

外场驱动下石墨烯正方薄膜中的动力学斯格明子纹理*

朱熠青¹⁾ 赵恩泽¹⁾ 张东波^{1)†}

1) (北京师范大学物理与天文学院, 北京 100875)

本文针对外场驱动下二维材料振动过程中拓扑结构的形成问题, 研究了单层正方形石墨烯薄膜在周期性面外驱动下的共振行为及其三维位移、速度矢量场中的拓扑纹理演化。基于连续张紧膜模型推导了固定边界条件下石墨烯薄膜的本征模态与本征频率关系, 并结合 Föppl-von Kármán 几何非线性讨论了面外振动诱导面内位移的物理机制。基于此, 采用分子动力学方法模拟了边长 169.74 Å 的单层正方形石墨烯在 5% 等轴拉伸下的高阶共振响应。结果表明, 外加周期驱动能够在石墨烯薄膜中激发清晰的高阶驻波振型, 理论估算的本征频率与分子动力学模拟中原子振动的快速傅里叶变换提取结果基本一致。进一步分析发现, 在特定相位构型下, 由完整三维位移矢量场和速度矢量场构造的归一化方向场可形成规则排布的局域拓扑单元, 其空间分布与高阶共振模态密切相关。这些局域结构表现出核心-外围反转和径向面内分量等 Néel 型纹理特征, 局域斯格明子数接近 ± 1 , 并在一个振动周期内随相位发生反转与重复出现。研究结果表明, 单层石墨烯薄膜在外场驱动共振过程中不仅表现出清晰的高阶振动模式, 而且能够形成具有周期性再现特征的动力学拓扑纹理, 为二维材料中振动与拓扑耦合行为的研究提供了新的思路。

关键词: 石墨烯薄膜; 共振; 斯格明子纹理; 分子动力学

PACS: 68.65.Pq 62.25.Fg 12.39.Dc 02.40.Pc

1 引言

斯格明子作为一类具有非平庸拓扑构型的局域矢量场纹理, 近年来已成为凝聚态物理、人工结构物理以及波动拓扑研究中的重要主题^[1-5]。最初, 斯格明子研究主要集中于磁性体系中的自旋纹理, 而随着实

† 通信作者. E-mail: dbzhang@bnu.edu.cn

* 中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: 13100-311324201501)资助的课题.

验技术与拓扑概念的发展，其研究对象逐渐拓展到更广泛的人工结构和经典场平台中，例如铁电极化结构、人工声学晶格、光学矢量场以及时空耦合场等^[6-17]。在这些体系中，边界约束、应变调控、各向异性工程以及外部电场、磁场和光场激励，为拓扑纹理的构筑、稳定和调控提供了丰富手段，使得 Bloch 型、Néel 型以及更复杂的混合型纹理能够在各种不同尺度和不同物理平台中实现^[18-25]。与此同时，拓扑纹理对外界驱动往往表现出高度灵敏的响应，可伴随模式重构、手性切换、晶格转变以及波传播调制等现象，从而在低功耗信息存储、拓扑输运、可重构波操控和新型功能器件设计等方面展现出重要潜力^[26-29]。这些研究表明，斯格明子已由传统磁性体系中的特殊拓扑解，逐步发展为描述复杂矢量场组织行为的一种普适拓扑框架。

尽管宏观与介观人工结构中的拓扑纹理已展现出丰富的构筑方式与功能特性，但将斯格明子研究推进到原子尺度的本征材料体系中，则具有更为深刻的科学意义^[30-32]。在原子尺度材料中，斯格明子不再仅仅是几何意义上的拓扑构型，而是与电子、自旋、轨道、晶格以及多体相互作用紧密耦合，从而表现出更为复杂的稳定机制、内部自由度与动力学响应^[33,34]。例如，在手征磁体及相关薄膜体系中，二维斯格明子晶格已经实现实空间直接观测，为拓扑纹理的微观成像与相图研究提供了直接证据^[35]；在中心对称或受挫体系中，旋度以及更一般的涡度自由度可在保持拓扑荷不变的条件下被磁场或电场连续调控，显著丰富了斯格明子的内部结构与动态行为^[36]。另一方面，随着斯格明子特征尺度的进一步减小，量子涨落、拓扑激发、量子隧穿以及量子器件功能等问题逐渐凸显，表明斯格明子研究已由经典拓扑纹理拓展至量子拓扑对象及其功能化应用的新阶段^[37]。与此同时，石墨烯及其相关低维电子体系中的斯格明子相关拓扑激发研究也表明，斯格明子的概念正从传统磁矩场逐步推广到更广泛的二维原子材料平台^[38-41]。因此，在微观低维材料中寻找新的斯格明子载体，揭示其形成条件及外场调控方式，已成为当前拓扑材料与低维物理交叉研究中的一个重要方向。

基于上述背景，本文研究外场驱动下单层正方形石墨烯薄膜的高阶共振行为及其三维位移、速度矢量场中的拓扑纹理演化。石墨烯作为典型二维原子晶体，兼具极高的面内刚度、极低的质量密度以及优异的机电耦合特性，是研究低维纳米机械振动与共振问题的重要材料平台^[42-53]。已有研究表明，悬浮石墨烯薄膜和石墨烯纳米谐振器能够表现出清晰的本征模态、可调谐共振频率以及显著的非线性动力学特征^[54-56]。本文结合连续张紧膜模型与分子动力学模拟，分析预应变单层正方形石墨烯在周期性面外驱动下的本征频率、高阶驻波模态、面内位移响应及其局域拓扑结构。结果表明，在特定共振相位下，由完整三维位移矢量场和速度矢量场构造的归一化方向场可形成规则排布的局域拓扑单元，其拓扑数接近 ± 1 ，

并表现出类似 Néel 型斯格明子纹理的径向反转特征。该工作将斯格明子的研究对象由传统自旋场、极化场和经典波矢量场进一步拓展到二维材料共振中的动力学矢量场，为理解低维机电系统中的模态演化、拓扑响应及其耦合机制提供了新的思路 [57–59]。

2 理论模型与本征频率分析

考虑边长为 L 的单层正方形石墨烯薄膜，其平衡位置位于 xy 平面内，四条边均固定。设薄膜在外驱动下产生面外振动，其面外位移记为 $w(x, y, t)$ ，其中 $x, y \in [0, L]$ 。由于单层石墨烯厚度远小于其面内尺度，且在预张力作用下面外振动通常以张力效应为主，因此本文将石墨烯薄膜近似视为各向同性二维张紧膜，不考虑弯曲刚度修正，仅在线性小振幅条件下讨论其本征振动与受迫共振行为。

设石墨烯的面密度为 ρ_s ，均匀面内预张力为 T 。在面外分布驱动力 $f(x, y, t)$ 作用下，薄膜的线性振动满足二维波动方程

$$\rho_s \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = T \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + f(x, y, t). \quad (1)$$

式中 $f(x, y, t)$ 表示单位面积上所受的周期性面外外力。由于四边固定，边界条件可写为

$$w(0, y, t) = w(L, y, t) = w(x, 0, t) = w(x, L, t) = 0. \quad (2)$$

2.1 自由振动本征方程

在无外力条件下， $f(x, y, t) = 0$ 。取分离变量形式 $w(x, y, t) = \phi(x, y)q(t)$ ，代入式(1)，并令时间项与空间项均等于分离常数 $-\omega^2$ ，可得

$$\frac{d^2 q}{dt^2} + \omega^2 q = 0 \quad (3)$$

以及空间本征方程

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\rho_s \omega^2}{T} \phi = 0. \quad (4)$$

进一步取 $\phi(x, y) = X(x)Y(y)$ ，结合固定边界条件，可得正方形薄膜的本征模态函数

$$\phi_{mn}(x, y) = \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi y}{L}, \quad m, n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

其对应的本征角频率为

$$\omega_{mn} = \frac{\pi}{L} \sqrt{\frac{T}{\rho_s}} \sqrt{m^2 + n^2}, \quad m, n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

