / 64 / 80 下分别为 0.2787 / 0.3007 / 0.3078%）；折射率 1.565，0.2839%（主张值为 0.2941%；0.2888 / 0.3021 / 0.3069%，仍为阈值的 2.2 倍）；折射率为 1.681 的 sc 88，0.4242%（主张值为 0.4243%）。

- **跨分辨率使用固定边缘集合**。 分辨率序列复用了在分辨率 40 下找到的 k 点。极值会随分辨率移动，因此固定集合只能在更高分辨率下夸大带隙。对于 1.654 的设计已关闭：在每个分辨率下使用牛顿步重新优化后，分辨率 48 / 64 / 80 下的带隙分别为 0.4488 / 0.4636 / 0.4747 %（在固定集合上为 0.4488 / 0.4638 / 0.4750 %），外推值为 0.488 %（1/res^2）和 0.513 %（1/res）。分辨率 96：0.4787 %。分辨率 112：0.4815 %。
- **本征求解器容差**。 MPB 会基于一个块的本征值之和测试收敛性，而不是针对每条能带进行测试；其 Ritz 值高于真实值，因此未收敛的第 n 条能带 $+1$ 会使带隙增大。对于 1.654 的设计已关闭：在容差 10^{-9} 和 10^{-10}下进行暖启动重新求解后，分辨率 48、64 和 80 下的带隙精确到四位数均未改变；第二种块大小使第 n 条能带和第 n 条能带 $+1$ 的变化至多为 2×10^{-10}（v3 设计：3×10^{-10}）。

- **离散化**。 分辨率误差是外推值，而非界。
- **迈向证明**。 计算机辅助证明需要在整个布里渊区上给出严格的特征值包络，正如对二维结构所做的那样 [46]。一个中间步骤是针对有限平面波模型的数值覆盖证书（certify3d.py；使用浮点运算，不采用区间包络）。对于覆盖整个布里渊区的一组固定平面波，逆介电矩阵 η 不依赖于 k，并且每条能带随 k 的移动速度至多为 $\mathrm{L} = \lambda_{\max}(\eta)^{1/2}$（对于体心立方136的 Ho 模型，该值为 0.997）。笛卡尔立方体覆盖维格纳–塞茨原胞的一半；当立方体中心处的这一速度上限或由带隙两侧相邻能带的特征向量得到的二阶界，能够使第 n 条能带保持在带隙内选定区间的下方、第 $\mathrm{n} + 1$ 条能带保持在其上方时，该立方体即通过测试。在体心立方136上的试验中，带边处边长为 0.01 的立方体均通过，而仅使用速度上限时所需边长为 0.0025。八种设计均获得了完整证书，每种设计都没有未解决的立方体，也没有违反条件的情况。在模型带隙的 0.9 倍处：折射率为 1.654 的体心立方136（156 419 个立方体，在 32 个核心上耗时 8.2 小时；认证模型带隙为 0.335%）、折射率为 1.680 的面心立方118（164 887 个立方体，5.0 小时；0.272%）、折射率为 1.759 的 sc 88（87 610 个立方体，1.7 小时；0.223%）、折射率为 1.677 的面心立方118（159 481 个立方体，4.3 小时；0.306%）、折射率为 1.565 的体心立方136（206 329 个立方体，12.4 小时；0.292%）、折射率为 1.547 的体心立方136（204 623 个立方体，11.7 小时；0.277%）以及折射率为 1.681 的 sc 88（167 118 个立方体，3.6 小时；0.355%）。对于折射率为 1.584 的体心立方 136，第一次运行在 84 个立方体处停止，这些立方体全部位于原胞内部；此时模型的第 $\mathrm{n} + 1$ 条能带在 $\mathrm{k} = (0.279, -0.206, -0.050)$（MPB 坐标）附近下降至 2.03462，低于根据主张的边缘得到的 2.03514：模型带隙为 0.345%，而非 0.371%。随后在模型带隙的 0.8 倍处，使用修正后的边缘重新运行，并保留已认证的立方体（这些立方体对任何更窄的区间都有效），最终完成认证（285 865 个立方体，三次运行共耗时 13.8 小时；认证模型带隙为 0.306%）。MPB 在该处并不遵循模型（边缘搜索起点见上文）。该证书是关于模型的陈述。对于体心立方136，认证模型在 442 个扫描点上具有 0.373% 的带隙，在 12 个边缘点上为 0.412%（MPB 在分辨率 40 时为 0.443%，在 80 时为 0.475%）；经过统一的 1.2% 平移后，其第 n 条能带和第 $\mathrm{n} + 1$ 条能带与 MPB 的差异为 0.12 个 MPB 带隙宽度的均方根。在距边缘一个模型带隙以内的范围内，MPB 最多比模型进一步深入带隙 0.19 个（第 n 条能带）和 0.30 个（第 $\mathrm{n} + 1$条能带）带隙宽度；MPB 若在带隙中点取态，则需要 0.38，而证书只需达到模型带隙的 0.9 倍。对于两轮 bcc 136 设计（折射率为 1.584），模型带隙为 0.345%（在 MPB 扫描上为 0.371%，但该扫描漏掉了下降点；MPB 在分辨率 40 时为 0.264%，在 80 时为 0.343%），残差为 0.19 个带隙宽度的均方根；在扫描范围内，偏移分别为 0.41 和 0.46 个带隙宽度，而认证模型带隙为 0.8 倍时所需值为 0.52（在边缘处、分辨率 80 时分别为 0.33 和 0.40）；在下降点处，MPB 的第 $\mathrm{n} + 1$ 条能带位于其自身下边缘之上 0.36 个带隙宽度，因此模型在该处给出的带隙偏小；对于面心立方118（折射率为 1.677），模型带隙为 0.340%（扫描上为 0.344%；MPB 为 0.432%），均方根为 0.15，偏移分别为 0.22 和 0.351，而所需值为 0.355（在分辨率 80 的边缘处分别为 0.14 和 0.32）（模型_check3d.py）（S2）。这些证书适用于使用浮点运算的平面波模型；它们并不是对麦克斯韦方程的证明，唯一严格的陈述仍然是 S7 的下界。

二阶立方体测试（certify3d.py）。在立方体中心，Y 和 Z 保存固定集算子 M(k) 的第 n $-$p $+1\ldots$n 条能带和第 n $+1\ldots$n $+$p 条能带的特征向量，其特征值为 Λ_Y和 Λ_Z。M 在位移 δ 处相对于中心的二阶部分是半正定的，且至多为 L$^2|\delta|^2$；仿射块$\Lambda_Z + \delta\cdot$B 的最小特征值关于 δ是凹函数，而 $\Lambda_Y + \delta\cdot$B′ 的最大特征值关于 δ是凸函数，因此它们在立方体上的极值位于其 8 个角点。两个集群之外的能带由速度上限隔离开来，而舒尔补结合 Courant–Fischer 定理表明，在外接半径为 r 的立方体中的任意位置，

$$
\begin{aligned}
&M(k) = C(k)^\dagger\,\eta\,C(k), \qquad B_a = Z^\dagger\,\partial_{k_a} M\,Z, \qquad B'_a = Y^\dagger\,\partial_{k_a} M\,Y,\\
&a_Z^2 = \textstyle\sum_a \|\partial_{k_a} M\,Z\|^2, \qquad a_Y^2 = \textstyle\sum_a \|\partial_{k_a} M\,Y\|^2,\\
&\omega_{n+1}^2 \ge \tfrac{1}{2}\Big[m + f - \sqrt{(f-m)^2 + 4r^2 a_Z^2}\Big], \qquad m = \min_{\text{corners}} \lambda_{\min}(\Lambda_Z + \delta\cdot B), \qquad f = \omega_{n+p+1}^2 - 2Lr\,\omega_{n+p+1},\\
&\omega_n^2 \le \tfrac{1}{2}\Big[m' + f' + \sqrt{(m'-f')^2 + 4c'^2}\Big], \qquad m' = \max_{\text{corners}} \lambda_{\max}(\Lambda_Y + \delta\cdot B') + L^2 r^2,\\
&\qquad f' = (\omega_{n-p} + Lr)^2, \qquad c' = r\,a_Y + L^2 r^2,
\end{aligned}
\tag{S5}
$$

右侧的频率 ω 取中心值。对于第 n 条能带，当该界或速度上限 ω_n(k$_c$) + Lr低于目标区间时，立方体即通过测试；对于第 n 条能带 $+1$同样如此。

S6. 各设计的验证数据

18 个设计通过了 S5 的全部验收测试，包括认证阈值；另有 8 个候选项在每个分辨率下均具有正带隙，但未达到阈值（表 S6a）。该表针对 18 种几何结构列出了 19 行已接受结果（其中一个为两种对比度下的一次推送二十面体十二面体设计），以及 10 行候选结果；候选结果中有两行是已接受几何结构在较低对比度下的探针。从二十面体十二面体起始结构（S12）出发，该设计在折射率 1.572 时无需修改即可通过；经过一轮扰动重启后，在 1.565 和 1.555 时通过；经过第二轮后，在 1.547 时通过。继续从 Riesz 初始设计（p3d_gopt3d_v3 和 v4，从最佳设计进行扰动重启）推进，可降低 MPB 确认带隙所需的对比度：体心立方 136 设计从折射率 1.654 降至 1.587（v3，为候选项：每个分辨率下均为正，但未达到阈值，主要由于两次外推结果的离散范围所致）和 1.584（v4，通过）；面心立方 118 设计则从 1.699（候选项）降至 1.680（v3）和 1.677（v4）。固定对比度 c $= 2.55$（折射率 1.597）下的 Riesz 起始体心立方 136 设计在每个分辨率下均具有正带隙（精细化结果为 0.103%，分辨率 80 时为 0.154%），但未通过阈值。在每个设计中，从分辨率 40 到 80，精细化带隙增加了 0.03–0.09 个百分点。

