

石墨烯条带各向异性堆垛结构中的半狄拉克电子态*

丁文策^{1)2)†} 刘璞¹⁾²⁾ 祝先哲³⁾ 李晓波⁴⁾ 杨凯科⁵⁾ 周光辉³⁾⁵⁾

1) (湖南工商大学微电子与物理学院, 长沙 410205)

2) (湘江实验室, 长沙 410205)

3) (邵阳学院理学院, 邵阳 422001)

4) (海南大学物理与光电工程学院, 海口 570228)

5) (湖南师范大学, 低维量子结构与调控教育部重点实验室, 长沙 410081)

(2025年6月13日收到; 2025年7月26日收到修改稿)

半狄拉克材料的各向异性使其具有独特的载流子传导操控选择性, 目前已分别在黑磷薄膜和拓扑金属 ZrSiS 材料中成功观测到半狄拉克电子行为, 即在半狄拉克点附近沿两个相互垂直的高对称路径上, 分别存在线性和抛物色散关系. 本文基于第一性原理计算, 预测在石墨烯基底上各向异性堆垛石墨烯纳米带阵列的结构体系中也可实现半狄拉克电子态. 还进一步研究了条带宽度、超胞中石墨烯宽度与条带宽度之比和外加电场对这种半狄拉克体系能带结构的影响. 值得注意的是在外电场作用下, 从计算模拟上分析了导带与价带由非锥型接触转变为锥型接触并逐步成为半狄拉克点的过程, 并相应存在从费米能级附近具有方向依赖的平带金属过渡到直接带隙半导体的相变. 该研究及其结果可能为二维材料纳米结构中半狄拉克电子态的实现与调控提供理论参考.

关键词: 石墨烯及条带, 各向异性堆垛, 半狄拉克电子态, 第一性原理计算**PACS:** 71.15.Mb, 73.22.-f, 64.70.Nd, 68.65.Pq**DOI:** 10.7498/aps.74.20250758**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250758

1 引言

随着信息科学技术的进步, 微处理器的集成度不断提高, 电子元器件的尺寸持续缩小, 传统硅基半导体集成电路已经遇到了发展障碍. 为突破这一瓶颈, 以石墨烯和拓扑绝缘体等为代表的狄拉克电子材料相继涌现^[1,2]. 不同于常规金属或半导体材料, 拥有狄拉克锥的二维材料具有无质量高迁移率的狄拉克电子性质, 在器件设计的尺寸和性能上具

有显著的优势^[3]. 狄拉克锥意味着无质量电子的线性色散关系, 在传导或者输运中往往没有方向的选择, 长距离传输往往能量损耗较大. 半狄拉克材料由于其独特的能带色散关系如图 1 所示, 在电子传导上存在各向异性的方向选择, 能较好地降低损耗. 实验上已分别在黑磷薄膜和拓扑金属 ZrSiS 三维晶体材料中, 分别观测到同时具有薛定谔电子与狄拉克电子的特性^[4], 即半狄拉克 (semi-Dirac) 电子行为的色散关系. 历史上, 通过对 3He 超流的研究, 2001 年, Volovik^[5] 便提出了半狄拉克型准粒

* 国家自然科学基金 (批准号: 61801520, 12174100, 12174099)、低维量子结构与调控教育部重点实验室基金 (批准号: QSQC2410)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2024JJ5111)、湖南省湘江实验室基金 (批准号: 22XJ03017) 和长沙市自然科学基金 (批准号: kq2208055) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wenceding@hutb.edu.cn

子这种各向异性的色散关系. 图 1 中半狄拉克电子态的各向异性表现在经过半狄拉克点的能带上, 一个动量方向是线性色散, 而另一个垂直动量方向为抛物色散^[6,7]. 其对应的低能有效哈密顿量为

$$H = p_y^2 / (2m^*) \sigma_x + v_F p_x \sigma_y,$$

其中 m^* 和 v_F 分别是有效质量和费米速度、 $p_{x/y}$ 为动量、 $\sigma_{x/y}$ 为泡利矩阵. 半狄拉克电子具有狄拉克电子和薛定谔电子两者纠缠叠加的新特性, 如存在方向依赖性的 Klein 隧穿^[3,8]、输运 Fano 因子^[9] 以及 Zitterbewe-Gung 震颤^[10]. 此外, 半狄拉克电子态密度与能量是根号依赖关系^[11,12], 朗道能级随能级指标 n 和磁场强度 B 按 $2/3$ 次幂变化等独有的特性^[6,7], 这些各向异性材料已被用于设计电光子器件新系统^[13-15]. 半狄拉克色散更易在光子 (声子) 晶体中调控获得^[16,17], 且在器件中具有不可或缺的优势, 如高灵敏光子晶体器件设计、定向传输等方面^[16].

对于凝聚态材料体系, 虽然已在掺钾黑磷薄膜及三维拓扑金属 ZrSiS 中观测到半狄拉克电子态^[18,19], 但仍然很有限. 为了实现各向异性的半狄拉克电子体系, 研究者在理论上进行了各种尝试, 如施加各向异性应变于石墨烯, 调整紧束缚模型中的近邻跃迁参数见图 1, 再用第一性原理计算预言了半狄拉克点^[5,6,10,20,21]. 类似的方法还应用在硅烯^[22]、 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 薄膜^[23]、多层 $(\text{VO}_2)_m(\text{TiO}_2)_n$ 异质结^[24-26] 和单层砷^[27] 等体系, 均存在理论上的半狄拉克点. 另一方面, 在实验上也取得了重要进展. 除调制冷原子光子晶体结构能观测到半狄拉克点^[28], 表面

掺钾的黑磷表面直接观测到半狄拉克点^[18,19] 以及在黑磷薄膜的磁输运实验中出现了半狄拉克电子特有的朗道能级结构^[15]. 特别是 2024 年, 拓扑金属 ZrSiS 三维材料在 4.25 K 和强磁场下观测到半狄拉克费米子行为^[4] 更加激发了人们的研究兴趣. 然而, 到目前为止, 仍缺少常态下稳定的二维半狄拉克固体电子材料, 寻找此类材料将拓展半狄拉克体系在电子器件中的应用范围.