因此，本征频率可写为

$$f_{mn} = \frac{\omega_{mn}}{2\pi} = \frac{1}{2L} \sqrt{\frac{T}{\rho_s}} \sqrt{m^2 + n^2}. \quad (7)$$

由式(7)可知，本征频率由薄膜边长 L 、面密度 ρ_s 和面内预张力 T 共同决定。对于正方形体系，模态 (m, n) 与 (n, m) 具有相同频率。例如，基模 $(1, 1)$ 的频率为 $f_{11} = (2L)^{-1} \sqrt{2T/\rho_s}$ ，而 $(1, 2)$ 与 $(2, 1)$ 为一对简并模，其频率均为 $f_{12} = f_{21} = (2L)^{-1} \sqrt{5T/\rho_s}$ 。

2.2 周期性外力驱动与共振条件

进一步考虑周期性外力驱动情形。对于本文所研究的正方形石墨烯薄膜，设外加面外驱动力在整个体系上均匀分布，则单位面积上所受的周期性外力可写为

$$f(x, y, t) = F_0 \cos \Omega t, \quad (8)$$

其中 F_0 为外力幅值， Ω 为外驱动角频率。在此条件下，石墨烯薄膜的位移响应可表示为各阶本征模态的线性叠加

$$w(x, y, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} q_{mn}(t) \phi_{mn}(x, y). \quad (9)$$

将其代入方程(1)，并利用模态正交关系，可得各阶模态的运动方程

$$\ddot{q}_{mn}(t) + \omega_{mn}^2 q_{mn}(t) = \frac{4}{\rho_s L^2} F_{mn} \cos \Omega t, \quad (10)$$

其中

$$F_{mn} = F_0 \int_0^L \int_0^L \phi_{mn}(x, y) dx dy \quad (11)$$

表示均匀外力在第 (m, n) 阶模态上的投影系数。将式(5)代入可知，理想均匀驱动对不同模态的激发效率由外力空间分布与模态函数之间的重叠积分决定。当外驱动角频率 Ω 接近某一模态的本征角频率 ω_{mn} 时，对应模态的响应将显著增强，即

$$\Omega \approx \omega_{mn}. \quad (12)$$

为便于统一表述，本文将 $m = n = k$ 所对应的共振频率记为 k 阶共振频率。综上，在均匀周期性外力作用下，单层正方形石墨烯薄膜的共振响应可理解为外场对各阶本征模态的选择性激发过程：驱动频率决定共振位置，而模态与均匀外力之间的重叠积分决定其是否能够被有效激发。这也为后续分析共振态下位移场和速度场的空间结构及其拓扑性质提供了基础。

需要说明的是，在理想连续膜和完全均匀外力假设下，均匀驱动对偶数模态的线性重叠积分可能为零。然而，分子动力学体系中存在有限宽度固定边界、原子离散性、预应力非均匀性以及受迫振动过程中的非线性模态耦合，因此实际响应并不严格受理想线性重叠选择定则限制。本文所称不同阶共振主要依据外驱动频率附近形成的稳定驻波空间图样进行判定。

2.3 面内位移与面外振动的耦合

需要说明的是，前述连续张紧膜模型主要用于估算预拉伸石墨烯薄膜的面外本征频率和共振模态。在该模型中， $w(x, y, t)$ 表示面外标量位移，因此其作用主要是描述薄膜在周期性外力作用下的面外振动响应。然而，在分子动力学模拟中，每个碳原子的运动并不局限于 z 方向，而是具有完整的三维位移和速度。因此，除面外位移外，体系中还会出现面内位移分量。

在分子动力学模拟中，以等轴拉伸并充分弛豫后的构型作为参考构型。记第 i 个原子在参考构型中的位置为 $\mathbf{r}_i^0$ ，在时刻 t 的瞬时位置为 $\mathbf{r}_i(t)$ ，则其原子位移矢量可定义为

$$\mathbf{u}_i(t) = \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i^0 = (u_{x,i}(t), u_{y,i}(t), u_{z,i}(t)), \quad (13)$$

其中 $u_{x,i}$ 和 $u_{y,i}$ 为面内位移分量， $u_{z,i}$ 为面外位移分量。连续张紧膜模型中的 $w(x, y, t)$ 可理解为 u_z 在连续介质近似下的对应量，但该模型本身并未显式求解面内位移分量 u_x 和 u_y 。后续分子动力学结果中的面内位移则直接来源于原子三维运动轨迹。

虽然本文外加驱动力沿 z 方向作用，但在固定边界和预拉伸条件下，面外振动会通过几何非线性诱导面内应变和面内位移。对于二维薄膜，其连续位移场可写为

$$\mathbf{u}(x, y, t) = (u_x(x, y, t), u_y(x, y, t), w(x, y, t)), \quad (14)$$

其中 u_x 和 u_y 为面内位移分量， w 为面外位移分量。在小斜率但允许有限面外挠度的 Föppl-von Kármán 近似下，面内应变张量可表示为

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial w}{\partial x_\alpha} \frac{\partial w}{\partial x_\beta} \right), \quad \alpha, \beta = x, y. \quad (15)$$

其中前两项为线性面内应变，最后一项 $\partial w / \partial x_\alpha \partial w / \partial x_\beta / 2$ 为几何非线性项。该项表明，只要面外位移 w 在空间上存在梯度，薄膜的实际弧长就会发生变化，从而产生附加的面内拉伸应变。因此，即使外力只沿面外方向施加，高阶共振过程中形成的空间起伏仍会通过 Föppl-von Kármán 几何非线性耦合诱导面内位移分量。

从原子尺度来看，相邻碳原子之间的瞬时距离由三维相对位移共同决定。当薄膜发生面外起伏时，相邻原子之间会出现高度差，使得实际键长满足

$$l_{ij}^2(t) = \Delta x_{ij}^2(t) + \Delta y_{ij}^2(t) + \Delta z_{ij}^2(t). \quad (16)$$

因此，面外高度差 Δz_{ij} 的变化会改变 C-C 键的实际长度，并通过原子间相互作用诱导面内方向的弛豫和重排。在预拉伸和固定边界条件下，这种面内弛豫受到约束，从而形成与面外驻波模态相关联的有序面内位移分布。

由此可见，本文连续张紧膜模型与分子动力学模拟承担不同作用：连续模型用于给出面外共振频率和模态分布的理论估计，而分子动力学模拟则自然包含原子间相互作用、固定边界约束、预拉伸状态以及几何非线性效应下的完整三维动力学响应。后续关于位移场和速度场的分析均基于分子动力学得到的三维原子运动数据，而不是仅基于连续模型中的单一面外标量位移。

3 结果与讨论

3.1 分子动力学模型与模拟参数

为研究外场驱动下单层石墨烯薄膜的共振动力学响应，本文采用 LAMMPS 软件进行分子动力学模拟。模拟采用 `atomic` 原子模型，碳原子间相互作用采用 Tersoff 势函数描述。所建立的模型为单层正方形石墨烯薄膜，总原子数为 11040，薄膜边长为 $L = 169.74 \text{ \AA}$ ，积分时间步长取为 0.001 ps 。模拟盒子采用三维周期性边界条件，并在 z 方向设置足够大的真空层，以避免周期镜像之间的相互作用。

在动力学模拟开始前，首先对初始构型进行共轭梯度能量最小化，以消除局域非平衡应力。随后在 300 K 下对体系进行速度初始化，并采用 NVT 系综进行热平衡处理，热浴阻尼时间取为 0.1 ps 。为引入面内预张力，本文采用 `fix deform` 方法在 x 和 y 方向同步几何缩放模拟盒子，对石墨烯薄膜施加 5% 的等轴面内拉伸。拉伸完成后再次进行能量最小化，并将弛豫后的构型作为后续位移矢量计算的参考构型。