带隙百分比：扫描结果（433–470 个 k 点，分辨率 40）、带边搜索后的结果（约 820 次 MPB 计算）、分辨率为 48、64 和 80 时边集上的结果、外推值，以及 S5 的认证阈值。折射率为 1.565 的一行采用全局搜索的能带边缘（S5）；其认证运行得到的带隙经精细计算为 0.294%，分辨率为 48 / 64 / 80 时分别为 0.310 / 0.325 / 0.333%。ID、IDIC、S34、S51 和 A 是多面体初始点（S12；IDIC 采用随机或对称符号），Riesz 指对数 Riesz 加权壳层（S3）；一次推送即一轮扰动重启；较低的 c 表示相同设计具有较低的对比度。每项主张均在 24–32 个核心上耗时 4–29 小时。

入口对比度：每项设计均在第一档 0.98 c_{03} 通过了 0.1% 的入口测试，但 bcc 118 除外；它需要第二档（在 3.2208 时为 0.023%，随后在 3.3522 时为 0.131%）。边缘 k 点、每种分辨率下的能带 n $-2\ldots$n $+3$、完整扫描谱以及每一次 Nelder–Mead 计算，均收录在声明文件中（S10）。

在每种设计中，带隙都随对比度几乎线性下降；对于 bcc 136，c 每增加一个单位，带隙约下降 1.8 个百分点，因此在这些 k 点集合上，开启对比度定义明确。

S7. 三维中的空晶格界

对于介于 1 和 c 之间的 ε，任何介电结构都不可能在第 n 条能带上方形成带隙，除非 c 超过仅根据空晶格计算出的界。该界是严格的，并指出了应针对哪些能带进行设计。经验证的设计所需的 c -1 是该界的 12–16 倍。

命题。令 ν_j(k) 表示所有倒格矢 G 对应的值 |k + G| 中第 j 小的值，每个值计数两次（对应两种偏振）。若 ε(r) 取值于 $[1, c]$（两相或梯度型，几何形状任意），则第 n 条能带上方的完全带隙比率 Δ 要求满足

$$
\sqrt{c} \;\ge\; R_n\,\frac{1+\Delta/2}{1-\Delta/2}, \qquad R_n = \frac{\max_k \nu_n(k)}{\min_k \nu_{n+1}(k)}
\tag{S6}
$$

表 S6a。MPB 对每个声称值设计和每个候选项的验证。

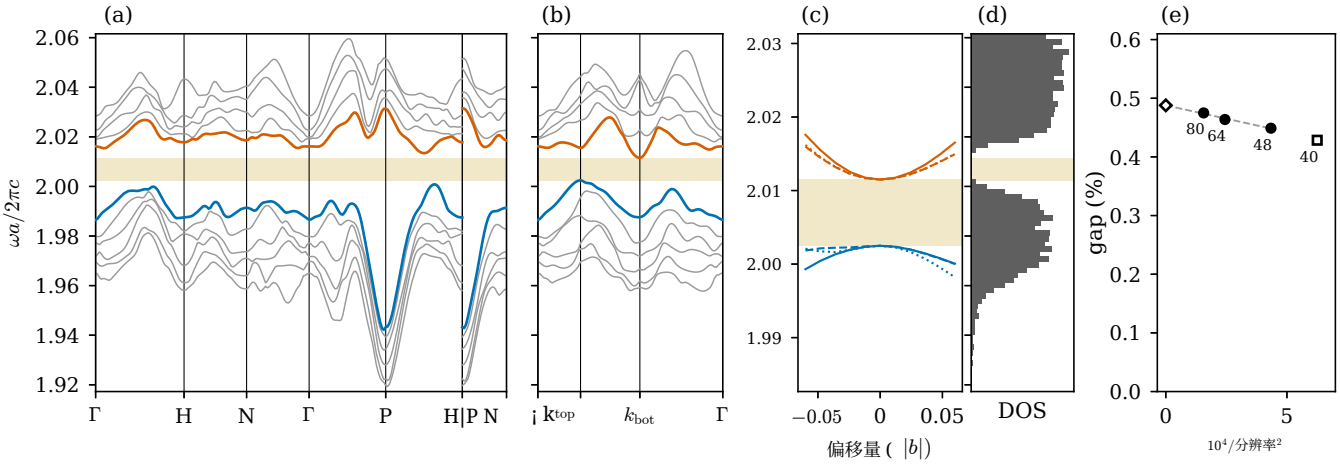
设计	c（指数）	扫描精细分辨率 48 / 64 / 80		外推值, $1/\text{分辨率}^2$ (1/分辨率)	阈值
bcc 136 ID，两次推送	2.3925（1.5468）0.257	0.252	0.279 / 0.301 / 0.308	0.326 (0.355)	0.103
体心立方 136 ID，一次推送，较低的 c	2.4180 (1.5550) 0.275	0.260	0.277 / 0.292 / 0.301	0.313 (0.336)	0.113
体心立方 136 ID，一次推送	2.4487 (1.5648) 0.310	0.284	0.289 / 0.302 / 0.307	0.318 (0.335)	0.132
bcc 136 ID	2.4705 (1.5718) 0.234	0.231	0.252 / 0.271 / 0.281	0.297 (0.325)	0.091
带背景的 bcc 136 ID	2.4964 (1.5800) 0.151	0.136	0.154 / 0.175 / 0.183	0.201 (0.230)	0.133
bcc 136 Riesz，两次推送	2.5084（1.5838）0.264	0.250	0.286 / 0.327 / 0.343	0.377 (0.432)	0.210
体心立方 136 IDIC（对称），一 push	2.5402 (1.5938) 0.237	0.221	0.244 / 0.271 / 0.283	0.305 (0.342)	0.159
bcc 136 IDIC（随机），一 push	2.6050（1.6140）0.234	0.226	0.244 / 0.266 / 0.278	0.297（0.330）	0.125
bcc 136 IDIC（对称）	2.6496（1.6278）0.279	0.249	0.268 / 0.291 / 0.298	0.316 (0.345)	0.178
体心立方 136 T42，一次推送	2.7203 (1.6493) 0.391	0.346	0.378 / 0.413 / 0.428	0.456 (0.504)	0.280
bcc 136 Riesz	2.7343 (1.6536) 0.443	0.428	0.449 / 0.464 / 0.475	0.488 (0.513)	0.120
bcc 136 S34、一次推送	2.7604 (1.6614) 0.454	0.437	0.454 / 0.467 / 0.474	0.486 (0.506)	0.111
体心立方 136 S34	2.8052 (1.6749) 0.440	0.432	0.461 / 0.482 / 0.491	0.508 (0.537)	0.113
面心立方 118 Riesz，两次推送	2.8108 (1.6765) 0.432	0.409	0.436 / 0.465 / 0.479	0.503 (0.545)	0.196
面心立方 118 Riesz，一次推送	2.8222 (1.6799) 0.383	0.360	0.389 / 0.410 / 0.423	0.440 (0.473)	0.168
sc 88 A，一次推送	2.8272 (1.6814) 0.444	0.424	0.448 / 0.478 / 0.491	0.515 (0.556)	0.183
简单立方 88 A	2.8471 (1.6873) 0.558	0.493	0.511 / 0.536 / 0.545	0.565 (0.598)	0.295
面心立方 118 随机	2.9735 (1.7244) 0.403	0.332	0.348 / 0.364 / 0.368	0.381 (0.401)	0.272
sc 88 随机	3.0926 (1.7586) 0.349	0.304	0.313 / 0.332 / 0.343	0.358 (0.387)	0.222
候选项：bcc 136 ID，带有背景，较低的 c	2.4806 (1.5750) 0.143	0.127	0.144 / 0.165 / 0.174	0.191 (0.220)	0.137
候选项：bcc 136 Riesz，一个 push	2.5178 (1.5868) 0.204	0.169	0.190 / 0.213 / 0.225	0.244 (0.277)	0.207
候选项：体心立方 136 Riesz，较低的 c	2.5500（1.5969）0.139	0.103	0.117 / 0.144 / 0.154	0.177 (0.214)	0.219
候选项：bcc 208 Riesz，一个 push	2.7499 (1.6583) 0.160	0.132	0.137 / 0.153 / 0.160	0.173 (0.195)	0.151
候选项：面心立方 118 S51，1 push	2.7757（1.6660）0.294	0.225	0.259 / 0.297 / 0.314	0.345（0.399）	0.369
候选项：体心立方 136 IDIC（随机）	2.8071（1.6754）0.234	0.183	0.210 / 0.236 / 0.248	0.269（0.307）	0.263
候选项：面心立方 118 Riesz	2.8877（1.6993）0.177	0.108	0.153 / 0.183 / 0.196	0.221 (0.263)	0.332
候选项：面心立方 118 S51	2.9518 (1.7181) 0.452	0.337	0.375 / 0.411 / 0.427	0.457 (0.507)	0.496
候选项：体心立方 118 随机	3.3522（1.8309）0.131	0.107	0.133 / 0.162 / 0.175	0.199 (0.240)	0.195
候选项：体心立方 190 TD	3.1049 (1.7621) 0.096	0.050	0.078 / 0.098 / 0.108	0.125（0.154）	0.224

