arXiv:2611.32229v1 [cond-mat.mes-hall] 24 Nov 2026

扭转菱面体多层石墨烯中的拓扑窄带

Alejandro Jimeno-Pozo，[1, 2, 3, *] Danna Liu，[2,3] Francisco Guinea，[1,4] 和 Pierre A. Pantaleón[2, 3, 4, †]1多诺斯蒂亚国际物理中心，*Paseo Manuel de Lardizábal 4*，圣塞瓦斯蒂安 *20018*，西班牙2理论物理中心，海南大学，海口 *570228*，中国3物理与光电工程学院，海南大学，海口 *570228*，中国4 *IMDEA* 纳米科学研究所，*C/ Faraday 9*，*28049* 马德里，西班牙

莫尔石墨烯多层结构通过堆垛、扭转和静电调控，为构筑原子级薄的拓扑窄能带提供了平台。近期对扭转菱方石墨烯的实验揭示了由菱方层数决定的高陈数层级。要对这一层级进行微观描述，需要将理想的手性图像与真实的电子结构联系起来。在此，我们表明，扭转单层–N层菱方石墨烯的两个中心莫尔能带，源于单层狄拉克锥与位于莫尔布里渊区相对两个角点的菱方表面态之间的杂化。增加 N 会使这些能带逐渐变窄，而反转位移场则会使其波函数权重在扭转界面与远端表面之间转移。在谱隔离区间内，这种重新分布会使下能带在陈数 $\mathcal{C} = N$ 和 $\mathcal{C} = -1$之间切换。投影表面理论展示了界面隧穿如何通过菱面体堆垛中的虚传播而得到修饰，从而解释了由电场选择的陈数层级以及实空间电荷纹理反复出现的三重结构。这些结果确立了层数和位移场作为石墨烯莫尔异质结构中能带平坦度、空间极化和拓扑的互补纳米尺度调控手段。

I. 引言

莫尔石墨烯多层结构提供了一个高度可调的平台，其中能带平坦度、相互作用和拓扑性质可通过扭转角、堆垛结构、载流子密度和位移场加以控制。这种可调性促成了魔角扭转双层石墨烯中的关联绝缘态和超导性 [1–6], 轨道磁性与反常霍尔响应 [7, 8], ，以及若干石墨烯莫尔体系中电控的陈相 [9–17]。综述和早期扭转电子学实验强调，扭转角、堆垛手性和电场为组织关联相与拓扑相提供了彼此独立的调控手段 [18–26]。

扭转单层–双层石墨烯是更广泛的单层–多层体系中的首个成员，也已展现出层特征为何至关重要。实验揭示了可由电场调控的范霍夫奇点、关联金属态与绝缘态、轨道磁序、反常霍尔效应，以及可通过电场切换的陈相 [27–31]。尤其是，扭转单层–双层石墨烯中轨道磁化的电学反转表明，栅极电场的作用不止于调节带宽：一旦相互作用使谷自由度发生极化，栅极电场还可以改变相关的谷陈数扇区 [28]。这与低能能带的层分辨结构直接相关，因为轨道响应的符号和大小取决于陈数特征以及占据谷所承载的轨道纹理。相关研究表明，自旋–轨道耦合还能进一步重组扭转单层–双层石墨烯的关联态 [32]。扭转双双层石墨烯则提供了一个互补的多层实例：位移场能够分离出平带，并稳定关联绝缘态和自旋极化相 [33–39]。研究预测，相关的单层–三层结构也可能具有孤立平带，尤其是ABC三层结构 [40],；而交替扭转及一般多层理论则表明，层数和堆垛手性能够决定平带与谷陈数的组织方式 [41–46]。

近期实验已将这一思路拓展至单层–多层和菱方石墨烯平台。研究者在扭转菱方和混合多层体系中发现了高陈数量子反常霍尔态、电可调轨道磁性以及相互作用重构拓扑相 [47–54]。特别是，扭转单层–多层菱方石墨烯被认为与由菱方堆垛层数控制的高陈数层级相关 [49], ，而扭转单层–五层和扭转菱方三层–双层体

验表明，相同的层数、位移场与拓扑组合能够产生大陈数反常霍尔响应和分数量子拓扑响应 [48, 51]。这些实验确立了相关现象，但也留下了一个微观理论问题：N 层菱方表面态的高阶手性如何编码到莫尔能带中？位移场又如何切换这些能带的层属性和陈数特征？解决这一问题对于理解电控高陈数莫尔能带及其相关的多通道手性边缘输运如何从

*alejandro.jimenopozo@physics.uu.se；现地址：乌普萨拉大学物理与天文学系，Box 524，75120，瑞典乌普萨拉。

† pierre.pantaleon@hainanu.edu.cn

底层莫尔电子结构中涌现至关重要。

这些体系的一个核心启示是，电场不仅能调节带宽，还能改变低能态的层与子晶格特征。在扭转单层–双层石墨烯的纳米角分辨光电子能谱测量中，这一现象已得到直接观测：反转电场会选择性地增强类单层或类双层的谱权重 [55]。小扭角单层–多层体系还会出现重构、孤子网络和应变调控的莫尔纹理 [56, 57]。当双层被 N层菱面体堆垛取代时，这种由电场控制的层极化原理会变得更加丰富。在理想化的严格手性近似中，若忽略更远邻层间跃迁和同亚晶格莫尔隧穿，两个低能表面位点便通过一个与 $|\boldsymbol{q}|^N$成正比的 N阶振幅耦合。三角翘曲和次近邻层跃迁会引入低阶虚传播路径，同时保留低能扇区的表面起源 [58–60]。下文的路径投影部分将介绍精确的模型层级。因此，增大 N 会增强形成窄表面派生能带的趋势，不过额外跃迁过程会重构其具体色散。对未扭转菱面体多层材料开展的扫描隧道显微镜/扫描隧道谱（STM/STS）研究，已直接分辨出这种依赖层数的能带变平现象 [61]。理论计算还预测，表面局域态密度中的杂质诱导干涉携带着关于层数和布洛赫态结构的信息 [62]。

本文研究了扭转的 $N+1$ 层菱方石墨烯体系，该体系由一层旋转后的石墨烯单层置于 N 层 ABC 堆垛薄层之上形成。我们发现，低能结构由位于莫尔布里渊区相对两个角点的不等价扇区之间的杂化所决定：一侧是位于K' 的单层狄拉克锥，另一侧是位于 K 的菱方表面扇区。我们计算了能带结构、层投影谱权重、实空间电荷密度，以及作为层数、扭转角和位移场函数的陈数相图。进一步地，我们推导出一种路径投影低能理论，其中两个菱方表面之间的传播由相干振幅表示，该振幅记为 X_N ，并将在下文推导；它结合了普通的狄拉克传播、三角翘曲和次近邻层间跃迁。其严格手征极限退化为熟知的 N 阶表面耦合，并明确展现出它与单位绕数单层狄拉克锥之间的竞争关系。该框架揭示了实验中高陈数层级背后的微观机制：增大 N 会增强能带变平，位移场会交换两个中心能带的扭转界面特征和远端表面特征，而手征表面极限则组织起陈数层级以及电荷纹理中反复出现的角向结构。在两个中心能带相互接触、但仍与远端能带保持隔离的区域内，拓扑性质归属于完整的孤立双能带子空间，正如下文拓扑部分所定义。

II. 结果

A. 扭转单层–菱方石墨烯

我们考虑一种扭转多层石墨烯结构：将一个石墨烯单层置于由 N 层菱方（即 ABC 堆垛）石墨烯构成的薄层之上，总计 $N+1$ 层。我们还纳入 $N=2$，即 AB 堆垛双层，作为最简单的参照体系。只有当 $N\geq 3$时，菱面体堆垛才与伯纳尔堆垛有所区别。菱方堆垛薄层包含第 $l=1$、.....、N 层，其子晶格为 A_l 和 B_l，排列方式使得 B_l 与 A_{l+1} 垂直对齐。旋转单层标记为 $l=0$。顶层单层旋转了 $+\theta/2$，而菱方堆垛薄层旋转了$-\theta/2$，如图 1 所示。莫尔倒格矢为 $\boldsymbol{G}_i=\boldsymbol{b}_i^{(0)}-\boldsymbol{b}_i^{(1)}$，其中 $i=1,\ 2$。按照图 1 所示的约定，旋转单层的狄拉克锥位于莫尔布里渊区的 K' 点，而菱面体堆垛的低能接触点位于 K 点。因此，受莫尔势杂化的两个低能对象并不等价：一个是单层狄拉克锥，另一个是 N 阶菱方能带接触点。它们在莫尔布里渊区相对角点处的分离度，是下文所讨论能带重构背后的几何要素。

单谷连续哈密顿量采用层块形式写为

$$H(\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix} H_{00}(\boldsymbol{q}) & T_{01}(\boldsymbol{r}) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ T_{01}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) & H_{11}(\boldsymbol{q}) & U_{12}(\boldsymbol{q}) & W_{13} & \cdots & 0 \\ 0 & U_{21}(\boldsymbol{q}) & H_{22}(\boldsymbol{q}) & U_{23}(\boldsymbol{q}) & \ddots & \vdots \\ 0 & W_{13}^{\dagger} & U_{32}(\boldsymbol{q}) & H_{33}(\boldsymbol{q}) & \ddots & W_{(N-2)N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & U_{(N-1)N}(\boldsymbol{q}) \\ 0 & 0 & \cdots & W_{(N-2)N}^{\dagger} & U_{N(N-1)}(\boldsymbol{q}) & H_{NN}(\boldsymbol{q}) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

这里 $T_{01}(\boldsymbol{r})$ 是莫尔势，也是唯一直接耦合旋转单层与第一层的项；W_{13} 则直接将旋转单层与第一层耦合的那一层

菱方层。块$U_{l,l+1}$ 描述菱方堆垛薄层内部的最近邻层间跃迁，而$W_{l,l+2}$包含次近邻层间耦合 γ_2，且仅在 $N \geq 3$ 时存在。垂直位移场的作用通过外层电势差 V表示，其中旋转单层上的位点能为 $-V/2$，远端表面 L_N上的位点能为 $+V/2$。对于适中的势差，这种外层分布可作为合理的低能近似，其依据是菱方态的表面特征以及ABC多层结构中的强屏蔽 [63, 64]。它保留了旋转单层与远端菱方表面之间的有效电势差。自洽静电处理可进一步修正内部势分布，以及实验位移场与模型势V之间的关系。S9节表明，将外层分布替换为沿所有层呈线性势降的均匀场后，陈数组织结构仍得以保留。 H_{ll}、 $U_{l,l+1}$、 $W_{l,l+2}$和 T_{01}的具体形式，以及所有参数值和平面波实现，均见方法和S1节。

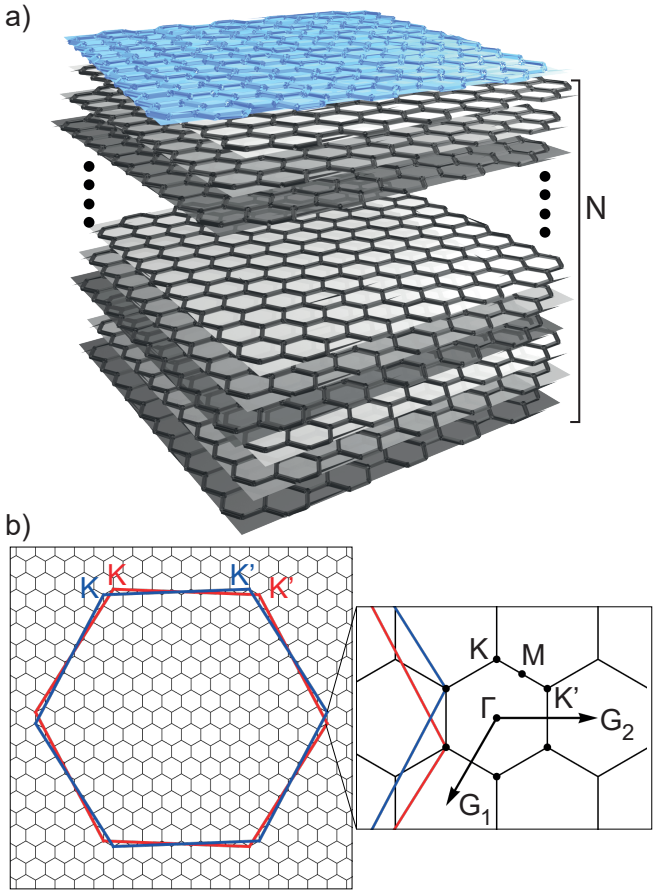

图 1. **扭转单层–菱方石墨烯。a**，扭转（$N+1$）层菱方石墨烯的示意图，由一个 N 层 ABC 堆垛多层石墨烯和一个以小角度 θ 旋转的顶部单层组成。**b**，莫尔布里渊区的倒易空间构造。顶部的 K 和 K' 点与下方多层结构之间的相对旋转生成莫尔倒易晶格矢量 $\boldsymbol{G}_1$ 和 $\boldsymbol{G}_2$，并定义高对称点 Γ、 K、 K' 和 M。

B. 莫尔耦合将中心能带权重转移至菱面体堆垛

通过监测开启莫尔耦合时本征态的层特征，可以直接追踪中心能带的形成过程。我们将界面隧穿缩放为 $T_{01} \to \alpha T_{01}$，其中 $\alpha = 0$ 表示解耦单层和菱方堆垛薄层，而 $\alpha = 1$表示物理系统 [65]。对于每个能带和动量，通过将在方法中定义的平面波展开中的本征矢分量对准子晶格和莫尔谐波求和，可以得到层权重。在$\alpha = 0$处，单层狄拉克锥和菱方能带仍保有彼此独立的层特征。开启 α 后，单层仅直接与第一层菱方堆垛层 L_1耦合，但ABC层状薄片的低能态是表面态，其振幅分布于界面侧和远端表面之间 L_N。因此，界面莫尔隧穿可以将波函数权重重新分布到整个菱方堆垛薄层中，而不是将杂化限制在扭转界面的两层之间。

图 2 展示了单层与 AB 堆垛双层（$N = 2$）在 $\theta = 1.05°$ 下耦合时的这一演化过程。这一最简单的参考系统使得波函数权重的重新分布
能够随着莫尔耦合的增强而得到清晰追踪。主要的垂直跃迁将 B_1 与 A_2 杂化成一个高能二聚体，使 A_1 和 B_2 分别成为界面处和远端表面的低能边界位点。在 $\alpha = 0$ 下，单层狄拉克锥与 AB 双层能带彼此交叉但不发生杂化，并且因其层特征而保持清晰分离。随着 α 增大，当未耦合的分支彼此接近时，会出现避免交叉，相应的本征态交换的是层权重，而不是发生刚性的能量偏移。因此，中心能带逐渐演化为混合的单层–双层态：其单层贡献减小，同时越来越大比例的波函数先转移到双层界面区域，随后转移到远端表面 L_2。在物理耦合 $\alpha = 1$下，两个中心能带都不再对应于某个单独的孤立层；相反，它们的层组成反映了单层狄拉克锥与 AB 双层的双边界低能区域之间的相干杂化。尽管权重的具体分布会随层数变化（见 S3 节），其基本机制保持不变：莫尔隧穿局域作用于扭转界面，而内部 ABC 耦合则将这种杂化传递至远端菱方表面。因此，界面到远端表面的转移是扭转单层–

菱方晶系 [66]。

C. 层数和位移场重塑完整模型能带

接下来，我们分析完整连续谱随菱方层数和位移场的变化。图 3 展示了在固定扭转角 $\theta = 1.05^\circ$ 以及 V 的代表性取值下、从 $N = 2$到 $N = 7$的能带结构。在零位移场下，随着菱方层数增加，两个中心能带逐渐变窄。这一行为反映了孤立 ABC 堆垛已知的低能表面结构：界面位点与远端边界位点只能通过跨越中间各层的传播相互作用，因此，增加 N 会抑制它们之间的低动量耦合，使表面衍生色散逐渐变软。下面的路径投影部分将通过把低能边界位点与强烈杂化的内部二聚体分离开来，对这一论述进行明确推导。与旋转单层发生杂化后，莫尔中心能带继承了这种逐渐变软的菱方表面色散。与此同时，层数增加会引入更多邻近能带，并减小它们与中心流形之间的能量间隔。因此，中心能带逐渐变平并不一定意味着其与远端能带的隔离性有所提高。

在本文采用的屏蔽近似中，位移场通过施加在最外侧两层上的在位势来表示：旋转单层 L_0 的能量移动 $-V/2$，远端菱方表面 L_N 的能量移动 $+V/2$，而内部层的势设为零。因此，电场改变了旋转单层、扭转界面层 L_1与远端表面 L_N之间的静电失谐。由于中心能带是这些扇区的相干混合态，改变 V 并不会使整个能谱发生刚性位移。相反，它会改变与邻近能带之间的杂化、避免交叉、带宽和能隙，从而产生图 3 中所示的非刚性能带重构。

层加权表示使这种重构清晰可见。每一层对应的基底颜色标示在图的底部，而颜色混合、线宽和不透明度约定则在方法中进行了定量定义。在下文中，扭转界面特征 表示其主要贡献来自旋转单层 L_0和第一层菱方堆垛层 L_1的态，而远端表面特征 表示来自最外侧菱方表面 L_N的贡献较大。

对于 $V = +50$ 毫电子伏（图 3 中间一行所示），上中心能带主要集中在远程菱方表面 L_N，而下中心能带则主要呈现扭转界面特征，源于 L_0 和 L_1的混合。两条能带都并非与单一纯层相关联。它们的组成会沿莫尔布里渊区变化，因为不同的未耦合分支会彼此接近并发生杂化。尤其是在 K' 点附近，名义上由界面主导的下中心能带会显现出显著的远程表面贡献。这种动量依赖的重新分布表明，位移场会使中心能带极化，同时不会抑制界面与远程菱方表面之间的相干杂化。

当 $V = -50$ 毫电子伏时，如底排所示，层极化发生反转。下中心能带及其附近的下方远端能带主要呈现远端表面特征，而上中心能带及其附近的上方能带则主要集中在扭转界面扇区。因此， V 的符号决定远表面权重主要由中心能带流形的上半部还是下半部承载。这种切换模式源于 L_0 和 L_N产生的相反静电位移。尽管如此，V取相反值时的谱并非彼此精确的粒子-空穴映像。真实的跃迁结构、静电势对相关表面态的作用并不等价，以及缺乏精确的粒子-空穴对称性，都会使两种电场方向下的带宽、避免交叉和隔离能隙各不相同。

这些按层加权的谱，为扭转单层–双层石墨烯及相关系统中观测到的电切换现象提供了微观联系；在这些系统中，位移场可调控范霍夫奇点、关联相、轨道磁性、反常霍尔响应以及电可切换拓扑 [27–31, 55]。本研究确定了其背后的单粒子机制：反转 V 会使上、下中心能带承载的界面特征与远端表面特征互换。当这种层交换与谷极化以及电场诱导的占据能带陈数变化相结合时，便为电切换轨道磁化和拓扑响应提供了一条微观途径。下文将分析相应的陈相。

D. 投影表面理论阐释了该机制

为推导上文所采用的表面传播机制，我们现在构建一种低能理论，在保留主要现实传播通道的同时，移除高能内部态。在 ABC层状薄片内部，主导的垂直跃迁 γ_1 会强烈杂化每一对对齐的 B_l 和 A_{l+1}。这些二聚化对构成高能扇区，而位于扭转界面处的边界位点 A_1 以及位于远端表面的 B_N 则保留在低能扇区中。我们将最近层同亚晶格跃迁 γ_4 设为零，但保留 γ_1、三角翘曲跃迁 γ_3、次近邻层间跃迁 γ_2以及两个莫尔振幅 u和 u'。这一投影构造将参考文献 [59]中的菱面体路径展开推广至与两个表面自由度耦合的扭转单-

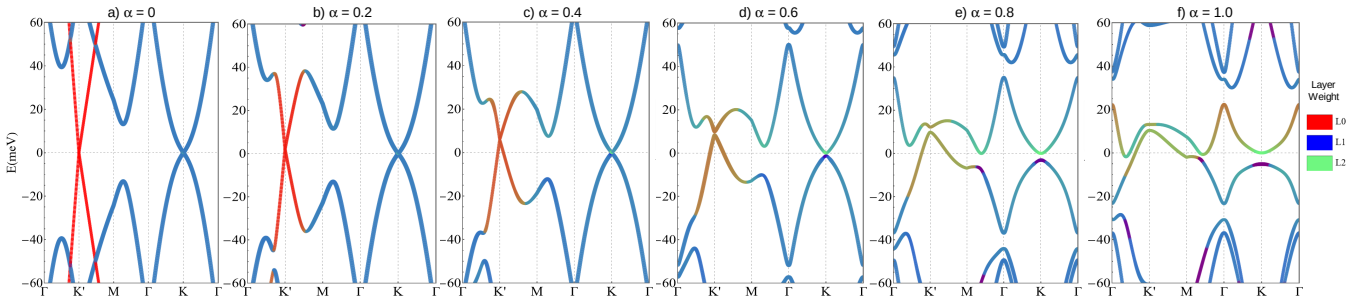

图 2. **莫尔耦合驱动的层杂化。** 单层与 AB 堆垛双层（$N = 2$）耦合后，其能带结构随莫尔隧穿按 α 缩放而演化的情况，其中 $\theta = 1.05°$。每个面板上方标出了 α 的值。颜色、线条粗细和不透明度按照方法中定义的约定表示层组成。在 $\alpha = 0$ 时，单层狄拉克锥与 AB 双层能带彼此解耦。增大 α 会产生避免交叉，并将波函数权重从单层转移到双层及其远端表面。具有 $N \geq 3$ 的菱方堆垛薄片的推广见 S3 节。

层体系。对于 N，保留基底为$\mathcal{L} = \{A_0, B_0, A_1, B_N\}$，并利用 Löwdin 分区法，在 E/γ_1 的一阶近似下消去剩余的二聚化扇区。完整推导见 S2 节。

令 $\pi = \eta q_x + i q_y$ 为薄片坐标系中的狄拉克算符，并定义三个基本路径振幅 $\xi_1 = v_f\pi$、$\xi_2 = v_3\pi^\dagger$ 和 $\xi_3 = \gamma_2/2$，其中 $v_3 = (\sqrt{3}/2)\, a\gamma_3$，单位制满足 $\hbar = 1$。它们分别使有效传播从界面表面 A_1 朝远端表面 B_N 前进一个、两个和三个层指标。振幅 ξ_1 表示常规狄拉克传播，ξ_2 表示由 γ_3 产生的三角翘曲路径，ξ_3 表示由 γ_2 产生的次近邻层路径。它们的相干和表示为 $X_N(\boldsymbol{q})$，递归定义如下：

$$X_N = -\frac{1}{\gamma_1}\left(\xi_1 X_{N-1} + \xi_2 X_{N-2} + \xi_3 X_{N-3}\right), \qquad X_0 = -\gamma_1, \quad X_{N<0} = 0. \tag{2}$$

