arXiv:2302.04127v1 [cond-mat.mes-hall] 5 Feb 2023

带有扭转的高次谐波产生：魔角扭转双层石墨烯的全光学表征。

Eduardo B. Molinero[1], *Anushree Datta,[1] M. J. Calderón,[1] E. Bascones,[1] 和 Rui E. F. Silva[1,2,†][1]马德里材料科学研究所（ICMM），西班牙国家研究委员会（CSIC），Sor Juana Inés de la Cruz 3，28049 马德里，西班牙 [2]马克斯·玻恩研究所，马克斯·玻恩街 2A，D-12489 柏林，德国

如果我们将两层石墨烯叠放，并改变它们各自的取向，使其形成一定的扭转角，那么与单层石墨烯相比，就会得到一个截然不同的系统。对于这一扭转角的某个特定值，即魔角，扭转双层石墨烯会呈现出一种其他系统中未曾发现的独特相图。近年来，高次谐波产生光谱学已成功应用于揭示量子材料的电子性质。本研究旨在利用魔角扭转双层石墨烯的非线性光学响应，揭示其电子性质。我们表明，魔角扭转双层石墨烯的能带结构会映射到其高次谐波谱中。具体而言，我们观察到，随着扭转角接近魔角，谐波信号会大幅减弱。我们的结果表明，高次谐波产生可用作光谱学工具，用于测量扭转双层石墨烯的扭转角及其电子性质，为莫尔材料的全光学表征铺平道路。

引言

魔角扭转双层石墨烯（MATBG）的发现 [1, 2] 近年来极大地推动了人们对莫尔量子材料 [3] 的关注。推动这一关注度上升的关键原因之一，是 MATBG 展现出丰富而独特的奇异现象 [4], ，包括关联绝缘体 [1, 5], 、非常规超导性 [2, 5, 6], 、相互作用拓扑相 [7–9], 、铁磁性 [10] 以及奇异金属行为 [11, 12]。其相图与铜氧化物 [13] 和铁基砷化物 [14]超导体中呈现的现象有些相似。例如，随着掺杂量变化，这两类系统都存在被关联绝缘态环绕的超导穹顶。莫尔材料凭借前所未有的原位调控能力，为研究开辟了全新途径；研究人员可以通过电子栅极、应变、磁场、压力或基底取向等手段调节其电子性质。因此，例如，研究人员得以在单个魔角扭转双层石墨烯样品中观察到多种不同的关联绝缘态，包括整数和分数量子陈绝缘体，以及具有或不具有电荷密度调制 [9]的平庸绝缘体。

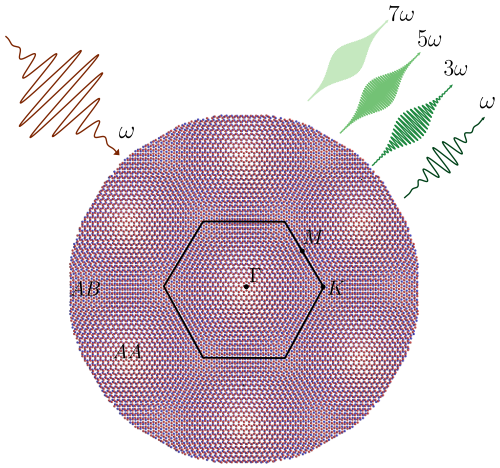

图 1. 莫尔超晶格及激光方向示意图。请注意，$\Gamma - M$ 方向连接 AA 与 AA 区，而 $\Gamma - K$ 方向连接 AA 与 AB/BA区。注意，图中莫尔布里渊区未按比例绘制。

魔角扭转双层石墨烯的关联相，其核心在于存在两个平带 [15–17] ，它们出现在所谓的魔角 $\theta_{\text{mag}} \approx 1.1°$处。随着带宽减小，相互作用所发挥的作用增强 [18, 19] ，丰富而复杂的物理现象随之产生。这些平带的本质远非 trivial，因为它们是由石墨烯每一层中的狄拉克锥杂化形成的 [1, 20]。恰当地表征魔角扭转双层石墨烯的低能能带结构，是揭示关联态起源的关键。另一方面，研究这些平带的电子性质需要新的光谱学工具，因为魔角扭转双层石墨烯巨大的莫尔元胞和二维性，使许多在其他强关联材料中常用的实验技术难以表明许多常用于其他强关联材料的实验技术的适用性。