表 S6c。折射率为 1.547 的设计的能带边缘（MPB，c = 2.3925，146 条能带，容差 10^{-8}）：主张中的 12 个边缘 k 点均来自连续边缘搜索，以及每个边缘 k 点所对应的能带边缘频率（MPB 单位，晶胞体积为 1）；这些结果分别在带边搜索的分辨率 40 和冷启动分辨率序列上获得。S5 的全局搜索（1620 次启动，在 MPB 中对每个处于某一边缘 0.6 个带隙宽度以内的不同极值进行重新优化）未发现超出这些边的点：在分辨率 40 下为 0.2515%，与主张中的 0.2515% 相符。

k（倒格子坐标）	Edge	分辨率 40	分辨率 48	分辨率 64	分辨率 80
$(-0.3477, -0.2210, +0.2567)$	第 n 条能带的最大值	2.07488	2.07398	2.07302	2.07261
$(-0.3465, -0.2319, +0.2666)$	第 n 条能带的最大值	2.07479	2.07388	2.07290	2.07248
$(-0.3461, -0.2225, +0.2578)$	第 n 条能带的最大值	2.07488	2.07397	2.07302	2.07261
$(-0.3461, -0.2225, +0.2571)$	第 n 条能带的最大值	2.07488	2.07397	2.07302	2.07261
$(-0.3457, -0.2350, +0.2702)$	第 n 条能带的最大值	2.07471	2.07380	2.07282	2.07240
$(-0.2752, +0.2267, -0.2640)$	第 n 条能带的最大值	2.07460	2.07354	2.07259	2.07215
$(-0.3963, -0.3957, +0.3237)$	第 n 条能带的最小值 $+1$	2.08039	2.07979	2.07927	2.07901
$(-0.0554, -0.4798, -0.4593)$	第 n 条能带的最小值 $+1$	2.08020	2.07983	2.07946	2.07930
$(-0.0471, -0.4754, -0.4565)$	第 n 条能带的最小值 $+1$	2.08010	2.07977	2.07942	2.07928
$(-0.0471, -0.4746, -0.4564)$	第 n 条能带的最小值 $+1$	2.08010	2.07977	2.07943	2.07929
$(-0.0457, -0.4754, -0.4580)$	第 n 条能带的最小值 $+1$	2.08011	2.07977	2.07942	2.07928
$(-0.0398, -0.4780, -0.4567)$	第 n 条能带的最小值 $+1$	2.08013	2.07980	2.07944	2.07930
带隙 (%)	~	0.252	0.279	0.301	0.308

表 S6b。对五种早期设计进行开启搜索：分辨率 48，边集；从 0.97 c 开始，每步将 c 降低 3%，然后进行二分。

设计	带隙仍在 c（指数）处开启	在 c 处关闭	最后一个开启步处的带隙
bcc 136，Riesz s0	2.4766（1.574）	2.4578	0.014%
fcc 118，随机 s1	2.6933（1.641）	2.6728	0.003 %
fcc 118，Riesz s1	2.8225 (1.680)	2.8011	0.030 %
sc 88，随机 s2	2.8441 (1.686)	2.8225	0.019 %
bcc 118，暖启动 s6	3.2025 (1.790)	3.1782	0.016 %



图S1. Riesz 起始体心立方 136 设计在 c = 2.7343（折射率 1.654）下的能带结构。(a) 沿 Γ–H–N–Γ–P–H|P–N 的能带 n − 5 . . . n + 5；能带 n 和能带 n + 1 的极值位于高对称线之外，因此该路径上的带隙（0.63 %）高估了完全带隙。(b) 经过精化能带边缘的路径

$$\Gamma \to k_{\text{top}} \to k_{\text{bottom}} \to \Gamma$$

±0 06，以及 (c) 在扩展尺度 | | 0 449 48, 下穿过这些边缘的六个 . b 截面；两者的带隙均为分辨率下主张值的 . %。(d) 12^3 网格上的态密度（分辨率 40 时带隙为 0.48 %）。(e) 带隙与 1/res² 的关系。该设计在折射率 1.547 下的能带结构见快报图2。

证明。在 H 形式中，$\omega_j(k)^2$ 是瑞利商 $\int \varepsilon^{-1} |\nabla \times H|^2 / \int |H|^2$ 在无散布洛赫场上的第 j 个极小–极大值。当 ε 逐点增大时，该商会减小，因此每条能带也都会减小。将其与均匀介质 $\varepsilon = c$ 和 $\varepsilon = 1$ 比较，可得对于每个 j 和 k，$\nu_j(k)/\sqrt{c} \le \omega_j(k) \le \nu_j(k)$。于是 max $\omega_n \ge \max \nu_n/\sqrt{c}$ 和 min $\omega_{n+1} \le$ min ν_{n+1}。带隙需要 min ω_{n+1} / max $\omega_n = (1 + \Delta/2)/(1 - \Delta/2)$，从而得到该不等式。 ■

计算 (bounds3d.py)。在分数坐标中使用未平移的 36^3 和 40^3 网格（其中包含 Γ、布里渊区边界以及 2、3、4、5、6、8、9、10、12、18 和 20 点网格），20,000 个随机点，并从每条能带的 24 个最佳点出发，对偶数 n ≤ 300 和 Δ = 0进行 Nelder–Mead 优化。3%。采样得到的极大值从不会高于真实极大值，采样得到的极小值从不会低于真实极小值，因此采样只会使该界变得不那么严格；其有效性仍然保持不变。ν_n 的极大值位于尖点处，通常位于 Γ或高对称性点，而 Nelder–Mead 无法沿其上升：早期版本在平移半个步长的网格上进行计算，遗漏了这些极大值，所得数值最多低估 0.02（sc 88：1.117，而非 1.132）。对于奇数 n，一种波的两种偏振分别落在带隙两侧，因此该界较差，只有偶数 n 有用。

T表 S7a. 各能带范围内的最低空晶格界 c_B（括号内为能带）。

晶格	n ≤ 40 的最低界	n ≤ 100	n ≤ 200	n ≤ 300
sc	1.212 (n = 40)	1.132 (88)	1.127(162)	1.088 (296)
fcc	1.293 (30)	1.184 (68)	1.103（200）	1.081（290）
bcc	1.319 (38)	1.167（100）	1.112（136）	1.083（208）
六方，理想 c/a 比	1.340 (24)	1.199(72)	1.130 (132)	1.101 (246)

该界限并不随 n 单调变化：sc 56 为 1.46，介于 sc 40（1.21）和 sc 88（1.13）之间。我们仅在局部极小值处进行设计。

在二维中，最佳设计高出 3–5 倍。三维中更大的倍数反映了该界限所忽略的一点：两相结构无法同时将第 n 条能带的每个态都向下推移，并将第 n 条能带 + 1 上的每个态都向上推移，而在三维中，

表 S7b。声称值单元与界的对比。

Cell	界	声称值 c（c − 1）/（界 − 1）	
bcc136，多面体初始值，两个推动轮次	1.112	2.3925	12.4
bcc 136，Riesz 初始值，两个推动轮次	1.112	2.5084	13.5
bcc 136，Riesz 初始值	1.112	2.7343	15.4
fcc 118，两轮推动	1.144	2.8108	12.6
fcc 118，一轮推动	1.144	2.8222	12.7
fcc 118，随机初始值	1.144	2.9735	13.7
sc 88，多面体初始值，一次推送	1.132	2.8272	13.8
sc 88，随机初始值	1.132	3.0926	15.9

通过傅里叶峰产生的向量耦合取决于偏振（S8）。按照 Rechtsman 和 Torquato 的思路，制定一个更严格但仍属严格的界限 [47]尚待开启。

S8. 倒易空间分析

承载带隙的傅里叶权重集中在布拉格球面上的一个薄壳层中。在体心立方 136 和面心立方 118 中，壳层权重表现得如同长程 Riesz 平衡中的电荷；剪枝掉弱分量会破坏带隙；而在柱面波初始值中，覆盖最均匀的轴集合效果最佳。

壳层。 $|\hat{\theta}(G)|$ 振幅 $|\hat{\theta}|$ 设计的系数以 sin(πf)/π 为单位进行测量，这是填充率为 f 时单个分量能够达到的最大值。在 218–313 个系数对中，Riesz 初始设计中有 14–21 个超过 0.1，且位于 0.93–1.0× $2k_n$ 的壳层上（平均约 18 对）。

Riesz 检验(`interp/peaks_riesz.py`)。

1. **点位**。 满足 0.85 < |G|/$2k_n$ < 1.12 且 $|\hat{\theta}|$ 超过阈值 $a_{\min}$ 的壳层峰被投影到单位球面上的 x = G/|G| 位置。每个点都配有一个对跖点，且电荷相同。 2. **力**。 对于 Riesz s能量 $\Sigma\, q_i\, q_j\, |x_i - x_j|^{-s}$ （s = 0时为对数形式），点 i 上的切向力为 $q_i\, f_i$，其中 f = Mq 对电荷呈线性。R(q) = |Mq| 除以力尺度；R = 0 为精确平衡。 3.**下限**。 晶格点无法处于精确平衡位置，因此可达到的最佳值为 R_{fit}，由对 q 进行非负最小二乘得到。 4. **零模型**。 将观测值权重在相同位置上置换，共进行 2000 次。 5. **电荷距离**。 使权重变化一半、趋向 R_{fit}所需的相对变化，与置换权重所需变化的对比（抽取 300 次）。

表S8a。对电荷 q = $|\hat{\theta}|^2$ 和对数相互作用下壳层峰进行Riesz检验。

设计（$a_{\min}$，峰值）	R（观测值）	R，置换值中位数	p	R_{fit} floor	变化以达到平衡：观测值与置换值
体心立方 136（0.04，79）	0.103	0.170	< 0.0005	0.034	25% 对比 44%（p < 0.003）
fcc 118（0.06，48）	0.128	0.197	< 0.0005	0.051	24% 对比 47%（p < 0.003）
sc 88（0.04，72）	0.153	0.182	0.12	0.021	46 % 对比 43 %（无显著性）

这种效应在对数能量下最强，并随作用范围缩短而减弱：对于 bcc 136，当 s = 1 时，p = 0.0055；当 s = 2 时，p 为 0.12；对于 fcc 118，这种效应持续至 s = 3 （p = 0.012），到 s = 6 时减弱（p = 0.055）。

注意事项。 这些是 `p3d_gopt3d_push` 中的最佳设计，在 S4 的密集复核之前进行了优化；在稠密检查下，其带隙需要 c ≈ 3–3.4。此发现促成了 Riesz 加权初始点的采用，并由此产生了经过验证的设计。

剪枝。 从 Riesz 起始设计（P = 313，268、218 对）出发，保留最大的 60、40 或 25 对并重新优化，在所有 9 种情况下、所有尝试过的对比度下都没有产生带隙。在二维中，79 % 的强内部峰是两个强环向量之差；随机向量的这一比例为 57 %（p = 8×10^{-5}）。

柱面波轴。 密集平面波 c_{03} （截断值 2.0 和 2.3 k_n 中较差者），对于从 3、4、6 或 10 个轴开始的情况，与 Riesz加权壳层相比：