已有研究表明^[29,30], 石墨烯薄膜 (单层或者双层) 支撑上层石墨烯纳米带形成堆垛结构, 其堆垛方式和条带边缘形貌对能带结构产生丰富的影响. 因此, 本文基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理计算, 研究石墨烯上各向异性堆垛纳米条带阵列体系的电子结构及其外电场调控, 寻找该层状纳米体系中可能的半狄拉克电子态. 工作中系统分析了石墨烯-条带结合的 4 类构型, 计算表征不同构型的电子结构, 分析宽度因子、条带占比、外电场等影响因素对能带的影响规律. 我们发现 4 类构型的能量基态均由上层的纳米带能量基态所决定, 宽度因子依赖的扶手边缘体系中存在无带隙线性狄拉克锥和有带隙非线性锥型色散, 锥尖低能附近色散是各向同性的; 锯齿体系具有自旋半金属锥型色散和简并的半狄拉克锥. 简并的半狄拉克锥锯齿体系中, 宽度因子与非线性色散路径上的最大色散能量差呈负相关特性, 条带占比亦然. 最后引入与体系平面垂直的外电场来调控带隙, 揭示独特半狄拉克电子态形成的物理机制. 我们的理论计算及结果旨在为半狄拉克电子体系在固体电子体系中实现, 从纳米体系构型的角度提供一种可行的方案.

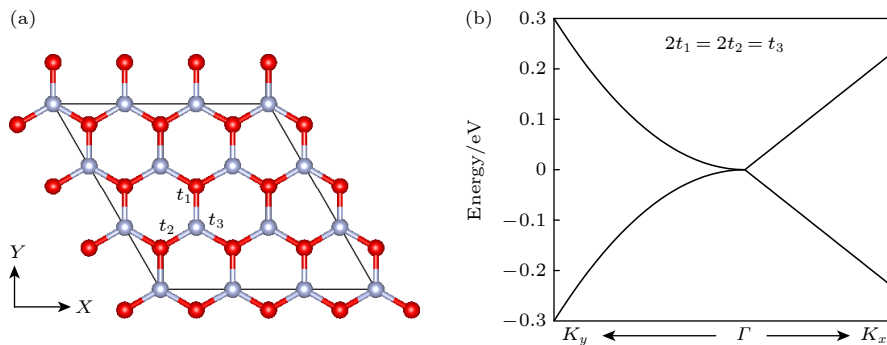


图 1 (a) 各向异性六角复式晶格最近邻跃迁, 深红和浅蓝小球代表复式格子的两类子格; (b) 半狄拉克电子的色散关系示意图, 理论模型中改变石墨烯的最近邻跃迁参数为 $2t_1 = 2t_2 = t_3$ 时会出现半狄拉克电子态^[6]

Fig. 1. (a) The nearest neighbor hopping of the anisotropic hexagonal compound lattice, the dark red and light blue spheres represent the two types of sub lattices of the compound lattice; (b) the schematic diagram of the dispersion relationship of the semi-Dirac electron in the theoretical model, when the nearest neighbor hopping parameter of graphene is $2t_1 = 2t_2 = t_3$, the semi-Dirac electronic state will appear^[6].

2 理论模型与计算细节

本文研究一种双层纳米薄膜结构,由底部的单层二维石墨烯支撑上层的单层准一维纳米条带而形成. 双层之间的堆垛方式和纳米条带边缘类型形成 4 种构型如图 2(a)—(d) 所示. 浅灰色小球表示底部的石墨烯, 红色小球表示条带且边缘的橙色小球表示氢原子钝化, GA_和 GZ_ 分别代表条带边缘类型为扶手型石墨烯纳米条带 (AGNR) 和锯齿型石墨烯纳米条带 (ZGNR), 下划线后代表 AA 和 AB 两种堆垛方式, 黑色虚线方框是计算选取的超胞. 超胞中条带宽度为 [31]

$$w = \sqrt{3}b(N-1)\cos\theta/4 + b(N+3)\sin\theta/4,$$

式中, b 为石墨烯的晶格常数 2.46 \AA , N 为宽度因子表示横跨条带方向上的 C 原子链数, 在 AGNR 和 ZGNR 中 θ 分别为 0° 和 30° .

结构优化与能带计算采用区分自旋广义梯度近似方法的 Nanodcal 软件, 该方法基于 DFT 的第一性原理计算. 结构优化中满足最大原子受力小于 0.01 eV/\AA , 添加层间范德瓦耳斯力计算, 截断能取 150 Ry , 自洽精度小于 10^{-6} eV , 温度设定为 300 K , Monkhorst-Pack 取点网格为 $3 \times 24 \times 1$. 相邻超胞之间条带与条带间距大于 13.5 \AA , 以阻断

相邻超胞条带之间的相互作用. 4 类构型优化后的层间距均接近 3.35 \AA [30], 处于层间范德瓦耳斯力能产生相互作用的范围.

3 结果与讨论

3.1 边缘构型对结构稳定性的影响

不同的自旋配置下体系将具有不同总能. 对于准一维条带一般考虑以下 3 种自旋配置: 两侧边缘原子不具备磁性的无磁态 (NM), 两侧边缘原子具备相同自旋排布的铁磁态 (FM) 和两侧边缘原子具备相反自旋排布的反铁磁态 (AFM). 由于不同的堆垛方式和边缘形貌组合而成的 4 种不同体系, 需要确定体系能量最低的自旋态. 根据 GZ_AA (N) ($N = 16, 30, 32, 48, 60, 64, 96, 112, 120, 128$) 和 GZ_AB(N) ($N = 16, 30, 32, 60, 64, 80, 120$) 各自的自旋态计算总能, N 为宽度因子, 发现 GA_AA 和 GA_AB 体系的能量基态均为 NM, GZ_AA 和 GZ_AB 体系的能量基态均为 AFM. 表 1 展示了部分宽度下的结果. 可以发现, 体系能量基态主要由条带的能量基态决定. 另外将具有相同的原子排数的模型进行横向对比, 发现堆垛方式 AB 均比 AA 更加稳定: 比如 GZ_AB(16) 的 AFM 态总能小于 GZ_AA(16) 的 AFM 态总能,