为近似实现四边固定边界条件，本文根据原子初始位置将靠近薄膜四条边界的区域定义为边界原子组，其余原子定义为内部可动原子组。具体而言，靠近 $y = 0$ 和 $y = L$ 的边界区域宽度约为 $0.5 \text{ \AA}$ ，靠近 $x = 0$ 和 $x = L$ 的边界区域宽度约为 $0.7 \text{ \AA}$ 。边界原子速度被设为零，并通过 `fix setforce` 固定其受力，从而在后续受迫振动过程中保持不动。内部原子则作为主要振动区域参与动力学演化。

完成预拉伸、弛豫和边界固定后，对内部可动原子施加沿 z 方向的简谐周期外力

$$F_z(t) = F_0 \sin(\omega t), \quad (17)$$

其中外力幅值根据共振阶数进行调节，取值范围约为 0.04–0.10 eV/Å。该外力通过 `fix addforce` 施加于每个内部可动原子，即所有内部原子受到相同相位和相同幅值的 z 向周期力，边界固定原子不施加该周期性外力。因此，该驱动在空间上近似为均匀面外体力场，其对不同模态的激发效率由驱动空间分布与本征模态之间的重叠积分决定。通过调节外驱动角频率 ω ，可将驱动频率调至不同阶共振频率附近，从而激发相应的高阶驻波模态。在驱动过程中，体系保持在 NVT 温度控制下，因此热浴为受迫振动提供有限耗散机制。

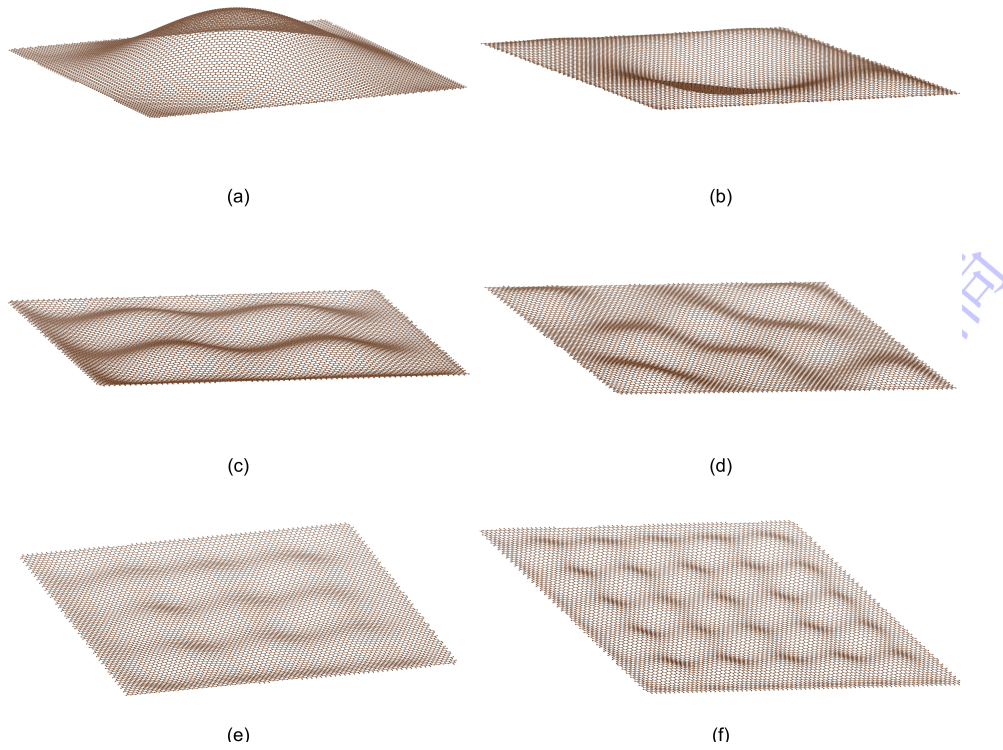


图 1 石墨烯共振模型。(a) 基模；(b) 二阶共振模态；(c) 四阶共振模态；(d) 五阶共振模态；(e) 六阶共振模态；(f) 九阶共振模态。

Fig. 1. Resonance modes of graphene: (a) fundamental eigenmode; (b) second-order resonance mode; (c) fourth-order resonance mode; (d) fifth-order resonance mode; (e) sixth-order resonance mode; (f) ninth-order resonance mode.

3.2 本征频率估算与共振频率选取

在完成预拉伸和边界固定后，石墨烯薄膜的面外振动可近似由前文的连续张紧膜模型描述。对于边长为 L 的正方形薄膜，其本征频率可写为

$$f_{mn} = \frac{1}{2L} \sqrt{\frac{T}{\rho_s}} \sqrt{m^2 + n^2}, \quad (18)$$

其中 ρ_s 为石墨烯面密度， T 为由面内预拉伸引入的有效二维预张力， m 和 n 为模态指标。需要指出的是，这里的 T 并非拟合参数，而是直接由分子动力学模拟输出的应力分量计算得到。在 LAMMPS 金属单位制下，体系面内压强分量 p_{xx} 与二维张力 T 满足关系：

$$T = -p_{xx} \cdot h \quad (19)$$

其中 $h \approx 0.335\text{nm}$ 为石墨烯等效层厚，负号源于压强与应力的符号约定。在本文采用 5% 等轴拉伸，应变为 $\varepsilon = 0.05$ 的张紧膜模型下，模拟得到平衡态面内压强分量为 $p_{xx} = -3.47 \times 10^5 \text{bar}$ ，经单位换算与厚度修正后，得到二维预张力为 $T \approx 11.62 \text{ N/m}$ 。本文采用 $T = 11.62 \text{ N/m}$ 作为连续膜模型中的有效预张力参数。该估算反映了 5% 面内拉伸所引入的张力尺度；在实际分子动力学体系中，由于固定边界、原子离散性和局域应力不均匀性，预张力并非严格空间均匀，因此该值主要用于理论频率的量级估算，而不是对每个原子局域应力的精确描述。

取石墨烯面密度 $\rho_s = 7.61 \times 10^{-7} \text{ kg/m}^2$ ，薄膜边长 $L = 169.74 \text{ \AA}$ ，并代入 $T = 11.62 \text{ N/m}$ ，可得

$$f_{mn} \approx 0.115 \sqrt{m^2 + n^2} \text{ THz}. \quad (20)$$

因此，基模 (1,1) 的理论频率为 $f_{11}^{\text{th}} = 0.115\sqrt{2} \approx 0.163 \text{ THz}$ 。

另一方面，本文对分子动力学模拟得到的原子振动时间序列进行快速傅里叶变换分析，以提取实际体系的主振动频率。FFT 结果显示，在当前预拉伸和固定边界条件下，体系的基频约为 $f_{11}^{\text{FFT}} \approx 0.16 \text{ THz}$ 。可以看到，连续张紧膜模型给出的理论基频与分子动力学结果基本一致，说明该有效预张力估算方法能够合理描述预拉伸石墨烯薄膜的面外共振频率。

因此，在本文中，连续膜模型主要用于提供共振频率的理论尺度和模态选择依据；实际外驱动频率的选取则以分子动力学轨迹的 FFT 结果为主要参考。具体而言，本文以 $f_{11}^{\text{FFT}} \approx 0.16 \text{ THz}$ 为基准，通过调节外驱动角频率 ω ，将驱动频率分别调节至一阶、二阶、四阶、五阶、六阶及九阶共振附近。对应的共振模式如图 1 所示。受 5% 等轴拉伸作用后，石墨烯薄膜整体保持良好的晶格连续性，在周期性外场驱动下呈现出清晰的面外驻波响应。

从图 1 可以看出，当外驱动频率调至不同共振频率附近时，石墨烯薄膜表现出显著不同的面外振动形貌。在一阶共振附近，薄膜整体呈现单峰式低阶起伏，中心区域发生明显的整体隆起，说明体系主要表现为全局协同振动特征。随着驱动频率升高，在二阶共振附近，面外振动不再局限于单一整体起伏，薄膜内部开始出现节点线，表明体系由低阶整体模态逐渐向高阶驻波模态过渡。