二十面体五重轴——即穿过一点的 6 条直线的最佳堆积——在每个单元中都胜出；在 bcc 136 上，它们与 Riesz 初始值的差距仅为 0.015。每个条目使用一个种子。在 sc 216 上，无论是柱面波还是 Riesz 初始点，都未能在缩减截断值 1.7 k_n 下开启带隙，且未进行对比度提升。

表 S8b. 按轴集合列出的柱面波初始值稠密平面波 c_{03}，与 Riesz加权壳层对照。

Cell	3 条立方体轴	4 条立方体对角线	6 条五重轴	10 条三重轴	Riesz 壳层
bcc 136	3.200	2.982	**2.805**	2.999	2.790
fcc 118	无带隙	3.273	**3.063**	3.370	2.947
sc 88	3.886	无带隙	**3.506**	无带隙	3.140

S9. 计数估算

覆盖、帕塞瓦尔关系和晶格给出了一个一阶计数，N $\approx 2.8\ \mathrm{R}^{3/2}$ 壳层对，并由此得到布拉格强度 b $\propto \mathrm{n}^{-1/4}$。正如 [18] 方程 5 所示，这不是一条设计规则：这些设计并不遵循它（本节末尾）。使用阈值化设计的振幅，双波版本给出 c $-\ 1 \gtrsim 1$。在 fcc 118 上，该结果接近优化器找到的值；在能带边缘处，有 20–30 个平面波发生耦合，因此双波估计值只能作为一个尺度参考（本节末尾）。

1. 覆盖。 N 对向量对给出 2N 个点及其对跖点。只有当 2N $\cdot\ 2\pi(1-\cos\ \theta_c) \geq 4\pi$ 时，角半径为 θ_c 的球冠才能覆盖球面，因此 $\theta_c^2/2 \geq 1$/N。最佳覆盖的数值为 $\theta_c \approx 1.56/\sqrt{\mathrm{N}}$（六条五重轴给出 1.27/N，二十面体点集给出 1.39/N）。与最近峰值成 θ 角的自由光子，在 |k| =(R/2)/cos θ 处遇到该布拉格平面，数值约高出 $\theta^2/2$：

$$\delta \approx \tfrac{1}{2}\,\theta_c^2 \approx \frac{1.2}{N} \tag{S7}$$

2. 阈值化设计的振幅。 设 $\theta = 1$，其中 g/$\sigma >$ t，g $=\Sigma\ \alpha_G$ exp(2πi G·r)，$\sigma^2 = \Sigma\ |\alpha_G|^2$，且 f $= 1 -$ Φ(t)。若 g 接近高斯分布（十几个相当的峰值可确保这一点），则阶跃函数的前两个厄米项为

$$\hat{\theta}(G) \approx \varphi(t)\,\frac{\alpha_G}{\sigma}, \qquad \hat{\theta}(G_a - G_b) \approx t\,\varphi(t)\,\frac{\alpha_a\,\alpha_b^{*}}{\sigma^2} \tag{S8}$$

其中 φ 和 Φ 分别表示标准正态密度和分布。两个推论如下：壳层承载了指示函数（而非生成元）的傅里叶功率份额 $\eta =$$\varphi$(t)^2/[f(1 $-$ f)]，在 f $=$ 0.35 时为 0.60；阈值化会在壳层向量之差处产生内峰，对于 N 个相等的向量对，每对的强度减弱为 t/$\sqrt{(2\mathrm{N})}$，并且在这一二次（厄米特）项中具有固定的三元组相位：当 f $<$ 1/2 时同相，当 f $=$ 1/2 时消失，当 f $>$ 1/2 时反相。这些就是二维记录中的相位锁定内峰。

3. 双波判据。 当布拉格强度为 b =(c $-$ 1)/[1 + (c $-$ 1)f], 时，单个布拉格平面会使自由光子的能量分裂约为 b|$\hat{}\theta$|，而形成带隙则需要

$$b\,\varphi(t)\,(2N)^{-1/2} \gtrsim \frac{1.2}{N} \tag{S9}$$

对于 N $=$ 18 且 f $=$ 0.35，这给出 b $\gtrsim$ 1.08，即 c $-\ 1 \gtrsim$ 1.7，接近优化器得到的 1.6–1.9。（使用较早的常数时，以 δ = 0.6/N 和拟合得到的 γ = 0.5 替代 1/$\bar{\varepsilon}$，同一判据给出 2.4。）能带边缘并非少波顶点态。在固定集合 Ho 模型中，对于 bcc 136 在 1.584 和 1.654 处的 12 个精化边缘点，以及 fcc 118 在 1.677 处的边缘点（dpt3d.py），边缘态具有 20–31 个平面波的参与数，其权重的 90% 集中在 46–60 个波上，这些波的自由波数在其均值的 ± 8 % 范围内分布；只有 2–6 个自由波位于该均值的 1% 以内，而三个平面的顶点本应包含四个波。仅限于近简并波时，在取与均值相差 3% 以内的波（10–20 个）时，该问题偏离边缘 5–23 个带隙宽度；取相差 8% 以内的波（35–43 个）时，偏离 0.3–0.7 个带隙宽度；来自其余波的二阶修正则将 3% 子空间的偏离缩小至 0.1–2 个带隙宽度。

因此，闭式顶点判据不适用于这些对比度。线性响应：dΔ/d$\hat{}\theta$(G) 可由边缘特征向量（Ho规则，d$\eta = -\eta$ dε η）得到，并与有限差分结果在三位有效数字内一致。表S9b按 |G|/$2k_n$ 的范围给出灵敏度 |dΔ/d$\hat{}\theta$|^2 的占比、傅里叶功率 |$\hat{}\theta$|^2 的占比以及工作预算：如果该范围内的每个峰值都在其自身相位下增长 100%，带隙的变化量（以带隙计），包括净变化、开启和关闭。壳层完成了净功；内峰（其中包括壳层矢量之差）承担了约一半的灵敏度，却只占四分之一的功率，但在很大程度上相互抵消。

4. 晶格。 这些峰值必须是位于球面相对厚度 δ 以内的晶格矢量。一个单位体积倒易晶胞约给出 $4\pi\mathrm{R}^3\delta$ 个这样的向量，或 $2\pi\mathrm{R}^3\delta$ 对。将其设为 N，并取 δ = 1.2/N：

表 S9. 按 $|G|/2k_n$ 的壳层划分，带隙对傅里叶系数的线性响应。

	G / $2k_n$	bcc 136，折射率 1.584：灵敏度 / 功率 / 功（开启，关闭）	bcc 136，折射率 1.654	面心立方 118，折射率 1.677
0–0.5	0.25 / 0.09 / −0.3 (+1.0, −1.4)	0.23 / 0.09 / −0.3 (+1.8, −2.0)	0.32 / 0.07 / 0.0 (+1.9, −1.9)	
0.5–0.85	0.27 / 0.17 / +0.7 (+3.4, −2.8)	0.34 / 0.19 / +1.6 (+3.6, −2.0)	0.29 / 0.22 / +2.1 (+4.7, −2.6)	
0.85–0.95	0.26 / 0.20 / +3.9 (+5.2, −1.3)	0.19 / 0.20 / +3.7 (+4.7, −1.0)	0.18 / 0.27 / +4.7 (+6.1, −1.4)	
0.95–1.05	0.17 / 0.33 / +4.3 (+5.7, −1.4)	0.17 / 0.30 / +3.1 (+4.2, −1.1)	0.15 / 0.21 / +4.4 (+5.3, −0.9)	
1.05–1.15	0.02 / 0.02 / +0.2	0.03 / 0.03 / +0.1	0.03 / 0.04 / +0.3	
高于 1.15	0.03 / 0.20 / +0.4	0.04 / 0.20 / +0.2	0.03 / 0.19 / +0.3	

$$N \approx \sqrt{2.4\pi}\, R^{3/2} \approx 2.8\, R^{3/2}, \qquad b \propto N^{-1/2} \propto R^{-3/4} \propto n^{-1/4} \tag{S10}$$

因为 $R = 2k_n \propto n^{1/3}$。在二维中采用相同的论证可得 $c - 1 \propto n^{-1/2}$，这就是二维记录的标度关系（$(c-1)\sqrt{n} \approx$ 1.2–1.9）。

与数据相符。 在面心立方 118（$R = 4.83$）中，计数得到 $N \approx 29$ 对；这些设计包含 14–21 个高于 0.1 的分量。在 $R = 3.1$（面心立方 30）到 5.1（体心立方 136）之间，最佳平面波 $c - 1$ 从 3.05 降至 1.44（在 MPB 中为 1.39）。较大晶胞目前尚未延续这一趋势（快报中的图4）：体心立方 208 和面心立方 202（$R = 5.8$）分别达到 1.70 和 1.94。这种标度关系仍是一个猜想。

受限支撑集和自由填充率（测试）。 如果低对比度下的带隙只需要 N 个布置得当的壳层峰，那么将支撑集限制为 N 个壳层对后重新优化，就应当能够找到该带隙。对于体心立方 136 和简单立方 88 上分布均匀的 $N = 15$、25、40、60 和 90 对，以及简单立方 40 上最多 40 对的情形，分别从 0.28、0.37 和 0.46 的初始填充率开始，没有一次运行能在全支撑设计的对比度范围内开启带隙：在体心立方 136 和简单立方 88 上，只有一次运行（90 对，初始填充率 0.28）开启了带隙，且其对比度为 $c = 4.66$；而在简单立方 40 上，40 对的运行需要 $c = 4.3$–4.4，而全支撑时为 3.44。采用全支撑时，从任一初始值出发，填充率都会回到 0.33–0.37，并且初始值为 0.28 时表现更好（体心立方 136：c =2.74，而初始值为 0.46 时为 3.09；简单立方 40：3.44，而初始值为 0.46 时为 3.55）。因此，壳层之外的弱峰——阈值化会在壳层矢量之差处产生这些弱峰（条目 2）——也是带隙的一部分，而全支撑优化会收敛到一个狭窄的填充率范围。一行估算给出了原因：对于阈值化高斯场，壳层峰的布拉格强度与 $F(t) = (c-1)\varphi(t)/[1 + (c-1)(1-\Phi(t))]$，成正比，其最大值位于 $t = F(t)$ 处；当 $c = 2.3925$、2.5084、2.7343 和 2.8108 时，对应的填充率 $f^* =$ 分别为 0.364、0.357、0.345 和 0.341。在 24 个优化设计中，观测值填充率平均比该估算值高 0.024（均方根差为 0.026，相关系数为 0.75）；折射率为 1.547 的设计的填充率为 0.372，而估算值为 0.364。该估算忽略了偏振和多波耦合，因此它解释的是这一范围，而非最优值。