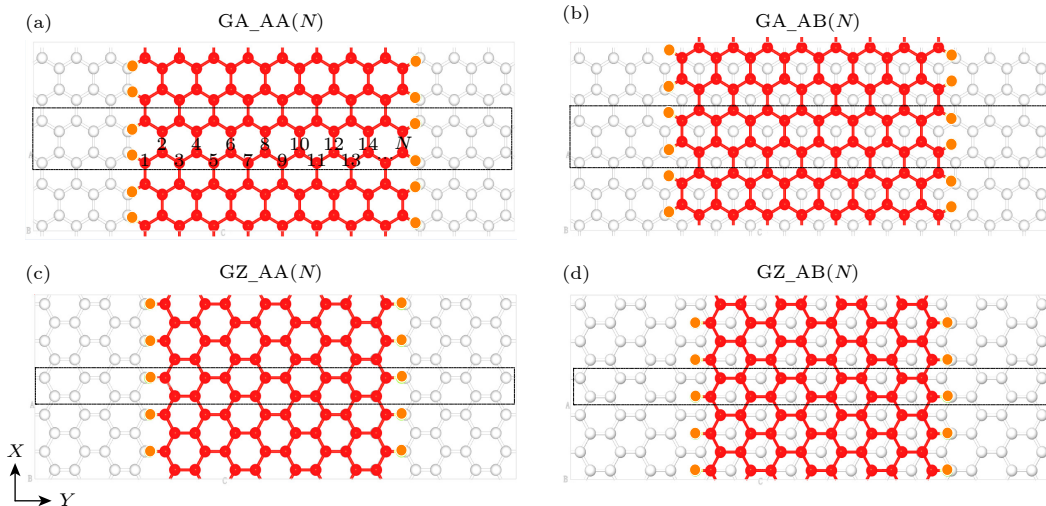


图 2 第一性原理计算中选取的超胞, 虚线框内为条带宽度因子 (N) 为 16、边缘修饰氢原子 (橙色) 的上层纳米带 (红色) 堆垛在下层石墨烯 (浅灰色) 上 (a) AGNR 与底层石墨烯薄膜以 AA 堆垛的方式构成的 GA_AA(N) 体系; (b)—(d) 分别对应 GA_AB(N), GZ_AA(N) 和 GZ_AB(N) 体系

Fig. 2. The selected supercell, the red balls symbolize the upper ZGNR with a width factor of $N = 16$ stacked on the light gray graphene, where the orange balls depict the H atoms located at the edge of the nanoribbon: (a) The GA_AA(N) system composed of AGNR and the underlying graphene film in the form of AA-stacking; (b)—(d) similarly corresponds to GA_AB(N), GZ_AA(N) and GZ_AB(N) systems.

表 1 中 GZ_AB(64) 和 GA_AB(28, 29) 亦然. 这也符合前人对石墨烯能量基态的研究^[30].

表 1 条带宽度下部分体系的三态总能

Table 1. Three types total energy of partial nanoribbon-graphene structures.

Structures	NM/eV	FM/eV	AFM/eV
GZ_AA(16)	-7892.70711	-7892.77758	-7892.77917
GZ_AA(32)	-13133.20879	-13133.28028	-13133.28086
GZ_AA(64)	-23614.69230	-23614.75757	-23614.75782
GZ_AB(16)	-7892.79525	-7892.86295	-7892.86507
GZ_AB(64)	-23616.29102	-23616.36383	-23616.36389
GA_AA(28)	-24303.04799	-24303.04799	-24303.04799
GA_AA(29)	-24630.63691	-24630.63691	-24630.63691
GA_AB(29)	-24630.82370	-24630.82370	-24630.82370
GA_AB(28)	-24303.23074	-24303.23074	-24303.23074

注: 加粗数据为对应的能量基态.

3.2 堆垛构型对 GA 体系电子结构的影响

二维体系矩形超胞的布里渊区有 4 个高对称点如图 3(a) 插图, 计算了 GA_AA(28) 和 GA_AB(28) 的完整路径 NM 态能带图, 费米能级 (E_F) 设为零能处, 浅橙色和深蓝色分别表示导带 (valence band, VB) 和价带 (conduction band, CB). 全路径能带中发现 GA_AA(28) 和 GA_AB(28) 的矩形布里渊区高对称点 B 处的能带始终远离 E_F , 所以简化分析主要考虑 Γ - X 与 Γ - Y 两个方向的能带变化. 在图 3(a), (b) 中, Γ 处能带具有类抛物色散关系, Y 处能带具有线性色散关系, 但是 Γ 和 Y 均不是 GA 体系中能隙的极小值点. 在图 3(a), (b) 各自的放大图中可以看到 E_F 处能隙最小值均在 Γ - Y 路径上, 设为 K 点.

GA 体系 AA 和 AB 两种堆垛方式能量基态均是 NM 态. 图 3(c) 为选取 AA 堆垛 $N = 15, 28$ 和 AB 堆垛下 $N = 28, 30$ 的能带图. 图中发现