因此，表面基底（A_1，B_N）中的投影菱方堆垛块为

$$H_{\mathrm{ABC}}^{(N),\mathrm{path}}(\boldsymbol{q}) = \begin{pmatrix} 0 & X_N^\dagger(\boldsymbol{q}) \\ X_N(\boldsymbol{q}) & 0 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

普通狄拉克路径、三重翘曲路径和次近邻层路径由此合并为单一连贯的表面间耦合。仅包含 N 普通狄拉克步的路径，在下文定义的严格手征极限中将成为完整答案，是这种更一般的路径投影和中的一个贡献。γ_2 和 γ_3 路径重构了其详细的动量依赖关系。

该投影还会对最初终止于 B_1 的莫尔隧穿进行缀饰。定义 $D_m = -X_m/\gamma_1$ 后，(A_0, B_0) 与 (A_1, B_N) 之间的耦合变为

$$\widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}) = \begin{pmatrix} T_{A_0A_1}(\boldsymbol{r}) & T_{A_0B_1}(\boldsymbol{r}) D_{N-1}^\dagger(\boldsymbol{q}) \\ T_{B_0A_1}(\boldsymbol{r}) & T_{B_0B_1}(\boldsymbol{r}) D_{N-1}^\dagger(\boldsymbol{q}) \end{pmatrix}. \tag{4}$$

第一列描述了通向保留的界面位点 A_1 的直接隧穿。第二列描述了隧穿进入 B_1，随后穿过 ABC层状薄片 虚传播至远端表面 B_N。因而，缀饰振幅D_{N-1} 提供了扭转界面处局部莫尔耦合与完整模型能带中观测到的远端表面权重之间的微观联系。

位移场引入了进一步的修正。对于 $\Delta = V/2$，远端层的两个位点都带有 $+\Delta$；由于在 $N \geq 2$时会消去 A_N，其势会在相同的领先阶、与能量无关的 Löwdin 投影中产生一个额外项，

$$H_{\mathrm{eff},\Delta}^{\mathrm{path}} = \begin{pmatrix} H_{00}^{\Delta} & \widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}} \\ (\widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}})^\dagger & H_{\mathrm{ABC},\Delta}^{(N),0} \end{pmatrix} + \Delta\Lambda\Lambda^\dagger, \qquad H_{\mathrm{ABC},\Delta}^{(N),0} = \begin{pmatrix} 0 & X_N^\dagger \\ X_N & \Delta \end{pmatrix}. \tag{5}$$

向量 Λ 见 S2 节。修正项 $\Delta\Lambda\Lambda^\dagger$ 计及作用于被消去的远端层位点上的势。它不会改变 X_N、D_{N-1}或保留位点 B_N的直接位点能。

在严格手征极限下，$\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$ 和 $u = 0$，而 γ_1 和 u' 保持有限。只有包含普通狄拉克传播的路径得以保留，路径振幅简化为

$$X_N^{\mathrm{ch}} = (-1)^{N-1}\frac{(v_f\pi)^N}{\gamma_1^{N-1}}, \qquad D_{N-1}^{\dagger,\mathrm{ch}} = (-1)^{N-1}\frac{(v_f\pi^\dagger)^{N-1}}{\gamma_1^{N-1}}. \tag{6}$$

区分这一严格的手性模型与约化模型非常重要。后者将 $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$ 设为零，同时保留 γ_1、u和 u'。因此，其菱方表面和传播振幅具有公式（6）中的纯幂形式，但其莫尔势保留了两种隧穿振幅。严格手性模型进一步将$u = 0$ 设为零，同时保留 γ_1 和 u' [67–69]。

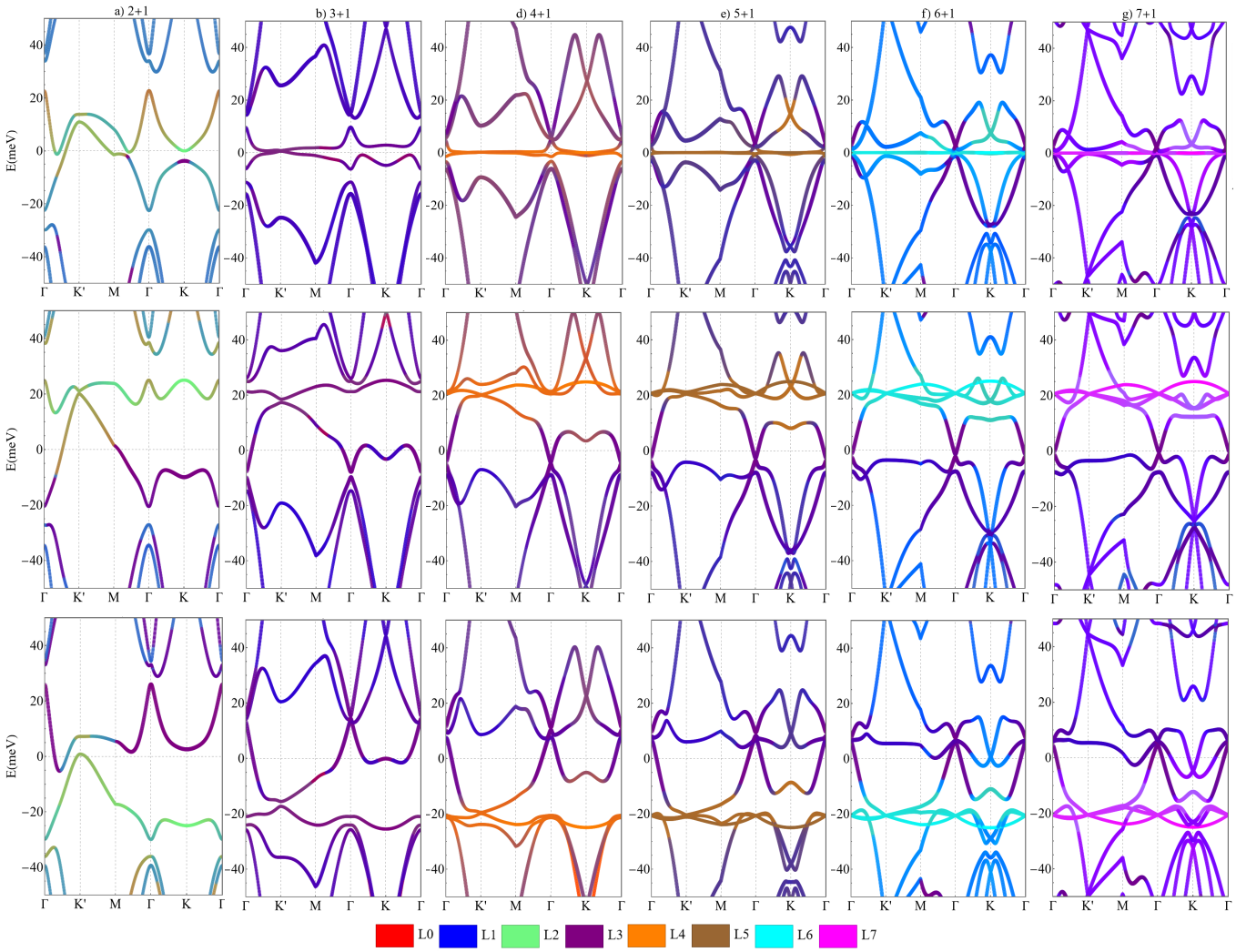

图 3。**完整模型的层组成分辨电子结构**。在 $\theta = 1.05°$处从 $N = 2$ 到 $N = 7$ 的完整（$N + 1$层）菱方石墨烯模型的能带结构。$N = 2$ 情形为 AB 双层，而 $N \geq 3$ 对应于菱方堆垛薄片。顶行对应于 $V = 0$ 毫电子伏，中行对应于 $V = +50$ 毫电子伏，底行对应于$V = -50$ 毫电子伏。与每一层相关的基底颜色标示在图的底部；颜色、线条粗细和不透明度按照方法中定义的约定对层组成进行编码。正 V 使远端表面特征主要位于上中心能带中，而扭转界面特征主要位于下中心能带中；负V则反转这种层极化。

在 $V = 0$处，路径投影模型以几乎完全相同的色散重现了完整模型的低能中心能带。差异主要出现在远端能带中，并且在较大的 $|V|$下变得更加明显，而低能机制仍然保持不变。约化模型和严格手性模型的能带见 S2 节。现在可以直接从投影表面理论理解电子结构。在严格手征极限下，菱方表面色散由 $X_N^{\mathrm{ch}} \propto (v_f \pi)^N / \gamma_1^{N-1}$ 控制，因此随着N增大而变得越来越平缓。 X_N中包含的额外 γ_2 和 γ_3 路径会重构这一纯幂色散，同时保留其表面起源。经过莫尔杂化后，中心能带继承了这一柔软的菱方扇区，从而解释了其随着层数增加而逐渐变窄。

位移场的作用也很直观。在 K' 附近，单层主导能带会发生位移，因为对角项 H_{00}^{Δ} 对单层子晶格施加相同的位点势。因此，电场会使单层狄拉克锥发生位移，但不会直接打开子晶格能隙，这与扭转双层石墨烯中的情况类似 [70, 71]。这一位移在图 3 的中间和底部两行中清晰可见。在 K 附近，电场对两个菱方表面分量的作用则有所不同：保留的远端位点 B_N 承受直接势 $+\Delta$，而被消去的位点 A_N 则通过 $\Delta\Lambda\Lambda^{\dagger}$产生作用。这种表面失谐会打开并重构

菱方相衍生能带中的能隙。

因此，路径投影理论解释了图 3 的两项主要趋势：随着 N 增大，菱 rhombohedral 表面色散变软，而位移场会改变单层、界面和远端表面扇区之间的相对对齐，并使它们的权重在两个中心能带之间转移。 V 取相反符号时谱的显著差异，源于真实的跃迁结构、电场对相关表面态的不等效作用，以及粒子-空穴对称性并非严格成立。

E. 实空间密度揭示莫尔混合与远端表面极化

层组分分辨能带结构揭示了动量空间中波函数权重在各层之间的分布。实空间电荷密度则提供了莫尔元胞内的互补视角，展现了方法中定义的展开式里不同平面波分量之间的干涉。某些项构成空间均匀的背景，而不同谐波之间的干涉则会在莫尔倒格矢处产生调制。因此，显著的空间对比度表明多个谐波之间存在相干混合，而近乎均匀的密度则意味着干涉贡献较弱。

图 4 展示了两个中心能带在选定高对称点处的概率密度，并对层和子晶格求和，以描述各个态的空间分布。左侧四列对应下中心能带，分别在 Γ、K'、 M和 K处计算；右侧四列则展示上中心能带相应的密度。色标采用所有显示的高对称点处总电荷密度的全局最小值和最大值进行归一化。当 N较小时，尤其是在 $N = 2$和 $N = 3$处，两个中心能带都呈现出显著的三角形电荷纹理。这些图案反映了莫尔隧穿所形成的 C_3结构，并表明中心能带态是多个莫尔谐波的相干叠加。

随着 N 增加，下中心能带呈现出显著的动量依赖性。在 K' 和 M处，其密度变得近乎均匀，而在 Γ 和 K处仍受到强烈调制。在 K附近，日益变软的菱方表面色散使多个由莫尔倒格矢关联的平面波分量在能量上彼此接近，从而使它们能够发生杂化并形成具有结构的密度。在严格手征极限下，相关表面尺度随$(v_f|\boldsymbol{q}|)^N/\gamma_1^{N-1}$变化；而在路径投影理论中，该尺度由 $|X_N(\boldsymbol{q})|$控制。相反， Γ处的调制源于多个对称性相关的折叠动量之间的相干干涉。上中心能带在更广泛的一系列高对称点上仍呈现强烈的纹理，这与其更强烈地受到扭转界面处直接莫尔扰动的影响相符，其受到扭转界面处直接莫尔微扰的影响更强。

仅凭总密度无法判断哪些层承载着空间调制。补充材料第 S5 节中的层分辨电荷图给出了这种分解。对于 N =2，3，4，最显著的莫尔纹理通常出现在构成扭转界面的两个层上，即 L_0 和 L_1，因为它们通过 T_{01}直接相连。其余层则作为菱面体堆垛的一部分，对界面处产生的莫尔微扰作出间接响应。对于 $N = 2$，这清楚地表明，该系统既不是常规的扭转双层，也不是孤立 AB 双层，而是一种杂化结构：直接耦合的 L_0–L_1 界面与 AB 双层的低能边界部分共存。

对于 $N = 3$ 和 $N = 4$，分层分辨图显示，空间纹理与积分层权重逐渐分离。单层 L_0 和界面层 L_1 具有最强的空间调制，而下中心能带则在远端菱方表面 L_N 上形成了显著权重。在投影描述中，这个远端表面分量主要由 B_N承载。与直接耦合到旋转单层的 A_1不同，B_N 是通过修饰传播振幅 D_{N-1}到达的。因此，对于此处考虑的参数，以 B_N 为主的态可以在远端表面上具有显著的积分电荷，同时在莫尔元胞 [66]内仍仅呈现微弱调制。这解释了为何下中心能带的一些总密度图在特定动量处变得平滑，尽管相应的态仍具有强烈的菱方特征。在扭转单层–双层石墨烯中，扫描隧道显微镜/扫描隧道谱也观察到了与表面相关的对比：平带局域态密度在扭转侧集中于特定堆垛区域附近，而在远端双层侧表面则相对均匀 [72]。

位移场依赖性为同一层切换机制提供了直接的实空间视角。S6节中的代表性 $N = 3$ 图显示，对于 $V = -50$毫电子伏，下中心能带主要集中在远端表面 L_N上，同时在相邻层 L_{N-1}上也有较小的贡献。上中心能带分布在多个层上，并呈现出更为复杂的密度分布，尤其是在Γ 和 K'处。对于 $V = +50$ 毫电子伏，层归属发生反转：上中心能带获得了主要的远程表面贡献，而下中心能带则主要集中在由 L_0 和 L_1形成的扭转界面区域。选定动量下，堆叠结构另一侧仍保留少量权重，这反映了中心能带之间的相干杂化，而不是完全分离为纯界面态和远端表面态。这种实空间重分布与图 3所示的动量空间层组成完全一致。

S6节中额外的位移场图显示， $N = 2$ 和 $N = 4$也发生了相同的交换，而第 S4 节

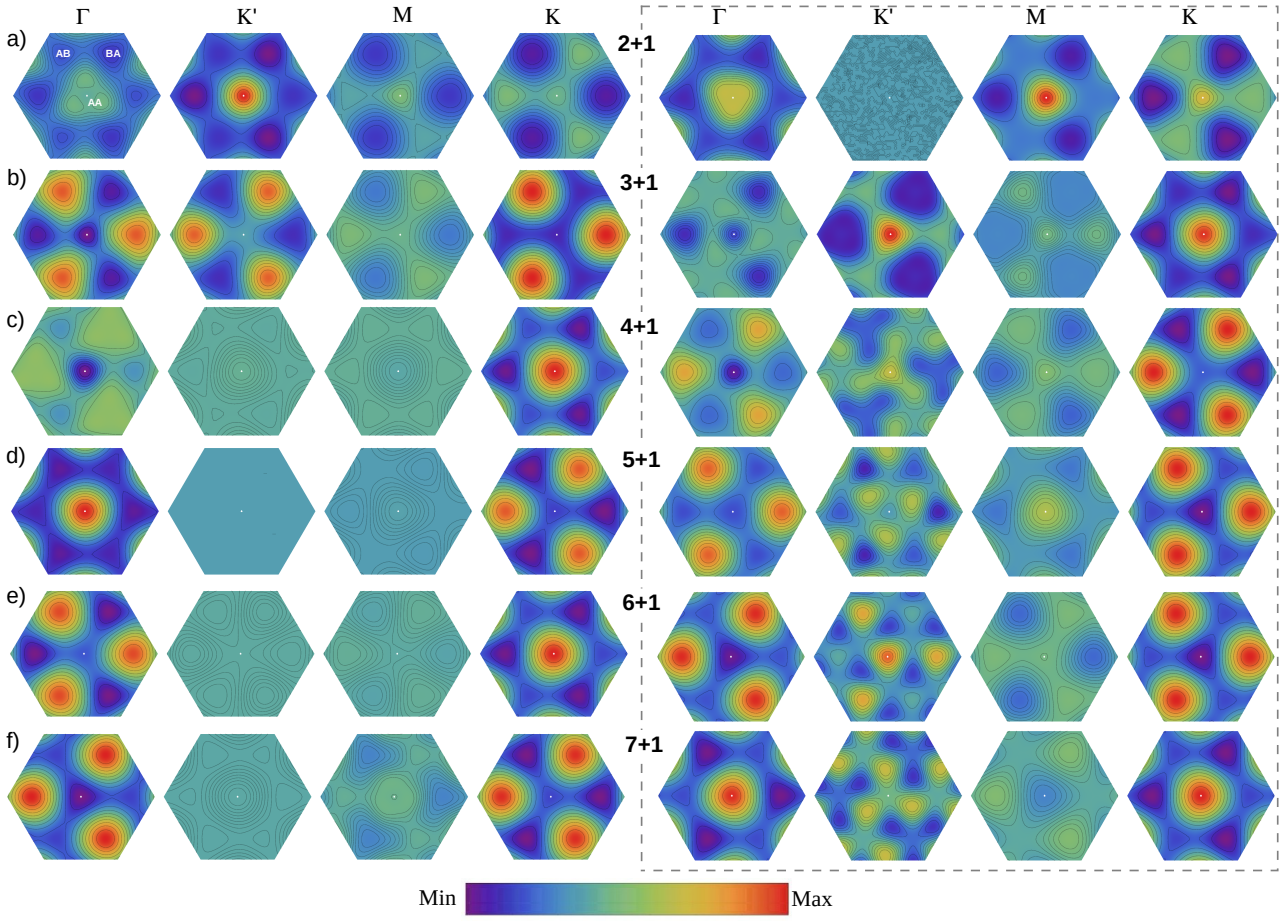

图4。**完整模型中的实空间电荷分布**。莫尔布里渊区选定高对称点处两个中心能带的概率密度，并对层数和子晶格求和。左侧四列对应下中心能带，右侧四列对应上中心能带。在每组中，动量依次排列为 Γ、 K'、 M 和 K。各行展示不同层数下的结果，从 $N = 2$ 到 $N = 7$。色标根据所有显示的高对称点处总电荷密度的全局最小值和最大值进行归一化。面板**a** 中的 AA、AB 和 BA 标签标识了旋转单层 L_0 与相邻石墨烯层 L_1之间的局部堆垛。

则展示了 $N = 4$对应的电场驱动的层组分分辨能带结构重分布。因此，反转 V 可以决定哪条中心能带具有主要的远端表面 L_N 特征，以及哪条能带仍与莫尔界面保持更强的杂化。实空间密度和动量空间层权重因此从两个互补的角度呈现了同一机制：位移场将中心能带特征从扭转界面转移到远端菱方表面。

这些密度图也为可能出现的扫描隧道显微镜/扫描隧道谱（STM/STS）纹理提供了直观指引。由于探测能量窗口内的所有态都会对局域态密度（LDOS）产生贡献，当窗口内的贡献主要来自 Γ 附近的态时，呈现的空间图样可能与这些态的密度分布相似。当 K 和 K' 附近的态都对其有所贡献时，它们的图样会按照各自的谱权重叠加。在弱隧穿区间，微分电导近似遵循针尖处的局域态密度，因此，相关的比较对象是暴露表面上的层分辨密度。位移电场驱动界面与远端表面之间的电荷重新分布，因此会改变表面谱权重和空间对比度。在扭转单层–双层石墨烯中，栅压依赖电导图揭示了随着载流子密度和位移电场同步变化，平带谱权重从局域化转变为较均匀分布 [73]。在与六方氮化硼（hBN）对齐的菱方三层石墨烯中，扫描隧道显微镜/扫描隧道谱测量和表面投影局域态密度计算同样表明，栅压依赖的峰强度与层极化有关 [74]。因此，我们的图确定了定性的光谱趋势；若要进行定量电导预测，则需要完整的能量分辨动量求和以及实验隧穿条件。

此外，正如前文所述，电场驱动的实空间切换，在微观层面上将这种机制与相关扭转单层–双层系统中可通过电场控制的轨道响应联系起来。

位移电场改变单层与远端表面扇区的相对能量，从而决定哪条中心能带具有占主导地位的 B_N 特征。尽管本计算未纳入相互作用，但由相互作用驱动的自旋极化或谷极化，若与对电场选定的陈能带的占据相结合，便可产生符号可通过电场切换的轨道磁响应 [28, 55]。在本系统中，这一机制因依赖层的菱面体表面结构而更加丰富；该结构的严格手征贡献具有 N 重相位绕转。

F. 电荷纹理的 $N \bmod 3$ 组织

总密度图和图5揭示了一种仅从单个层数难以看出的重复规律。菱方堆垛层数每增加三层，相似的角向图样便会再次出现，密度图自然分为以下几组： $N = 2$、5、8、.....， $N = 3$、6、9、.....，以及 $N = 4$、7、10、.....。这种分组并非数值过程刻意设定的，而是由投影波函数的相位结构自然产生的。

图5对比了约化连续模型和严格手征模型。两者都令 $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$；它们的区别在于同亚晶格莫尔振幅$u$，该振幅在约化模型中保留，在严格手征模型中则被去除。差异在 Γ 处最为明显，此处 u 产生环状结构；在 K' 处也很明显，此处它会增强中心密度，这与扭转双层石墨烯 [75, 76] 中的情况类似。对于 $N = 2$、5、8，这种敏感性尤为明显。除这些特征外，两种描述中相同角向组织的持续存在表明，主要的重复规律已编码在投影低能结构中，而非由 γ_2、γ_3 或 γ_4 产生。

角向递推关系源自路径理论的严格手征极限。写作 $\pi = |\pi| e^{i\varphi_{\boldsymbol{q}}}$ 时，右上角的菱方矩阵元以及远端表面隧穿修正包含

$$\left(X_N^{\mathrm{ch}}\right)^{\dagger} \propto |\pi|^N e^{-iN\varphi_{\boldsymbol{q}}}, \qquad D_{N-1}^{\dagger,\mathrm{ch}} \propto |\pi|^{N-1} e^{-i(N-1)\varphi_{\boldsymbol{q}}}. \tag{7}$$