与此同时，超短激光脉冲与凝聚态系统相互作用的研究也日益受到重视 [21]。这类短脉冲能够在短于电子自身周期的时间内，将系统中的电子激发至非平衡激发态。受此激发影响，电子会发射频率为激光频率数倍（最高达数百倍）的相干辐射，为我们揭示其动力学提供了一种工具。尽管高次谐波产生（HHG）起源于原子与分子物理学 [22], ，但近年来它已成功应用于凝聚态系统，成为一种光谱学工具 [23, 24]。例如，它已能够

观测超快电子-空穴动力学 [25],绝缘体-金属转变 [26, 27], 拓扑转变 [28, 29], 以及光驱动的能带结构 [30]。

高次谐波产生为何能有效地用作光谱学工具，可以从其背后的物理机制得到解释。固体中的高次谐波谱来自两种不同的贡献，即带内电流和带间电流。电子从价带经多光子/隧穿激发后，在导带中的电子（价带中的空穴）因加速运动而产生带内谐波。随后，这对电子—空穴的复合会产生带间谐波。带内贡献通常与低阶谐波相关 [31], ，而高阶谐波则由后一种贡献引起 [32]。在强低频激光场作用下，电荷载流子会漂移穿过整个布里渊区，探索其他光学测试（如二次谐波产生）通常无法观测到的区域及其物理现象 [33]。

在本研究中，我们旨在通过研究魔角扭转双层石墨烯中的高次谐波产生，弥合这两个不同领域之间的鸿沟。值得注意的是，尽管关于扭转双层石墨烯已有大量研究 [34–39], ，其超快动力学却鲜有探索，只有极少数例外[40–43]。然而，据作者所知，此前尚无研究涉及魔角扭转双层石墨烯中的高度非线性光学响应。本文表明，发射光谱揭示了魔角处平带的形成。

结果

如前所述，固体的高次谐波产生极度依赖于系统的电子能带结构 [44, 45], ，以至于可以根据其高次谐波谱重构能带结构 [46]。因此，扭转双层石墨烯的谐波谱必然会反映平带的存在（或缺失）。

本研究旨在证明，可以通过全光学方式表征魔角，为其他表征技术（如扫描隧道显微镜）提供一种替代方案 [16]。我们发现，当扭转双层石墨烯的扭转角接近 θ_{mag}时，高次谐波（从三次谐波开始）的强度会降低数个数量级。此外，研究表明，这种效应对激光场的重要变化和温度变化具有稳健性，因此相较于现有方法，能够提供更稳健的魔角探针。为验证这一假设，我们进行了数值模拟（有关模型和时间传播方案的更多细节，请参见方法部分）。为检验平带对发射光谱的影响，我们将扫描一系列接近 θ_{mag}的扭转角，范围从 1.00° 到 1.35°。在图2中，我们展示了三个不同角度下的能带结构：魔角本身（$\theta = 1.12^\circ$ 在我们的模型中）、高于魔角的一个角度（$\theta = 1.22^\circ$）以及低于魔角的一个角度（$\theta = 1.05^\circ$）。可以看出，随着我们偏离 θ_{mag}，能带会逐渐失去平坦性。

图 3（a）展示了沿 $\Gamma - M$ 方向（见图 1）照射激光时，扭转角不同时扭转双层石墨烯的谐波谱。一个显著特征是：当扭转角接近 θ_{mag}时，奇数非线性谐波的强度受到强烈抑制。为更清楚地了解这种下降的幅度，图 3（b）展示了从三次谐波到七次谐波的谐波产额。尽管扭转角差异很小，这三种谐波的强度却相差数个数量级。这种差异使得即使扭转角彼此接近，也能通过全光学表征识别魔角扭转双层石墨烯；例如，比较1.06° 与 1.12°。

尽管这里描述的过程相当复杂，但其背后的物理直觉并不复杂。在半经典层次，带内电流可以表示为 [32]

$$\mathbf{j}_{\text{intra}}(t) \propto \sum_{\mathbf{k},n} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n(\mathbf{k}(t)), \tag{1}$$