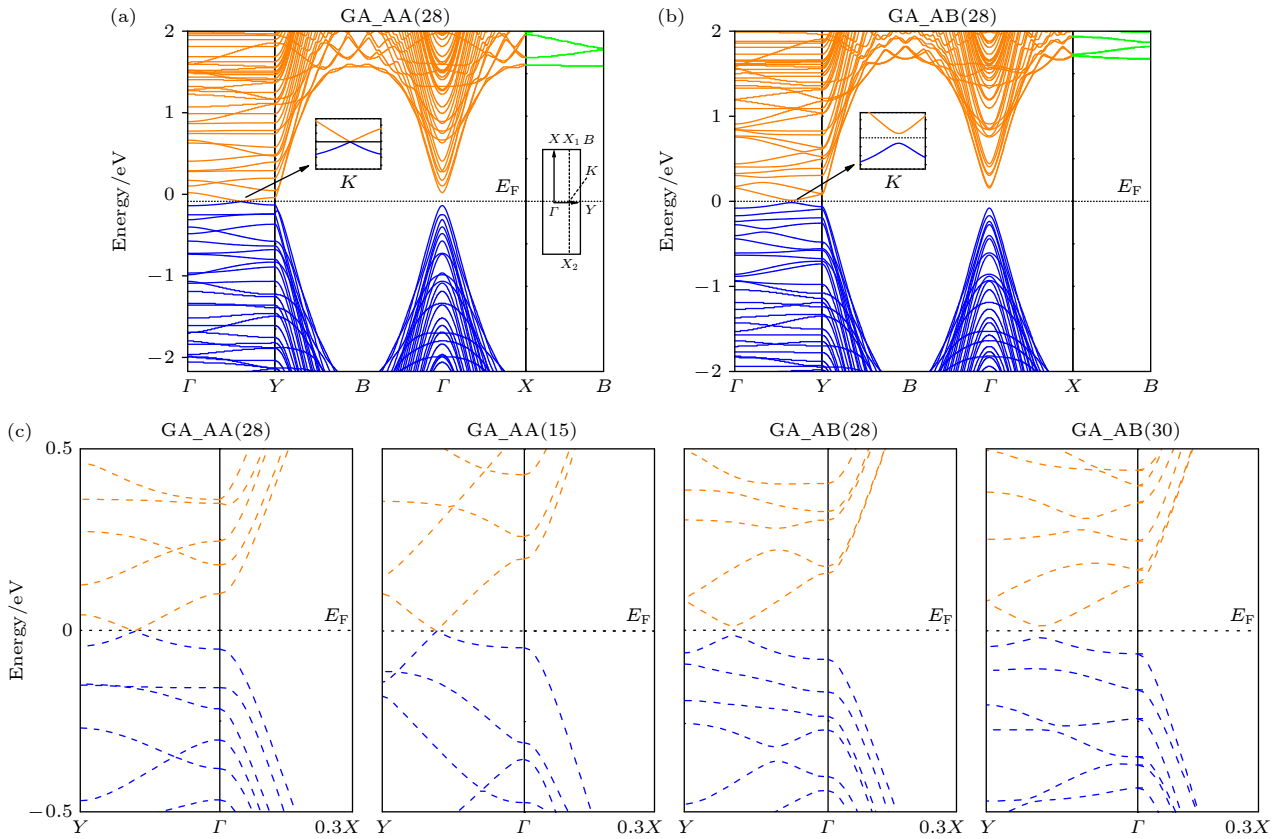


图 3 (a), (b) GA_AA(28) 和 GA_AB(28) 的完整路径能带图, 括号里的数字表示条带宽度因子, (a) 中插图为超胞第一布里渊区, 费米能级 (E_F) 上下的导带与价带分别用浅橙和深蓝色标记, 另外分别给出了 Γ - Y 路径上的能带放大插图. (c) GA_AA(28) 和 GA_AA(15) 沿 Γ - Y 和 Γ - X 两个方向上的能带, 以及 GA_AB(28) 和 GA_AB(30) 能带图; 浅橙和深蓝虚线代表导带和价带

Fig. 3. The band route crossing all highly symmetric points of (a) GA_AA(28) and (b) GA_AB(28) are illustrated in the first Brillouin zone of the supercell. The conduction and valence bands above and below the E_F are marked in light orange and dark blue, respectively; in addition, the energy band enlarged illustrations on Γ - Y are given, respectively. (c) Band of the GA_AA(28), GA_AA(15), GA_AB(28) and GA_AB(30) system in the Γ - Y and Γ - X momentum directions.

GA_体系沿 Γ -Y 方向有一个类似狄拉克 K 点的位置, 且分别表现为 GA_AA(28) 和 GA_AA(15) 无带隙, GA_AB(28) 和 GA_AB(30) 有带隙. 在本征 AGNR 条带中当碳链数 $N = 3n, 3n+1$ 时条带是具有直接带隙的半导体材料, 而当 $N = 3n+2$ 时条带是无带隙的半金属材料^[32]. 考虑能带带隙与扶手型边缘的“ $3n$ 规律”, 发现 GA_AB(29) 和 GA_AA(14) 符合 $N = 3n+2$, 其价带均穿过 E_F 是无磁金属且均没有狄拉克锥, 本文中未展示; 另外 $N = 3n, 3n+1$ 是直接带隙半导体的规律对于 GA_AB($N = 28, 30$) 来说是符合的, 如图 3(c) 所示, 但对于 GA_AA($N = 13, 15, 28$) 零带隙半金属体系来说并不满足半导体性质的规律, 如图 3(c) 和图 4(a) 所示. GA_体系中 AA 堆垛关闭了带隙使 GA_AA($N = 13, 15, 28$) 等成为了零带隙半金属材料, 而 AB 堆垛的构型仍保留了带隙是直接带隙半导体材料.

GA_AA(13) 和 GA_AA(15) 均具有无带隙 K 点, 这样的无带隙 GA_体系的 K 点均在 Γ -Y 方

向上. 为了进一步研究沿 Γ -Y 方向 K 点附近的电子结构, 图 4 中选取了 GA_AA(13) 和 GA_AB(28) 分别计算 K 点附近二维能带如图 4(a), (b), 以及在 Γ -X-Y 动量空间中的三维 CB/VB 能带图 4(c), (d). 沿 Γ -Y 方向 (即 K_y 方向) 发现 K 点附近 GA_AA(13) 是线性色散关系, GA_AB(28) 是非线性色散关系. 沿与 Γ -Y 垂直的 K -X₁ 方向 (即 K_x 方向) 发现 K 点附近 GA_AA(13) 亦是线性色散关系, GA_AB(28) 亦是非线性色散关系. 且 GA_AA(13) 和 GA_AB(28) 在 K 点处的能带均是锥尖接触的模式, 分别表现为 GA_AA(13) 无带隙和 GA_AB(28) 有带隙的特征. 拓展一下, 在 GA_AA 中的 K 点是典型的无带隙狄拉克点下文将详细证明, 经过 K 点的 K -X₁ 和 Γ -Y 方向均是线性色散关系且 K 点两个方向有效质量几乎为 0, 是一种零带隙半金属; 而 GA_AB 中的 K 点有带隙 (~ 0.027 eV, $N = 28$), 经过 K 点的 K -X₁ 和 Γ -Y 方向均是非线性色散关系, 且 K 点两个方向有效质量不为 0, 是半导体.