在 C_3 旋转下，这些因子获得相位 $e^{-i2\pi N/3}$ 和 $e^{-i2\pi(N-1)/3}$。在 $N \to N+3$ 下二者均保持不变，因此得到三个剩余类

$$N = 3m, \qquad N = 3m+1, \qquad N = 3m+2. \tag{8}$$

这种分类关注的是主导角向相位结构。径向振幅仍按 $|\pi|/\gamma_1$ 的不同次幂缩放，因此同一剩余类中的成员不一定具有完全相同的带宽、层极化或密度对比度。

这些三角形电荷纹理与多层石墨烯中其他莫尔微扰所产生的图案有关，包括六方氮化硼上的菱方石墨烯以及扭转石墨烯–石墨界面 [52, 77–80]。在然而，在当前系统中，周期性微扰并非由外部六方氮化硼势产生，而是源自旋转单层与菱面体堆垛之间的莫尔杂化。因此，产生的纹理在实空间中呈现出界面到远端表面的耦合特征，而这种耦合控制着能带变平和位移场驱动的层切换。

G. 陈数层级由单层和菱面体表面扇区组织

能带结构和电荷密度表明，两个中心能带源自单层狄拉克锥与前一节中由 X_N 描述的菱面体表面扇区的杂化。当一个中心能带与另一个中心能带及远端能带均相隔离时，其拓扑由阿贝尔陈数 $\mathcal{C}$ 表征。当两个中心能带彼此接触、但仍与远端能带分离时，它们各自的陈数不再有定义。此时，不变量必须赋予完整的孤立双能带子空间，并利用非阿贝尔贝里联络 [81] 计算；这里的“非阿贝尔”仅指该子空间内部的矩阵值贝里联络。数值计算方法见“方法”一节。在 $V = 0$ 处的严格手征模型中，这种情况尤为清晰：两个中心能带彼此接触，而这对能带仍与远端谱相隔离。

下中心能带的陈数相图如图 6 所示，展示了其随扭转角和位移场的变化，范围为 $N = 2$ 至 $N = 7$。对应的上能带相图见补充材料第 S8 节。彩色区域表示所选中心能带彼此隔离，并被赋予阿贝尔陈数的参数点。带阴影线的区域表示两个中心能带相接触，但仍作为双能带子空间与其他能带隔离；黑色区域则表示中心能带扇区未与远端能带隔离。

图 6 对比了上述定义的完整、约化和严格手征连续模型。路径投影理论为这些描述提供了分析上的联系：它在表面振幅 X_N 中保留了 γ_2 和 γ_3 传播通道，同时省略了 γ_4 和高能二聚体能带。因此，该理论解释了额外的菱方路径如何使严格手征表面扇区发生形变，之后完整模型再恢复完整的远端谱。

当中心能带与远端谱保持隔离，且仍主要呈现单层或菱方特征时，最容易作出清晰的解释。在严格手征极限下，式（6）将一个单位绕数单层狄拉克锥与一个 N 阶菱方表面扇区结合起来。位移场改变二者的相对能量，并决定哪个扇区位于中央能隙下方。随后，莫尔杂化将这两个动量空间扇区转化为相互隔离的中心迷你能带。

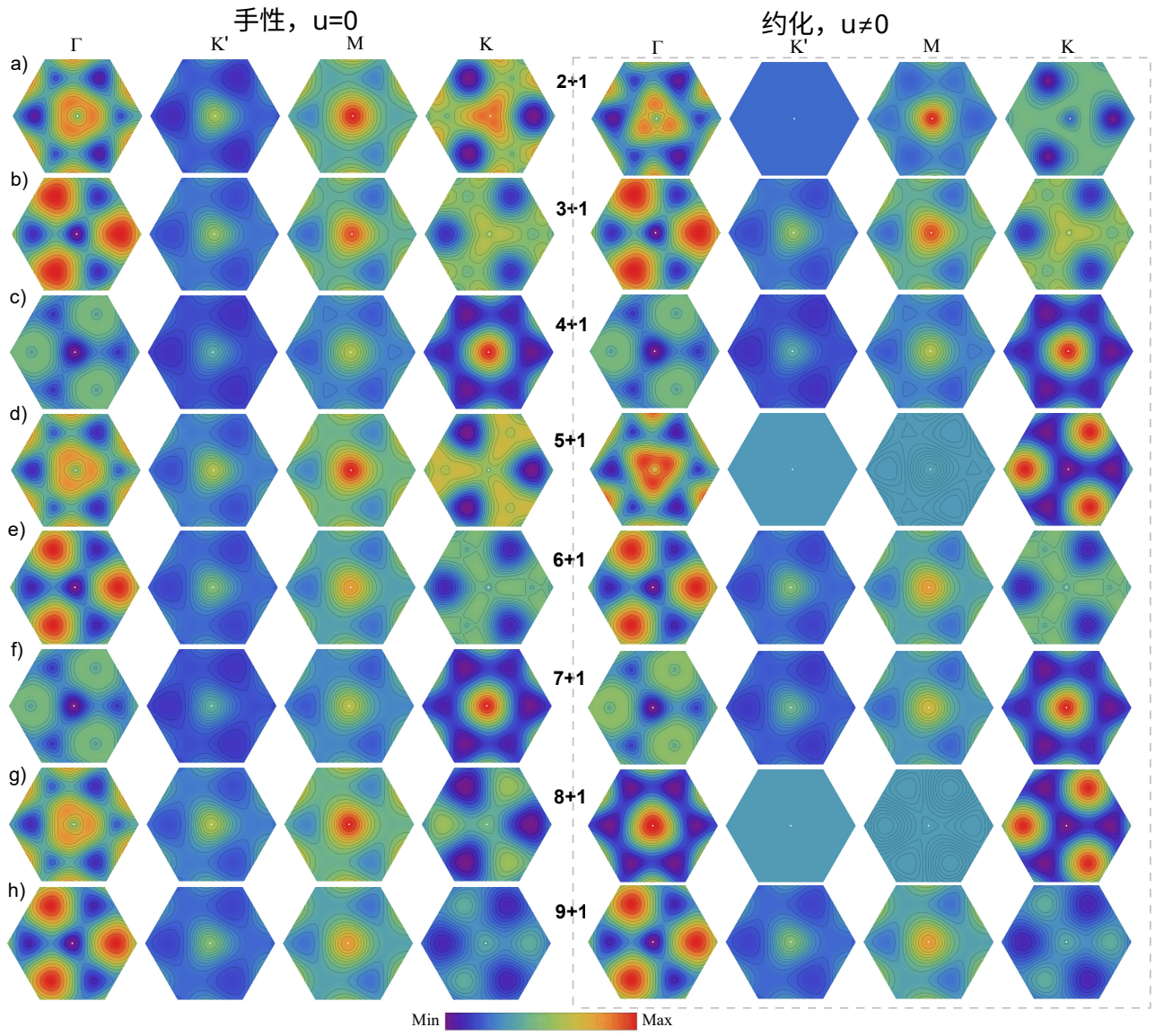

图5。**严格手性模型和约化模型中的实空间密度**。在 Γ、 K'、 M 和 K 处计算的下中央能带和上中央能带的概率密度，其中 $N = 2$ 到 $N = 9$。在所显示的中心态属于简并子空间的动量处，密度取相应正交归一态的平均值； M 点的密度还对与三个 C_3 相关的动量取平均值。反复出现的角向纹理组织成 N mod 3 的三个剩余类。

在本文采用的单谷和电场约定下，较低的中心能带具有

$$\mathcal{C} = N \tag{9}$$

对于负位移场，

$$\mathcal{C} = -1 \tag{10}$$

对于正位移场。上中心能带呈现互补的交换。这些整数序列是为扭转手性多层结构建立的理想手性参考 [67, 68]。完整计算的新作用在于确定相同的扇区如何被选出、发生层极化，并受到真实跃迁和完整远端谱的变形。在两个孤立能带序列之间转换，需要中心能带之间的能隙闭合。在严格手征模型中，这种闭合发生在 $V = 0$ ，而两能带流形仍与远端谱保持隔离；因此，闭合点处的不变量是利用非阿贝尔贝里联络计算得到的孤立双能带子空间的陈数。

路径振幅 X_N 也说明了为什么真实的菱方扇区通常不能被等同于单个 N 阶单项式。 γ_2 和 γ_3 传播路径会分裂并重塑低能节点，

而 γ_4 以及完整的远程能带谱会引入粒子-空穴不对称性和额外的避免交叉。因此，在真实计算中，不能仅凭 X_N 的局部绕数来推断具有 $\mathcal{C} = N$ 的相。更准确地说，它应被认定为与严格手征模型的菱方分支绝热连通的孤立能带相。同样， $\mathcal{C} = -1$ 序列与单位绕数单层分支绝热连通。这一区分既保留了严格手征极限所赋予的物理解释，也允许真实跃迁过程使节点和相边界发生形变。

两条由电场选定的序列具有相反的符号和不等的大小，无法通过将中心能带对视为一个封闭的两能带哈密顿量来理解。对于$N \geq 2$，中心能带源自一个更大的多能带系统，并且可以与远端能带交换贝里曲率。因此，它们的总陈数不必为零。时间反演对称性将两个石墨烯谷联系起来，并使另一个谷中的所有陈数反号。

在较小的扭转角或较大的 N下，中心能带逐渐接近远端谱，相图也变得越来越碎片化。额外的能带反转会在中心能带与远端能带之间转移贝里曲率，从而产生具有较大正或负陈数的狭窄区域。其具体分布取决于更远邻跃迁参数，以及当前连续模型未纳入的微观因素。稳健的结果是电场驱动的 $\mathcal{C} = N$ 与 $\mathcal{C} = -1$ 孤立能带序列之间的交换。严格手征表面扇区组织起这一层级结构，而约化模型、路径投影模型和完整模型则展示了它如何因现实的莫尔和菱方跃迁过程而连续变形。

III. 结论

我们的结果建立了扭转单层–菱方石墨烯的统一低能图像，其中能带变平、层极化、实空间电荷纹理和拓扑均源于两个不等价扇区的杂化：一个旋转单层狄拉克锥和一个由 N 层 ABC 堆垛构成的表面态。随着 N 增大，菱方表面色散逐渐变软，中心能带也逐步变窄。这种增强的能带变平还使中心流形更接近远端谱，从而使其隔离性和层组成对扭转角、位移场和层间跃迁过程越来越敏感。

位移场主要通过改变旋转单层 L_0 与远端菱方表面 L_N之间的相对能量起作用。由于中心态是单层、界面和远端表面扇区的相干混合态，电场不会造成刚性的谱移位。相反，它会重构避免交叉，并在扭转的 L_0–L_1 界面与 L_N之间转移波函数权重。界面层 L_1 通过 T_{01}与单层直接耦合，而到达远端表面则需经过ABC堆垛传播；在投影理论中，这一过程由 X_N和缀饰莫尔振幅 D_{N-1}表征。这种不对称耦合解释了为何一条中心能带主要呈现远端表面特征，而另一条则与扭转界面杂化得更强；也解释了为何反转 V 会使二者的角色互换。

实空间电荷密度揭示了同一机制的另一个互补层面。最强的莫尔调制通常仍位于直接耦合的界面，而很大一部分积分波函数权重则可能分布在远端表面。这种表面上的分离现象源于：积分层权重只包含莫尔谐波的对角概率，而实空间密度还包含它们之间的干涉。因此，一个由 B_N 主导的态可以同时具有很强的菱方特征和较弱的调制。反复出现的 $N \mod 3$ 角向纹理，则进一步提供了波函数指纹，体现出从投影表面和隧穿振幅中继承的纯幂相位因子。

拓扑性质源于相同的双扇区结构。在严格手征极限下，单层狄拉克锥具有单位绕数，而菱方表面耦合是 N 阶的。这些理想高陈数扇区已在手征扭转多层理论中得到揭示 [67, 68]。本模型层级的贡献在于展示位移场如何选出这些扇区的分层后代态，以及 γ_2、 γ_3、 γ_4、同亚晶格莫尔隧穿、粒子-空穴不对称性和完整远端谱如何使其发生形变。当单个中心能带仍保持孤立时，完整计算表明，其保留了与严格手征扇区绝热相连的场选层级。对于本文所用的谷和电场约定，下中心能带中，负 V选出序列 $\mathcal{C} = N$，而正 V选出序列 $\mathcal{C} = -1$；上中心能带则呈现互补的交换。当中心能带彼此接触、但仍与远端能带隔离时，各自的不变量便无定义，此时必须改为使用非阿贝尔贝里联络，为孤立双能带子空间指定陈数。

当中心流形接近远端谱时，尤其是在较小的扭转角和较大的N下，额外的避免交叉和能带反转会在中心能带与远端能带之间转移贝里曲率。此时相图会变得支离破碎，并包含一些陈数较大的狭窄区域，其陈数可能为正，也可能为负。其具体分布对石墨跳跃参数化、晶格弛豫、应变、静电屏蔽以及当前单粒子连续模型未纳入的其他微观效应十分敏感。这些因素可能会移动定量相边界，并改变狭窄的高-$|\mathcal{C}|$ 区域，但不会改变其组织机制：中心能带源自单层—表面杂化，其层特征会因位移电场而交换，而稳健的孤立能带序列仍与绕数为 1 的扇区和N阶严格手征扇区绝热连通。

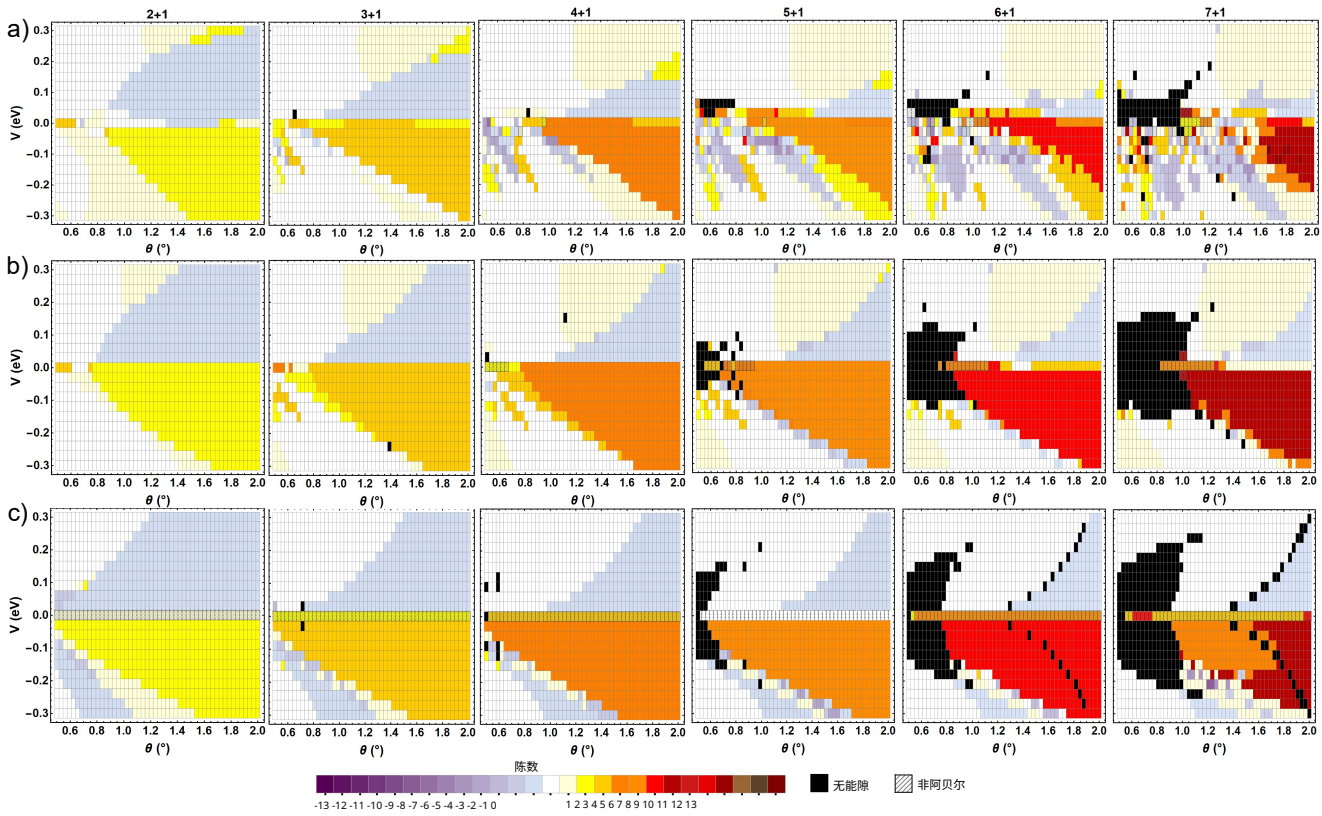

图 6。**陈数相图**。对于从 $N = 2$ 到 $N = 7$ 层的菱方石墨烯下中心能带，比较完整模型、约化模型和严格手征模型。陈数由色彩图表示。着色区域表示 $(\theta,\ V)$ 点，在这些点处下中心能带是孤立的，并被赋予阿贝尔陈数。带阴影线区域表示两个中心能带相接触，但仍与远端能带保持孤立，因此使用非阿贝尔贝里联络为孤立双能带子空间赋予陈数。黑色区域对应于中心能带扇区未与远端能带隔离的参数区域。

杂化，其层特征会因位移电场而交换，而稳健的孤立能带序列仍与绕数为 1 的扇区和N阶严格手征扇区绝热连通。

这一框架为理解近期关于扭转单层–多层石墨烯和菱方石墨烯的实验提供了单粒子基础；这些实验报道了高陈数的量子反常霍尔态、电场可调的轨道磁性以及相互作用驱动的拓扑相 [47–51, 53, 54]。我们的计算并不描述相互作用导致的有序态本身，而是确定了可供这类态形成的窄层极化陈能带。具体而言，实验报道的高陈轨道磁体随层数变化的层级关系，自然地与电场选定的 N 阶菱方扇区相关联 [49]。一旦相互作用选定自旋极化态或谷极化态，占据该扇区便可产生强烈的轨道响应，其符号取决于占据谷以及位移电场选定的层特征。对扭转单层–双层石墨烯的扫描隧道显微镜/扫描隧道谱测量还表明，相互作用能够重新分布莫尔元胞内的电子谱权重 [82]，这凸显了态的空间结构的重要性。

建立非相互作用色散、拓扑性质和波函数结构，为确定相互作用如何重构中心能带提供了所需的参考。带宽和隔离能隙决定动能尺度，而按层和子晶格分辨的波函数则决定库仑形状因子。占据态的电荷分布产生哈特里势，而单个态的静电位移取决于其与该势的空间重叠。对于给定的哈特里势，具有相似按层分辨密度的态会经历相似的位移，而不同的分布则可能产生依赖动量的位移，并改变色散。正如我们之前的工作 [77]，所示，仅有窄带宽并不足以预示强烈的哈特里重构；态的空间结构同样至关重要。因此，位移场驱动的波函数权重重新分布会同时改变单粒子谱和相互作用矩阵元。这些结果为相互作用理论提供了微观起点；确定有序基态

或者，要确定关联拓扑相的稳定性，需要进行专门的多体计算。

同一机制为纳米角分辨光电子能谱在扭转单层–双层石墨烯中观测到的反向偏压谱响应提供了微观解释 [55]。用当前的语言来说，该体系是这一族系统中的 $N = 2$ 成员：反转位移场会改变单层狄拉克锥与 AB 双层低能扇区的相对对齐关系，从而在中心能带内交换它们的层与动量特征。对于更大的 N，同样的波函数重新分布会产生远端表面极化，并组织由电场选定的陈数层级。

模型层级将这一稳健机制与定量修正区分开来。严格手征模型提取出纯幂律表面路径，而约化模型则恢复同亚晶格莫尔振幅 u。路径投影理论保留了通过 X_N 和 D_{N-1}的 γ_2 与 γ_3 传播通道，完整模型则恢复 γ_4、高能二聚体能带、粒子-空穴不对称性以及完整的远端谱。这些补充会重塑详细的色散关系和拓扑相边界，但不会改变它们共同的起源。因此，扭转单层–菱方石墨烯提供了这样一个平台：层数控制可用的表面传播路径，位移场选择活性层和拓扑扇区，而扭转角控制莫尔杂化程度与能带隔离。

IV. 方法

A. 连续模型实现

数值计算采用式 (1) 中引入的单谷连续模型哈密顿量。基态以层 l、子晶格 $\alpha = A, B$ 和平面波动量 $\boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}$ 标记，其中 $\boldsymbol{G}$ 属于截断后的莫尔倒格子。层内狄拉克块、最近层及次近层跃迁矩阵以及界面莫尔隧穿矩阵在 S1 节中有明确给出。位移场由屏蔽后的外层势差 V 表示，其中 L_0 上的位点能为 $-V/2$， L_N 上的位点能为 $+V/2$，而内部层的位点势设为零。

除非另有说明，计算均采用 $\theta = 1.05°$，层间跃迁参数取自文献 [83] 的基于 DFT 的 ABC 三层拟合，并在不同层数中保持一致。我们使用 $\gamma_0 = 3.16$ eV、$\gamma_1 = 0.502$ eV、 $\gamma_2 = -0.0171$ eV、 $\gamma_3 = -0.377$ eV和 $\gamma_4 = -0.099$ eV，以及 $u = 0.0797$ eV和 $u' = 0.0975$ eV的莫尔隧穿振幅 [77, 83–86]。层间项遵循文献 [86]中的起伏扭转双层参数化。

B. 连续体模型层级与表面投影

我们采用四种相关的描述。完整模型保留 γ_1、 γ_2、 γ_3、 γ_4、 u和 u'，以及完整的层和平面波基组。约化模型设定$\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$ ，同时保留 γ_1、 u和 u'。严格手征模型进一步设定 $u = 0$，除层内狄拉克项外，仅保留 γ_1 和异亚晶格莫尔隧穿 u' 。这些极限情形将表面杂化机制与额外跃迁过程引入的修正区分开来。通过与完整模型的比较，可以确定中央能带变窄、场驱动的层切换以及具有特征性的孤立能带陈序列是否持续存在。为检验微观输入的敏感性，S9节针对菱方石墨烯的另一种跃迁参数化 [87, 88]以及线性位移场分布，重复了完整模型的计算。

解析路径投影模型不同于约化手征模型和严格手征模型。它将 $\gamma_4 = 0$ 设为零，但在低能基底（A_0, B_0, A_1, B_N）中保留 γ_1、 γ_2、 γ_3、 u 和 u' 。利用 Löwdin 分区法，高能二聚化子空间在 E/γ_1 的最低阶近似下被消去。由此得到的表面间传播振幅 X_N、缀饰莫尔振幅 D_{N-1} 以及有限场修正 $\Delta\Lambda\Lambda^\dagger$ 均在 S2 节中推导。