其中，$\varepsilon_n(\mathbf{k}(t))$ 是第 n 条能带的能量，而晶体动量由 $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k} + e\mathbf{A}(t)$给出。因此，对发射光谱贡献最显著的是能带的曲率。由此，当能带开始变平时，谐波强度会降低。尽管这种半经典解释无法涵盖该系统中所有微妙却有趣的物理现象，但它为这一过程提供了一个易于理解的图景。

因此，由于这一现象仅基于平带的存在，所以在激光参数发生重要变化时必定具有鲁棒性。我们的数值模拟证实了这一判断。图 3(c,d)展示了与 2(a,b)相同的量，但对应于沿 $\Gamma - K$ 方向传播的激光，见图 1。 无论激光方向如何，都会出现相同的物理现象；当扭转角接近 θ_{mag}时，发射光谱中会出现幅度达数个数量级的骤降。

如上所示，魔角附近谐波强度的抑制在很大程度上取决于平带的变窄；但是，当动力学过程中涉及其他能带时，情况会怎样？例如，当温度升高导致上导带出现一定占据时，见图 2。直观地说，人们可能会预期，当上能带被占据后，电流将产生显著的带内贡献，因此发射强度的下降会趋于平缓，因为此时谐波信号不再完全源自平带。

为检验这一假设，我们对接近 θ_{mag} 的一系列扭转角进行了宽范围的温度扫描。图4 展示了三次谐波产额随扭转角和温度的变化。温度低于100 K 时，强度的降低主要集中在魔角附近。从表示三次谐波最小值的黑色圆点位置可以看出，最小值位于魔角处（1.12°）。然而，这种在魔角附近的降低

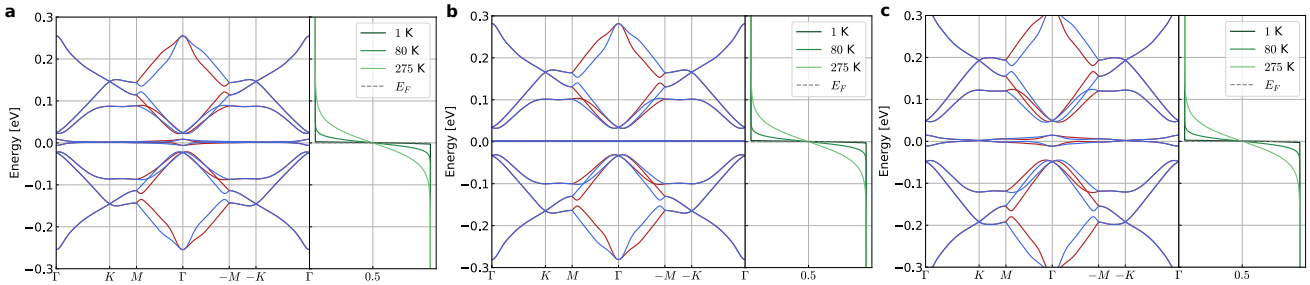

图2. 3种不同扭转角下扭转双层石墨烯的能带结构及其费米-狄拉克分布。**a** 对应于 $\theta = 1.05°$，**b** 对应于$\theta = 1.12°$，**c** 对应于 $\theta = 1.22°$，展示了所谓魔角 $\theta = 1.12°$处平带的出现。红色表示与 K 谷相关的能带结构，蓝线则表示其 K' 对应部分（关于模型的讨论见方法）。