一阶计数并非设计规则。[18], $N = 2.46\,(\bar{n}/\Delta n)^2$ 个光栅、带隙为 $0.49\,(\Delta n/\bar{n})^2$，时，方程 5 最大化 $\Delta\omega/\omega = 1.54\,(\Delta n/\bar{n})/\sqrt{N} - 1.21/N$：在等六边形有效区域的面中心和角点处的一阶半开隙，与布拉格频率从面中心到角点的上升相抗衡。在最大值处，两项均为 $(\Delta n/\bar{n})^2$，量级，与被忽略部分的量级相同：仅面心态与其六个相邻光栅的耦合，就会使该边缘移动 $0.26\,(\Delta n/\bar{n})^2$，且其方程 6 允许偏振之间存在 $2\,(\Delta n/\bar{n})^2$ 的差异，是预测带隙的四倍。他们的三维模拟针对每种对比度只采用一个 N。我们的计数（上文 1–4）基于同样的平衡关系。三项检验。（i）方程 5 在折射率 1.654 时给出 3.0%，是经验证的 0.48% 的六倍；在 22 个优化设计失去带隙的对比度下，该方程给出的光栅数为 26–46。对于这些设计，壳层对的有效数量（满足 $|G|/2k_n = 0.85$–1.12 的向量对的参与数）随 R 变化，从 18 到 115，约为 0.6 R^2.9（对数的相关系数为 0.94），而非方程 5 给出的数量（0.15）。（ii）他们在周期胞中的方案：简单立方胞的球面 $h^2 + k^2 + l^2 = 26$ 上放置 36 个等同光栅，并采用随机相位，对比度为 3（折射率 1.73）；方程 5 给出的最优值为 34 个光栅，带隙为 +3.5%。在八组相位组和 0.35、0.5 的填充率下，计算能带重叠了 4.7–5.2%（截断为 1.4–2.0 k_n）；按同样方法、使用该组实际的 25° 孔计算，结果为 −1.7%，因此一阶估算乐观了约 3 个百分点。（iii）将折射率为 1.654 的设计截断（313 对，参与数 123；保留振幅和相位，重设阈值；对比度 3，截断为 1.4 k_n）：全部 313 对为 +0.25%，最强的 250 对（占功率的 98.4 %）为 −0.10%，最强的 45 对为 −1.25%。这些结果来自同一个晶格组，且截断时未重新优化；在支撑集限制为 N 对（见下文）的重新优化序列中，在此对比度范围内，即使最多采用 90 对，也未能开启带隙。

S10. 数据和代码可用性

每个声称的设计都可以通过一个命令，从其系数文件重建并重新验证。每种立方晶格上的最佳设计（快报表 I：折射率为 1.547 时的 bcc 136、折射率为 1.677 时的 fcc 118、折射率为 1.681 时的 sc 88），以及它们在80^3 网格上的结构、MPB 主张文件和能带图，还有用于重建结构并用 MPB 检查带隙的脚本，共同构成一个数据包。与设计、优化代码以及下文列出的其他文件一样，作者可应要求提供该数据包。

表 S10. 数据和代码。

Item	内容	位置（当前）
设计文件（每个案例一个 JSON 文件）	晶格，n，支撑向量 m_j，系数 c_j，阈值 t，填充率，c_{dense} / c_{open} / c_{03}，极值 k 集，迭代历史	集群：bench/<研究计划>/cases；最佳分支上的设计
声明文件（CLAIM3_*.json）	入口阶梯；每个扫描 k 点处的所有能带；每个 Nelder–Mead 评估；边集以及能带 n − 2 … n + 在每个分辨率下为 3；外推	tcm/<研究计划> 分支 tcm/p3d_mpb3d_claim_*
开启文件（开启3_*.json）	边集上每个对比度步长对应的带隙	分支 tcm/p3d_mpb3d_open
优化历史（.npz 每个案例）	237 786 个迭代点；84 092 个具有能带 n − 4 的二元设计…… n + 5 在 k 网格(4)上；在后续计算批次中还包括每次扫描，Nelder–Mead 和对比搜索评估，能带 n − 2 … n + 3；格式见 DATA_FORMAT.md；约 1.1 GB	集群：bench/<研究计划>/数据
Code	平面波求解器和优化器（gopt3d.py, gopt3d_run.py）、密集带边搜索（densek.py）、MPB 声称与开启（mpb3d_proof.py、 mpb3d_open.py），全局边缘搜索与探测器（mpb3d_verify.py）、覆盖证书（certify3d.py）、能带结构（mpb3d_bands.py）、多面体初始点（poly_start.py）、连通性（conn3d.py）、界（bounds3d.py）、Riesz分析 (interp/peaks_riesz.py)，研究计划表格和启动器	代码仓库 wave-datasets，分支 p3d/go3d，benchmarks/gapdesign3d

重新验证一项主张。 对于折射率为 1.547 的设计（一个节点，在 32 个核心上运行约 13 小时），使用数据包中的设计文件；传递给脚本的对比度是平面波 c_{03}，而第一个阶梯级别 0.98 c_{03} = 2.3925 是所主张的对比度：

```
python3 mpb3d_proof.py \--design bcc136_index1547_design.json --c 2.44129 \
--kextra bcc136_index1547_design.json \--ladder 0.98,1.02,1.06,1.1,1.15,
1.2 --ladder-target 0.001 \--grids 6,
8 --nworst 12 --res-scan 40 --nedge 10 --maxfev 40 \--res-final 48,64,
80 --tol 1e-8 --extra 10 \--out OUT --name CLAIM3 bcc136 index1547_      _
```

软件。 通过 Meep Python 接口 1.35.0 使用 MPB 1.12.0（libctl 4.7.1）；Python 3.14.8，搭配 numpy 2.5.4 和 scipy 1.18.1。

S11. 带隙内的衰减、连通性和打印样品

复能带。 在固定集合平面波模型（S2）中，矩阵关于 k 呈二次关系。对于沿法向为 ˆn 的表面的实波矢 k_0，倏逝波通过求解 $\det[M(k_0 + \kappa\,\hat{n}) - \nu^2] = 0$ 来得到复 κ（移位反演Arnoldi法）；其中衰减最慢的波按 $\exp(-2\pi\,\mathrm{Im}\,\kappa x/a)$ 衰减，a 为单位体积晶胞的长度。对于折射率为 1.654 的 bcc 136，在 15 个通道上（法向为 (110) 和 (100)，以及两个能带边缘处的主轴），带隙中点处的 Im κ 至少为 0.045 和 0.062（中位数）：对于最慢通道，每个边长为 2.5 λ_0 的常规立方晶胞衰减 3.1 分贝；每个真空波长衰减 1.2 分贝。双带估计 $\lambda_0/(\pi\, n_{\mathrm{eff}}\, \Delta)$ 得到 Im $\kappa = 0.0047$，低十倍。

平坦带隙能带，已在 MPB 中检查。 MPB 带边抛光的海森矩阵（S5，分辨率 40）在第 n 条能带顶部（11 个边缘点）的中位数主曲率为 0.47、1.4 和 3.5，在第 n 条能带底部 + 1 （15 个点）为 0.55、1.1 和 2.8（ν 每（2π/a）²），而双能带模型中为 $h = 2v^2/\Delta\nu \approx 140$，自由光子群速度为 $v = c/n_{\mathrm{eff}}$。利用有效质量，在带隙中点处为 Im κ =(Δν/h)ˆ{1/2}；沿最陡轴，这给出

对于 1.654 处的设计，为 0.040–0.059（每个立方晶胞 2.8–4.1 分贝，在第 n 条能带顶部最慢），与复能带一致；对于 1.584 处的设计，为 0.036–0.044（每个立方晶胞 2.5–3.0 分贝）（edge_curv3d.py）。

损耗。 平坦能带还意味着慢光，因此带隙附近的吸收约为均匀介质的十倍。在 1.654 处，该设计的平面波模型中最慢通道每个立方晶胞的衰减；将损耗表示为复频率，电能分数为 0.6：

表 S11。带隙附近每个立方晶胞的衰减，无吸收和有吸收。

位置	无损耗	损耗角正切 0.003	损耗角正切 0.01
顶部边缘下方 1 个带隙宽度处	0	1.1 分贝	2.4 分贝
顶部边缘	0	1.6 分贝	3.0 分贝
进入带隙的 25%	2.3 分贝	2.4 分贝	3.3 分贝
带隙中点	3.1 分贝	3.2 分贝	3.7 分贝

阻带在无损耗时比周围高出每单元 3.1 分贝，损耗角正切为 0.003 时高出 2.1 分贝，为 0.01 时高出 1.3 分贝。十个立方晶胞在带隙中点处无损耗时可达到 30 分贝；在 60 GHz 下（晶胞边长 12.6 mm，支柱宽 0.75–1.75 mm，空气通道宽 1.0–2.5 mm），对应的块长为 13 cm。

连通性 (conn3d.py， 128^3 体素，具有面邻居的周期性连通分量)。体心立方136在 1.654 处和面心立方118在 1.677 处：两种相位均为贯穿所有三个方向的单一网络。体心立方136在 1.584 处：介电材料每个单元有一个分离晶粒（占体积的 0.42 %），因此无法按原样打印。以多面体为起点的体心立方136设计在 1.565 和 1.547 处：两种相位均为贯穿所有三个方向的单一网络（快报图 1a）。