进一步提高共振阶数后，在四阶和五阶共振附近，薄膜内部的节点线更加清晰，振动区域被分割为若干局域振动单元，相邻单元的面外位移方向相反，体现出高阶驻波模态中典型的相位交替特征。到六阶共振附近，节点线数量继续增加，局域振动单元的空间排布更加规则，表明高阶模态已经在两个面内方向上建立起较强的周期性调制。对于九阶共振附近的响应，薄膜内部被进一步划分为更多局域振动区域，在两个面内方向上均可观察到清晰的多节点驻波结构，对应于高阶共振条件下的典型空间振型。

3.3 面外位移与速度场的空间分布

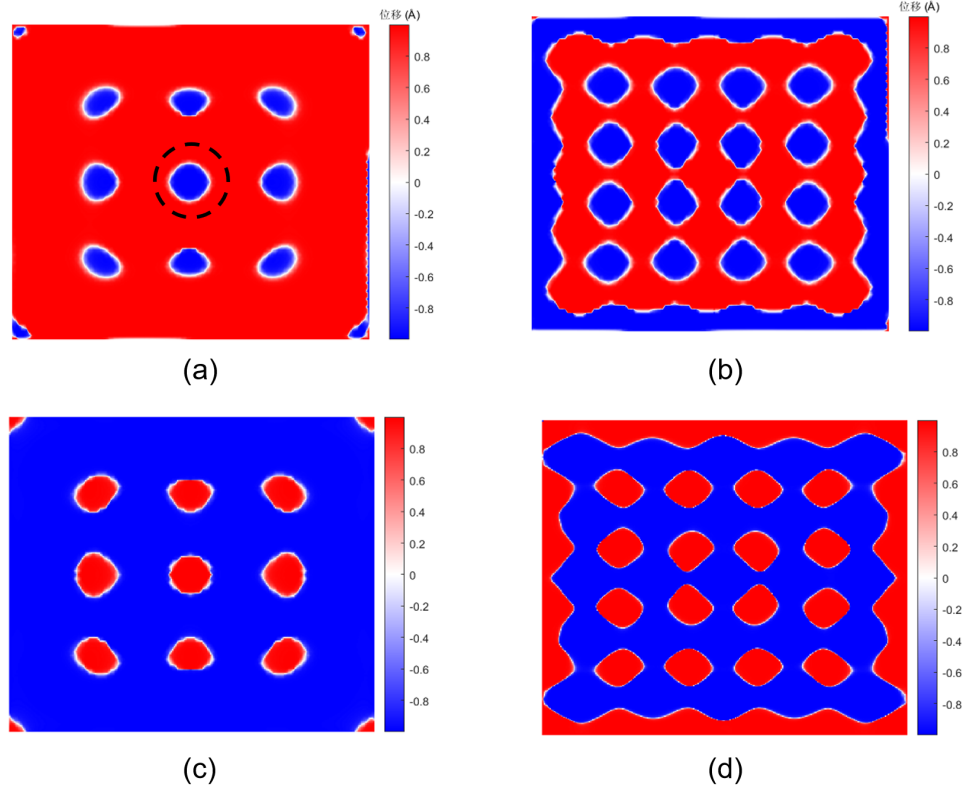


图 2 六阶和九阶共振下石墨烯薄膜的面外分量分布。(a) 六阶共振下的面外位移分量 u_z ；(b) 九阶共振下的面外位移分量 u_z ；(c) 六阶共振下的面外速度分量 v_z ；(d) 九阶共振下的面外速度分量 v_z 。

Fig. 2. Out-of-plane component distributions of the graphene membrane under the sixth- and ninth-order resonances: (a) u_z under the sixth-order resonance; (b) u_z under the ninth-order resonance; (c) v_z under the sixth-order resonance; (d) v_z under the ninth-order resonance.

在确定外驱动频率后，本文进一步分析了高阶共振条件下石墨烯薄膜的瞬时振动形貌。图 2 给出了六阶和九阶共振附近典型时刻的面外位移分量和面外速度分量分布。其中，图 2(a) 和图 2(b) 分别对应六阶和九阶共振下的面外位移分布，图 2(c) 和图 2(d) 分别对应相同共振条件下的面外速度分布。颜色采用红-白-蓝连续标度表示，其中红色和蓝色分别代表正、负方向上的较大幅值，白色区域对应面外分量接近零的位置。

从图 2 可以看出，在高阶共振条件下，石墨烯薄膜不再表现为低阶模态中的整体起伏，而是在有限尺寸区域内形成了具有明显空间周期性的驻波图样。随着共振阶数提高，薄膜内部的节点线数量增加，振动区域被进一步划分为多个局域振动单元。相邻单元之间的面外位移或速度符号相反，反映出高阶驻波模态中典型的相位交替特征。

对于面外位移分布而言，红色和蓝色区域分别对应局域正位移核心和负位移核心。这些局域核心在薄膜内部呈现规则排布，尤其在九阶共振下更加明显，说明高阶模态能够在空间上形成更密集的局域振动结构。对于面外速度分布而言，也可以观察到类似的正负交替区域，但其空间分布对应的是振动过程中速度达到极值的相位时刻。

需要指出的是，图 2 中的位移分布和速度分布并不取自同一瞬时构型。面外位移在其极值时刻最能体现位移场的空间反转结构，而面外速度则在相差约四分之一周期的时刻达到最清晰的速度分布。本文分别选取位移场和速度场中最能反映空间调制特征的瞬时构型进行展示。

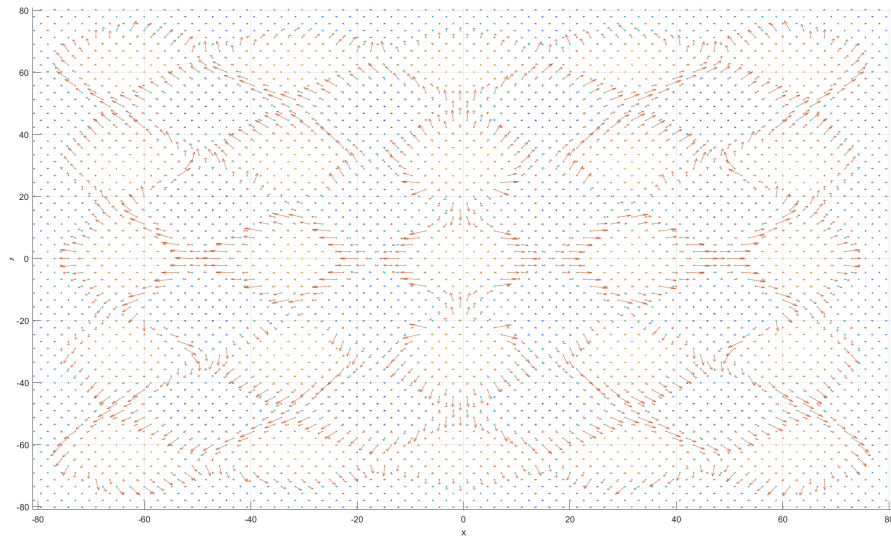


图 3 六阶共振下面内位移矢量场分布

Fig. 3. In-plane displacement vector field under the sixth-order resonance.