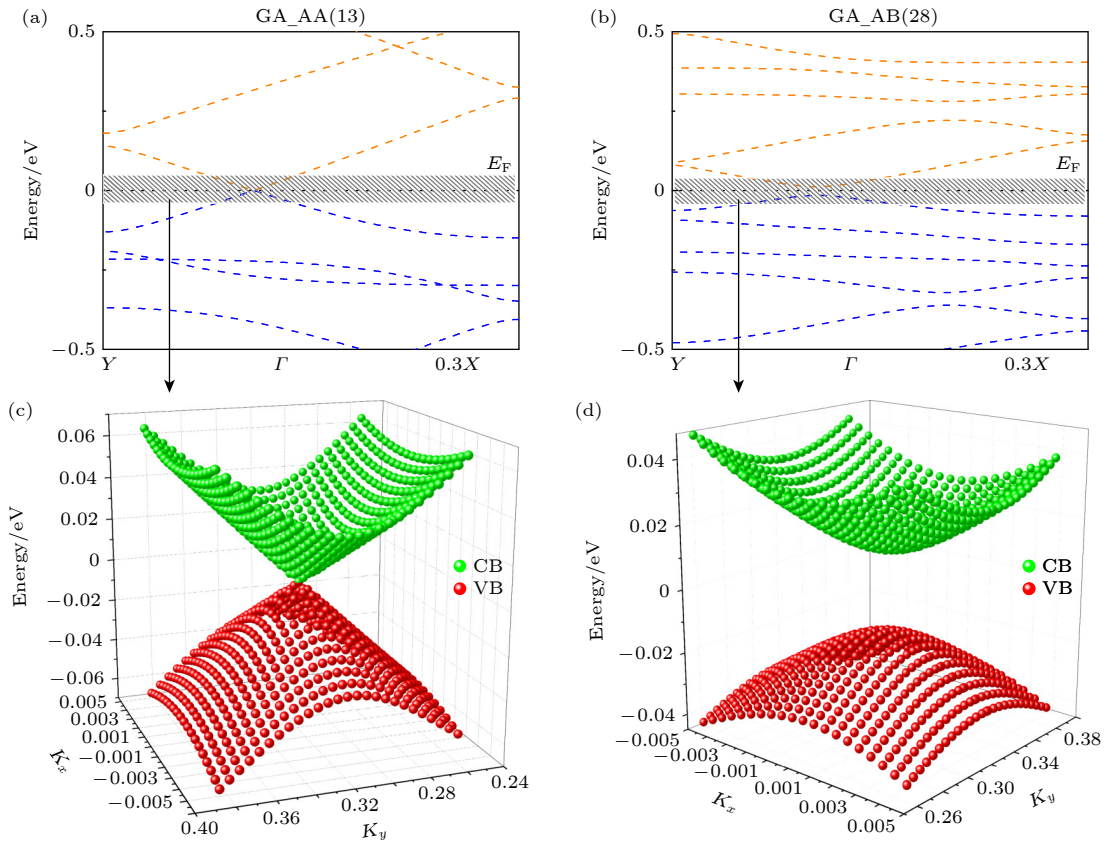


图 4 (a), (b) GA_AA(13) 与 GA_AB(28) 在 K 点附近的二维图; (c), (d) 对应 (a), (b) 中 K 点低能附近三维能带图

Fig. 4. (a), (b) The 2D bands of GA_AA(13) and GA_AB(28) near point K in the Γ -Y direction; (c), (d) the 3D bands within the Γ -XY momentum space near point K in (a), (b), respectively.

结合 AA 和 AB 堆垛的双层石墨烯性质来分析 GA_体系由于堆垛方式在 K 点形成两种不同质量粒子的原因. 沿 Γ - Y 方向 GA_AA 上层的条带是离散的, 只有底层的石墨烯保持连续, 故而沿 Γ - Y 方向 GA_AA 的能带主要来源于底层石墨烯, 是线性色散. 而沿 K - X_1 方向 GA_AA 的条带和石墨烯均保持连续且构成 AA 堆垛的双层结构, 沿 K - X_1 方向 GA_AA 的能带主要受到双层 AA 堆垛区域的影响, 也是线性色散. 因为双层 AA 堆垛的石墨烯具有线性的双狄拉克锥. 总之无带隙的 GA_AA 沿 Γ - Y 方向是线性色散来源于底层连续的石墨烯, 沿 K - X_1 方向由于受到双层 AA 堆垛的石墨烯影响也是线性色散. 有带隙的 GA_AB 沿 K - X_1 方向的非线性色散是 AB 堆垛导致的, 由于 AB 堆垛的双层石墨烯能带在 K 点附近是非线性色散的. 另外, GA_AB 沿 K - Y 方向仍然是非线性色散, 这与带隙打开的石墨烯相关. 因为我们关注于 K 附近低能范围的色散关系. 即堆垛方式影响双层结构 K 点附近色散关系, 带隙打开会弯曲锥型尖端的能带, 底层石墨烯在非双层周期方向保持狄拉克锥, 此 3 种因素的共同作用导致了 GA_AA 与 GA_AB 在 K 点处的有效质量不同.

通过图 5 来佐证 K 点处 GA_AA(13) 具有狄拉克锥. 图 5(a), (e) 和图 5(b), (f) 分别计算了 GA_AA(13) 石墨烯和条带对 K 点两个垂直方向上的能带贡献 FatBand 图. 并分析 E_F 附近的电子

态在实空间的分布即布洛赫态 (Bloch states) 见图 5(c), (g), (h), (i). 最后对石墨烯和条带的原子做投影态密度图 (PDOS) 见图 5(d). 在 K 点附近的 GA_AA(13) 能带是狄拉克锥, 且两个方向上 CB 和 VB 均大部分由石墨烯贡献见图 5(a), (e). 图 5(b), (f) 说明条带参与狄拉克锥的小部分 VB 贡献, CB 部分基本没有条带的贡献, PDOS 图中也能很好的说明这点. 图 5(d) 反映出 CB 区域石墨烯贡献始终占据态密度主导, VB 区域条带和石墨烯均贡献部分电子态. 布洛赫态在 CB 区域电子态主要集中在非重叠的石墨烯, 条带上有少量的电子态分布. 且沿 Γ - K - Y 和 X_1 - K - X_2 方向上与 K 点相近 CB/VB 位置上的布洛赫态如图 5(c), (h) 基本一致, 图 5(g), (i) 亦基本相同. 以图 5(c) 为例, 对应图 5(b) 中 K 点附近 CB 上的以蓝圈标记波矢相近的两个点拥有几乎相同的布洛赫态, 其他位置如图 5(g)—(i) 亦表示一组对称点的布洛赫态且几乎相同, 故此只给出其中一个的布洛赫态. GA_AA(13) 的 K 处是狄拉克锥, 该点附近能带具有各向同性.