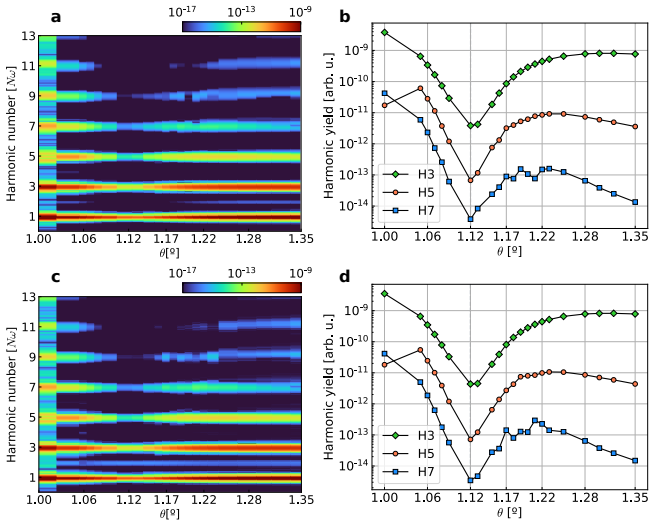

图3. **a** 和**c**，一组扭转角下的高次谐波谱。**b** 和**d**，三次（H3）、五次（H5）和七次（H7）谐波的产率。**a** 和**c** 的结果对应于沿$\Gamma - M$ 方向的激光，而**c** 和**d** 的结果对应于同一激光沿 $\Gamma - K$ 方向的情况。所有计算均在80 K温度下进行。可以看到，所有子图中的谐波信号在魔角附近都明显减弱。

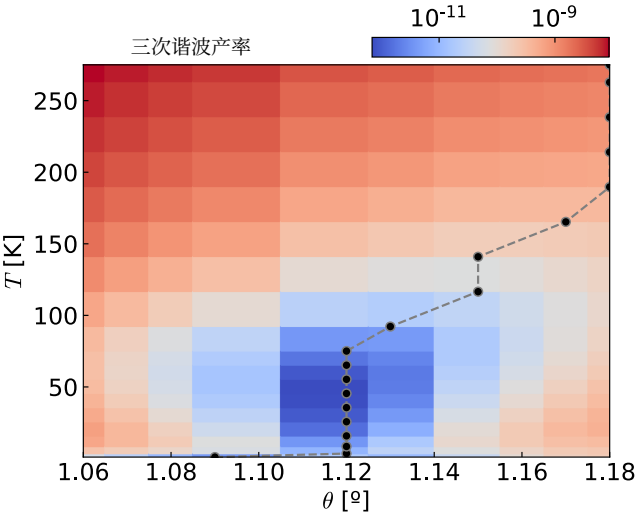

图4. 三次谐波产率随温度的变化。黑色圆圈表示每个扭转角对应的产率最低值。

θ_{mag} 会在温度足以使上能带被占据时消失，且最小值会偏离魔角。即使温度远高于在魔角扭转双层石墨烯（MATBG）中观测到关联绝缘体和超导性的温度，这种效应仍然可见。

对于低频激光脉冲，电流（进而谐波信号）最重要的贡献来自费米能附近的能带；对于扭转双层石墨烯而言，这些能带就是平带。具体来说，选择低于扭转双层石墨烯平带典型带宽的激光频率（此处为 $\omega = 1\text{meV}$），即可避免更高导带带来的伪贡献。如此低的激光频率对我们的研究至关重要，有助于实验检测能带变平所导致的谐波效率下降。与本文所考虑的频率和强度相近的激光频率和强度，已用于对石墨烯单层进行高谐波产生测量 [47], 使所提出的实验在实验上切实可行。

讨论

我们的结果表明，魔角扭转双层石墨烯能带的平坦程度会显著影响其高次谐波谱。能带在接近魔角时变窄，会使发射强度降低数个数量级。光学响应中的这种差异可用于对魔角扭转双层石墨烯进行纯光学研究。这种效应仅 基于平带的存在，并且在很宽的激光参数范围内均成立，甚至不会随激光方向呈现各向异性。此外，我们还证实，这种抑制效应在相当宽的温度范围内一直保持，最高可达 100 K，远高于大多数魔角扭转双层石墨烯实验所采用的超低温区