图 3 进一步给出了六阶共振下面外位移达到极值时刻的面内位移矢量场。面内位移分量 (u_x, u_y) 以预拉伸并弛豫后的构型为参考构型计算。该瞬时构型对应面外位移 u_z 达到极值的时刻，箭头表示面内位移的方向和大小。可以看到，面内位移并非随机热涨落，而是在高阶共振模态约束下呈现出与局域振动单元相关的有序空间分布，这说明面外受迫振动可通过几何非线性耦合诱导面内位移响应。

3.4 三维位移矢量场与Néel型纹理特征

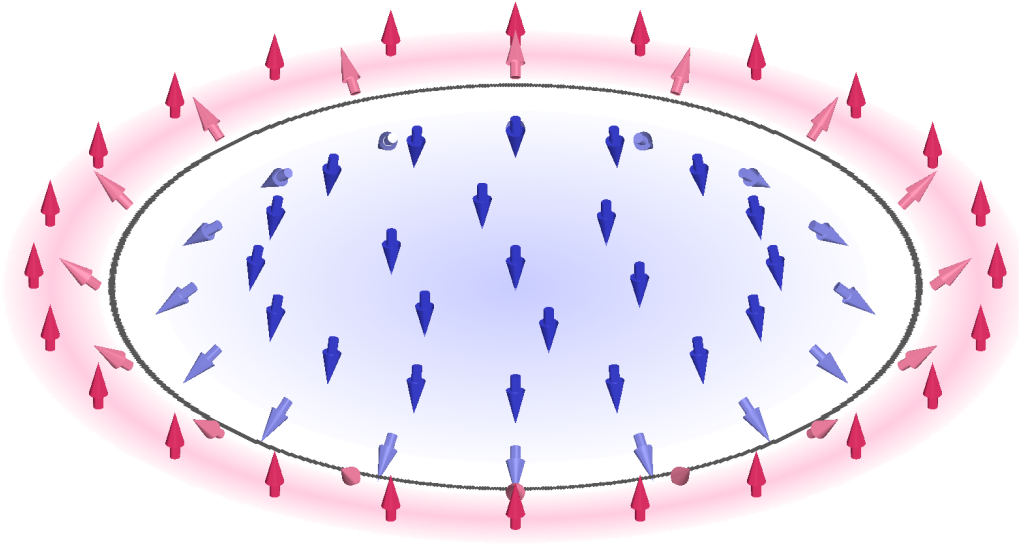


图 4 局域振动结构示意图。核心区域与外围区域的矢量在面外方向上相反，过渡区域中的面内分量呈径向分布，表现出类似 Néel 型纹理的局域反转特征。

Fig. 4. Schematic diagram of the localized vibrational structure. The vectors in the core and outer regions point in opposite out-of-plane directions, while the in-plane components in the transition region show a radial distribution, exhibiting a local reversal feature similar to a Néel-type texture.

由上一节可知，在高阶共振条件下，石墨烯薄膜的面外位移分量 u_z 和面外速度分量 v_z 会形成规则排布的局域正负核心。然而，仅由 u_z 或 v_z 的标量分布并不能直接判断其拓扑性质。对于斯格明子型纹理而言，关键在于完整三维矢量场是否在局域区域内表现出从核心到外围的连续方向反转，并伴随有序的面内分量分布。因此，本节进一步结合面内位移和三维位移矢量场，分析这些局域振动单元的矢量结构特征。

如图 3 所示，在六阶共振下面外位移达到极值的瞬时构型中，面内位移分量 (u_x, u_y) 并非随机热涨落，而是呈现出与高阶共振模态相关的有序空间分布。该面内位移以预拉伸并弛豫后的构型为参考构型计算得到，反映了受迫共振过程中由面外起伏、固定边界和预拉伸共同诱导的面内响应。结合第2.3节的 Föppl-von Kármán 几何非线性分析可知，面外位移梯度会引入附加面内应变，从而使体系在面外振动过程中自然产生面内位移分量。

为说明局域振动单元的矢量结构特征，图 4 给出了局域振动结构的示意图。该结构中，核心区域的矢量主要指向一个面外方向，而外围区域逐渐反转为相反方向；在核心与外围之间，面内分量沿径向展开或

收缩，形成类似 Néel 型纹理中的径向反转结构。该图用于说明本文所讨论的局域三维矢量场结构，而非单独表示某一面外标量分量。

对于本文中的局域振动核心，其三维位移矢量可写为

$$\mathbf{u}(x, y, t) = (u_x(x, y, t), u_y(x, y, t), u_z(x, y, t)) \quad (21)$$

其中， u_z 决定核心与外围区域之间的面外极性差异，而 u_x 和 u_y 描述膜面内的径向或切向响应。以图 2 中的局域核心为例，核心区域的 u_z 与外围背景具有相反符号，说明该区域存在明显的中心-外围面外反转；同时，图 3 中的面内位移箭头表明，核心附近的面内分量具有一定的有序组织特征。因此，该局域三维位移构型与图 4 所示的局域振动结构相对应，即面外分量发生核心-外围反转，而面内分量参与形成径向过渡结构。

类似的分析也适用于速度矢量场。对于受迫简谐振动，位移场与速度场在时间上存在约 $\pi/2$ 的相位差，因此二者最清晰的空间分布通常出现在不同瞬时构型中。速度矢量可写为

$$\mathbf{v}(x, y, t) = (v_x(x, y, t), v_y(x, y, t), v_z(x, y, t)) \quad (22)$$

其中， v_z 描述面外速度核心的正负分布， v_x 和 v_y 则反映与振动相位相关的面内速度响应。由于速度场是位移场的时间导数，速度型纹理可理解为同一动力学共振过程在不同相位下的矢量场表现，而不是与位移型纹理相互独立的另一类静态结构。

3.5 局域斯格明子数计算

为进一步定量判断上述局域振动单元的拓扑性质，本文引入二维归一化矢量场的斯格明子数。对于位移场，首先根据分子动力学轨迹得到每个原子的三维位移矢量 $\mathbf{u}_i(t) = (u_{x,i}(t), u_{y,i}(t), u_{z,i}(t))$ ，并将其映射到二维规则网格上，得到连续位移矢量场 $\mathbf{u}(x, y, t)$ 。随后构造归一化方向场

$$\mathbf{n}^{(u)}(x, y, t) = \frac{\mathbf{u}(x, y, t)}{|\mathbf{u}(x, y, t)|}. \quad (23)$$

类似地，对于速度场，可由原子速度矢量 $\mathbf{v}_i(t) = (v_{x,i}(t), v_{y,i}(t), v_{z,i}(t))$ 构造归一化速度方向场 $\mathbf{n}^{(v)}(x, y, t) = \mathbf{v}(x, y, t)/|\mathbf{v}(x, y, t)|$ 。

在得到归一化矢量场后，局域斯格明子数定义为

$$N_{\text{sk}} = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \mathbf{n}(x, y) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (24)$$

其中 Ω 为选定的局域积分区域， $\mathbf{n}$ 可取 $\mathbf{n}^{(u)}$ 或 $\mathbf{n}^{(v)}$ 。在实际计算中，本文以每个局域振动核心为中心选取积分区域，将离散原子数据通过线性插值重构到规则网格上，并采用数值差分计算空间导数，最后对局域区域进行积分得到对应的 N_{sk} 。

计算结果表明，高阶共振过程中形成的局域振动核心具有接近整数的拓扑数。以六阶共振下的速度矢量场为例，多个局域核心的斯格明子数均接近 +1，平均值约为 $N_{\text{sk}} \approx 0.9923$ （详见补充材料图 S1）。这说明这些局域结构并非普通的振动极值区域，而是在三维速度矢量场中具有非平庸绕转特征的局域拓扑单元。对于位移矢量场中的正负核心，也可得到符号相反或相近整数的局域拓扑数，其符号由核心区域与外围区域的矢量反转方向决定。

结合前文的面外分量分布、面内位移矢量场以及局域拓扑数计算可以看出，外场驱动下的高阶共振不仅在石墨烯薄膜中形成规则的驻波模态，而且能够在特定相位下诱导具有非平庸拓扑数的局域动力学纹理。这些局域拓扑单元随共振模态周期性排布，构成了石墨烯薄膜受迫共振过程中的动力学拓扑响应。