容差。 对于折射率为 1.654 的设计，当填充率变化 1.1 % 或折射率变化 0.4 % 时，带隙中心会移动半个带隙宽度，因此整个样品的表面必须保持均匀，误差约为 $10^{-3}\ \lambda_0$ （60 GHz 时为 5 μm）；对整个结构进行均匀缩放只会使带隙在频率上发生偏移，但每个单元中重复出现的形状或折射率误差也会使带隙变窄或关闭。必须先测量细丝的介电常数，再据此重新调整设计。根据 S7 中的极小极大论证，可以得到对任何设计都成立的保证：若单元周期性（或超单元周期性）误差处处满足 $|\delta\varepsilon| \le \rho\varepsilon$ ，则每个带频率的变化因子都介于 $(1+\rho)^{-1/2}$ 和 $(1-\rho)^{-1/2}$之间，因此相对宽度为 Δ 的带隙在 $\rho < \Delta/(1+\Delta^2/4)$ 的误差下仍会保留；对于此处的设计，这约为 ε 的 0.3 %。位移界面并非介电常数的微小点态变化，因此不在此保证范围内。

局限性。 这些是平面波模型中某一设计的衰减率以及通过 MPB 得到的有效质量，而不是透射率：晶体中的耦合和 $2.5\ \lambda_0$ 单元的衍射级次均未计入。有限板层透射计算（十个单元，布洛赫周期侧面）尚待完成；对于 1.547 处的设计也需要进行同样的分析，该设计的带隙约为 1.654 处设计的 0.6 倍。

S12. 多面体初始点

为什么选择多面体。 优化器从一小组强傅里叶峰开始，然后让支撑集的每个系数移动（S3）。如果初始值已经将峰值置于带隙对应的布拉格面位置，就能免去最困难的工作。若峰值位于内接于布拉格球 $|\mathbf{G}| = 2k_n$ 的多面体顶点处，则其布拉格面 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{G} = |\mathbf{G}|^2/2$ 界定了对偶多面体：位于阿基米德立体顶点的峰值，会使卡塔兰立体成为该初始值的布拉格多面体，即琼斯区。一个好的初始值需要满足三个条件。该区域应近似为球形，从而使最低 n 条能带的自由光子态在各个方向上的频率大致相同；这样，其体积的两倍（两种偏振，体积为 1 的原胞）就接近 n。其顶点必须接近倒格矢。此外，第 n 条能带应处于空晶格界的深最低点（S7）。具有二十面体对称性的立体拥有最圆的区域，但没有任何晶格具有五重对称性，因此其顶点需要使用黄金分割比 $\varphi = (1+\sqrt{5})/2$ 的有理逼近。

二十面体十二面体起始结构。 二十面体十二面体是阿基米德立体，其 30 个顶点是二十面体的边中点；其卡塔兰对偶体是菱形三十面体，具有 30 个菱形面。外接半径为 φ时，其顶点为

- 6 个点 $(\pm\varphi, 0, 0)$、$(0, \pm\varphi, 0)$、$(0, 0, \pm\varphi)$；
- 24 个点 $(\pm\varphi^2/2, \pm\varphi/2, \pm1/2)$、$(\pm\varphi/2, \pm1/2, \pm\varphi^2/2)$、$(\pm1/2, \pm\varphi^2/2, \pm\varphi/2)$，取所有符号组合：一个三元组的循环排列。

它们形成 15 ±G 对。将其乘以 4 后，变为 $(\pm4\varphi, 0, 0) \approx (\pm6.47, 0, 0)$ 以及 $(\pm2\varphi^2, \pm2\varphi, \pm2) \approx (\pm5.24, \pm3.24, \pm2)$ 的循环置换。bcc 中最近的倒格矢（常规米勒指数，其中 $h + k + l$ 为偶数）是轨道 {600} 和循环轨道 {532}c，即 (5, 3, 2)、(3, 2, 5) 和 (2, 5, 3) 及其所有符号组合。由于 5、3 和 2 是连续的斐波那契数，这一近似结构将 φ替换为 5/3 和 3/2；下一个

近似结构 8/5 是 bcc 576 上的 {10 0 0} + {853}c。两个轨道的半径分别为 6 和 $\sqrt{38}$，相差 2.7%；六个轴向矢量恰好沿着精确的顶点方向，另外 24 个与之相差不超过 1.2°（图 S2a）。对于 bcc 136，它们分别位于 0.94 和 $0.97 \times 2k_n$。其 30 个布拉格面界定出一个近似的菱形三十面体（图 S2b），其体积乘以两种偏振的因子 2 后，恰好为 $2038/15 = 135.87$：该布里渊区几乎恰好容纳带隙以下的 136 条能带。这种匹配比阿基米德形状本身更重要，正是该起点适合 bcc 136 的原因。沿晶格平移后，该布里渊区在所有布洛赫矢量 k 中，恰好有 68 个向量 k + G，占 93.6%；有 67 个的比例为 6.2%，有 66 个的比例为 0.2%，从未更多（200 000 个随机波矢 k；相对于 68 的均方根偏差：0.27）；8/5 近似结构在 97.1% 的情况下恰好有 288 个（均方根偏差 0.18）。没有其他起点接近这一结果（表 S12a）。同样的计数方法对 bcc 190 上的截角十二面体给出 191，但对其他集合给出 83–145；裸结构筛选反而选择了这些集合（表 S12a）。循环轨道 {532}c 及其镜像 {523}c 是与立方轴相容的两个二十面十二面体；其边中点构成 {532}c 的二十面体为 {350}c，而其向量就是该起点的五重轴。

斐波那契体积恒等式。该构造继续使用连续的斐波那契数 r < q < p（上文中的 2、3、5）。在体心立方中，30 个向量 {2q 0 0} + {pqr}c 界定了一个区域；其加倍体积 N 以体积为 1 的原胞为单位，精确为：

$$
\begin{aligned}
N_m &= 4F_{3m-3} - \frac{2F_{m-3}}{F_m F_{m+1}}, \qquad (r,q,p) = (F_{m-1}, F_m, F_{m+1}),\\
N &= 20r^3 - 12\delta r + \frac{2(q-2r)\,\delta^2}{q(q+r)}, \qquad \delta = r^2 + qr - q^2 = (-1)^m,\\
F_{3j} &= 5F_j^3 + 3(-1)^j F_j .
\end{aligned}
\tag{S11}
$$

对于 m = 4、5、6 和 7，第一行分别给出 $136 - 2/15$、$576 - 1/20$、$2440 - 1/26$ 和 $10336 - 2/91$；我们已通过数值计算检验到 m = 8。证明：在米勒指数单位中，区域体积等于 N。其 30 个半空间具有 32 个顶点，即 (±d、 ±d、 ±d)，其中 d = (q² + qr + r²)/[2(q + r)], ，以及 (0, q, r²/q) 和 (0, r, q) 的带符号循环置换。对 6 个轴向面和 24 个倾斜面上的棱锥求和，得到第二行；根据卡西尼恒等式，$|\delta| = 1$，而三倍恒等式（第三行，j = m − 1）将 $20r^3 - 12\delta r$ 化为第一行中的整数。每个候选能带都是前一个能带的四倍加上再前一个能带（$2440 = 4 \times 576 + 136$）。两个轨道在米勒半径平方上相差 2，因此它们的相对径向展宽约为 1/(4q²)，从能带 136 时的 2.7% 降至能带 576 时的 1.0%，并且还在继续下降；角度误差也在减小（1.2° 和 0.5°，见表 S12b）。更接近的近似结构本身并不会开启带隙或降低对比度：裸 8/5 起始结构在对比度 4.5 时仍然没有带隙。

优化器保留的内容。裸起始结构没有带隙：在对比度为3时，其能带 n 和 n + 1重叠约1.3%，而 Riesz加权壳层为2.4 %。在优化过程中施加起始结构的对称性会使优化停滞在接近零带隙处，因此只有起始结构是多面体的，之后每个系数都可以自由调整。最终设计保留了该多面体：在折射率为1.547的设计中，最强的壳层峰以及40个最强峰中的26个都是起始向量（图1b），而30个起始向量在壳层$0.85–1.12 \times 2k_n$中占据了36%的傅里叶功率。接下来的9.6%位于$0.991 \times 2k_n$ 处的12个向量 {602}c 中（中位振幅为最强峰的51%），每个十二个五重孔洞中各有一个，距其五重轴12.5°，距最近的起始向量18.4°。在折射率为1.565的设计中，同一轨道占据壳层功率的11.1%；在推送后的 IDIC 设计中则占8.2%。即使从随机初始值生成的设计，也会将其壳层功率的15%置于30个起始向量上，并将4.7%置于 {602}c 上；这两者分别占446个壳层向量的6.7%和2.7%。除 {602}c 外，折射率为1.547的设计峰值避开了孔洞：它们将12%的功率置于距五重轴15°以内的范围，而29%的壳层向量位于该范围内。因此，孔洞是在球面上由每个孔洞一个峰覆盖的，而不是由许多微弱峰覆盖。IDIC 在孔中心提供了一个二十面体 {350}c，但其位于$0.914 \times 2k_n$处的球面内部；优化器将其移除（占功率的0.9%，中位振幅为16 %），转而生成 {602}c。其他族保留了其起始结构的一部分（图4，插图）：A 保留八面体 {400}（中位振幅为97%）以及部分 {322}（54%），并在两者之间添加 {411} 和 {331}（分别为42%和35%）；TD 保留 {136}c（59%），并丢失 {017}c 和 {345}c（分别为22%和25%）。

相位。折射率为 1.547 时的设计不是中心对称的：无论如何选择原点，都无法使其系数为实数（最佳原点下，功率加权均方根相位偏离 0 或 π 达 43°，而随机相位为 45°）。在起始结构的坐标系中，较强的顶点峰保持其符号：{600} 的相位为 5–19°，{532}c 的相位为 129–176°（图 S3a）。较弱的峰，包括 {602}c，具有分布近似随机的相位。相位与振幅同等重要（图 S3b）。在平面波 $c_{03} = 2.441$ 对应的 54 个 k 点上，该设计的带隙为 0.65%；固定振幅和填充率不变，将所有相位随机抖动 5°几乎没有影响，抖动 10°会使带隙减半，抖动 20°则会关闭带隙。将最强的 30 对的相位置为随机，或将其余 280 对的相位置为随机，都会使带隙变为 0.9–1.6% 的重叠；将最强的 30 对的相位精确设为 0 或 π，则会产生 0.65% 的重叠。带隙取决于许多峰（包括较弱峰）之间的相位关系，而非仅由顶点振幅决定。