总之, GA_体系均为无磁基态, 条带宽度因子满足 $N = 3n+2$ 时在本研究中表现金属性. 体系中的费米能级附近有两种有效质量的粒子: 在 GA_AA 中能找到 K 点处具有狄拉克锥的零带隙半金属结构, 其有效质量为 0; 在 GA_AB 中能找到 K 点处非线性色散的直接带隙半导体结构,

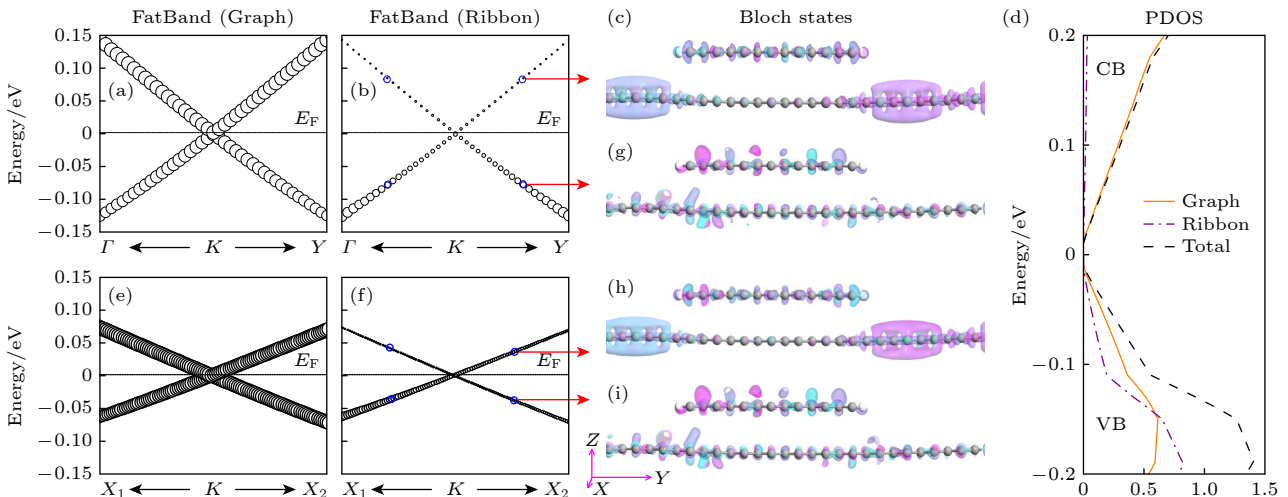


图 5 K 点附近 GA_AA(13) 的条带和石墨烯能带贡献图 (a), (b) 沿 Γ - K - Y 方向, (c), (g), (h), (i) 能带上某点在实空间的布洛赫态图; (d) 区分条带和石墨烯的投影态密度图

Fig. 5. The GA_AA(13) band contribution of nanoribbon and graphene near the K -point: (a), (b) Along the Γ - K - Y direction; (c), (g), (h), (i) the Bloch state figure of a point on the energy band in real space and the projected density of states diagram; (d) projection density of states map for distinguishing between nanoribbon and graphene.

其有效质量不为 0. 这样的差异是由堆垛方式, 带隙打开和底层石墨烯共同决定的, 且两种构型中的 K 点均出现在 Γ - Y 方向上.

3.3 堆垛构型对 GZ_ 体系电子结构的影响

保持下层支撑的单层石墨烯不变, 上层换成 ZGNR, 是 GZ_ 体系. Chen 和 Weinert^[30] 已经对 GZ_AB 体系反铁磁基态的能带做了充分的分析. 经过验算布里渊区高对称 B 点仍可以被忽略以简化分析路径. 不同于 GA_ 体系, 在 GZ_AB/GZ_AA 中其 K 点位置均位于 Γ - X 方向上. 根据图 2(a), (b) 可得出 K 点始终出现在石墨烯锯齿周期方向投影的倒空间之上. 而且 GZ_AB 在 E_F 附近产生自旋劈裂, 形成自旋半金属, 且 K 点上两个相互垂直方向的色散关系是各向异性的^[30]. GZ_AB 在不同条带宽度、条带与单层石墨烯占比下仍具有自旋半金属性, 且紧束缚计算与 DFT 都能验证结构的自旋半金属性, 本文的宽度因子大致是文献^[30] 的 2 倍. 文献^[30] 认为计算所用的矩形超胞中 K 对应石墨烯的六方原胞中的 K 点, 且出现在 Γ -

X 方向上, 如图 6(c), (f) 所示.

本文继续研究 GZ_ 在 AA 堆垛方式下的电子结构. 我们计算的 GZ_AA(16) 沿 Γ - X 的能带图与文献^[30] 反铁磁基态能带图吻合, 如图 6(a) 所示. 所研究的 GZ_AA 体系均为反铁磁基态, 且能带几乎是简并的, 除了在 K 点导带底 (CBM) 和价带顶 (VBM) 的尖端有极小的自旋劈裂, 且具有很小的带隙 (~ 0.03 eV, $N = 16$). 图 6(b) 是以图 6(a) 中黑色虚线圆内的 K 点附近沿 Γ - X 方向的 GZ_AA(16) 能带图, K 点在 Γ - X 方向上, 在 K 点两侧均为有带隙的线性色散. 图 6(d) 是经过 K 点并与图 6(b) 垂直的 Y_1 - K - Y_2 方向, 在 K 点两侧表现为非线性色散. 通过在 K 点附近选取路径 X - K - Y_1 连接图 6(d), (b), 得到图 6(e), 能直观看到 X - K 与 K - Y_1 两侧能带的差异, 即 K - X 方向是线性色散, K - Y 是非线性色散.