录用稿件，非最终出版稿

3.6 单周期内局域拓扑结构的演化

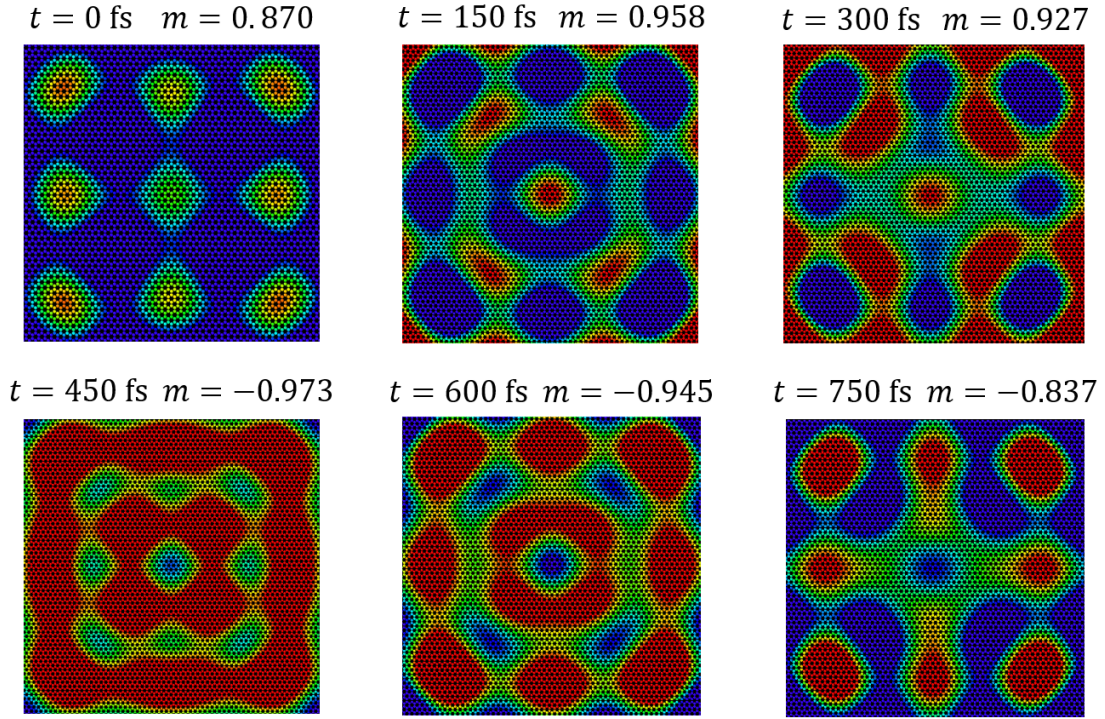


图 5 单周期内局域拓扑结构的演化。图中展示了同一振动周期内不同瞬时构型下的局域矢量场分布及其对应的拓扑数 m 。

Fig. 5. Evolution of the localized topological structure within one oscillation period. The snapshots show the local vector-field configurations and the corresponding topological number m at different times within the same period.

为进一步考察局域拓扑结构在周期性驱动过程中的动态演化，本文选取一个典型振动周期内的多个瞬时构型，对局域矢量场及其拓扑数进行分析，如图 5 所示。图中给出了同一共振周期内不同时间点的局域拓扑结构分布，并在每个子图上标出了对应的时间 t 和局域拓扑数 m 。这里 m 表示在选定局域区域内计算得到的斯格明子数，即 $m \equiv N_{\text{sk}}$ 。

从图 5 可以看出，在一个周期内，局域结构并非始终保持完全相同的瞬时形貌，而是随驱动相位发生连续演化。在 $t = 0$ fs、150 fs 和 300 fs 等时刻，局域拓扑数分别约为 $m = 0.870$ 、0.958 和 0.927，均接近 +1，说明此时矢量场保持了较完整的局域绕转结构。随着相位继续演化，体系进入反向构型，在 $t = 450$ fs、600 fs 和 750 fs 时，局域拓扑数分别约为 $m = -0.973$ 、-0.945 和 -0.837，整体接近 -1。这表明局域拓扑单元会随振动相位发生极性反转，其拓扑数符号也随之改变。

需要指出的是，在正、负拓扑构型之间的转换过程中，体系会经历若干过渡状态，此时局域矢量场的方向分布尚未完全形成稳定的核心-外围反转结构，因此计算得到的拓扑数会偏离严格整数值。尽管如此，在一个周期的大部分相位区间内，局域拓扑数仍保持在接近 ± 1 的范围内，说明该结构并非偶然瞬时涨落，而是在周期性受迫共振过程中可重复出现的动力学拓扑纹理。

因此，本文所称的“稳定”并不是指静态意义下时间不变的拓扑结构，而是指在给定外场驱动和共振条件下，局域拓扑单元能够随振动周期重复出现，并在多数相位时刻保持接近整数的拓扑数。这一结果进一步说明，石墨烯薄膜中的局域斯格明子型纹理具有明显的动力学特征，其形成、反转和再现均与外场驱动下的共振相位密切相关。

4 结论

本文围绕周期性面外驱动下单层正方形石墨烯薄膜的高阶共振与动力学拓扑纹理开展研究，结合连续张紧膜模型与分子动力学模拟，分析了预拉伸石墨烯薄膜的本征频率、高阶驻波模态、面内位移响应以及局域拓扑结构的形成与演化。主要结论如下。

首先，在固定边界和面内预拉伸条件下，单层正方形石墨烯薄膜的面外振动本征频率由薄膜边长、面密度和面内有效预张力共同决定。本文根据分子动力学模拟得到的平衡态面内压强分量估算有效二维预张力，得到 $T \approx 11.62 \text{ N/m}$ 。将其代入连续张紧膜模型后，基模 (1,1) 的理论频率约为 0.163 THz ，与分子动力学轨迹快速傅里叶变换得到的基频 0.16 THz 基本一致。这说明连续张紧膜模型能够较好描述预拉伸石墨烯薄膜的面外共振频率。理论值与模拟值之间的差异主要来源于原子晶格离散性、固定边界区域的有限宽度、预拉伸后应力分布的不均匀性以及高阶振动过程中的非线性效应。

其次，在周期性面外驱动作用下，预拉伸石墨烯薄膜能够形成清晰的多阶受迫驻波图样。随着驱动频率调至更高阶共振附近，薄膜内部的节点线数量增加，振动区域由低阶整体起伏逐渐转变为多个局域振动单元组成的高阶空间调制结构。分子动力学结果进一步表明，尽管外力沿面外方向施加，但面外起伏可通过 Föppl-von Kármán 几何非线性诱导面内位移响应，从而使原子位移场具有完整的三维矢量结构。

进一步地，对三维位移矢量场和速度矢量场的分析表明，高阶共振条件下形成的局域正负核心并非简单的振动极值区域。面外分量 u_z 或 v_z 描述核心与外围区域之间的极性反转，而面内分量 (u_x, u_y) 或 (v_x, v_y) 提供径向过渡结构。通过构造归一化三维矢量场并计算局域斯格明子数，发现这些局域单元具有接近整数的拓扑数：例如六阶共振下速度矢量场中多个局域核心的平均斯格明子数约为 $N_{sk} \approx 0.9923$ 。

该结果说明，外场驱动共振能够在石墨烯薄膜中诱导出具有 Néel 型特征的动力学拓扑纹理。

最后，单周期演化结果表明，这些局域拓扑结构并非静态不变的构型，而是随外驱动相位连续演化。在一个振动周期内，局域拓扑数在多数相位时刻保持接近 ± 1 ，并在正、负构型之间发生极性反转；在相位转换过程中，体系会经历拓扑数偏离整数的过渡状态。因此，本文所称的稳定性主要指局域拓扑单元在周期性受迫共振过程中能够重复出现，并在大部分相位区间内保持接近整数的拓扑数。这一结果表明，石墨烯薄膜中的局域斯格明子型纹理具有明确的动力学特征，其形成、反转和再现均与共振模态和外场相位密切相关。