已测试的族。表 S12a 列出了每个多面体族，包括其最佳初始结果在一轮扰动重启前后的平面波对比度，以及其 MPB 声明。除 ID、IDIC 和 TD 外，这些集合并非命名

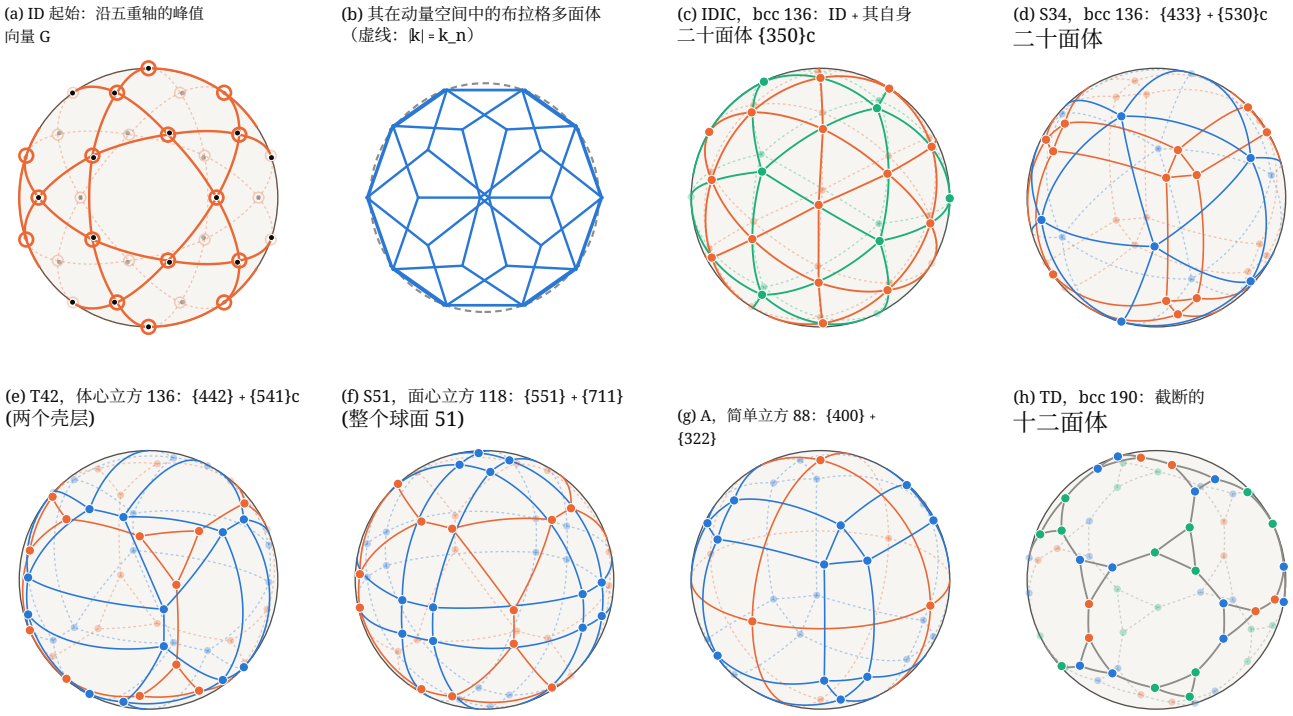


图 S2. 多面体初始点。(a) 沿五重轴观察倒易空间中 bcc 136 的二十面体十二面体起始结构：其峰值向量 G 的方向，{ $\frac{600}{2k_n}$ + $\frac{532}{30}$ | |≈ } { }c（橙色圆环），以及精确二十面体十二面体的方向（黑点），位于球面 G 上；浅色部分为其背面。(b) 从光的角度观察到的相同峰值：波矢 k 所在区域由其布拉格平面 k·G = |G|²/2 界定，每个平面平分一个峰值向量，并沿相同方向按 k 的尺度（G 的一半）绘制。这是一个近似的菱形三十面体，即二十面体十二面体的卡塔兰对偶体，其面位于 0.94–0.97 k_n，略在第 n 条能带的自由光子球面 |k| = k_n 内侧（虚线）。位于其中的平面波不会被起始峰值布拉格反射；带隙在其面上开启，而其体积的两倍即为带隙以下的能带数。(c)–(h) 其他各族按方向划分的起始集合；颜色表示轨道，每个轨道均以自身的边绘出（灰色：截角十二面体）。

实体，而是由两个立方轨道组成的复合体，每个轨道都是球面上的一个精确多面体：{hhk} 轨道具有截角立方体（TC型）的面，而 {hkk} 轨道或循环轨道 {hkl}c 具有小斜方截半立方体（RCO型）的面；除非比例为阿基米德比例，否则它们会发生变形（图 S2d–g）；T42 的两个轨道半径分别为 6 和 $\sqrt{42}$，S51 填充整个球面 $h^2 + k^2 + l^2 = 51$。它们是对壳层 0.88–1.04 × $2k_n$ 中所有单轨道和轨道对进行裸结构筛选后得到的最佳集合（体心立方 136 中有 105 个集合，面心立方 118 中有 55 个，简单立方 88 中有 45 个），由该筛选选出，而非依据几何规则。S34 包含具有 $h^2 + k^2 + l^2 = 34$ 的 48 个向量中的 36 个，其中该球面上的两个二十面体之一缺失；T42 的外壳层恰好位于布拉格球之外。IDIC 是二十面体十二面体及其自身二十面体的复合体，{600} + {532}c + {350}c，分别采用随机符号运行，记为 IDIC（随机），以及采用对称符号运行，记为 IDIC（对称）；与镜像二十面体组成的复合体未运行。其布里渊区包含 124 个态，而不是 136 个；其最佳初始结果 IDIC（对称）在平面波中达到 c = 2.70（折射率 1.64），而二十面体十二面体单独达到 2.50，因此加入其二十面体并无帮助；一轮扰动重启将其提升至 c = 2.60（折射率 1.61），而二十面体十二面体单独经过两轮后为 2.44；MPB 确认 IDIC（对称）在未推送时折射率为 1.628，经过一轮后为 1.594，IDIC（随机）经过一轮后为 1.614（S6）。折射率为 1.547（体心立方 136）和 1.681（简单立方 88）的推送主张通过了全局边缘搜索，其平面波模型带有数值覆盖证书。

作为比较，Riesz加权壳层在 bcc 136 上给出 c = 2.79（两轮：2.56，折射率为 1.584 时的主张），在 fcc 118 上为 2.95，在 sc 88 上为 3.14，且设置相同。

阿基米德族与卡塔兰族。 表 S12b 列出了二十面体阿基米德多面体，以及卡塔兰多面体的顶点方向（即对称轴），并给出了它们在 R = 8.6 以内的最佳晶格近似，其中 R 是以体积为 1 的原胞为单位的壳层半径。立方阿基米德多面体无需近似结构：立方群的每个轨道 {hkl} 都是晶格上的精确多面体（立方八面体 {110}、截角八面体 {210}），但它们的布里渊区不够圆。在二十面体多面体中，只有二十面体十二面体在空晶格界较低的半径处具有一个紧密的近似结构。

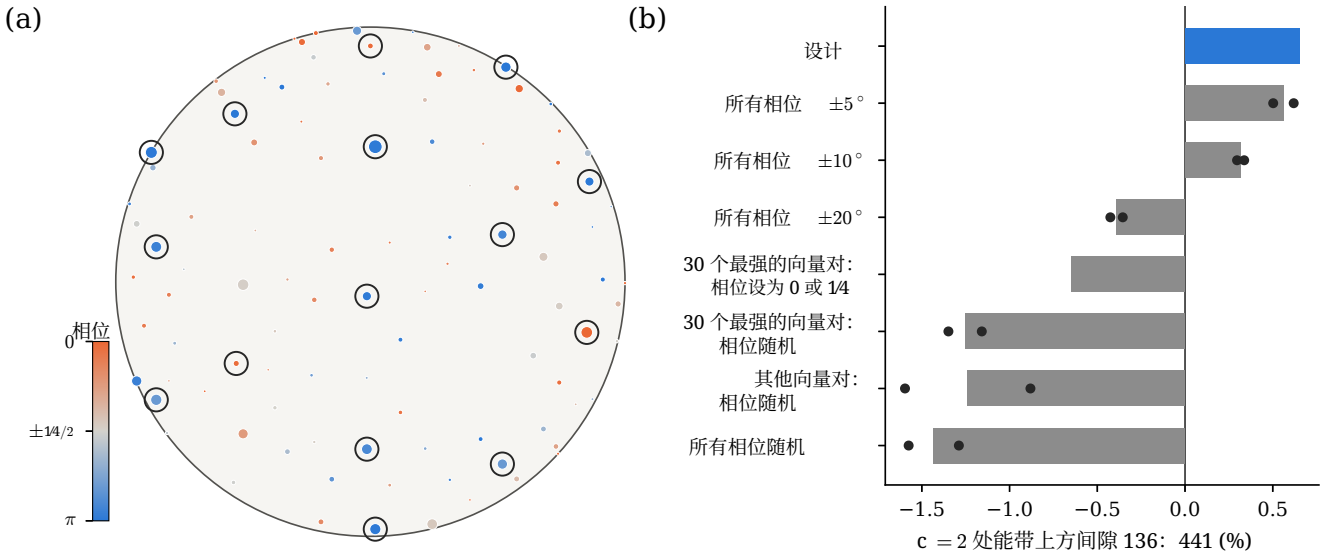


图 S3. 折射率为 1.547 时设计的傅里叶峰的相位。(a) 布拉格球上按方向排列、位于壳层 0.85–1.12× $2k_n$ 附近半径处的二值结构的峰值 $\hat{\theta}$(G)（面积为 $\propto |\theta|^2$，如图 1b 所示），按相位余弦着色；起始集合的原点：橙色表示相位 0；蓝色表示 π；灰色表示 $\pm\pi/2$。环：30 个起点向量，{600}（符号 +）和 {532}c（符号 –）。(b) 在 c = 2.441 处（平面波 c_{03}）的能带 136 上方间隙，基于 54 个 k 点，比较该设计与系数相位经过修改的版本；振幅和填充率（ 0.372 ）保持不变。点：两个随机种子；条：两者的平均值。