C. 层和子晶格权重

对于动量$\boldsymbol{k}$处能带 n的归一化本征态，

$$|\psi_{n\boldsymbol{k}}\rangle = \sum_{l,\alpha,\boldsymbol{G}} C^{(n)}_{l\alpha,\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{k})|l, \alpha, \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}\rangle, \tag{11}$$

层分辨和亚晶格分辨权重为

$$W^{(n)}_{l\alpha}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\boldsymbol{G}} \left|C^{(n)}_{l\alpha,\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{k})\right|^2, \qquad \sum_{l,\alpha} W^{(n)}_{l\alpha}(\boldsymbol{k}) = 1. \tag{12}$$

层 L_l 上的总计权重为

$$W^{(n)}_l(\boldsymbol{k}) = \sum_{\alpha=A,B} W^{(n)}_{l\alpha}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\alpha=A,B}\sum_{\boldsymbol{G}} \left|C^{(n)}_{l\alpha,\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{k})\right|^2, \quad \sum_l W^{(n)}_l(\boldsymbol{k}) = 1. \tag{13}$$

对于层组分分辨能带结构，设$a_1 \geq a_2$ 为由层 ℓ_1 和 ℓ_2承载的两个最大层权重。显示的颜色通过使用分数$a_1/(a_1+a_2)$对它们的基底颜色进行连续混合而获得。当 $a_2/(a_1+a_2) < 0.10$时，使用主导层 ℓ_1 的纯色。线条粗细增加

至 a_1。不透明度由置信度决定

$$\begin{aligned} Q &= \sqrt{PS}, \\ P &= \frac{N_L \sum_l \left(W_l^{(n)}\right)^2 - 1}{N_L - 1}, \\ S &= \frac{a_1 - a_2}{a_1 + a_2}, \end{aligned} \tag{14}$$

其中，$N_L = N + 1$ 是层的总数。此处，P 表示总层纯度，S 表示两个主要层权重之间的分离度。浅灰色骨架表示独立于层归属的底层色散关系。

D. 实空间电荷密度

分层和子晶格分辨的实空间振幅由平面波系数重构为

$$\psi_{l\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}) = \sum_{\boldsymbol{G}} C_{l\alpha,\boldsymbol{G}}^{(n)}(\boldsymbol{k}) e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{15}$$

相应的密度分量为

$$\begin{aligned} \rho_{l\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}) &= \left|\psi_{l\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{r};\boldsymbol{k})\right|^2, \\ \rho_l^{(n)} &= \sum_{\alpha=A,B} \rho_{l\alpha}^{(n)}, \\ \rho_{\mathrm{tot}}^{(n)} &= \sum_l \rho_l^{(n)}. \end{aligned} \tag{16}$$

不同于公式（13）中的积分权重，实空间密度包含不同莫尔谐波之间的干涉项。总密度图通过对所有层和子晶格求和得到，而分层分辨图则在子晶格求和之前保留层索引。当所显示的图表示一个简并的中心子空间时，密度取相应正交归一本征态的平均值。相关图注中会说明额外的对称性平均。一起显示的图采用统一的归一化方式，该归一化由所显示高对称点处总密度的全局最小值和最大值确定。

E. 陈数计算

对于与所有其他能带隔离的非简并能带，贝里曲率的计算公式为

$$\Omega_n(\boldsymbol{k}) = -2\,\mathrm{Im} \sum_{m\neq n} \frac{\langle u_{n\boldsymbol{k}}|\partial_{k_x} H|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle\langle u_{m\boldsymbol{k}}|\partial_{k_y} H|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle}{(E_m - E_n)^2}, \tag{17}$$

且阿贝尔陈数为

$$\mathcal{C}_n = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathrm{mBZ}} \Omega_n(\boldsymbol{k})\, d^2\boldsymbol{k}. \tag{18}$$

当两条中心能带接触，但仍与远端谱隔离时，各条能带的陈数没有定义。此时，我们将两个本征向量保留为一个共同子空间，并将其收集在矩阵$\Psi(\boldsymbol{k})$中。相邻动量点之间的重叠矩阵为

$$M_\mu(\boldsymbol{k}) = \Psi^\dagger(\boldsymbol{k})\Psi(\boldsymbol{k} + \Delta\boldsymbol{k}_\mu). \tag{19}$$

对于奇异值分解 $M_\mu = U_\mu \Sigma_\mu V_\mu^\dagger$，相应的酉链路矩阵为

$$\mathcal{U}_\mu(\boldsymbol{k}) = U_\mu V_\mu^\dagger. \tag{20}$$

沿三角形晶格面的威尔逊环是其三个链路矩阵的有序乘积，

$$\mathcal{W}_\triangle = \mathcal{U}_{12}\mathcal{U}_{23}\mathcal{U}_{31}, \qquad \Phi_\triangle = \arg\det \mathcal{W}_\triangle, \tag{21}$$

而孤立双能带子空间的陈数为

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi}\sum_\triangle \Phi_\triangle. \tag{22}$$

这是参考文献 [89] 中规范不变晶格表述的非阿贝尔扩展。在相图中，着色区域表示具有阿贝尔陈数的孤立单带，阴影线区域表示需要非阿贝尔贝里联络的孤立双能带子空间，黑色区域则表示中心能带扇区未与远端能带隔离的参数点。

数据可用性

构成正文图和补充图基础的数值数据，可在合理请求下向通讯作者获取。

致谢

我们感谢 Gerardo Naumis 和 Federico Escudero 提供的有益讨论。本研究由中国国家自然科学基金委员会（NSFC）项目资助，项目编号：125471103。A.J.-P. 感谢海南大学理论物理中心和物理与光电工程学院在其访问期间给予的热情接待，其部分研究工作在此期间完成。A.J.-P. 和 F.G. 感谢欧盟 NextGenerationEU/PRTR-C17.I1 及 IKUR战略提供的资助，该资助依据 Ikerbasque基金会与 DIPC 代表巴斯克政府教育部签订的合作协议提供。D.L. 感谢中国国家留学基金管理委员会项目的资助，项目编号为 202406960092。P.A.P. 和 F.G. 感谢“Severo

Ochoa”研发卓越中心计划（CEX2020-001039-S/AEI/10.13039/501100011033）、由西班牙科学与创新部（MCIN）/西班牙国家研究署（AEI）/10.13039/501100011033 资助的 NOVMOMAT资助项目 PID2022-142162NB-I00，以及“欧洲区域发展基金：建设欧洲之路”提供的支持。

作者贡献

A.J.-P. 和 P.A.P. 共同构思了该项目。A.J.-P. 进行了数值计算。A.J.-P.、D.L.、F.G. 和 P.A.P. 分析了结果并参与了结果的诠释。A.J.-P. 和 P.A.P. 在所有作者的意见基础上撰写了手稿。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

[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，《魔角石墨烯超晶格半填充时的关联绝缘体行为》，《自然》**556**，80（2018年）。[2] Y. Cao、V. Fatemi、S. Fang、K. Watanabe、T. Taniguchi、E. Kaxiras 和 P. Jarillo-Herrero，《魔角石墨烯超晶格中的非常规超导性》，《自然》**556**，43（2018年）。[3] M. Yankowitz、S. Chen、H. Polshyn、Y. Zhang、K. Watan- abe、T. Taniguchi、D. Graf、A. F. Young 和 C. R. Dean，《调控扭转双层石墨烯中的超导性》，《科学》**363**，1059（2019年）。[4] 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，《魔角双层石墨烯中的超导体、轨道磁体和关联态》，《自然》**574**，653（2019年）。[5] P. Stepanov、I. Das、X. Lu、A. Fahimniya、K. Watanabe、T. Taniguchi、F. H. L. Koppens、J. Lischner、L. Levitov 和 D. K. Efetov，《解开魔角石墨烯中的绝缘序与超导序》，《自然》**583**，375（2020年）。[6] M. Oh、K. P. Nuckolls、D. Wong、R. L. Lee、X. Liu、K. Watanabe、T. Taniguchi 和 A. Yazdani，《扭转双层石墨烯中非常规超导性的证据》，《自然》**600**，240–245（2021年）。[7] A. L. Sharpe、E. J. Fox、A. W. Barnard、J. Finney、K. Watanabe、T. Taniguchi、M. A. Kastner 和 D. Goldhaber-Gordon，《扭转双层石墨烯四分之三填充附近涌现的铁磁性》，《科学》**365**，605–608（2019年）。[8] M. Serlin、C. L. Tschirhart、H. Polshyn、Y. Zhang、J. Zhu、K. Watanabe、T. Taniguchi、L. Balents 和 A. F. Young，《莫尔异质结构中的内禀量子反常霍尔效应》，《科学》**367**，900（2020年）。[9] K. P. Nuckolls、M. Oh、D. Wong、B. Lian、K. Watanabe、T. Taniguchi、B. A. Bernevig 和 A. Yazdani，《魔角扭转双层石墨烯中的强关联陈绝缘体》，《自然》**588**，610–615（2020年）。[10] S. Wu、Z. Zhang、K. Watanabe、T. Taniguchi 和 E. Y. Andrei，《魔角扭转双层石墨烯中的陈绝缘体、范霍夫奇点和拓扑平带》，Nature Materials **20**，488（2021年）。[11] I. Das、X. Lu、J. Herzog-Arbeitman、Z.-D. Song、K. Watanabe、T. Taniguchi、B. A. Bernevig 和 D. K. Efetov，魔角双层石墨烯中的对称性破缺陈绝缘体与类拉什巴朗道能级交叉，《自然·物理》**17**，710–714（2021年）。[12] 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，魔角扭转双层石墨烯中的分数陈绝缘体，《自然》**600**，439（2021年）。[13] Y. Choi、H. Kim、C. Lewandowski、Y. Peng、A. Thomson、R. Polski、Y. Zhang、K. Watanabe、T. Taniguchi、J. Al- i cea 和 S. Nadj-Perge，扭转双层石墨烯中相互作用驱动的能带变平与关联相，《自然·物理》**17**，1375（2021年）。[14] 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，魔角扭转双层石墨烯中的关联驱动拓扑相，《自然》**589**，536（2021年）。[15] Y. Saito、J. Ge、L. Rademaker、K. Watanabe、T. Taniguchi、D. A. Abanin 和 A. F. Young，扭转双层石墨烯中的霍夫施塔特子带铁磁性与对称性破缺陈绝缘体，《自然·物理》**17**，478（2021年）。[16] A. T. Pierce、Y. Xie、J. M. Park、E. Khalaf、S. H. Lee、Y. Cao、D. E. Parker、P. R. Forrester、S. Chen、K. Watan- abe、T. Taniguchi、A. Vishwanath、P. Jarillo-Herrero 和 A. Yacoby，魔角扭转双层石墨烯中关联陈绝缘体的非常规序列，《自然·物理》**17**，1210（2021年）。[17] P. Stepanov、M. Xie、T. Taniguchi、K. Watanabe、X. Lu、A. H. MacDonald、B. A. Bernevig 和 D. K. Efetov，超导扭转双层石墨烯中的竞争性零场陈绝缘体，《物理评论快报》**127**，197701（2021年）。[18] R. Ribeiro-Palau、C. Zhang、K. Watanabe、T. Taniguchi、J. Hone 和 C. R. Dean，借助动态可旋转异质结构实现可扭转电子学，《科学》**361**，690–693（2018年）。[19] Y. Chu、L. Liu、Y. Yuan、C. Shen、R. Yang、D. Shi、W. Yang 和 G. Zhang，扭转石墨烯莫尔超晶格实验进展综述*，《中国物理 B》**29**，128104（2020年）。[20] E. Zhang、F. Lin、Z. Lei、S. Qi、S. Ban、A. Vinu、J. Yi 和 Y. Liu，转动门把手，开启石墨烯基范德华结构的电子性质，《Matter》**4**，3444–3482（2021年）。

[21] 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，莫尔材料的魅力，《自然·材料评论》**6**，201–206（2021年）。[22] W. Ma、Q. Zhang、L. Li、D. Geng 和 W. Hu，微小扭转，巨大奇迹——扭转二维材料制备的最新进展，Journal of Materials Chemistry C **11**，15793–15816（2023年）。[23] K. Saumya、S. Naskar 和 T. Mukhopadhyay，扭转多层石墨烯与二维纳米异质结构的“魔力”，Nano Futures **7**，032005（2023年）。[24] J.-H. Baek、W. Choi 和 G.-H. Lee，扭转二维材料中的莫尔驱动能带重整化与量子输运，npj 二维材料与应用 **10**，10 2 1038 41699 025 00642 5 2025。/s - - -（）。[25] L.-H. Tong、C.-C. Xu 和 L.-J. Yin，魔角扭转多层石墨烯扫描隧道显微术/光谱学表征的最新进展，Frontiers of Physics **21**，065301（2026年）。[26] S.-Y. Yang 和 C. Shen，将石墨烯扭转，探索关联与拓扑，National Science Review 10.1093/nsr/nwag363（2026年）。[27] S. Chen、M. He、Y.-H. Zhang、V. Hsieh、Z. Fei、K. Watan- abe、T. Taniguchi、D. H. Cobden、X. Xu、C. R. Dean 和 M. Yankowitz，扭转单层–双层石墨烯中电可调的关联态与拓扑态，Nat. Phys. **17**，374（2020年）。[28] H. Polshyn、J. Zhu、M. A. Kumar、Y. Zhang、F. Yang、C. L. Tschirhart、M. Serlin、K. Watanabe、T. Taniguchi、A. H. MacDonald 和 A. F. Young，轨道陈绝缘体中磁序的电切换，《自然》**588**，66–70（2020年）。[29] S. Xu、M. M. Al Ezzi、N. Balakrishnan、A. Garcia-Ruiz、B. Tsim、C. Mullan、J. Barrier、N. Xin、B. A. Piot、T. Taniguchi、K. Watanabe、A. Carvalho、A. Mishchenko、A. K. Geim、V. I. Fal’ko、S. Adam、A. H. C. Neto、K. S. Novoselov 和 Y. Shi，扭转单层–双层石墨烯中可调的范霍夫奇点与关联态，Nat. Phys. **17**，619（2021年）。[30] H. Polshyn、Y. Zhang、M. A. Kumar、T. Soejima、P. Led- with、K. Watanabe、T. Taniguchi、A. Vishwanath、M. P. Zaletel 和 A. F. Young，莫尔超晶格半整数填充下的拓扑电荷密度波，《自然·物理》**18**，42–47（2021年）。[31] M. He、Y.-H. Zhang、Y. Li、Z. Fei、K. Watanabe、T. Taniguchi、X. Xu 和 M. Yankowitz，扭转单层-双层石墨烯中的竞争性关联态与丰富的轨道磁性，Nat. Commun. **12**，4727（2021年）。[32] J. Park、M. Luo、L. Rademaker、J. Smet、M. S. Scheurer 和 L. Classen，通过邻近诱导自旋轨道耦合调控扭转单层 - 双层石墨烯的关联态，Physical Review Research **8**，033225（2026年）。[33] G. W. Burg、J. Zhu、T. Taniguchi、K. Watanabe、A. H. MacDonald 和 E. Tutuc，扭转双双层石墨烯中的关联绝缘态，Phys. Rev. Lett. **123**，10 1103 123 197702 2019。/physrevlett. .（）。[34] P. Rickhaus、G. Zheng、J. L. Lado、Y. Lee、A. Kurz- mann、M. Eich、R. Pisoni、C. Tong、R. Garreis、C. Gold、M. Masseroni、T. Taniguchi、K. Wantanabe、T. Ihn 和 K. Ensslin，晶体场导致扭转双双层石墨烯能隙开启，Nano Letters **19**，8821–8828（2019年）。

[35] C. Shen、Y. Chu、Q. Wu、N. Li、S. Wang、Y. Zhao、J. Tang、J. Liu、J. Tian、K. Watanabe、T. Taniguchi、R. Yang、Z. Y. Meng、D. Shi、O. V. Yazyev 和 G. Zhang，扭转双双层石墨烯中的关联态，《物理学年鉴》**16**，520（2020年）。[36] Y. Cao、D. Rodan-Legrain、O. Rubies-Bigorda、J. M. Park、K. Watanabe、T. Taniguchi 和 P. Jarillo-Herrero，扭转双层-双层石墨烯中的可调关联态和自旋极化相，《自然》**583**，215（2020年）。[37] X. Liu、Z. Hao、E. Khalaf、J. Y. Lee、Y. Ronen、H. Yoo、D. H. Najafabadi、K. Watanabe、T. Taniguchi、A. Vishwanath 和 P. Kim，扭转双双层石墨烯中的可调自旋极化关联态，《自然》**583**，221，2020年（）。[38] M. He、Y. Li、J. Cai、Y. Liu、K. Watanabe、T. Taniguchi、X. Xu 和 M. Yankowitz，扭转双双层石墨烯中的对称性破缺，《物理学年鉴》**17**，26（2020年）。[39] M. Kuiri、C. Coleman、Z. Gao、A. Vishnuradhan、K. Watanabe、T. Taniguchi、J. Zhu、A. H. MacDonald 和 J. Folk，扭转双双层石墨烯中的自发时间反演对称性破缺，《自然·通讯》**13**，6468（2022年）。[40] Z. A. H. Goodwin、L. Klebl、V. Vitale、X. Liang、V. Gogtay、X. van Gorp、D. M. Kennes、A. A. Mostofi 和 J. Lischner，魔角单层-三层石墨烯中的平带、电子相互作用和磁序，《物理评论材料》**5**，084008（2021年）。[41] E. Khalaf、A. J. Kruchkov、G. Tarnopolsky 和 A. Vishwanath，扭转石墨烯多层中的魔角层级结构，《物理评论B》**100**，085109（2019年）。[42] J. Liu、Z. Ma、J. Gao 和 X. Dai，扭转多层石墨烯体系中的量子谷霍尔效应、轨道磁性和反常霍尔效应，《物理评论X》**9**，10.1103/physrevx.9.031021（2019年）。[43] G. Tarnopolsky、A. J. Kruchkov 和 A. Vishwanath，扭转双层石墨烯中魔角的起源，《物理评论快报》**122**，10.1103/physrevlett.122.106405（2019年）。[44] S.-P. Ding、M. Liang、Z. Ma、J.-T. Lü 和 J.-H. Gao，双扭转多层石墨烯体系中的镜面对称性分解，《物理评论B》**108**，195119（2023年）。[45] B. Xie、R. Peng、S. Zhang 和 J. Liu，交替扭转多层石墨烯：通用分区规则、双平带和轨道磁电效应，《npj计算材料》**8**，110（2022年）。[46] Y. Wang、J. Xie、Y.-J. Wang、J. Zhang、Y. Gao、Z. Zhang、D. Yi、Y. Xie、J. Shi、G. Zhao、C. Xiong、K. Watanabe、T. Taniguchi、Z.-D. Song、X. Lu 和 Y. Chen，菱方石墨烯中的新兴跨莫尔轨道与拓扑，arXiv（2026年），（访问日期：2026年11月24日），arXiv:2608.12478。[47] W. Wang、Y. Wang、Z. Zhang、Z. Huo、G. Zhou、S. Zhang、K. Watanabe、T. Taniguchi、X. Yang、Q. Dai、X. C. Xie、K. Liu、Z. Song 和 X. Lu，扭转晶体平带中的可编程量子反常霍尔绝缘体，《物理评论X》**16**，011015（2026年）。[48] N. Liu、Z. Chen、J. Ding、W. Zhou、H. Xiang、X. Fang、L. Wu、X. Zhan、L. Zhang、Q. Chen、K. Watanabe、T. Taniguchi、N. Xin 和 S. Xu，扭转菱面体石墨烯中的多样高陈数反常霍尔绝缘体，arXiv（2025年），（访问日期：2026年11月24日），arXiv:2507.11347。

[49] X. Wang、L. A. Benitez、S. Rao、V. T. Phong、W. I. Chu、K. Watanabe、T. Taniguchi、C. Lewandowski 和 P. Jarillo-Herrero，扭转菱面体石墨烯中的高陈数轨道磁性，《自然·材料》，10.1038/s41563-026-02659-7（2026年）。[50] R. Su、D. Waters、B. Zhou、K. Watanabe、T. Taniguchi、Y.-H. Zhang、M. Yankowitz 和 J. Folk，扭转石墨烯中的莫尔驱动的拓扑电子晶体，《自然》**637**，1084–1089（2025年）。[51] J. Dong、L. Liu、J. Zhu、Z. Pan、Y. Hong、F. Wang、Z. Ren、Z. Jia、K. Watanabe、T. Taniguchi、L. Du、D. Shi、W. Ya ng 和 G. Zhang，在高陈数平带中观测到整数和分数陈绝缘体，arXiv（2025年），（访问日期：2026年11月24日），arXiv:2507.09908。[52] D. Waters、R. Su、E. Thompson、A. Okounkova、E. Arreguin-Martinez、M. He、K. Hinds、K. Watanabe、T. Taniguchi、X. Xu、Y.-H. Zhang、J. Folk 和 M. Yankowitz，石墨烯多层莫尔晶格家族中的拓扑平带，《自然·通讯》**15**，10.1038/s41467-024-55001-7（2024年）。[53] Z. Chen、N. Liu、J. Hua、H. Xiang、W. Zhou、J. Ding、X. Fang、L. Wu、L. Zhang、Q. Chen、X. Chen、K. Watanabe、T. Taniguchi、N. Xin、W. Zhu 和 S. Xu，扭转菱面体石墨烯中的层工程量子反常霍尔效应，《自然·材料》，10.1038/s41563-026-02711-6（2026年）。[54] Z. Li、W. Wang、F. Wang、Z. Zhang、Q. Yang、K. Watanabe、T. Taniguchi、X. C. Xie、J. Wang、K. Liu、Z. Song 和 X. Lu，扭转菱面体石墨烯中的分数高陈绝缘体，《自然》**655**，892（2026年）。[55] H. Zhang、Q. Li、Y. Park、Y. Jia、W. Chen、J. Li、Q. Liu、C. Bao、N. Leconte、S. Zhou、Y. Wang、K. Watanabe、T. Taniguchi、J. Avila、P. Dudin、P. Yu、H. Weng、W. Duan、Q. Wu、J. Jung 和 S. Zhou，扭转单层-双层石墨烯中的二分可调磁场的电子结构观测，《自然·通讯》**15**，10 1038 41467 024 48166 8 2024。/s - - -（）。[56] S. Zhang、Q. Xu、Y. Hou、A. Song、Y. Ma、L. Gao、M. Zhu、T. Ma、L. Liu、X.-Q. Feng 和 Q. Li，扭转单层-多层石墨烯中的多米诺式堆垛顺序切换，《自然·材料》**21**，621（2022年）。[57] P. Ding、J. Yan、J. Wang、X. Han、W. Yang、H. Chen、D. Zhang、M. Huang、J. Zhao、S. Yang、T.-t. Xue、L. Liu、Y. Dai、Y. Hou、S. Zhang、X. Xu、Y. Wang 和 Y. Huang，通过移动纳米气泡操控扭转单层-多层石墨烯中的莫尔超晶格，《纳米快报》**24**，8208（2024年）。[58] H. Min 和 A. H. MacDonald，石墨烯多层电子结构中的手性分解，《物理评论B》**77**，155416（2008年）。[59] M. Koshino 和 E. McCann，ABC 堆垛多层石墨烯中的三角翘曲与贝里相 $n\pi$，《物理评论B》**80**，165409（2009年）。[60] R. Makov、F. Guinea 和 A. Stern，手性多层石墨烯中的平带，《物理评论B》**110**，195112（2024年）。[61] Y. Zhang、Y.-Y. Zhou、S. Zhang、H. Cai、L.-H. Tong、W.-Y. Liao、R.-J. Zou、S.-M. Xue、Y. Tian、T. Chen、Q. Tian、C. Zhang、Y. Wang、X. Zou、X. Liu、Y. Hu、Y.-N. Ren、L. Zhang、L. Zhang、W.-X. Wang、L. He、L. Liao、Z. Qin 和 L.-J. Yin，菱面体多层石墨烯中电子结构与关联效应的层依赖演化，《自然·纳米技术》**20**，222–228（2025年）。