从具体应用角度看，本文所揭示的多阶共振与局域拓扑纹理可为频率寻址的拓扑编码和拓扑纹理传感提供物理基础。可将四边固定的方形石墨烯薄膜悬置于底栅电极上方，通过周期性静电力输入待处理信号；当驱动频率接近某一高阶共振频率时，相应模态被选择性激发，并形成具有特定数量、位置和符号的局域拓扑单元。由此，可将不同共振频率映射为不同的拓扑码字，并以局域斯格明子数 $N_{sk} \approx +1, -1$ 及过渡态作为可区分的动态状态。结合分区电容电极、锁相激光干涉或扫描测振重建三维矢量场，可实现对拓扑单元阵列的空间读出，从而为频率选择、动态多值编码及拓扑辅助模式识别提供具体实现思路。另一方面，高阶共振频率、拓扑密度分布及局域核心排布还可共同构成拓扑模态指纹。当吸附颗粒、局域缺陷、边界松动或非均匀应变改变薄膜的有效质量和张力分布时，共振频率、节点位置、拓扑核心质心及纹理形状将发生相应变化。通过联合分析频率偏移、拓扑核心位移、主轴方向和局域斯格明子数，可在保持拓扑单元身份可辨识的同时，反演扰动的位置、方向与强度，为石墨烯微质量、应变和缺陷传感提供新的读出维度。需要指出的是，上述方案仍需进一步结合多频驱动、局域扰动和噪声条件，对拓扑纹理的识别稳定性与器件性能进行定量验证。

需要指出的是，本文仍主要聚焦于特定预拉伸、固定边界和外场驱动条件下的概念验证。今后的工作可进一步围绕不同应变幅值、边界条件、驱动力强度、温度效应以及更大尺寸体系展开系统研究，并结合实验可观测的面外振动模态、局域位移场和频率响应特征，进一步验证二维材料共振动力学与拓扑纹理之间的内在联系。

参考文献

- [1] Rößler U K, Bogdanov A N, Pfleiderer C 2006 *Nature* **442** 797
- [2] Bogdanov A N, Panagopoulos C 2020 *J. Phys.: Condens. Matter* **32** 313001

- [3] Nagaosa N, Tokura Y 2013 *Nat. Nanotechnol.* **8** 899
- [4] Fert A, Reyren N, Cros V 2017 *Nat. Rev. Mater.* **2** 17031
- [5] Xu Y F, Vergniory M G, Ma D S, Mañes J L, Song Z D, Bernevig B A, Regnault N, Elcoro L 2024 *Science* **384** eadf8458
- [6] Yu X Z, Onose Y, Kanazawa N, Park J H, Han J H, Matsui Y, Nagaosa N, Tokura Y 2010 *Nature* **465** 901
- [7] Mühlbauer S, Binz B, Jonietz F, Pfleiderer C, Rosch A, Neubauer A, Georgii R, Böni P 2009 *Science* **323** 915
- [8] Heinze S, von Bergmann K, Menzel M, Brede J, Kubetzka A, Wiesendanger R, Bihlmayer G, Blügel S 2011 *Nat. Phys.* **7** 713
- [9] Dong B W, Zhang J Y, Peng L C, He M, Zhang Y, Zhao Y C, Wang C, Sun Y, Cai J W, Wang W H, Wei H X, Shen B G, Jiang Y, Wang S G 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 137507 (in Chinese) [董博闻, 张静言, 彭立聪, 何敏, 张颖, 赵云驰, 王超, 孙阳, 蔡建旺, 王文洪, 魏红祥, 沈保根, 蒋勇, 王守国 2018 物理学报 **67** 137507]
- [10] Xia J, Han Z Y, Song Y F, Jiang W J, Lin L R, Zhang X C, Liu X X, Zhou Y 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 137505 (in Chinese) [夏静, 韩宗一, 宋一凡, 蒋文静, 林留荣, 张希超, 刘晓曦, 周艳 2018 物理学报 **67** 137505]
- [11] Liu Y, Qian Z H, Zhu J G 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 231201 (in Chinese) [刘益, 钱正洪, 朱建国 2020 物理学报 **69** 231201]
- [12] Hu Y F, Wan X J, Wang B 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 136201 (in Chinese) [胡杨凡, 万学进, 王彪 2018 物理学报 **67** 136201]
- [13] Jiang W, Upadhyaya P, Zhang W, Yu G Q, Jungfleisch M B, Fradin F Y, Pearson J E, Tserkovnyak Y, Wang K L, Heinonen O, te Velthuis S G E, Hoffmann A 2015 *Science* **349** 283
- [14] Zhang H, Shao Y T, Chen X, Zhang B H, Wang T Y, Meng F H, Xu K, Meisenheimer P, Chen X Z, Huang X X, Behera P, Husain S, Zhu T C, Pan H, Jia Y L, Settineri N, Giles-Donovan N, He Z H, Scholl A, N'Diaye A, Shafer P, Raja A, Xu C S, Martin L W, Crommie M F, Yao J, Qiu Z Q, Majumdar A, Bellaiche L, Muller D A, Birgeneau R J, Ramesh R 2024 *Nat. Commun.* **15** 3828

- [15] Erb K C, Hlinka J 2020 *Phys. Rev. B* **102** 024110
- [16] Ge H, Xu X Y, Liu L, Xu R, Lin Z K, Yu S Y, Bao M, Jiang J H, Lu M H, Chen Y F 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 144502
- [17] Smirnova D A, Nori F, Bliokh K Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 054003
- [18] Shen Y J, Yuan X C, Zayats A V 2024 *Nat. Photonics* **18** 15
- [19] Cao L Y, Wan S, Zeng Y, Zhu Y F, Assouar B 2023 *Sci. Adv.* **9** eadf3652
- [20] Zhang N, Lei X R, Liu J C, Zhan Q W 2023 *Opt. Express* **31** 30020
- [21] Zhang S, Petford-Long A K, Phatak C 2016 *Sci. Rep.* **6** 31248
- [22] Das S, Tang Y L, Hong Z, Gonçalves M A P, McCarter M R, Klewe C, Nguyen K X, Gómez-Ortiz F, Shafer P, Arenholz E, Stoica V A, Hsu S L, Wang B, Ophus C, Liu J F, Nelson C T, Saremi S, Prasad B, Mei A B, Schlom D G, Íñiguez J, García-Fernández P, Muller D A, Chen L Q, Junquera J, Martin L W, Ramesh R 2019 *Nature* **568** 368
- [23] 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
- [24] Nahas Y, Prokhorenko S, Louis L, Gui Z, Kornev I, Bellaiche L 2015 *Nat. Commun.* **6** 8542
- [25] Zhang M H, Thong H C, Jiang B, Zhang N, Zhao C H, Wu Z H, Zhou T H, Wu C F, Yao F Z, Bi K, Gong W, Xu B, Wang K 2025 *Adv. Mater.* **37** 2413587
- [26] Petrović A P, Psaroudaki C, Fischer P, Garst M, Panagopoulos C 2025 *Rev. Mod. Phys.* **97** 031001
- [27] Yao X Y, Dong S 2022 *Phys. Rev. B* **105** 014444
- [28] Jiang Y J, Low T, Chang K, Katsnelson M I, Guinea F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 046601
- [29] Chatterjee S, Bultinck N, Zaletel M P 2022 *Phys. Rev. B* **105** 235137
- [30] Lu C K, Herbut I F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 266402
- [31] Yin L J, Jiang H, Qiao J B, He L 2016 *Nat. Commun.* **7** 11760
- [32] Lee C, Wei X D, Kysar J W, Hone J 2008 *Science* **321** 385
- [33] Han T W, He P F, Wang J, Wu A H 2010 *New Carbon Mater.* **25** 261 (in Chinese) [韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 吴艾辉 2010 新型炭材料 **25** 261]