进一步研究不同宽度的 ZGNR 对路径 X - K - Y_1 能带的影响. 我们计算了 X - K - Y_1 路径下 GZ_AA(N) 体系 $N = 32, 48, 64, 96, 112, 128$ 的能带, 如图 7(a), (c) 所示. 对比半狄拉克电子理论的色散

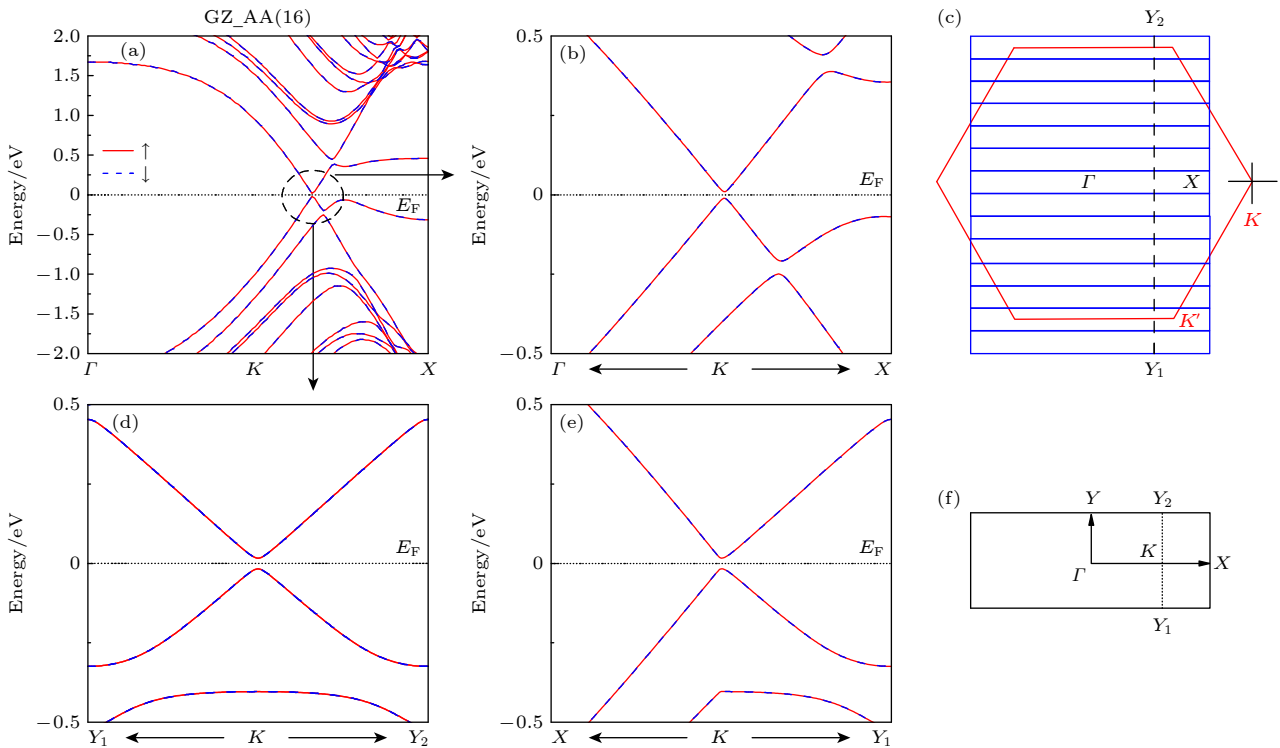


图 6 (a) 采用 Nanocal 计算 GZ_AA(16) 的能带图, 并与文献^[30] VASP 进行对比; (b) Γ - X 方向, (d) Y_1 - K - Y_2 方向以及 (e) Γ - K - Y_1 两个相互垂直方向的 K 点附近 GZ_AA(16) 能带; (c), (f) 超胞与原胞的布里渊区 K 点位置图

Fig. 6. (a) Bandstructure of GZ_AA(16) Nanocal calculation is consistent with VASP calculation in Ref. ^[30]; calculated GZ_AA(16) energy band in the Γ - X direction (b) and the Y_1 - K - Y_2 direction (d) near the K point, as well as the energy band in the Γ - K - Y_1 directions (e) passing through the K point; (c), (f) shows K positions in the Brillouin zone of the primitive cell with supercell.

特征, GZ_AA 在 K 点均具有明显的各向异性, 并以 GZ_AA(64) 为代表绘制三维能带如图 7(b) 所示. 蓝色 (深色) 小球指示经过 K 点两个相互垂直的方向, CB 和 VB 分别采用浅绿色和深红色小球标记, 蓝色 (深色) 小球将 CB 和 VB 划分成了 8 个区域. 为了看清 K 点附近 CB 底部蓝色路径的色散趋势, 我们将面朝视角方向的 CB 区域进行透明处理. 另外图 7(d) 是图 7(b) 以 Γ - X 方向上的

K 点为分割点, 展示了 Γ - K 的半剖三维能带图, 切面上的蓝色 (深色) 小球直观展示了沿 Y_1 - K - Y_2 方向非线性色散或者说抛物色散, 图 7(d) 只标记了 Y_1 - K - Y_2 方向的蓝色 (深色) 小球. 另外, 图 7(b) 中另一方向蓝色小球所在的剖面 (未给出) 展示了沿 Γ - K - X 方向的线性色散. GZ_AA(64) 在 K 点附近的 CB 与 VB 正是以锥尖的方式接触且过 K 点的两个相互垂直的方向具有线性色散和抛物色散,