[62] C. Dutreix 和 M. I. Katsnelson，菱方 N层石墨烯表面的弗里德尔振荡，《物理评论B》**93**，035413（2016）。[63] F. Guinea，层状石墨烯系统中的电荷分布与屏蔽，《物理评论B》**75**，235433（2007）。[64] M. Koshino，具有 aba 和 abc 堆垛方式的石墨烯多层中的层间屏蔽效应，《物理评论B》**81**，125304（2010）。[65] M. Long、A. Jimeno-Pozo、H. Sainz-Cruz、P. A. Pantaleón 和 F. Guinea，扭转多层石墨烯中超导性的演化，《美国国家科学院院刊》**121**，10 1073 2405259121 2024 . /pnas.（）。[66] P. A. Pantaleon、A. Jimeno-Pozo 和 F. Guinea，菱方石墨烯中界面驱动的远端表面态（2026），（访问日期：2026年11月24日）。[67] P. J. Ledwith、A. Vishwanath 和 E. Khalaf，具有任意陈数的手性扭转多层石墨烯中的理想陈平带族，《物理评论快报》**128**，10.1103/physrevlett.128.176404（2022）。[68] J. Wang 和 Z. Liu，手性扭转多层石墨烯模型中理想平带的层级结构，《物理评论快报》**128**，176403（2022）。[69] P. San-Jose、J. González 和 F. Guinea，石墨烯双层中的非阿贝尔规范势，《物理评论快报》**108**，216802（2012）。[70] J. M. B. Lopes dos Santos、N. M. R. Peres 和 A. H. Castro Neto，扭转双层石墨烯：电子结构，《物理评论快报》**99**，256802（2007）。[71] E. Suárez Morell、P. Vargas、L. Chico 和 L. Brey，电场下扭转双层石墨烯中的电荷再分布与层间耦合，《物理评论B》**84**，195421 2011（）。[72] L.-H. Tong、Q. Tong、L.-Z. Yang、Y.-Y. Zhou、Q. Wu、Y. Tian、L. Zhang、L. Zhang、Z. Qin 和 L.-J. Yin，魔角扭转单层-双层石墨烯中平带的光谱可视化：局域化与离域化共存，《物理评论快报》**128**，126401 2022（）。[73] S. Li、Z. Wang、Y. Xue、L. Cao、K. Watanabe、T. Taniguchi、H. Gao 和 J. Mao，扭转单层–双层石墨烯中平带波函数的栅控局域化-离域化转变，《中国物理B》**32**，067304（2023）。[74] E. Seewald、S. Ghosh、N. Verma、J. Cenker、Y. Dong、B. Yang、A. Basu、T. Taniguchi、K. Watanabe、M. M. Deshmukh、D. N. Basov、R. Queiroz、C. Dean 和 A. N. Pasupathy，绘制多层菱方石墨烯中的莫尔势，arXiv（2025），（访问日期：2026年11月24日），arXiv:2510.09548 [cond-mat.mes-hall]。[75] L. Rademaker 和 P. Mellado，扭转双层石墨烯中的电荷转移绝缘，《物理评论B》**98**，235158（2018）。[76] F. Guinea 和 N. R. Walet，扭转双层石墨烯中的静电效应、能带畸变与超导性，《美国国家科学院院刊》**115**，13174–13179（2018）。[77] P. A. Pantaleón、T. Cea、R. Brown、N. R. Walet 和 F. Guinea，石墨烯堆垛中的窄能带、静电相互作用与能带拓扑，《二维材料》**8**，044006（2021）。[78] Z. Zhang、X. Chen、K. Watanabe、T. Taniguchi、Z. Song 和 X. Lu，菱方石墨烯中的纠缠莫尔陈绝缘体

2026年），arXiv:2512.21609。[79] J.-B. Wu、X. Zhang、M. Ijäs、W.-P. Han、X.-F. Qiao、X.- L. Li、D.-S. Jiang、A. C. Ferrari 和 P.-H. Tan，《扭转多层石墨烯的共振拉曼光谱》，《自然·通讯》**5**，10.1038/ncomms6309（2014）。[80] D. Waters、E. Thompson、E. Arreguin-Martinez、M. Fujimoto、Y. Ren、K. Watanabe、T. Taniguchi、T. Cao、D. Xiao 和 M. Yankowitz，《扭转石墨薄膜的混合维度莫尔系统》，《自然》**620**，750 755 2023–（）。[81] G. Palumbo，《多能带拓扑系统中的非阿贝尔张量贝里联络》，Phys. Rev. Lett. **126**，246801 2021（）。[82] S.-y. Li、Z. Wang、Y. Xue、Y. Wang、S. Zhang、J. Liu、Z. Zhu、K. Watanabe、T. Taniguchi、H.-j. Gao、Y. Jiang 和 J. Mao，《扭转单层-双层石墨烯中拓扑绝缘态和关联绝缘态的成像》，《自然·通讯》**13**，4225（2022）。[83] F. Zhang、B. Sahu、H. Min 和 A. H. MacDonald，《 abc堆垛石墨烯三层的能带结构》，《物理评论B》**82**，035409（2010）。[84] R. Bistritzer 和 A. H. MacDonald，《扭转双层石墨烯中的莫尔能带》，《美国国家科学院院刊》**108**，12233（2011）。[85] M. Koshino，《一般非公度原子层中的层间相互作用》，《新物理学杂志》**17**，015014（2015）。[86] M. Koshino、N. F. Q. Yuan、T. Koretsune、M. Ochi、K. Kuroki 和 L. Fu，《扭转双层石墨烯中的最大局域化 Wannier 轨道与扩展哈伯德模型》，《物理评论X辑》**8**，031087（2018）。[87] G. Parra-Martínez、A. Jimeno-Pozo、J. A. Silva-Guillén 和 F. Guinea，《层数变化的菱方石墨烯中的向列相和部分极化相：一项广泛的哈特里–福克研究》，《先进材料》**38**，10 1002 202514008 2025。/ adma.（）。[88] H. Zhou、T. Xie、A. Ghazaryan、T. Holder、J. R. Ehrets、E. M. Spanton、T. Taniguchi、K. Watanabe、E. Berg、M. Serbyn 和 A. F. Young，《菱方三层石墨烯中的半金属和四分之一金属》，《自然》**598**，429–433（2021）。[89] T. Fukui、Y. Hatsugai 和 H. Suzuki，《离散布里渊区中的陈数：计算（自旋）霍尔电导的高效方法》，《日本物理学会志》**74**，1674（2005）。[90] V. T. Phong 和 C. Lewandowski，《扭转菱方三层-双层石墨烯中由库仑相互作用稳定的孤立窄带及其陈数》$\mathcal{C}>1$，《自然·通讯》**17**，10.1038/s41467-026-74428- 8（2026年）。[91] G. P. Mikitik 和 Y. V. Sharlai，《石墨烯和多层石墨中的贝里相位》，《低温物理学》**34**，794–800（2008年）。[92] S. Zhang、X. Dai 和 J. Liu，《扭转多层石墨烯体系中的自旋极化向列序、量子谷霍尔态和场可调拓扑相变》，《物理评论快报》**128**，10.1103/phys- revlett.128.026403（2022年）。

《扭转菱方多层石墨烯中的拓扑窄带》补充材料

Alejandro Jimeno-Pozo、Danna Liu、Francisco Guinea 和 Pierre A. Pantaleón

目录

S1. 完整连续模型和约定 19 S2. 路径投影表面模型和手征极限 21 S3. 不同层数下的层杂化演化 24 S4. 位移场作用下的分层能带结构 25 S5. 分层实空间密度 26 S6. 位移场依赖的实空间密度 28 S7. 陈数计算 30 S8. 上中心能带中的拓扑相 31 S9. 对跃迁参数化和位移场分布的稳健性 34

S1. 完整连续模型和约定

我们研究一种扭转多层石墨烯体系，该体系由一个石墨烯单层堆叠在一个含有 N 层菱方（即 ABC 堆垛）石墨烯体系的顶部构成，总层数为 $N+1$ 层。我们还纳入 $N=2$，即 AB 堆垛双层，作为最简单的参考体系。在未旋转构型中，菱方堆垛薄层由 N 个石墨烯层组成，标记为 $l=1$、.....、N；其中原子位点 A_l 和 B_l 按照标准 ABC 堆垛序列排列，使得相邻层之间的位点 B_l 和 A_{l+1} 在垂直方向上对齐。旋转单层标记为 $l=0$。

石墨烯的面内晶格由以下原始向量定义

$$\boldsymbol{a}_1 = a(1,0), \qquad \boldsymbol{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \tag{S1}$$

其中 $a \simeq 0.246\text{nm}$。相应的倒格矢为

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right), \qquad \boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right). \tag{S2}$$

顶层单层旋转了 $+\theta/2$，而整个菱面体堆垛旋转了 $-\theta/2$。每层的倒格矢为 $\boldsymbol{b}_i^{(l)} = R(\theta_l)\boldsymbol{b}_i$，其中 $\theta_0 = +\theta/2$ 和 $\theta_l = -\theta/2$ 对应 $l \geq 1$。莫尔倒格矢为

$$\boldsymbol{G}_i = \boldsymbol{b}_i^{(0)} - \boldsymbol{b}_i^{(1)}, \qquad i = 1, 2, \tag{S3}$$

且层 l 的狄拉克点为

$$\boldsymbol{K}^{(l)} = \frac{2\boldsymbol{b}_1^{(l)} + \boldsymbol{b}_2^{(l)}}{3}. \tag{S4}$$

在单谷连续介质描述中，完整的哈密顿量以层块形式写为

$$H(\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix} H_{00}(\boldsymbol{q}) & T_{01}(\boldsymbol{r}) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ T_{01}^{\dagger}(\boldsymbol{r}) & H_{11}(\boldsymbol{q}) & U_{12}(\boldsymbol{q}) & W_{13} & \cdots & 0 \\ 0 & U_{21}(\boldsymbol{q}) & H_{22}(\boldsymbol{q}) & U_{23}(\boldsymbol{q}) & \ddots & \vdots \\ 0 & W_{13}^{\dagger} & U_{32}(\boldsymbol{q}) & H_{33}(\boldsymbol{q}) & \ddots & W_{(N-2)N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & U_{(N-1)N}(\boldsymbol{q}) \\ 0 & 0 & \cdots & W_{(N-2)N}^{\dagger} & U_{N(N-1)}(\boldsymbol{q}) & H_{NN}(\boldsymbol{q}) \end{pmatrix}. \tag{S5}$$

将旋转单层与菱方堆垛薄层直接耦合的唯一项是界面莫尔隧穿$T_{01}(\boldsymbol{r})$。层分辨狄拉克算符为

$$\pi^{(l)}=\eta q_x^{(l)}+iq_y^{(l)},\qquad (\pi^{(l)})^{\dagger}=\eta q_x^{(l)}-iq_y^{(l)}, \tag{S6}$$

其中，$\eta=\pm1$ 是谷指标，$\boldsymbol{q}^{(l)}=R(\mp\theta/2)(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{K}^{(l)})$；上号对应旋转单层，下号对应菱方堆垛薄层。在 $\hbar=1$的单位制下，层内块为

$$H_{ll}(\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix} \Delta^{(l)} & v_f(\pi^{(l)})^{\dagger} \\ v_f\pi^{(l)} & \Delta^{(l)} \end{pmatrix}, \tag{S7}$$

其中 $v_f=(\sqrt{3}/2)a\gamma_0$。垂直位移场通过作用于两个外层的位点势纳入模型，

$$\Delta^{(l)}=\begin{cases} -V/2, & l=0, \\ +V/2, & l=N, \\ 0, & \text{otherwise}. \end{cases} \tag{S8}$$

采用这一分布是因为它能为中等势差 [64]提供合理的低能描述。它保留了导致波函数权重场驱动再分布的静电失谐。随内部层变化的势虽能进一步修正色散和杂化，但要确定本文考察的表面耦合机制，并不需要解析这一分布。该近似适用于中等偏压下由表面主导的中心态；在强场下，或这些态与远端能带发生显著混合时，层内电势会变得更加重要；例如参见文献 [90]。S9节将这一分布与沿所有层线性下降的均匀场进行比较。对于 $l=1,\ \ldots,\ N-1$，相邻菱方堆垛层之间的耦合为

$$U_{l,l+1}(\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix} v_4(\pi^{(l)})^{\dagger} & v_3\pi^{(l)} \\ \gamma_1 & v_4(\pi^{(l)})^{\dagger} \end{pmatrix}, \tag{S9}$$

其中 $v_j=(\sqrt{3}/2)a\gamma_j$对于 $j=3,\ 4$ 和$U_{l+1,\,l}=U_l^{\dagger},\ _{l+1}$。当 $N\geq3$时，次近层跃迁为

$$W_{l,l+2}=\begin{pmatrix} 0 & \gamma_2/2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\qquad l=1,\ldots,N-2, \tag{S10}$$

其中$W_{l+2,\,l}=W_l^{\dagger},\ _{l+2}$。旋转单层与第一层菱方堆垛层之间的莫尔隧穿为

$$T_{01}(\boldsymbol{r})=T_1+T_2e^{i\eta\boldsymbol{G}_1\cdot\boldsymbol{r}}+T_3e^{i\eta(\boldsymbol{G}_1+\boldsymbol{G}_2)\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{S11}$$

其中

$$T_j=\begin{pmatrix} u & u'e^{-i\phi_j} \\ u'e^{i\phi_j} & u \end{pmatrix},\qquad \phi_j=\eta(j-1)\frac{2\pi}{3}. \tag{S12}$$

计算中使用的参数为层间跃迁 $\gamma_0=3.16$ eV、$\gamma_1=0.502$ eV、$\gamma_2=-0.0171$eV、$\gamma_3=-0.377$ eV 和 $\gamma_4=-0.099$ eV [83], ，以及莫尔隧穿振幅 $u=0.0797$ eV 和$u'=0.0975$ eV [77, 84–86]。在 S9节中，我们使用另一组菱方跃迁参数考察了结果对这一选择的敏感性。

对于数值对角化，将每个层和子晶格分量展开为莫尔平面波，

$$\psi_{l\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{r};\boldsymbol{k}) = \sum_{\boldsymbol{G}\in\mathcal{G}} C_{l\alpha,\boldsymbol{G}}^{(n)}(\boldsymbol{k}) e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{S13}$$

其中， $\mathcal{G}$ 是由 $\boldsymbol{G}_1$ 和 $\boldsymbol{G}_2$生成的有限倒格矢集合。对于给定的一组参数，在比较谱、层权重和实空间密度时，均采用相同且已收敛的倒空间截断。S2 节从完整哈密顿量推导低能表面理论。随后，S3–S6 节利用完整模型的本征态分析层杂化和实空间密度，而 S7 和 S8 节给出拓扑计算和上能带相图。S9节检验结果对跃迁参数化和位移场分布的稳健性。

S2. 路径投影表面模型与手征极限

本节推导一种表面理论，以保留菱方石墨烯中的主要传播过程，同时消去高能二聚化位点。我们保留 γ_1、 γ_2和 γ_3，令 $\gamma_4 = 0$，并保留两种莫尔隧穿振幅 u和 u'。省略 γ_4 后，便可得到下方紧凑的表面非对角形式，因为 γ_4 耦合同亚晶格并产生额外的对角自能项。该构造将参考文献 [59] 中所述的菱方石墨烯路径展开推广至一个扭转单层，该单层与 N层薄片的界面位点和远端表面位点耦合。

对于 $N \geq 2$，强垂直跃迁 γ_1 将 B_l 与 A_{l+1}配对，只留下 A_1 和 B_N 作为两个表面位点。计入旋转单层后，保留扇区为

$$\mathcal{L} = \{A_0, B_0, A_1, B_N\}, \tag{S14}$$

而消去扇区为

$$\mathcal{H} = \{B_1, A_2, B_2, A_3, \ldots, B_{N-1}, A_N\}. \tag{S15}$$

我们考虑 $N \geq 2$。为完整起见，当 $N = 1$ 时，消去扇区 $\mathcal{H}$ 为空，无需进行投影。在有序基（$\mathcal{L}$， $\mathcal{H}$）中，

$$H = \begin{pmatrix} H_{\mathcal{L}\mathcal{L}} & H_{\mathcal{L}\mathcal{H}} \\ H_{\mathcal{H}\mathcal{L}} & H_{\mathcal{H}\mathcal{H}} \end{pmatrix}. \tag{S16}$$

精确的下折叠　　哈密顿量依赖于能量。对于 $|E| \ll \gamma_1$，我们保留 leading Löwdin项

$$H_{\text{eff}} = H_{\mathcal{L}\mathcal{L}} - H_{\mathcal{L}\mathcal{H}} H_{\mathcal{H}\mathcal{H}}^{-1} H_{\mathcal{H}\mathcal{L}}. \tag{S17}$$

菱方堆垛薄层的所有层共享同一个旋转狄拉克算符，

$$\pi = \eta q_x + i q_y, \qquad \pi^\dagger = \eta q_x - i q_y. \tag{S18}$$

定义如下较为方便

$$\xi_1 = v_f \pi, \qquad \xi_2 = v_3 \pi^\dagger, \qquad \xi_3 = \frac{\gamma_2}{2}, \tag{S19}$$

其中， ξ_1、 ξ_2和 ξ_3 分别使有效路径从 A_1 朝 B_N 方向推进一个、两个和三个层指标。普通的层内跃迁提供 ξ_1，倾斜的 γ_3 跃迁提供 ξ_2，而次近邻层跃迁提供 ξ_3。表面间矩阵元 $X_N(\boldsymbol{q})$定义为

$$X_N = -\frac{1}{\gamma_1}\left(\xi_1 X_{N-1} + \xi_2 X_{N-2} + \xi_3 X_{N-3}\right), \qquad N \geq 1, \tag{S20}$$

with

$$X_0 = -\gamma_1, \qquad X_{N<0} = 0. \tag{S21}$$

等价地，

$$X_N(\boldsymbol{q}) = \sum_{\substack{n_1,n_2,n_3\geq 0 \\ n_1+2n_2+3n_3=N}} \frac{(n_1+n_2+n_3)!}{n_1!n_2!n_3!} \frac{\xi_1^{n_1}\xi_2^{n_2}\xi_3^{n_3}}{(-\gamma_1)^{n_1+n_2+n_3-1}}. \tag{S22}$$

如参考文献 [59] 中所获得的结果。约束条件 $n_1+2n_2+3n_3=N$ 计算两个表面位点之间的总推进量，而多项式系数计算基本步骤的不同排序方式。前几个振幅为

$$X_1=\xi_1, \tag{S23}$$

$$X_2=-\frac{\xi_1^2}{\gamma_1}+\xi_2, \tag{S24}$$

$$X_3=\frac{\xi_1^3}{\gamma_1^2}-\frac{2\xi_1\xi_2}{\gamma_1}+\xi_3, \tag{S25}$$

其复现了菱方三层石墨烯中通常的手征项、三角翘曲以及直接的 $\gamma_2/2$ 贡献 [58, 59, 91]。

在零位移　　电场下，表面基底（A_1，B_N）中的投影菱方哈密顿量为

$$H_{\mathrm{ABC}}^{(N),\mathrm{path}}(\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix}0 & X_N^\dagger(\boldsymbol{q})\\ X_N(\boldsymbol{q}) & 0\end{pmatrix}, \tag{S26}$$

其本征值为 $E_\pm=\pm|X_N|$。因此，严格的手性幂只是更一般的相干路径求和中的一个贡献。相同的投影会修饰最初终止于 B_1的莫尔隧穿。定义

$$D_m(\boldsymbol{q})=-\frac{X_m(\boldsymbol{q})}{\gamma_1},\qquad D_0=1. \tag{S27}$$

将原始界面矩阵写为

$$T_{01}(\boldsymbol{r})=\begin{pmatrix}T_{A_0A_1}(\boldsymbol{r}) & T_{A_0B_1}(\boldsymbol{r})\\ T_{B_0A_1}(\boldsymbol{r}) & T_{B_0B_1}(\boldsymbol{r})\end{pmatrix}, \tag{S28}$$

则（A_0，B_0）与（A_1，B_N）之间的投影隧穿为

$$\widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix}T_{A_0A_1}(\boldsymbol{r}) & T_{A_0B_1}(\boldsymbol{r})D_{N-1}^\dagger(\boldsymbol{q})\\ T_{B_0A_1}(\boldsymbol{r}) & T_{B_0B_1}(\boldsymbol{r})D_{N-1}^\dagger(\boldsymbol{q})\end{pmatrix}. \tag{S29}$$

第一列是直接项，因为保留了 A_1。第二列表示隧穿进入 B_1，随后通过虚传播到达 B_N。在 $V=0$处，完整的投影哈密顿量为

$$H_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{path}}=\begin{pmatrix}H_{00}^0 & \widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}}\\ \left(\widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}}\right)^\dagger & H_{\mathrm{ABC}}^{(N),\mathrm{path}}\end{pmatrix}, \tag{S30}$$

其中

$$H_{00}^0(\boldsymbol{q})=\begin{pmatrix}0 & v_f(\pi^{(0)})^\dagger\\ v_f\pi^{(0)} & 0\end{pmatrix}. \tag{S31}$$