。尽管如此，我们希望这项工作不仅能作为一种光谱学工具，也能帮助阐明扭曲材料中电子超快动力学背后的机制。

方法

为了建立扭转双层石墨烯（TBG）模型，我们从连续模型出发[15, 17, 20]，取石墨烯费米速度为 v_F =2.34a eV，其中 a 是石墨烯的晶格常数，AA区域与AB区域的层间隧穿比值为 $w_0/w_1 = 0.78$ [48]。采用这些参数，可得魔角为 $\theta \approx 1.12°$。在连续模型中，假设石墨烯的两个谷彼此解耦。TBG的能谱等于各个谷贡献之和。在每个谷中，模型均满足以下对称性： $\mathcal{C}_3$、$\mathcal{C}_2\mathcal{T}$（涉及时间反演对称性 $\mathcal{T}$与 $\mathcal{C}_2$的组合操作），以及保持谷不变的镜像对称性 M。这里， $\mathcal{C}_3$ 和 $\mathcal{C}_2$分别涉及绕垂直于TBG的轴进行的120° 和 180° 旋转，而 M 是绕平行于TBG的轴进行的交换层的二重旋转。随后，我们调整了TBG的Wannier函数模型，该模型每个谷含有8个轨道[49, 50]，用以近似连续模型得到的能带结构模型。由此得到的紧束缚模型包含的跃迁范围可达10个莫尔晶格常数。该Wannier模型在每个谷中均满足连续模型的对称性。所有计算中，我们通过为每个温度设定化学势，假设TBG未掺杂。由于我们关注双层的光学响应，需要对位置算符 **r**作出某种形式的假设，并将讨论限制在对角近似 [45, 51]内。

只有纳入两个谷时，反演对称性和时间反演对称性才成立。每个谷的偶次谐波谱都是有限的，但将两个谷的贡献相加后，偶次谐波谱便消失。

通过求解半导体Bloch方程（SBE）进行含时计算，并采用最适用于上述模型的最大局域Wannier函数 [52]，遵循 [45] 中提出的形式体系。在本研究中，我们考察了扭转双层石墨烯与微波区域内相对较弱的 （$E_0 = 1 \cdot 10^5$ V/m） 脉冲（$\omega = 1$ meV） 的相互作用，脉冲具有高斯包络，半高全宽为 23.5 ps。选择这一光学区域，是为了适当地隔离平带，即避免平带与上导带之间发生跃迁。否则，此类过程会对光谱产生显著的带间贡献。尽管如此，物理行为对于场振幅和频率的变化都具有稳健性。需要指出的是，尽管场振幅看起来较弱，但对于魔角扭转双层石墨烯（MATBG），由于系统带宽较窄，该振幅实际上相对较强。约化密度矩阵在Wannier规范下使用 100×100 Monkhorst–Pack网格进行传播，时间步长为 2.41 fs。我们确认，对于所有数值参数，动力学演化均已充分收敛。退相干项 [32, 45] 设为 $T_2 = 1000$ fs $\approx \Omega/4$，其中 Ω 为激光周期。不过，我们确认，即使改变 T_2 的取值，所得结果也相同。

致谢

E. B. M. 和 R. E. F. S. 感谢获得“La Caixa”基金会（ID 100010434）提供的奖学金 LCF/BQ/PR21/11840008 的资助。本研究获得 MCIN/AEI/10.13039/501100011033 资助的项目 PID2021-122769NB-I00 的支持。

* ebmolinero@gmail.com
† ruiefdasilva@gmail.com; rui.silva@csic.com

[1] Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, 和 P. Jarillo-Herrero, 《自然》556, 80（2018年）。[2] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, 和 P. Jarillo-Herrero, 《自然》556, 43（2018年）。[3] E. Y. Andrei, D. K. Efetov, P. Jarillo-Herrero, A. H. Mac- Donald, K. F. Mak, T. Senthil, E. Tutuc, A. Yazdani, 和 A. F. Young, 《自然综述：材料》6, 201（2021年）。[4] E. Y. Andrei 和 A. H. MacDonald, 《自然·材料》19, 1265（2020年）。[5] X. Lu, P. Stepanov, W. Yang, M. Xie, M. A. Aamir, I. Das, C. Urgell, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Zhang, A. Bachtold, A. H. MacDonald, 和 D. K. Efetov, 《自然》574, 653（2019年）。[6] M. Yankowitz, S. Chen, H. Polshyn, Y. Zhang, K. Watanabe, T. Taniguchi, D. Graf, A. F. Young, 和 C. R. Dean, 《科学》363, 1059（2019年）。[7] K. P. Nuckolls, M. Oh, D. Wong, B. Lian, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. A. Bernevig, 和 A. Yazdani, 《自然》588, 610（2020年）。[8] Y. Choi, H. Kim, Y. Peng, A. Thomson, C. Lewandowski, R. Polski, Y. Zhang, H. S. Arora, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Alicea, 和 S. Nadj-Perge, 《自然》589, 536（2021年）。[9] Y. Xie, A. T. Pierce, J. M. Park, D. E. Parker, E. Khalaf, P. Ledwith, Y. Cao, S. H. Lee, S. Chen, P. R. Forrester, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Vishwanath, P. Jarillo-Herrero, 和 A. Yacoby, 《自然》600, 439（2021年）。[10] A. L. Sharpe, E. J. Fox, A. W. Barnard, J. Finney, K. Watan- abe, T. Taniguchi, M. A. Kastner, 和 D. Goldhaber-Gordon, 《科学》365, 605（2019年）。[11]Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K.Watanabe, T.Taniguchi, T. Senthil, 和 P. Jarillo-Herrero, 《物理评论快报》124, 076801（2020年）。[12] A. Jaoui, I. Das, G. Di Battista, J. Díez-Mérida, X. Lu, K. Watanabe, T. Taniguchi, H. Ishizuka, L. Levitov, 和 D. K. Efetov, 《自然·物理》18, 633（2022年）。[13] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, 和 J. Zaanen, 《自然》518, 179（2015年）。