- [34] Huang L Y, Han Q 2012 *Sci. Sin.-Phys. Mech. Astron.* **42** 319 (in Chinese) [黄凌燕, 韩强 2012 中国科学: 物理学力学天文学 **42** 319]
- [35] Hui Z X 2018 *J. Ningxia Norm. Univ.* **39** 21 (in Chinese) [惠治鑫 2018 宁夏师范学院学报 **39** 21]
- [36] Han T W, He P F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3408 (in Chinese) [韩同伟, 贺鹏飞 2010 物理学报 **59** 3408]
- [37] Li T T 2018 *M. S. Dissertation* (Urumqi: Xinjiang University) (in Chinese) [李婷婷 2018 硕士学位论文 (乌鲁木齐: 新疆大学)]
- [38] Garcia-Sanchez D, van der Zande A M, San Paulo A, Lassagne B, McEuen P L, Bachtold A 2008 *Nano Lett.* **8** 1399
- [39] Chen C Y, Rosenblatt S, Bolotin K I, Kalb W, Kim P, Kymissis I, Stormer H L, Heinz T F, Hone J 2009 *Nat. Nanotechnol.* **4** 861
- [40] Eichler A, Moser J, Chaste J, Zdrojek M, Wilson-Rae I, Bachtold A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 339
- [41] Bunch J S, van der Zande A M, Verbridge S S, Frank I W, Tanenbaum D M, Parpia J M, Craighead H G, McEuen P L 2007 *Science* **315** 490
- [42] Wan Z, Li C, Liu Y J, Song X F, Fan S C 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 126801 (in Chinese) [万振, 李成, 刘宇剑, 宋雪峰, 范尚春 2022 物理学报 **71** 126801]
- [43] Atalaya J, Isacsson A, Kinaret J M 2008 *Nano Lett.* **8** 4196
- [44] van der Zande A M, Barton R A, Alden J S, Ruiz-Vargas C S, Whitney W S, Pham P H Q, Park J, Parpia J M, Craighead H G, McEuen P L 2010 *Nano Lett.* **10** 4869
- [45] Barton R A, Ilic B, van der Zande A M, Whitney W S, McEuen P L, Parpia J M, Craighead H G 2011 *Nano Lett.* **11** 1232
- [46] Xu Y H, Chen C Y, Deshpande V V, DiRenno F A, Gondarenko A, Heinz D B, Liu S M, Kim P, Hone J 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 243111
- [47] Cadelano E, Palla P L, Giordano S, Colombo L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 235502
- [48] Fasolino A, Los J H, Katsnelson M I 2007 *Nat. Mater.* **6** 858
- [49] Xu Z C, Zhong W R 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 083401 (in Chinese) [徐志成, 钟伟荣 2014 物理学报 **63** 083401]

- [50] Zhou N, Chen W N, Sun W J, Sheng Z Q, Wu H W 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 042204
- [51] Fogler M M, Guinea F, Katsnelson M I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 226804
- [52] Bennett D, Chaudhary G, Slager R J, Bousquet E, Ghosez P 2023 *Nat. Commun.* **14** 1629
- [53] Wang S X, Li W, Deng C G, Hong Z J, Gao H B, Li X L, Gu Y L, Zheng Q, Wu Y J, Evans P G, Li J F, Nan C W, Li Q 2024 *Nat. Commun.* **15** 1374
- [54] Li W, Wang S X, Peng P, Han H J, Wang X B, Ma J, Luo J L, Liu J M, Li J F, Nan C W, Li Q 2025 *Nat. Phys.* **21** 1965
- [55] Wang B, Che Z Y, Cheng C, Tong C L, Shi L, Shen Y J, Bliokh K Y, Zi J 2025 *Nature* **638** 394
- [56] Zhang C Z, Wei T Y, Wang Y J, Li J G, Tang J K, Zhang D B 2023 *J. Beijing Norm. Univ. (Nat. Sci.)* **59** 956 (in Chinese) [张成铸, 卫天宇, 王英杰, 李建高, 唐锦锟, 张东波 2023 北京师范大学学报(自然科学版) **59** 956]
- [57] Wang J, Gao R Z, Tang S Y, Dong S Z, Liang M C, Yang J, Yang H Y, Nie Z Y, Liang D S, Wang Q M, Wang D X, Taazayet W B, Zhang S J, Huang H B, Nan C W 2025 *Sci. Adv.* **11** eadu6223
- [58] Brouwer P W 1998 *Phys. Rev. B* **58** R10135
- [59] Zhang L, Wan L P, Deng W M, Hou L, Qiu J M, Zou Q S, Wang T B, Zhao D M, Yu T B 2025 *Sci. Adv.* **11** eadx0478

Dynamical Skyrmion Textures in an Externally Driven Resonant Square Graphene Membrane*

ZHU Yiqing¹⁾ ZHAO Enze¹⁾ ZHANG Dongbo^{1)†}

¹⁾ (*School of Physics and Astronomy, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

Abstract

Topological textures in externally driven nonequilibrium systems have attracted increasing interest because they provide a route to generating and manipulating nontrivial vector configurations without relying on static magnetic or ferroelectric ordering. Here, we investigate the resonant dynamics of a monolayer square graphene membrane under periodic out-of-plane driving, with particular emphasis on the emergence, spatial organization, and phase-dependent evolution of localized topological textures in the full three-dimensional displacement and velocity fields. A continuum tensioned-membrane model with fixed boundaries is first established to derive the eigenmodes and eigenfrequency relation. The Föppl–von Kármán geometric nonlinearity is then introduced to clarify how finite out-of-plane deformation induces in-plane strain and displacement components, thereby allowing an initially flexural response to develop into a three-dimensional vector field.

Molecular dynamics simulations are performed for a monolayer square graphene membrane containing 11040 carbon atoms and having a side length of 169.74 Å. The membrane is subjected to a uniform equibiaxial prestrain of 5%, fully relaxed, thermally equilibrated at 300 K, and fixed along finite-width boundary regions. A spatially uniform harmonic force is subsequently applied to the movable atoms in the out-of-plane direction. The effective two-dimensional pretension extracted from the equilibrated in-plane stress is approximately 11.62 N/m. Substituting this value into the continuum model yields a fundamental

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. 13100-311324201501).

† Corresponding author. E-mail: dbzhang@bnu.edu.cn

frequency of approximately 0.163 THz, in close agreement with the value of 0.16 THz obtained from fast Fourier transform analysis of the molecular dynamics trajectories. By tuning the driving frequency to successive resonances, clear standing-wave patterns from low- to high-order modes are obtained. As the resonance order increases, the number of nodal lines grows and the membrane is progressively divided into regularly arranged localized vibration cells.

To determine whether these localized cells possess nontrivial topology, the complete atomic displacement and velocity vectors are reconstructed from the molecular dynamics trajectories, interpolated onto a two-dimensional grid, normalized, and mapped onto the unit sphere. The corresponding local skyrmion density and skyrmion number are then evaluated from the spatial derivatives of the normalized vector fields. At selected resonance phases, both displacement and velocity fields exhibit a continuous core-to-background reversal of the out-of-plane component together with predominantly radial in-plane components, forming Néel-type skyrmion-like textures. These localized units are spatially locked to the high-order standing-wave pattern rather than being ordinary vibration extrema. For the velocity field under the sixth-order resonance, the average local skyrmion number of several cores reaches approximately $N_{\text{sk}} = 0.9923$, demonstrating a nearly integer real-space winding.

Phase-resolved analysis over one oscillation period further reveals that the localized topological units are intrinsically dynamical. Their vector configurations evolve continuously with the driving phase, remain close to $N_{\text{sk}} = +1$ or -1 over most phase intervals, and pass through noninteger transitional states during polarity reversal. The term “stable” therefore refers to reproducible recurrence under sustained resonant driving rather than to a time-independent or intrinsically protected state. These results establish a direct connection among flexural resonance, geometric nonlinearity, and real-space topology in an atomically thin membrane, and demonstrate that high-order mechanical resonance can generate periodically recurring dynamical topological textures. The proposed mechanism also provides a physical basis for frequency-addressable topological encoding, topology-assisted mode recognition, and multimodal mechanical sensing in two-dimensional nanoelectromechanical systems.

Keywords: graphene membranes; resonance; skyrmion textures; molecular dynamics