接下来，我们纳入外层位移场，其中包含 $\Delta=V/2$。单层 L_0 携带 $-\Delta$，远端层的两个子晶格都携带 $+\Delta$ L_N。对于 $N\geq 2$，保留 B_N，而消去 A_N。因此，后者会产生额外的贡献；若只为保留基底添加现场能，则会遗漏这一贡献。在领先阶与能量无关的投影中，可在 Δ 中精确求逆消去块，得到

$$H_{\mathrm{eff},\Delta}^{\mathrm{path}}=\begin{pmatrix}H_{00}^{\Delta} & \widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}}\\ \left(\widetilde{T}_{01}^{\mathrm{path}}\right)^\dagger & H_{\mathrm{ABC},\Delta}^{(N),0}\end{pmatrix}+\Delta\Lambda\Lambda^\dagger,\qquad N\geq 2, \tag{S32}$$

with

$$H_{00}^{\Delta}=\begin{pmatrix}-\Delta & v_f(\pi^{(0)})^\dagger\\ v_f\pi^{(0)} & -\Delta\end{pmatrix},\qquad H_{\mathrm{ABC},\Delta}^{(N),0}=\begin{pmatrix}0 & X_N^\dagger\\ X_N & \Delta\end{pmatrix}, \tag{S33}$$

and

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma_1^{-1} T_{A_0 B_1} D_{N-2}^{\dagger} \\ \gamma_1^{-1} T_{B_0 B_1} D_{N-2}^{\dagger} \\ -D_{N-1}^{\dagger} \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{S34}$$

修正项 $\Delta\Lambda\Lambda^{\dagger}$ 的符号与 Δ相同。对于孤立投影薄层，它给出

$$H_{\mathrm{ABC},\Delta}^{(N),\mathrm{isolated}} = \begin{pmatrix} \Delta |D_{N-1}|^2 & X_N^{\dagger} \\ X_N & \Delta \end{pmatrix}. \tag{S35}$$

对于 $N = 1$，没有消去任何格点：基组为 (A_0, B_0, A_1, B_1)， L_1 的两个格点都接收 $+\Delta$，且不存在修正项。严格手征极限为

$$\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0, \qquad u = 0, \tag{S36}$$

在这些条件下，只有包含 N 普通狄拉克步的路径能够保留下来，并且

$$X_N^{\mathrm{ch}} = (-1)^{N-1} \frac{(v_f \pi)^N}{\gamma_1^{N-1}}, \qquad D_{N-1}^{\dagger,\mathrm{ch}} = (-1)^{N-1} \frac{(v_f \pi^{\dagger})^{N-1}}{\gamma_1^{N-1}}. \tag{S37}$$

数值比较中使用的约化模型将 $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$ 设为零，同时保留 γ_1、 u和 u'。因此，其菱方表面振幅具有与式 (S37) 相同的纯幂形式，但其莫尔隧穿保留了两种振幅。严格手性模型进一步将 $u = 0$设为零，同时保留 γ_1 和 u'。在此极限下，同亚晶格莫尔矩阵元$T_{A_0 A_1}$ 和$T_{B_0 B_1}$ 消失，式 (S29) 变为

$$\widetilde{T}_{01}^{\mathrm{ch}} = \begin{pmatrix} 0 & T_{A_0 B_1} D_{N-1}^{\dagger,\mathrm{ch}} \\ T_{B_0 A_1} & 0 \end{pmatrix}. \tag{S38}$$

在 $u = V = 0$ 以及 $\gamma_4 = 0$，路径投影哈密顿量和严格手征哈密顿量均与...反对易。 h

$$\Gamma = \mathrm{diag}(1, -1, 1, -1), \qquad \{\Gamma, H_{\mathrm{eff}}\} = 0. \tag{S39}$$

因此，保留 γ_2 和 γ_3 能够保持亚晶格对称性以及 $E \leftrightarrow -E$。路径约束还会在 $\gamma_2 \neq 0$时产生局部的小动量 N 模 3 结构。对于 $N = 3m$，最低阶路径包含 ξ_3 的 m 个因子，且与动量无关。对于 $N = 3m + 1$，最低阶贡献包含一个 ξ_1 因子，并与 π成正比。对于 $N = 3m + 2$，最低阶贡献包含一个 ξ_2 因子，并与 $\pi^{\dagger}$成正比。这种局域渐近分类不同于正文所讨论的中心能带电荷纹理在莫尔尺度上的重现。

路径投影哈密顿量是一种低能理论。它忽略了（$E - H_{\mathcal{H}\mathcal{H}}$）$^{-1}$的能量依赖性、高能二聚体能带，以及由 γ_4产生的同亚晶格自能。当能量和表面路径振幅相对于层间 γ_1较小时，该近似是受控的。在远端能带交叉、大位移场以及需要定量确定相边界时，完整连续模型仍然不可或缺。这里列出约化模型与严格手征模型能谱，作为对上述模型层级的数值检验。正文给出了这些极限的一般定义及其物理作用；补充图 S1 和 S2 旨在展示，在逐步移除跃迁通道后，哪些谱特征仍然保留。

补充图 S1 展示了约化模型，其中 $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$ ，而 γ_1、 u 和 u' 保持有限。随着 N 增大，两条中心能带逐渐变窄的现象在所有三种场构型中仍然可见。这在数值上证实，主要的层数依赖性并不需要更远邻跃迁参数：约化模型保留的纯幂次菱方表面传播已足以产生这一现象。单层主导态（位于 K' 附近）与菱方表面态（位于 K 附近）之间的分离度也依然存在。位移场对这两个扇区的作用不同。在 K' 附近，低能态具有更强的单层特征，电场主要改变它们的相对能量。在 K 附近，态源自两个菱方表面，电场则改变表面失谐并重构局域带隙。去除 γ_2、 γ_3 和 γ_4 会抑制完整模型中可见的大部分符号不对称性和许多额外的避免交叉，但由于同亚晶格莫尔振幅 u 仍然有限，能谱在 $E \to -E$ 下并非精确对称。

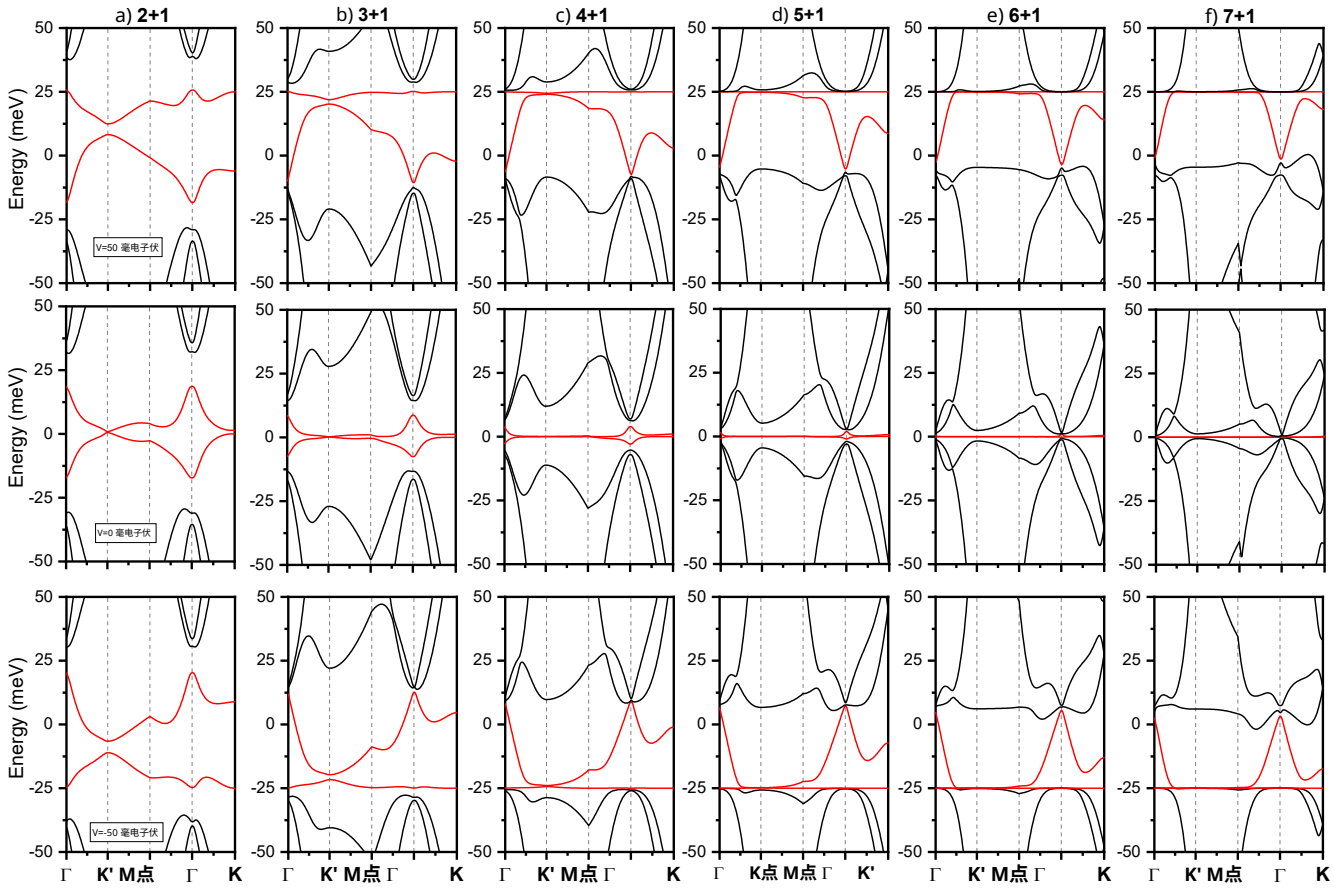

图 S1. **约化模型的电子结构。** 约化的（$N+1$）层菱方石墨烯模型在 $\theta = 1.05^\circ$ 下从 $N = 2$ 到 $N = 7$ 的能带结构。顶行对应 $V = 50$ 毫电子伏，中间行对应 $V = 0$，底行对应 $V = -50$ 毫电子伏。红色曲线标出两个中心能带。能量尺度随层数变化。

补充图 S2 展示了严格手征极限，即进一步令 $u = 0$。在 $V = 0$ 处，数值能谱呈现出式 (S39) 所蕴含的精确对称性：每个能量为 E 的态都有一个能量为 $-E$ 的对应态。随着 N 增大，中心能带变窄的现象依然存在，这表明该现象源于单层狄拉克锥与严格的 N 阶菱方表面路径之间的耦合，而非粒子–空穴不对称跃迁过程。有限的位移场会引入对角的外层势，并打破这种能谱对称性，从而使顶部和底部两行呈现不对称。这一解释将本文的构造与早期关于手征菱方石墨烯、理想手征扭转双层以及一般扭转多层的理论联系起来 [41–45, 92]。

综合来看，这两幅图区分了稳健特征与依赖模型的特征。中心能带变窄，以及 K' 单层扇区与 K 菱方扇区之间的区别，在两个极限下都得以保留。同亚晶格莫尔隧穿 u 解释了约化模型残余的能谱不对称性，而完整模型中的 γ_2、 γ_3 和 γ_4 则产生了额外的翘曲、粒子 – 空穴不对称性以及远端能带反交叉。严格手征模型突显了精确对称性和表面绕数；约化模型和完整模型则展示了这些结构如何发生形变，同时不改变其低能起源。

S3. 不同层数下的层杂化演化

我们比较了 AB 双层（$N = 2$）与菱方堆垛薄层（$N = 3$、……、6）的耦合演化，表明这一系列体系中杂化机制始终存在。对于动量为 $\boldsymbol{k}$ 处能带 n 的一个本征态，其在第 L_l 层上的权重为

$$W_l^{(n)}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\alpha=A,B} \sum_{\boldsymbol{G}\in\mathcal{G}} \left| C_{l\alpha,\boldsymbol{G}}^{(n)}(\boldsymbol{k}) \right|^2 , \tag{S40}$$

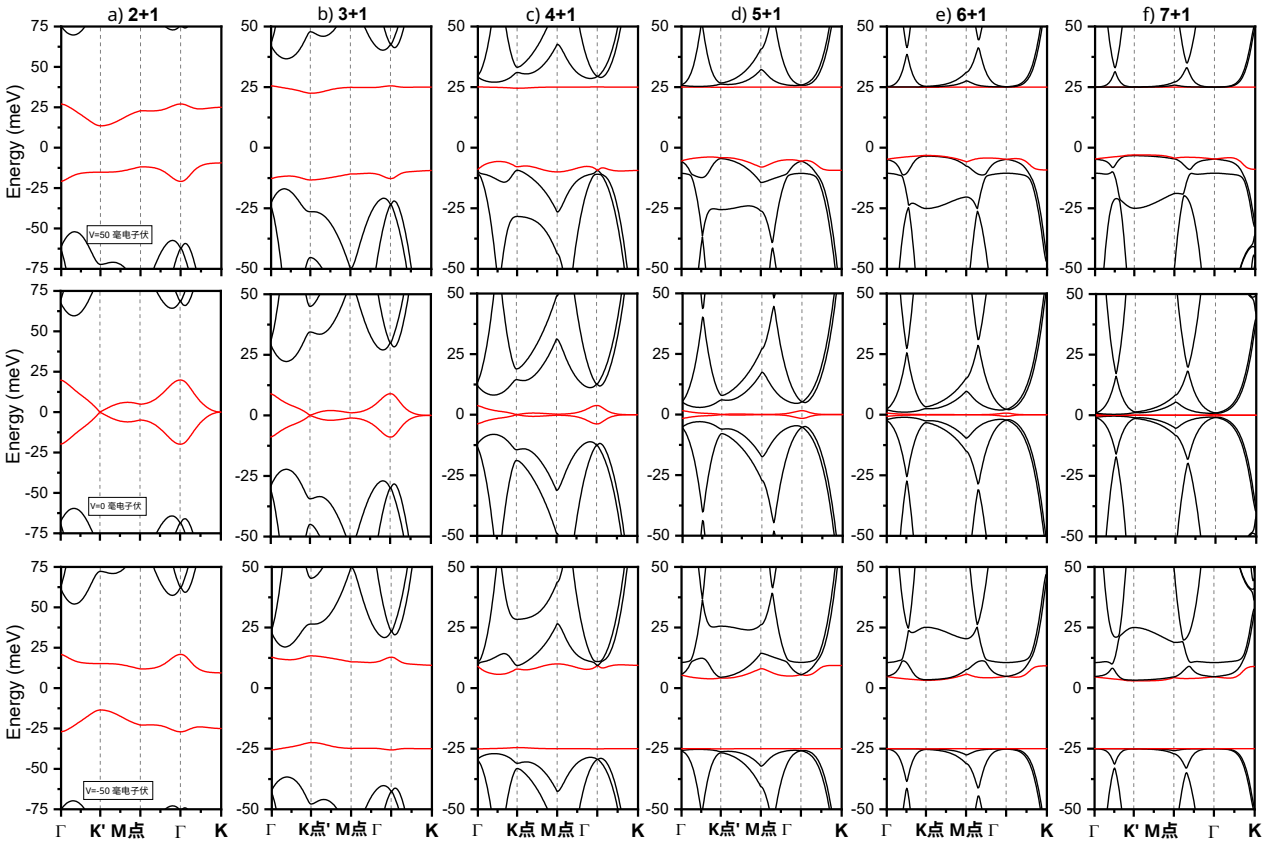

图 S2。**严格手性模型的电子结构。** $\theta = 1.05°$下，从 $N = 2$ 到 $N = 7$ 的严格手性（$N + 1$）层菱方石墨烯模型的能带结构。顶行对应 $V = 50$ 毫电子伏，中行对应 $V = 0$，底行对应 $V = -50$ 毫电子伏。红色曲线突出显示两条中心能带。谱展示了理想化极限，其中中央能带变窄由单层狄拉克锥与严格 N阶菱方表面路径之间的耦合控制。

其中，$C_{l\alpha}^{(n)}$，$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{k})$ 是式（S13）中引入的平面波系数，对应于第 l 层、子晶格 α 和莫尔谐波 $\boldsymbol{G}$ 上的归一化本征矢。倒空间集合 $\mathcal{G}$ 的选取足够大，可使所示能带和层权重收敛。

补充图 S3 总结了 $N = 2$、……、6 的演化。颜色、线宽和不透明度按照正文方法部分中定义的约定编码层组成；细灰色骨架表示底层色散关系。混合颜色表示可比的主要贡献；这并不意味着其余所有层权重都为零。

基色顺序由层索引确定，并在每个面板中标示。对于较小的 N，序列在最后一个可用层处截断。由于每个 N 都经过独立归一化，比较结果清楚地表明，同一杂化机制仍然存在。在所有情况下，增强莫尔耦合都会将中心能带的权重从旋转单层转移到菱方扇区，并最终转向远端表面 L_N，同时保留动量依赖的界面–表面混合。

S4. 位移场下的分层能带结构

补充图 S4 和 S5 详细展示了代表性 $N = 4$ 系统中由位移场诱导的重构的分层分解。每幅图的面板 **a** 展示层组分分辨能带结构，采用与 S3 节相同的颜色、线宽和不透明度约定。面板 **b–f** 展示各层在L_0, L_1, L_2, L_3 和 L_4 上的权重。

对于 $V = +50$ 毫电子伏，上中心能带和邻近的上远端能带具有显著的远端表面 L_4 特征，而下中心能带则主要集中在由 L_0 和 L_1形成的扭转界面扇区中。

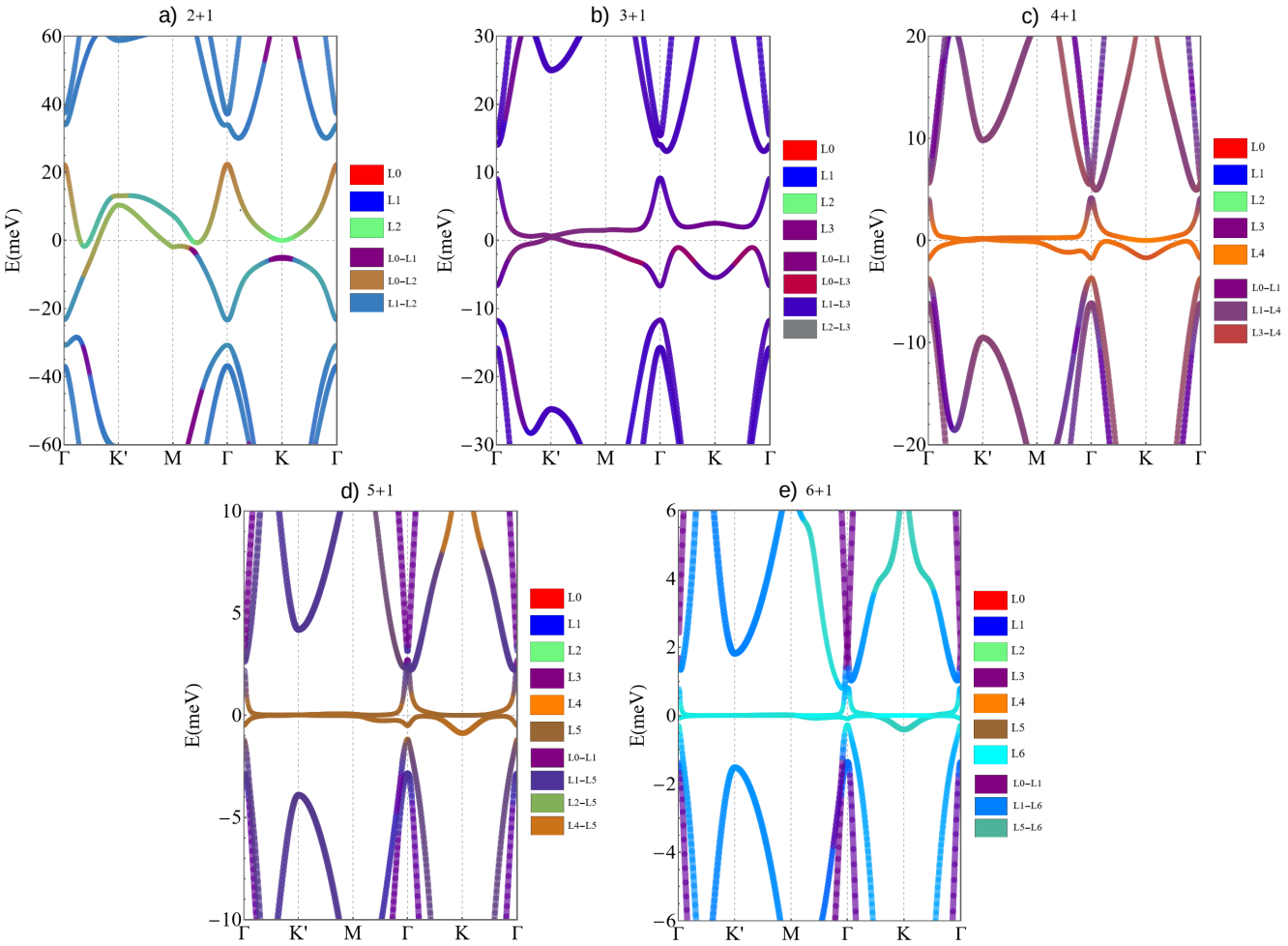

图 S3. **单层–多层体系中的层杂化。** AB 双层（**a**、 $N = 2$）和菱方堆垛薄片（**b**–**e**、 $N = 3,\ldots,6$）中的耦合演化。颜色、粗细和不透明度遵循正文方法部分中定义的约定。每个面板中均标明层的颜色约定。绘图采用 S2 节所述的投影模型。

层组成仍随动量而变化，而名义上的界面主导能带在特定的避免交叉附近仍保留远端表面混合。对于 $V = -50$ 毫电子伏，层极化发生反转：下中心能带及邻近的下方能带主要呈现远端表面特征，而上中心能带及邻近的上方能带则主要集中在扭转界面扇区中。这些图展示了S6节所讨论的实空间层切换在动量空间中的对应表现。

S5. 分层实空间密度

正文展示了随层数变化的总实空间密度。在图 S6、S7 和 S8 中，我们将零电场下的中心态分解到各个单独的层，分别对应 $N = 2$、3、4。动量顺序为 Γ、 K'、 M 和 K，与正文中的图保持一致；所有展示的高对称点处总密度的全局最小值和最大值共同确定统一的颜色归一化。每幅图均表示所示动量处中心能带态的概率密度。分层分解揭示了其在莫尔元胞内的空间调制，以及其在界面或远端表面上的权重。

分层分解区分了空间调制与积分层权重。旋转单层 L_0和界面层 L_1 通常承载最强的莫尔纹理，因为它们通过 T_{01}直接相连。其余层则通过内部 ABC 传播产生响应。因此，某个态在远端表面 L_N 上可能具有显著的积分权重，却只在该处呈现微弱的实空间调制 [66]。在路径