[14] R. M. Fernandes, A. I. Coldea, H. Ding, I. R. Fisher, P. J. Hirschfeld, 和 G. Kotliar, 《自然》601，35（2022年）。[15] R. Bistritzer 和 A. H. MacDonald, 《美国国家科学院院刊》108，12233（2011年）。[16] S. Lisi, X. Lu, T. Benschop, T. A. de Jong, P. Stepanov, J. R. Duran, F. Margot, I. Cucchi, E. Cappelli, A. Hunter, A. Tamai, V. Kandyba, A. Giampietri, A. Barinov, J. Jobst, V. Stalman, M. Leeuwenhoek, K. Watanabe, T. Ta niguchi, L. Rademaker, S. J. van der Molen, M. P. Allan, D. K. Efetov, 和 F. Baumberger, 《自然·物理》17，189（2021年）。[17] J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, 和 A. H. Cas- tro Neto, 《物理评论快报》99，256802（2007年）。[18] Y. Choi, J. Kemmer, Y. Peng, A. Thomson, H. Arora, R. Pol- ski, Y. Zhang, H. Ren, J. Alicea, G. Refael, F. von Op- pen, K. Watanabe, T. Taniguchi, 和 S. Nadj-Perge, 《自然·物理》15，1174（2019年）。[19]A. Datta, M. Calderón, A. Camjayi, 和 E. Bascones, “扭转双层石墨烯中无对称性破缺的重准粒子与级联”，arXiv:2301.13024。[20] P. San-Jose, J. González, 和 F. Guinea, 《物理评论快报》108，216802（2012年）。[21] S. Y. Kruchinin, F. Krausz, 和 V. S. Yakovlev, 《现代物理评论》90，021002（2018年）。[22] F. Krausz 和 M. Ivanov, 《现代物理评论》81，163（2009年）。[23] S. Ghimire 和 D. A. Reis, 《自然·物理》15，10（2018年）。[24] E. Goulielmakis 和 T. Brabec, 《自然·光子学》16，411（2022年）。[25] G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thiré, B. E. Schmidt, F. Lé- garé, C. R. McDonald, T. Brabec, 和 P. B. Corkum, 《自然》522，462（2015年）。[26] R. E. F. Silva, I. V. Blinov, A. N. Rubtsov, O. Smirnova, 和 M. Ivanov, 《自然·光子学》12，266（2018年）。[27] M. R. Bionta, E.Haddad, A. Leblanc, V. Gruson, P. Lassonde, H. Ibrahim, J. Chaillou, N. Émond, M. R. Otto, A. Jiménez-Galán, R. E. F. Silva, M. Ivanov, B. J. Siwick, M. Chaker, 和 F. m. c. Légaré, 《物理评论：研究》3，023250（2021年）。[28] R. E. F. Silva, Á. Jiménez-Galán, B. Amorim, O. Smirnova, 和 M. Ivanov, 《自然·光子学》13，849（2019年）。[29]A. Chacón, D. Kim, W. Zhu, S. P. Kelly, A. Dauphin, E. Pisanty, A. S. Maxwell, A. Picón, M. F. Ciappina, D. E. Kim, C. Ticknor, A. Saxena, 和 M. Lewenstein, 《物理评论B辑》102，134115（2020年）。[30] A. J. Uzan-Narovlansky, Á. Jiménez-Galán, G. Orenstein, R. E. F. Silva, T. Arusi-Parpar, S. Shames, B. D. Bruner, B. Yan, O. Smirnova, M. Ivanov, 和 N. Dudovich, 《自然·光子学》16，428（2022年）。