表 S12a。多面体的族：起始集合、布拉格区、最佳平面波对比度和 MPB 主张。恰好 n/2：布洛赫矢量 k 所在区域恰好包含 n/2 个向量 k + G 的比例（ID、IDIC、A、TD 和 ID 8/5 使用 200 000 个随机 k；其他情况使用 4096 个扰乱的索博尔点），以及计数偏离 n/2 的均方根偏差。IDIC：一个起始集合，分别使用随机符号和对称符号运行。

族	Cell	轨道（±G 对）	形状	半径 / $2k_n$	区域体积	恰好 n/2（均方根）	最佳 c，开始 / 已推送	MPB 声明（折射率）
ID	体心立方	136 {600} + {532}c (15)	二十面体十二面体 (5/3)	0.94–0.97	135.87	94 % (0.27)	2.50 / 2.44（两轮次）	1.572；1.565 和 1.555（1 轮次）；1.547（2 轮次）
IDIC	体心立方	136 {600} + {532}c + {350}c（21）	ID + 其自身二十面体	0.91–0.97	123.53	0 %（6.3）随机符号	2.86 / 2.66；对称 2.70 / 2.60	1.614（随机，1 轮；未推送：候选项位于 1.675）；1.628（对称）；1.594（对称，1 轮）
S34	体心立方	136 {433} + {350}c (18)	RCO型 + 二十面体	0.91	122.08	0 % (7.6)	2.86 / 2.82	1.675；1.661 (1 轮)
T42	体心立方	136 {442} +{541}c (24)	TC型 + RCO型	0.94–1.02	144.45	17 % (6.5)	3.08 / 2.78	1.649（1 轮）
S51	面心立方	118 {551} + {711} (24)	TC型 + RCO型	0.93	104.80	6 % (7.1)	3.01 / 2.83	仅候选项 (1.718；1.666 经过1轮)
A	sc 88	{400} +{322} (15)	八面体 + RCO型	0.91–0.94	83.16	28 % (3.2)	2.91 / 2.88	1.687；1.681（1 轮）
TD	体心立方	190 {017} + {136} + {345} (30)	截断的十二面体	0.95–0.99	191.02	18 % (2.5)	3.04 / —	仅候选 (1.762)
ID 8/5	体心立方	576 {10 0 0} + {853}c (15)	二十面体十二面体 (8/5)	0.96–0.97	575.95	97 % (0.18)	未优化	—

较大集合（n = 190 至 656）的裸结构即使在对比度为 4.5 时也不会在第 n 条能带处开启带隙（最接近的是体心立方晶格上的 8/5 二十面体十二面体，半径为 576，但仍有 0.3% 的重叠）；在经过检查的情况下，第 n 条能带也没有像体心立方晶格的第 136 条能带那样从相邻能带中凸显出来。除体心立方晶格上的半径为 190 的截角十二面体外，其余结构均未经过优化。首次优化.....

表 S12b. 二十面体阿基米德多面体和卡塔兰顶点方向截至 R = 8.6 的晶格近似。

固体	±G 向量对	截至 R = 8.6 的最佳近似结构（径向离散度、方向误差）
二十面体	6	简单立方 {320}c，R 3.6，n 64（2.0°）；体心立方 {530}c，R 4.6，n 136（0.8°）
十二面体	10	简单立方 {333} + {520}c，R 5.3，n 190（3.6 %，0.9°）；简单立方 {555} +{830}c，R 8.6，n 800（1.4 %）
二十面体十二面体	15	体心立方 {600} +{532}c，R 4.8，n 136（2.7 %，1.2°）；体心立方 {10 0 0} + {853}c，R 7.9，n 576（1.0 %，0.5°）
截角二十面体	30	R = 8 以下无；体心立方 R 8.1，n 590；简单立方 R 8.2，n 602
截角十二面体	30	体心立方 R 5.5，n 190（4.1 %）；体心立方 R 6.5，n 316（1.5 %，4.3°）
菱形十二二十面体	30	体心立方 R 6.7，n 334（2.8 %，1.0°）
截角二十面十二面体	60	在 5% 和 4.5° 范围内均无
扭棱十二面体及其镜像图像	60	体心立方 R 7.6，n 460（4.4%，3.8°）；体心立方 R 8.5，n 656（4.4%，3.1°）
卡塔兰顶点方向（对称性轴）		7、13、16、31 立方轴：sc {700} + {444}，R 7.0（1.0 %）；二十面体的 16 和 31：4 % 以内没有任何结果

进一步起点的优化在平面波中以更高的对比度结束，且未进行推动轮次：bcc 334 上的菱形十二二十面体在 c = 2.93（折射率 1.71），fcc 165 上的小斜方截半立方体在 3.10（1.76），以及 bcc 136 的二十面体十二面体起点，在加入柱面波背景后为 2.57（1.60），而不加背景时为 2.50。bcc 576 上的 8/5 二十面体十二面体仍在优化中。

S13. 二维设计

设定。 正方形和三角形单胞中的 TM偏振，单胞面积为单位面积。当 $\Delta\omega/\omega_{\mathrm{mid}}$ 第 n 条能带以上达到 0.3 % 时，计为存在带隙。对于 $\pi\rho_n^2 = \mathrm{n}$，第 n 条能带的布拉格圆为 $|\mathrm{G}| = 2\rho_n$，而空晶格界 $c_B(\mathrm{n})$ 可由 S7 的极小极大论证得到。

等半径棒记录。 N 个相等的圆柱（N =n，但正方形 41 中为 37 个圆柱）从八类点阵排列（最优环面堆积、s = 1、2、6 和 12 的黎曼能量极小化构型、极大极小排列、对称质心沃罗诺伊镶嵌和环面质心沃罗诺伊镶嵌）或准周期干涉场的极大值开始。利用平面波 TM 求解器，沿对比度路径优化它们的位置和公共半径：采用精确的圆盘傅里叶系数、带隙平滑极小值的海尔曼–费曼梯度、至少为 $1.02 \times 2\mathrm{r}$ 的中心间距；当精细化平面波带隙达到 0.33% 时接受一个步。表 S13 的记录包括一个准周期场起始构型（正方形 41）和黎曼能量 s = 12起始构型（正方形 52、三角形 45 和 58）；它们占据单元的 34–39%。

密集 MPB 检查。 表 S13 中的每个 MPB 数值均来自 MPB：在分辨率为 128（正方形）或 144（三角形）下，采用 $+6$ 条能带、覆盖布里渊区的 25×49 k 网格，从第 n 条能带的三个最高点和第 n $+1$ 条能带的三个最低点开始进行 Nelder–Mead 优化，并使用对比度阶梯（棒：优化器对比度的 1、1.005、1.01、.....倍；自由形式：从平面波对比度的 0.995 倍开始，以 0.5% 为步长向上递增）。自由形式的数值通过线性插值阶梯，得到 0.3% 的带隙。

自由形式设计。 S2 和 S3 的水平集方法，采用二维 TM 平面波求解器，分别在正方形 n = 28–208 和三角形 n = 31–205 中进行（114 条优化历史）。在每个 n 下，4–7 个独立初始值最终彼此相差约 0.5% 以内，而使用 $1.5 \times 2\rho_n$ 的支撑集而非 $1.06 \times 2\rho_n$，最多只能提高 0.2%。这些设计占单元的 40–47%，并随 n 增大而上升。

表 S13. 二维中第 n 条能带上方 0.3% TM 带隙的最低对比度 c，以及相关检查结果。MPB 阶梯：0.3% 附近两个阶梯档位处的对比度和带隙（%）。

单元，n	棒（密集 MPB）	自由形式 form，平面波	自由形式，MPB 阶梯	Free form，MPB 位于 0.3 %	c_B	(c − 1)/(c_B − 1)
正方形 41	1.2776	1.2149	1.2148：0.254；1.2209：0.315	1.219	1.0753	2.9
正方形 52	1.2565	1.2339	1.2339：0.288；1.2400：0.361	1.235	1.0536	4.4
三角形 45	1.2494	1.2080	1.2077：0.281；1.2137：0.340	1.2096	1.0676	3.1
三角形 58	1.2132	1.1827	1.1827：0.270；1.1886：0.336	1.185	1.0433	4.3
三角形180	—	1.1425	未运行	—	—	5.4（平面波）

另一种三角形45设计（平面波1.2077）在 MPB 中于 1.208 处达到 0.3%；表 S13 保留了更

保守值。在这四个单元中，对于相同的带隙，MPB 所需的对比度比平面波求解器高 0.1–0.4%。

傅里叶峰。三角形 n $=12$ 杆记录（菱形四聚体中有 12 根棒，c $=1.3583$，填充率为 0.47）在 $0.991\times 2\rho_n$ 处呈现一个由峰值构成的正十二边形，并在 $0.476\times 2\rho_n$处有 6 个内峰；面积为 n 的正十二边形，其边位于 $0.988\times 2\rho_n$处。仅将傅里叶峰置于布拉格环上的初始构型，所得结果与方形杆记录相差不超过 0.1 %（n $=20$：高出 3 %），但并未优于后者。在杆记录中，79 % 的强内部峰（$0.05<|G|/2\rho_n<0.85$）是两个强环向量之差；数量相同的随机内部向量中，这一比例为 57 %（37 条记录中有 29 条高于随机水平；Wilcoxon检验 p $=8\times 10^{-5}$）。在自由形式设计中，这一比例为 50–100 %，随机情况下则为 11–45 %。在 19 个自由形式设计中，有 13 个设计的最强环状峰对应的布拉格线界定了一个面积接近 n 的布里渊区（与随机排序零假设相比，p ≤ 0.05）；而在杆记录中，这种界定作用仅较弱。

数据。杆　　设计、自由形式设计以及每个 MPB 阶梯均与三维数据（S10）一同保留。