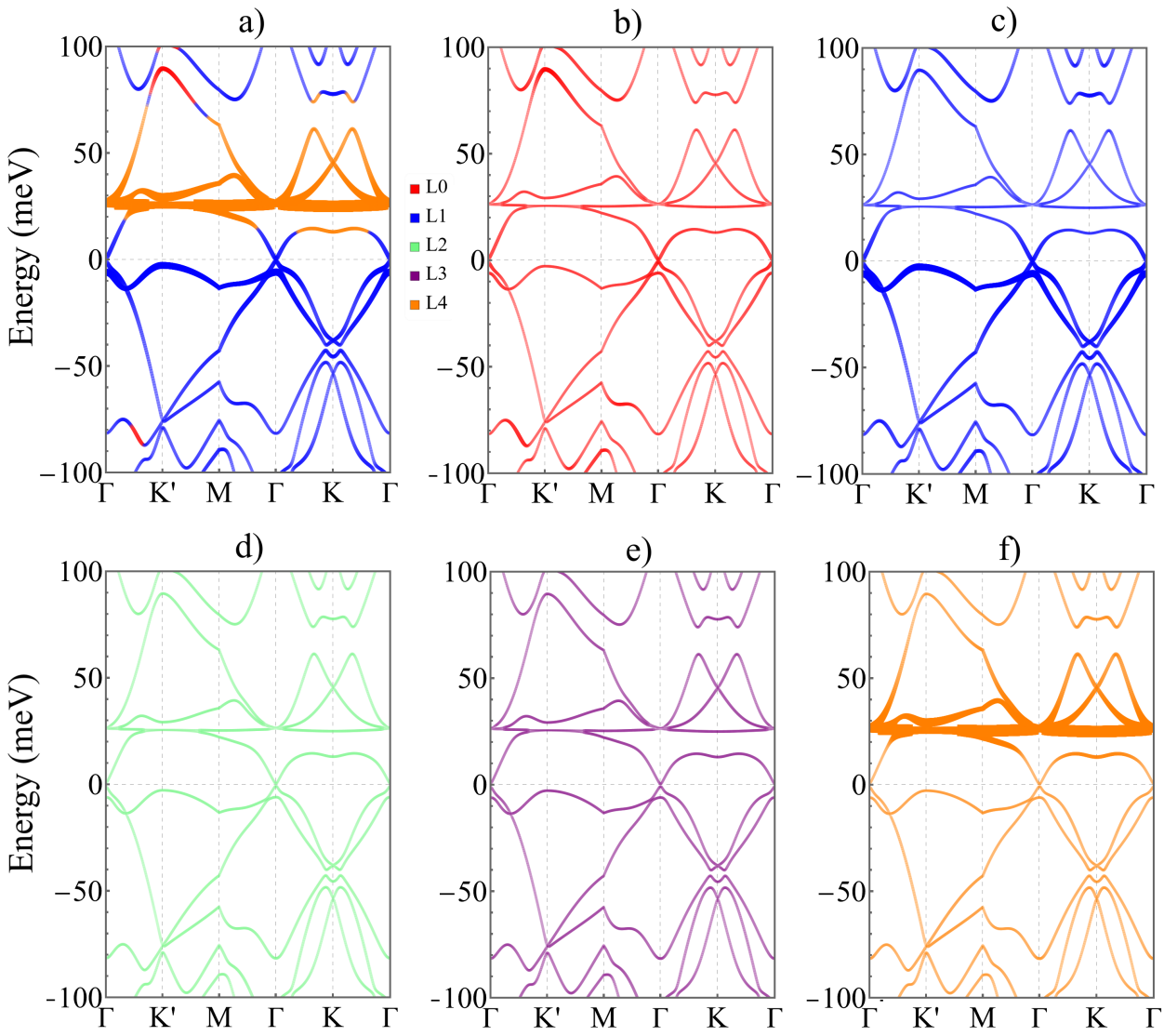

图 S4。**的分层能带结构** $N = 4$ **和** $V = +50$ **毫电子伏。a**，层组分分辨能带结构。**b–f**，L_0、L_1、L_2、L_3和 L_4上各层的层权重。上中心能带及其附近的上远端能带具有显著的远端表面 L_4 特征，而下中心能带则主要呈现扭转界面特征，并带有动量依赖的远端表面混合。

投影描述中，这个远端分量主要由 B_N 承载，并通过缀饰振幅D_{N-1} 到达，而不是由旋转单层直接隧穿而来。

补充图 S6展示了界面与远端表面彼此区分的AB 双层。 L_0–L_1对具有最强的三角纹理，而 L_2 构成了AB 双层的双表面低能扇区。因此，该体系既不是传统的扭转双层，也不是孤立 AB 双层，而是直接受扰动的界面与AB 双层边界扇区的杂化结构。补充图 S7和S8展示了这种区别如何随厚度增加而变得更加明显：界面调制仍集中在 L_0 和 L_1上，而 L_3 和 L_4上则分别出现了可观但更平滑的贡献。这些图展示了正文总密度图中所缺失的分层信息。

三角形界面纹理与多层石墨烯中其他莫尔微扰产生的纹理有关。六方氮化硼上的菱方石墨烯及相关超晶格平台同样表明，周期性微扰能够重构多层能谱并产生三角形电荷纹理 [77, 78]。然而，此处的周期性微扰是由界面单层–菱方结构杂化产生的，而非来自外部六方氮化硼势。

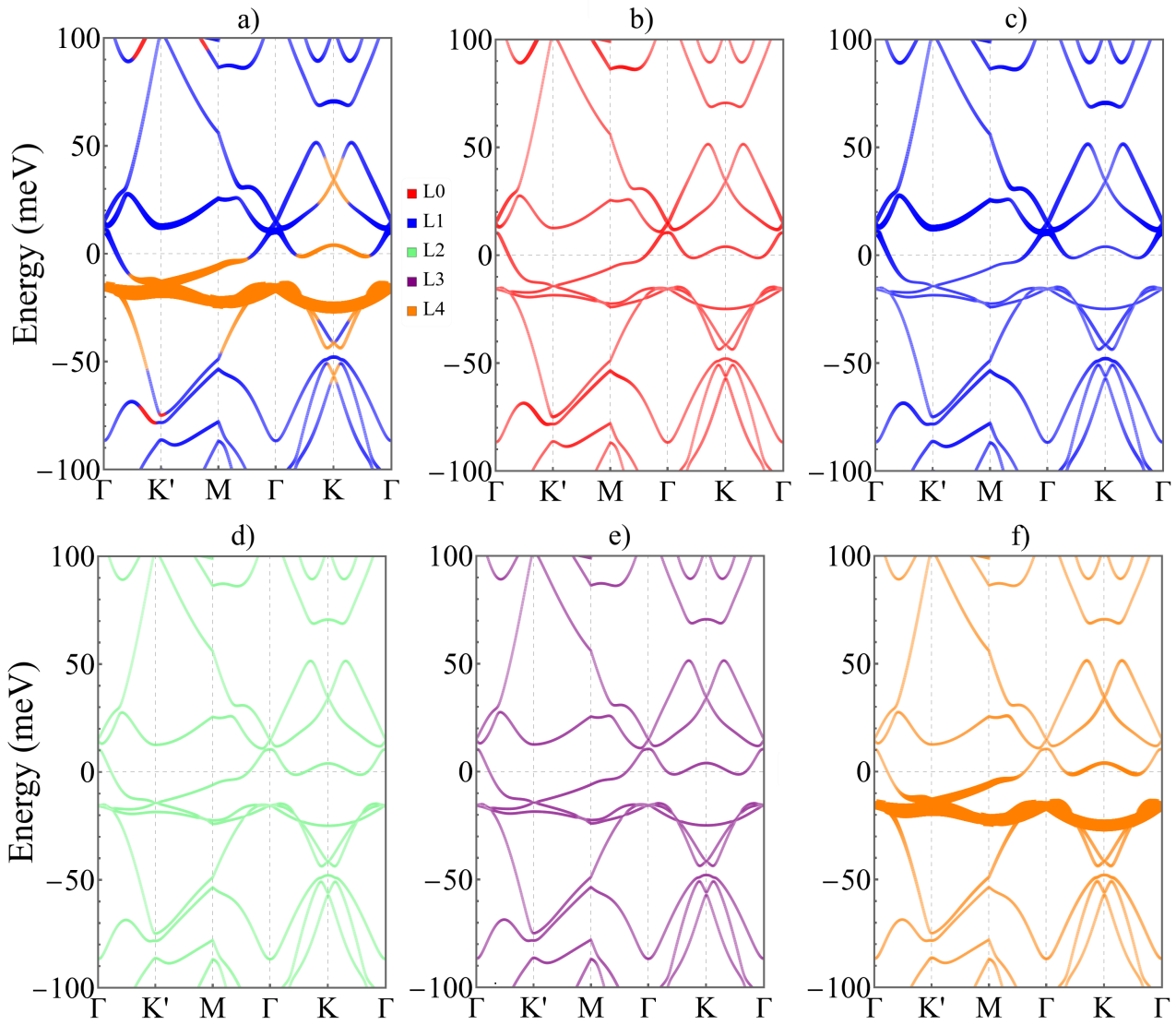

图 S5。**分层能带结构（适用于 $N = 4$ 和 $V = -50$ 毫电子伏）**。表示方式与补充图 S4 相同。反转位移场会反转层极化：下中心能带及其附近的下能带主要由远端表面 L_4 主导，而上中心能带及其附近的上能带则主要集中在扭转界面扇区。

S6. 位移场依赖的实空间密度

补充图 S9、S10 和 S11 分别展示了 $N = 2$、3、4 随位移电场变化的分层密度。在所有情况下， $V = -50$ 毫电子伏使主要的远端表面特征出现在下中心能带中，而 $V = +50$ 毫电子伏则将其转移到上中心能带。互补的中心能带仍更集中于由 L_0 和 L_1形成的扭转界面扇区。由于中心态仍保持相干杂化，而非变成纯粹的界面态和远端表面态，因此在选定动量处，堆叠另一侧仍存在残余权重。

对于 $N = 2$ [补充图 S9], ，场反转会交换远端双层表面 L_2在两个中心能带之间的贡献，而直接耦合的 L_0–L_1 界面仍保留最强的空间调制。对于 $N = 3$ [补充图 S10], ， $V = -50$ 毫电子伏处的下能带主要集中在 L_3上，同时也有较小的 L_2贡献。上能带仍分布于多个层中，并呈现出更强的结构，尤其是在多个莫尔谐波发生干涉的动量处。在 $V = +50$ 毫电子伏处，占主导地位的 L_3 贡献转移至上中心能带，而下能带则与扭转界面区域的关联更为紧密。补充图 S11显示了针对 $N = 4$的相同交换，其中远端贡献由 L_4 和

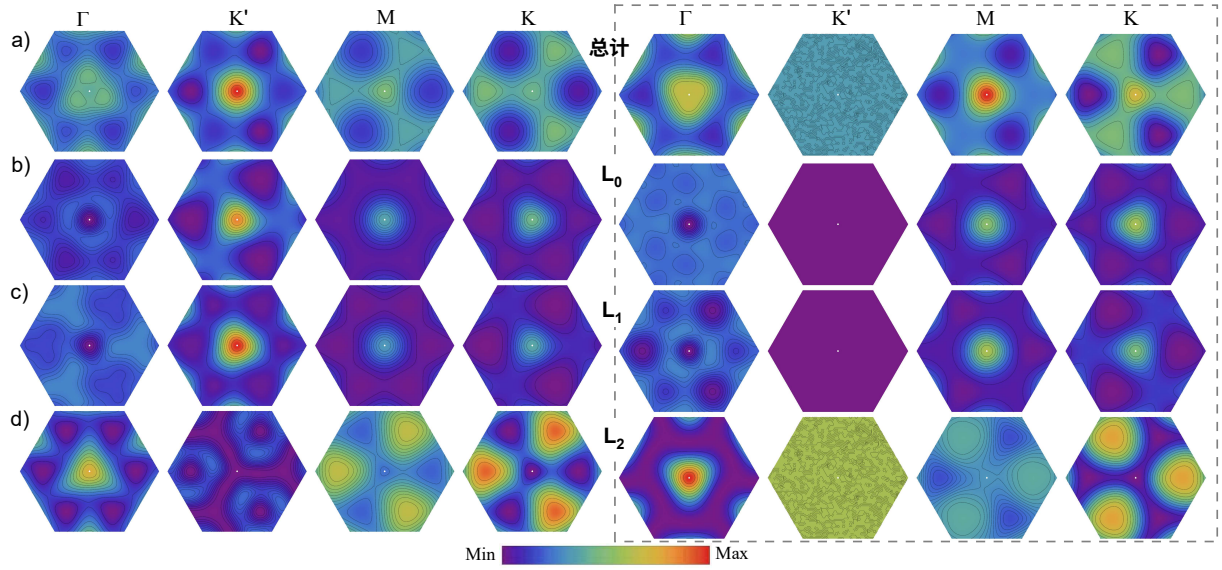

图 S6. **分层实空间密度（适用于 $N = 2$）**。在 Γ、 K'、 M 和 K 处计算的下中心能带和上中心能带的总密度与分层密度。左侧组对应下中心能带，右侧组对应上中心能带。 L_0 表示旋转单层，而 L_1 和 L_2 是 AB 双层的两层。统一色标由所有展示动量下总密度的全局最小值和最大值确定。

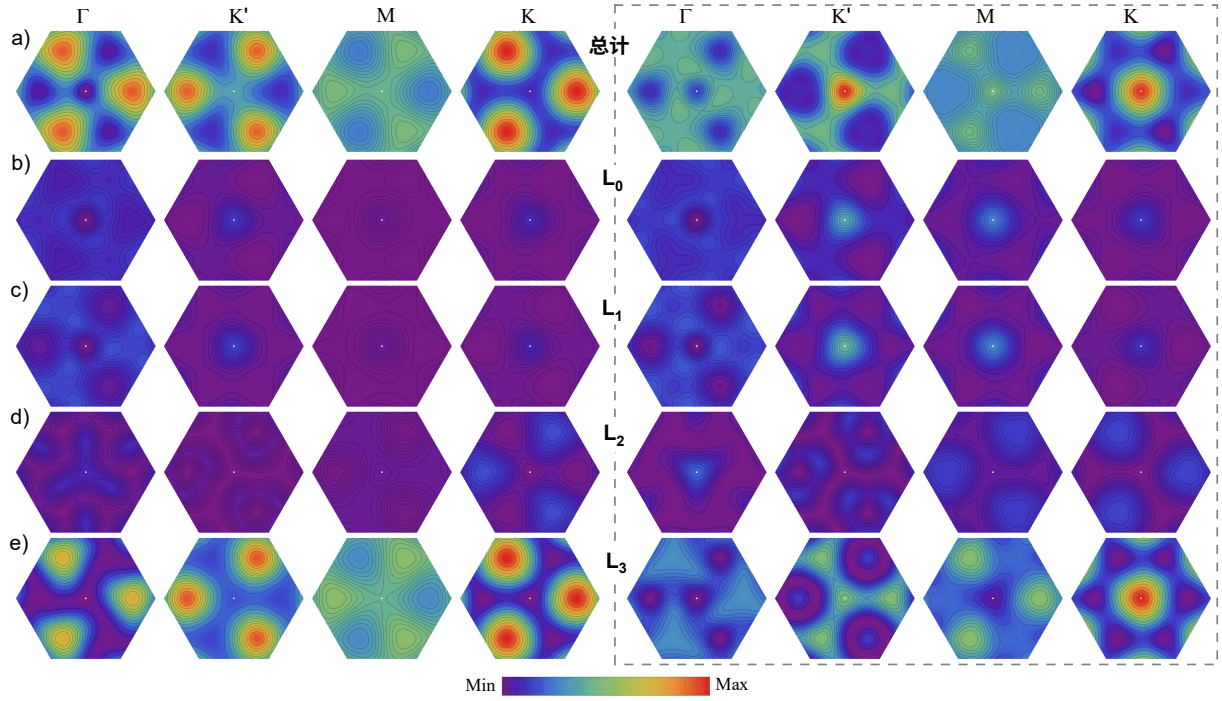

图 S7. **分层实空间密度（适用于 $N = 3$）**。对于 $N = 3$ 系统，表示方式和动量顺序与补充图 S6 相同。界面层呈现最强的空间纹理，而中心态在 L_3上也具有显著的远表面权重。

在避免交叉附近仍保留依赖于动量的混合。

这些实空间图补充了第 S4 节中的层组分分辨能带结构。能带结构测量沿高对称路径的积分层权重，而密度图还揭示了每一层内莫尔谐波之间的干涉。因此，这两种诊断回答了不同的问题：前者确定概率分布在整个层叠结构中的位置，后者展示这些概率在莫尔元胞内混合得有多相干。

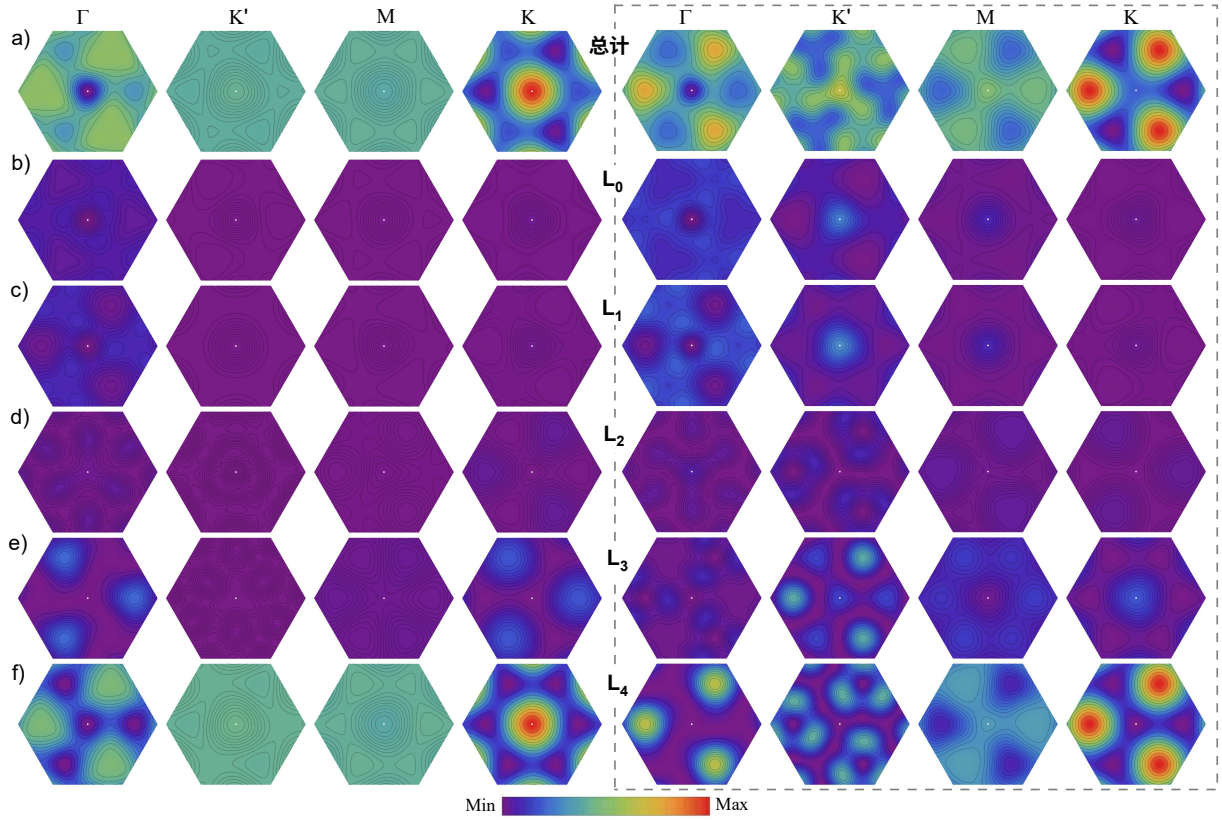

图 S8. **的分层实空间密度** $N = 4$。对于 $N = 4$ 系统，采用与补充图 S6 相同的表示方式和动量顺序。强烈调制的扭转界面密度与调制较弱的远程表面贡献之间的分离度日益明显。

二者共同表明，反转 V 会交换两条中心能带的主导远端表面特征，但不会完全消除界面–表面杂化。

S7. 陈数计算

这里我们说明正文陈数图中所用拓扑分类的数值实现。孤立能带的阿贝尔贝里曲率、孤立双能带子空间的威尔逊环以及由此得到的陈数，其定义表达式见正文的方法部分。在数值计算中，将莫尔布里渊区离散为与三角莫尔晶格相一致的网格。在每个动量点，计算所选中心能带的本征矢；当两个中心能带彼此接触但仍与远端谱隔离时，则将这两个正交归一本征矢都保留为一个共同子空间。通过奇异值分解将相邻动量点之间的重叠矩阵酉化，并由三条链矩阵按序乘积的行列式的辐角得到每个三角形晶格面的贝里通量。按照文献 [89] 的规范不变晶格表述及其非阿贝尔扩展，陈数等于各晶格面通量之和除以 2π。

陈数图中的彩色区域对应这样的参数点：所选中心能带与另一个中心能带及远端能带均彼此隔离。带阴影线的区域对应两个中心能带彼此接触、但仍与远端能带隔离的情况；这些区域所标示的是利用非阿贝尔贝里联络计算得到的孤立双能带子空间的陈数。黑色区域表示中心能带扇区不再与远端能带隔离。