[31]P. Jürgens, B. Liewehr, B. Kruse, C. Peltz, D. Engel, A. Husakou, T. Witting, M. Ivanov, M. J. J. Vrakking, T. Fennel, and A. Mermillod-Blondin, 《自然·物理》16，1035（2020年）。[32] G. Vampa、C. R. McDonald、G. Orlando、D. D. Klug、P. B. Corkum 和 T. Brabec, 《物理评论快报》113，073901（2014）。[33] R. W. Boyd, 《非线性光学》（Academic press，2008）。[34] B. A. Bernevig、Z.-D. Song、N. Regnault 和 B. Lian, 《物理评论B辑》103，205411（2021年）。[35] Z.-D. Song、B. Lian、N. Regnault 和 B. A. Bernevig, 《物理评论B辑》103，205412（2021年）。[36] B. A. Bernevig、Z.-D. Song、N. Regnault 和 B. Lian, 《物理评论B辑》103，205413（2021年）。[37] B. Lian、Z.-D. Song、N. Regnault、D. K. Efetov、A. Yazda ni 和 B. A. Bernevig, 《物理评论B辑》103，205414（2021年）。[38] B. A. Bernevig、B. Lian、A. Cowsik、F. Xie、N. Regnault 和 Z.-D. Song, 《物理评论B辑》103，205415（2021年）。[39] F. Xie、A. Cowsik、Z.-D. Song、B. Lian、B. A. Bernevig 和 N. Regnault, 《物理评论B辑》103，205416（2021年）。[40] T. N. Ikeda, 《物理评论：研究》2，032015（2020年）。[41] M. S. Mrudul 和 G. Dixit, 《物理评论B辑》103，094308（2021年）。[42] M.Du、C. Liu、Z. Zeng 和 R. Li, 《物理评论A辑》104，033113（2021年）。[43] F. Yang、W. Song、F. Meng、F. Luo、S. Lou、S. Lin、Z. Gong、J. Cao、E. S. Barnard、E. Chan、L. Yang 和 J. Yao, 《Matter》3，1361（2020年）。[44] N. Tancogne-Dejean、O. D. Mücke、F. X. Kärtner 和 A. Ru- bio, 《物理评论快报》118，087403（2017年）。[45] R. E. F. Silva、F. Martín 和 M. Ivanov, 《物理评论B辑》100，195201（2019年）。[46] G. Vampa、T. J. Hammond、N. Thiré、B. E. Schmidt、F. Lé- garé、C. R. McDonald、T. Brabec、D. D. Klug 和 P. B. Corkum, 《物理评论快报》115，193603（2015年）。[47] H. A. Hafez、S. Kovalev、J.-C. Deinert、Z. Mics、B. Green、N. Awari、M. Chen、S. Germanskiy、U. Lehnert、J. Te- ichert、Z. Wang、K.-J. Tielrooij、Z. Liu、Z. Chen、A. Narita、K. Müllen、M. Bonn、M. Gensch 和 D. Turchinovich, 《自然》561，507（2018年）。[48] N. N. T. Nam 和 M. Koshino, 《物理评论B辑》96，075311（2017年）。[49] S. Carr、S. Fang、H. C. Po、A. Vishwanath 和 E. Kaxiras, 《物理评论：研究》1，033072（2019年）。[50] M. J. Calderón 和 E. Bascones, 《物理评论B辑》102，155149（2020年）。[51] J. I. nez Azpiroz、F. de Juan 和 I. Souza, 《SciPost物理》12，070（2022年）。[52] N. Marzari、A. A. Mostofi、J. R. Yates、I. Souza 和 D. Van- derbilt, 《现代物理评论》84，1419（2012年）。