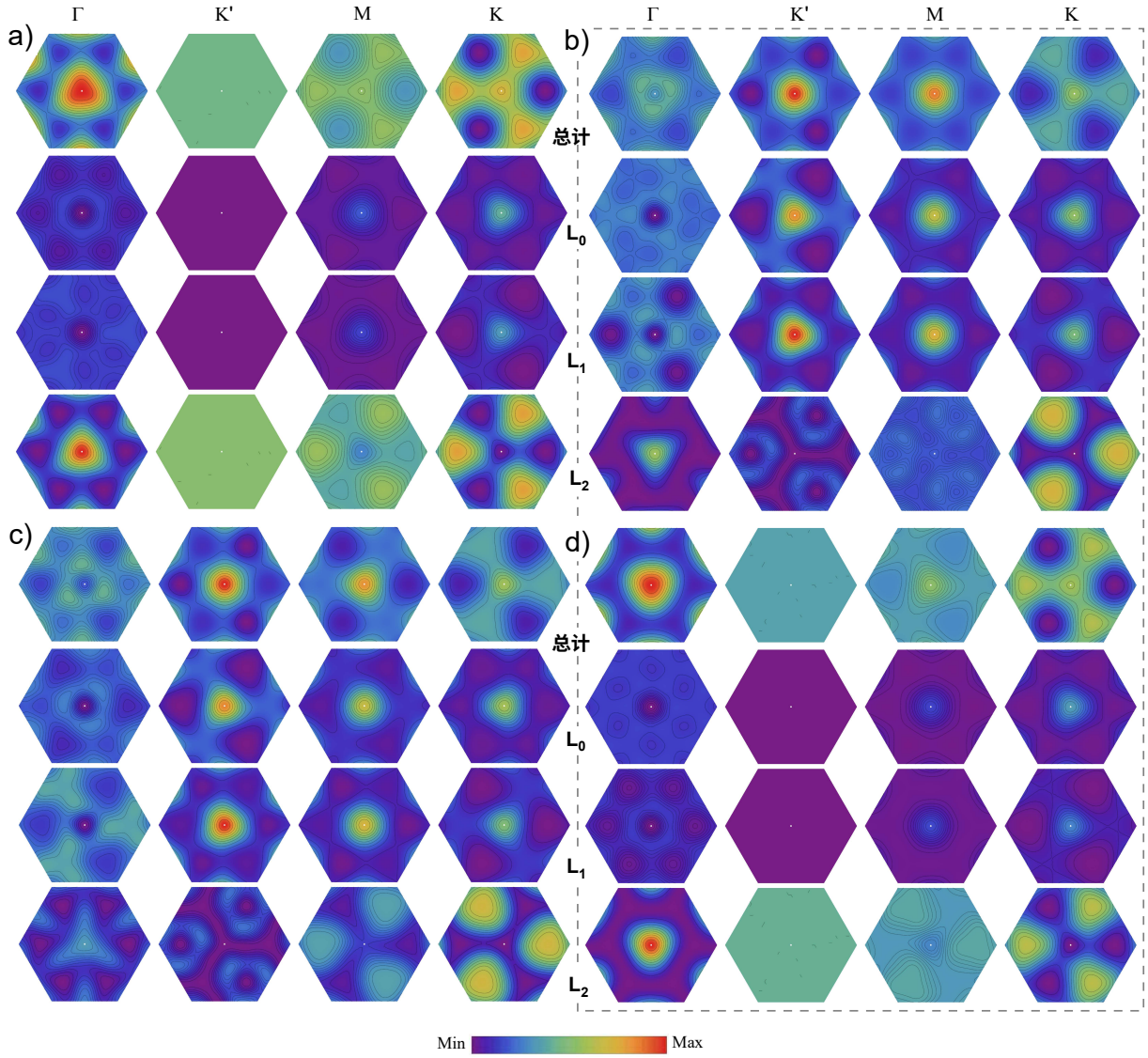

图 S9。**层分辨密度对位移场的依赖性（针对 $N = 2$）**。在 Γ、K'、M 和 K 处计算得到的总密度和分层实空间密度。左侧和右侧组分别对应下中央能带和上中央能带。各面板比较了 $V = -50$ 毫电子伏和 $V = +50$ 毫电子伏的情况。统一色标由所有所显示动量上的总密度全局最小值和最大值确定。反转 V 会交换两个中心能带的界面特征和远端表面特征。

S8. 上中心能带中的拓扑相

补充图 S12 展示了上中心能带的陈数相图。这些结果补充了正文中讨论的下能带图。在大角度区域，单层和菱方扇区之间仅发生弱杂化，上中心能带呈现出与下中心能带相反的拓扑特征：位移场使两个能带中的类单层扇区与类菱方扇区发生交换。因此，两个中心能带都由单位绕数单层扇区与菱方扇区之间的交换所组织；后者可绝热连接到严格的 N 阶手性表面态。在较小扭转角下，上能带相图显示出与下能带相同的定性趋势：更强的莫尔杂化、与远端能带的隔离性降低，以及额外的能带反转，导致陈数区域碎片化，出现需要采用非阿贝尔贝里联络处理的双能带区域，以及中心能带扇区不再隔离的黑色区域。

t 之间的比较　　完整、约化和严格手征模型再次表明，严格手征极限导-

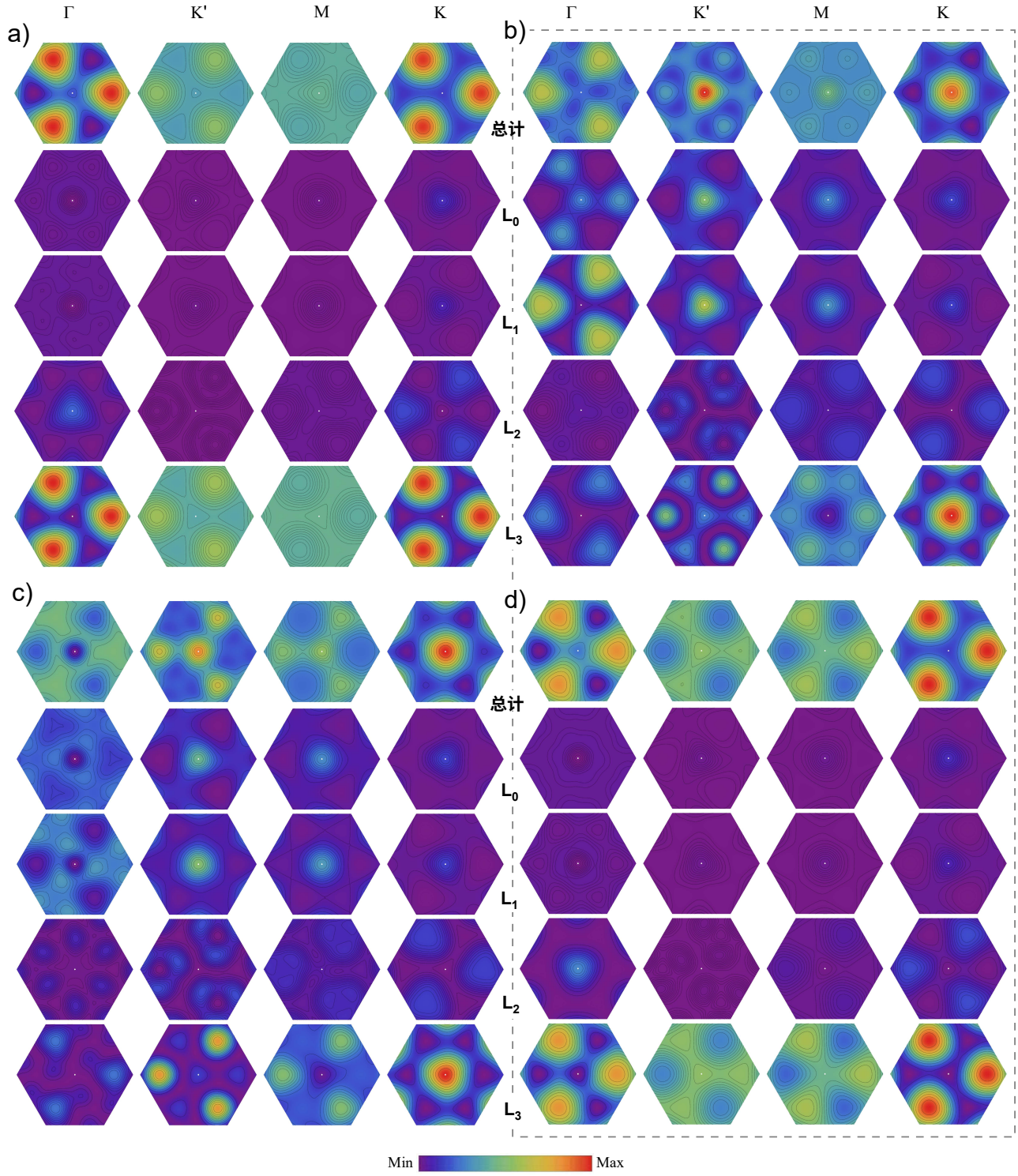

图 S10。**位移场依赖性：** $N = 3$。在 Γ、K'、M 和 K 处，下中央能带和上中央能带在 $V = -50$ 毫电子伏和 $V = +50$ 毫电子伏时的总密度和分层密度。在负场下，下能带携带主要的远端表面 L_3 贡献；在正场下，该贡献转移至上能带。所有图均采用统一色标，其范围由所显示的所有高对称点处总密度的全局最小值和最大值确定。

作为组织性参考，而路径振幅 X_N 解释了 γ_2 和 γ_3 如何使该表面扇区发生形变，而完整的跃迁参数化则引入了额外的粒子-空穴不对称性和相边界复杂性。我们的

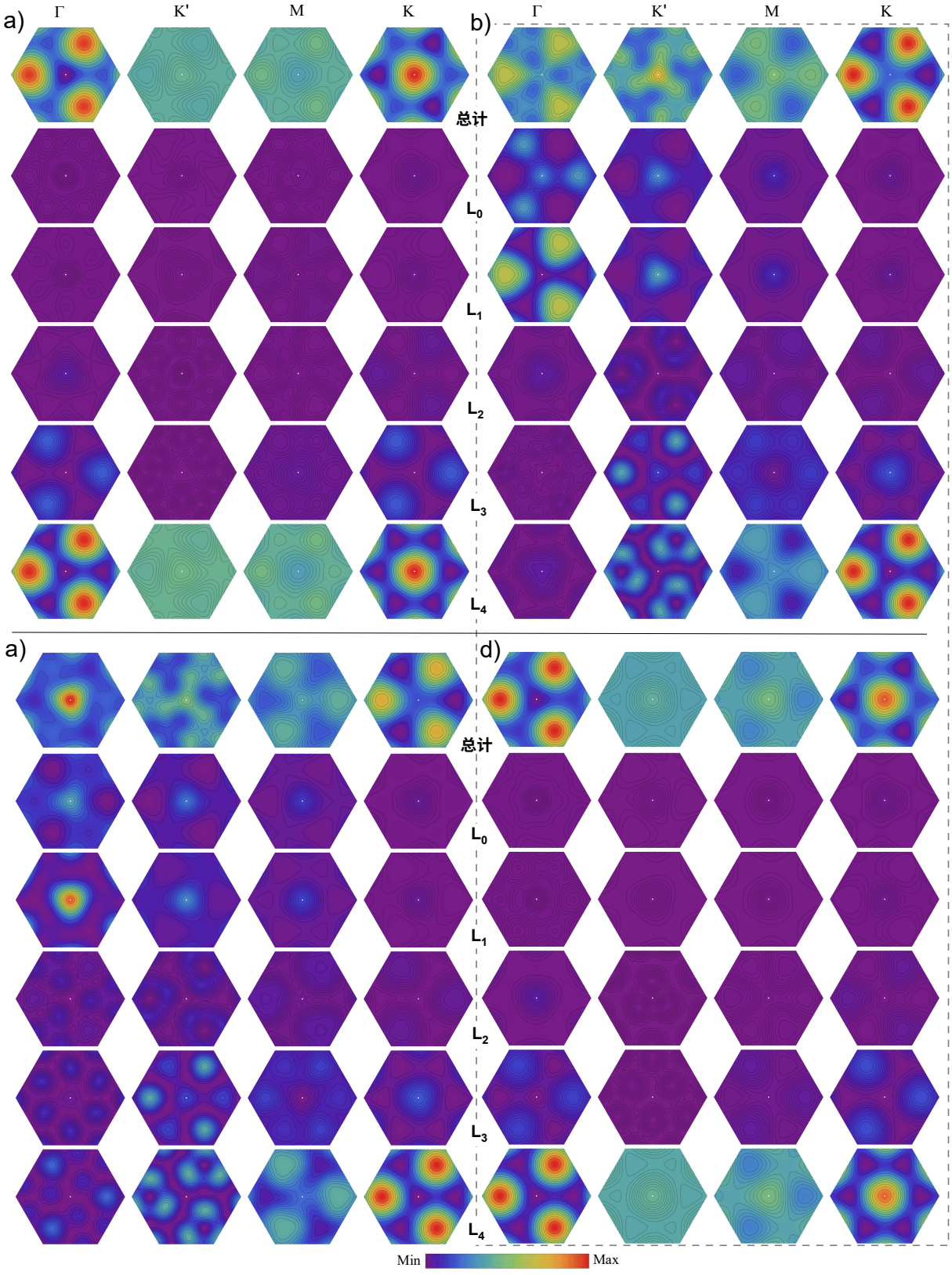

图 S11。**的位移场依赖性层分辨密度**。表示方式和动量顺序与补充图 S9 相同。场反转会使主要的远程表面 L_4 贡献在下中央能带和上中央能带之间转移，而动量依赖的界面–表面混合仍然清晰可见。

上带和下带映射将当前理论与近期实验联系起来；在这些实验中，不同的扭转菱方堆垛构型呈现出高陈数拓扑相或相互作用重构拓扑相，并由层数和位移场控制 [47–51, 53]。

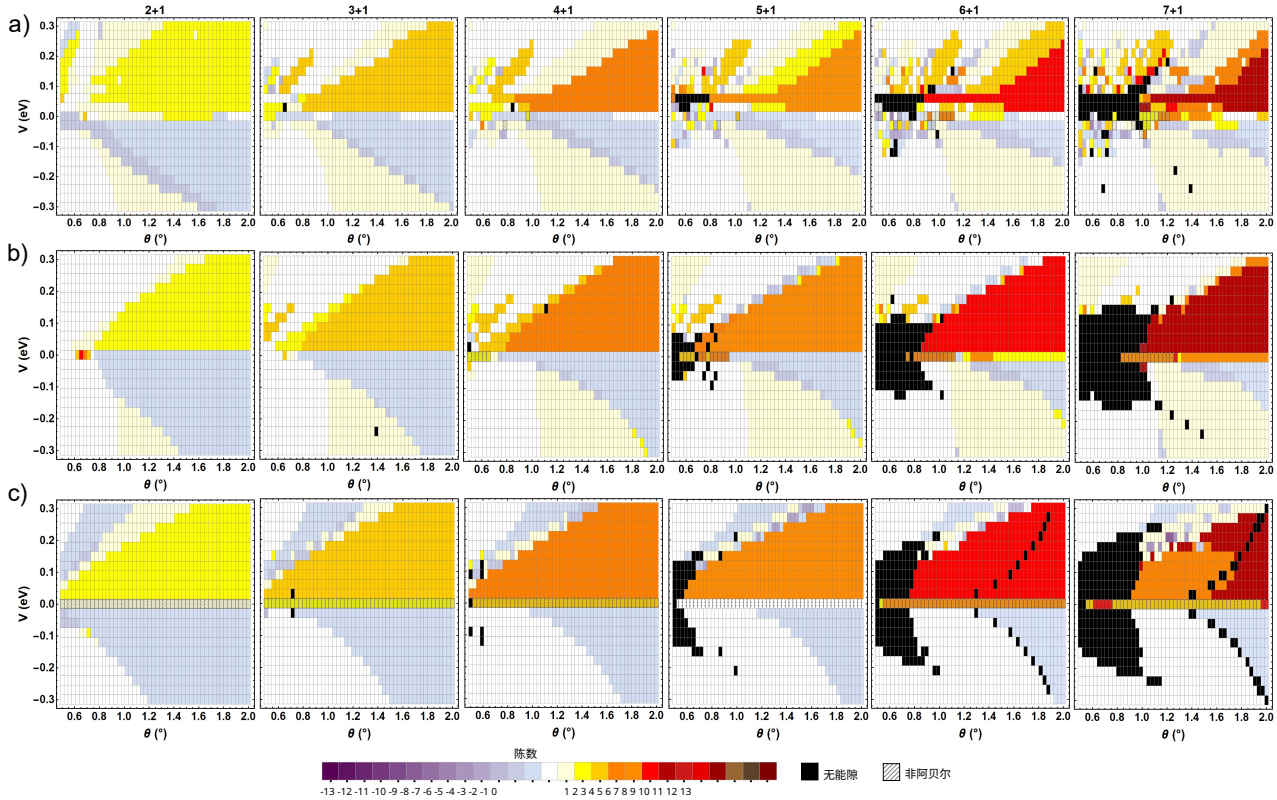

图 S12。**上中心能带的陈数相图**。比较从 $N = 2$ 到 $N = 7$ 的（$N+1$）层菱方石墨烯的完整模型、约化模型和严格手征模型。陈数以色彩图表示。彩色区域表示上中心能带是孤立的，并被赋予阿贝尔陈数的参数点。带阴影线的区域表示两个中心能带相互接触，但仍与远端谱保持隔离，因此使用非阿贝尔贝里联络为孤立双能带子空间赋予陈数；黑色区域则对应中心能带未与远端能带隔离的参数区域。

S9. 跃迁参数化和位移场分布的稳健性

正文中的结果采用了一组菱方堆垛跃迁参数和公式（S8）中的外层势分布。为区分稳健特征与依赖于这一微观输入的特征，我们在保持莫尔隧穿振幅 u 和 u'、平面波截断以及第 S7 节的数值过程不变的情况下，对完整模型计算进行两项独立修改。我们将文献 [83] 中的参数替换为文献 [87], 中用于菱面体多层材料的参数；文献 [88] 采用了这些参数来描述菱方三层石墨烯：

$$\gamma_0 = 3.10 \text{ eV}, \quad \gamma_1 = 0.380 \text{ eV}, \quad \gamma_2 = -0.015 \text{ eV}, \quad \gamma_3 = -0.290 \text{ eV}, \quad \gamma_4 = -0.141 \text{ eV}. \tag{S41}$$

γ_3 和 γ_4 的符号遵循方程（S9）的矩阵约定，这与文献 [88]中的约定一致。我们还将方程（S8）替换为均匀场，使势在所有 $N+1$ 层之间线性下降，

$$\Delta^{(l)} = -\frac{V}{2} + \frac{l}{N} V, \qquad l = 0, \ldots, N. \tag{S42}$$

方程（S8）对应菱方堆垛薄层内部电场被完全屏蔽的情况，而方程（S42）对应未发生屏蔽的情况。自洽分布介于这两个极限之间 [64]。两种分布在旋转单层 L_0 与远端表面 L_N之间产生相同的电势差 V，因此可以在相同的 V下直接比较相应的图。

采用不同的参数化方式后，我们在补充图 S13 中比较了使用正文模型（左列）、替代跃迁参数（中列）和线性分布（右列）得到的 $N = 4$ 下中央（**a**）和上中央（**b**）能带的陈数图。三种情况下，大角度区域的组织方式都相同。对于 V的一种符号，中心能带属于菱方扇区，且具有 $\mathcal{C} = N = 4$；对于相反的符号，它属于类单层扇区，且具有 $|\mathcal{C}| = 1$。反转 V会使下中央能带与上中央能带对应的扇区互换。这符合正文所述机制的预期：只要所选能带保持孤立，其陈数就不会在参数连续形变下发生变化，因此大角度扇区会持续存在。

不过，这些修改可能会定量地移动相边界，并重排小角度区域。这与第 S1 节讨论的适用范围一致：层内电势和更远邻跃迁主要在中心态接近远端谱并与之混合的区域内发挥重要作用。

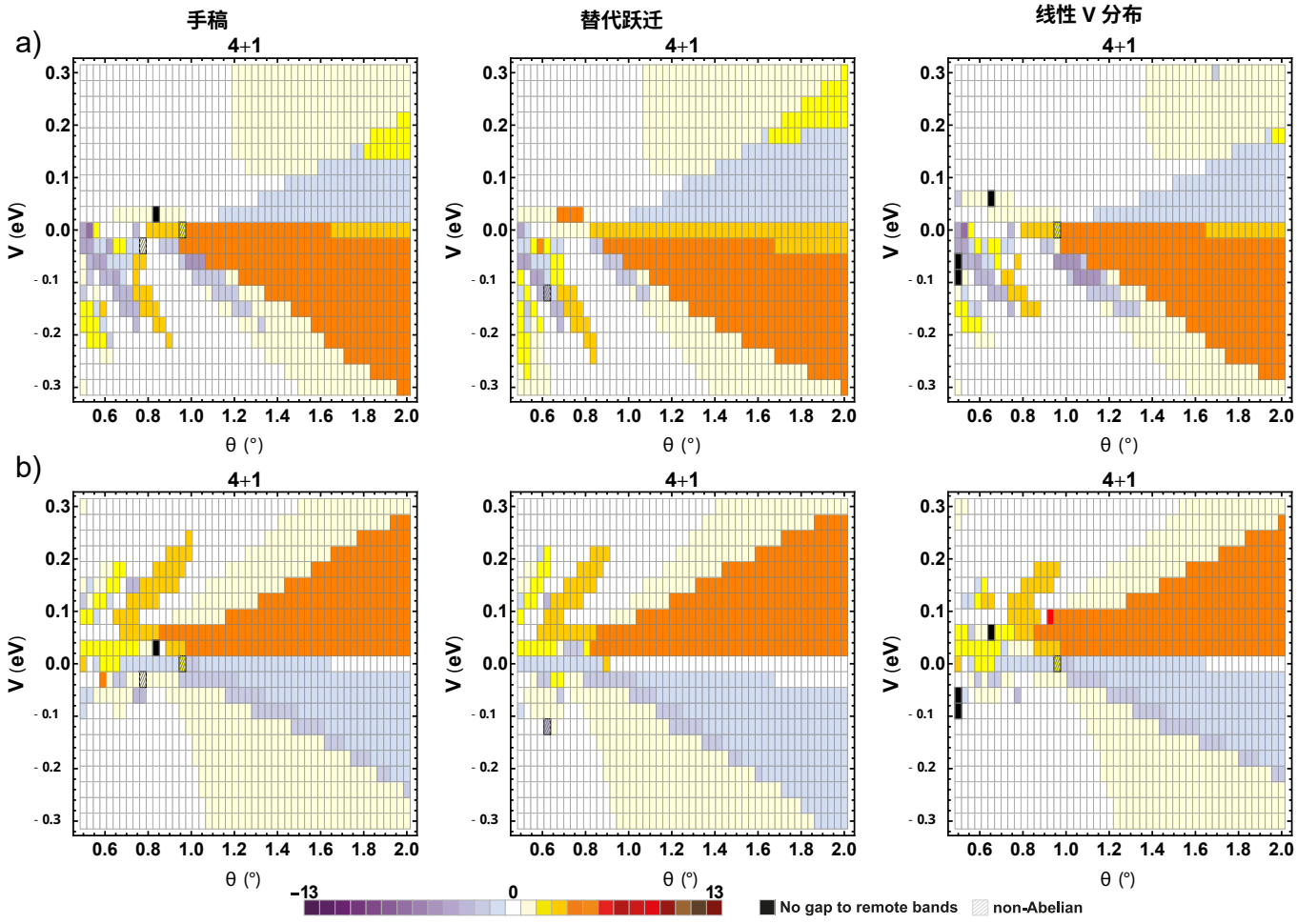

图 S13. **的陈数图的稳健性**。完整模型中下方（**a**）和上方（**b**）中心能带的陈数图。左列（手稿）：正文中的跃迁参数和外层势分布，方程（S8）。中列（替代跃迁）：方程（S41）中的替代跃迁参数 [87, 88] 及外层分布。右列（线性 V 分布）：正文中的跃迁参数和方程（S42）中的线性分布。所有面板中的莫尔隧穿振幅均相同。颜色、阴影线和黑色单元格遵循第 S7 节中的约定。