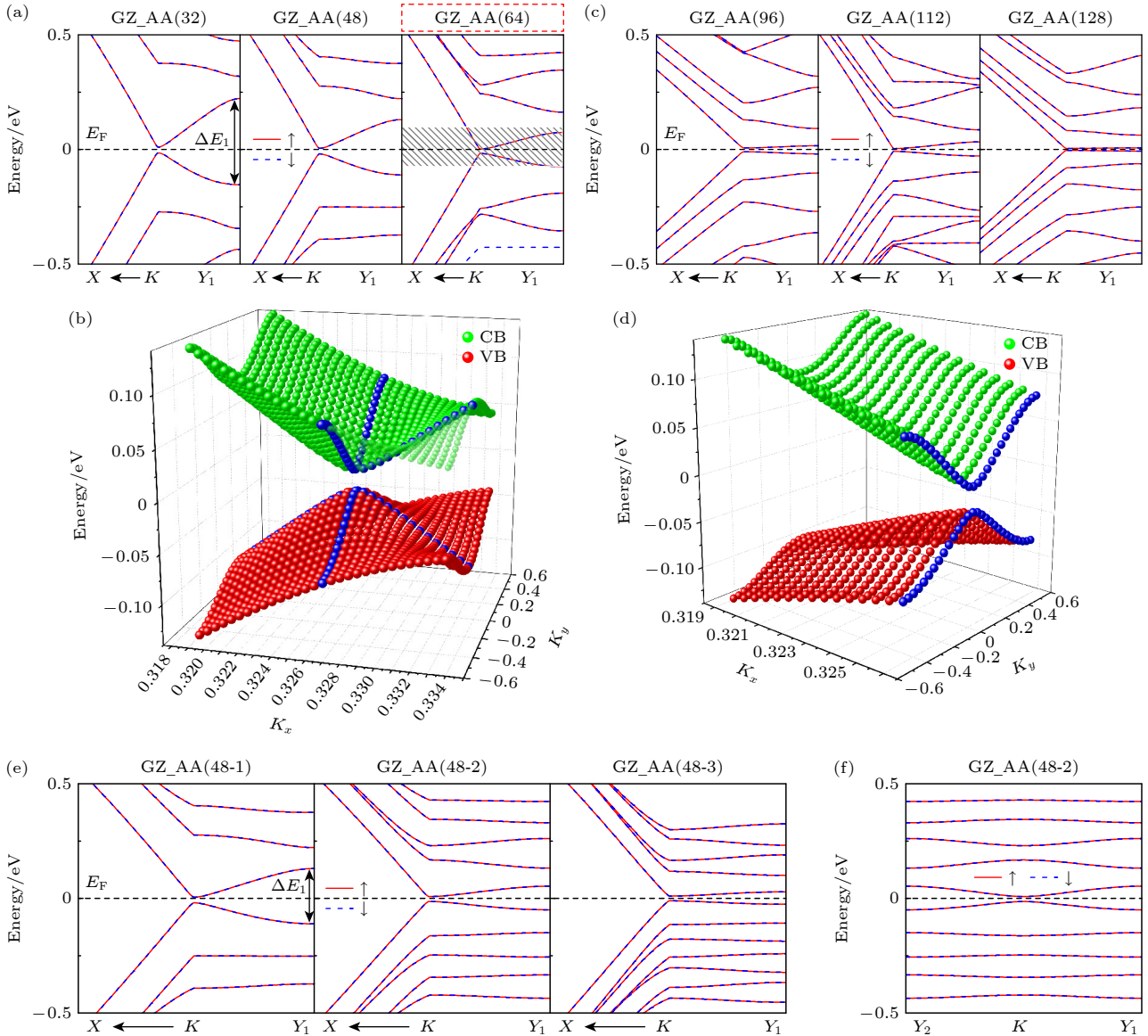


图 7 (a), (c) $N = 32, 48, 64, 96, 112, 128$ 下 GZ_AA 沿路径 X - K - Y_1 的能带图; (b) GZ_AA(64) 在 K 点附近的三维 CB/VB 能带, 蓝色小球位置为经过 K 点两个相互垂直的方向, 正面为 K_x 方向, 侧面为 K_y 方向; (d) 图 (b) 以 K 点为分割点沿 Γ - K 方向的半剖能带图; (e) 在 GZ_AA(48-1, -2, -3) 结构中石墨烯-条带之比分别为 1.34, 2.71 和 4.07 时的能带图, K 点附近能带仍然沿两个相互垂直方向上色散各异; (f) GZ_AA(48-2) 结构沿 Y_1 - K - Y_2 方向能带图

Fig. 7. (a), (c) Band of GZ_AA on path Γ - K - Y_1 under different N ; (b) the band of GZ_AA (64) within a small range around point K , with the blue balls indicating two mutually perpendicular directions passing through point K ; (d) half of panel (b) in the Γ - K direction; (e) in the GZ_AA (48-1, -2, -3) energy bands, the ratio of graphene-nanoribbon is 1.34, 2.71, and 4.07, the band dispersion near the K point still exhibits different in two perpendicular directions; (f) the band of GZ_AA(48-2) on path Y_1 - K - Y_2 .

因此 GZ_AA(64) 具有明显的半狄拉克电子色散特征. 研究的 GZ_AA(N) 体系都表现出各向异性色散关系, 具有半狄拉克锥.

图 7(a), (c) 为 GZ_AA(N) 体系随 N 改变沿 X - K - Y_1 路径在 K 点附近的能带图, 且超胞中均保持超胞中石墨烯宽度与 ZGNR 宽度的固定差值 (~ 1.7 nm). 图 7(e), (f) 中计算了 $N = 48$ 改变条带占比 (即超胞中石墨烯宽度与 ZGNR 宽度之比 w_G/w_R) 为 1.34, 2.71 和 4.07 分别对应 GZ_AA(48-1, -2 和 -3) 结构, 其中 GZ_AA(48-3) 结构的 w_G/w_R 为 4.07, 对应超胞中石墨烯宽度为 20.32 nm; ZGNR 宽度为 4.99 nm. 随着 N 的增大, 在 Y_1 处 CB 与 VB 的能量差 ΔE_1 呈现明显减小趋势, 这仅仅是由 N 带来的吗? 图 7(a), (c) 在 GZ_AA(N) 体系 Y_1 处能量差 ΔE_1 逐渐减小的过程中, 条带宽度 N 在增大, 相应的条带占比 w_G/w_R 在减小. 为了明确宽度因子 N 和条带占比 w_G/w_R 独立分别对 GZ_AA 结构 ΔE_1 的影响, 图 7(e) 中只改变 GZ_AA(48) 的 w_G/w_R . 可以明显看到: w_G/w_R 越大, ΔE_1 减小, 即 ΔE_1 与 w_G/w_R 负相关. 从图 7(a), (c) 可以看出, 随着宽度因子 N 增大, 由于条带与石墨烯超胞宽度有固定 ~ 1.7 nm 的差值会导致条带占比 w_G/w_R 越小, 又由于 ΔE_1 与 w_G/w_R 负相关, 故而 ΔE_1 明显减小是由 N 增大所导致. 故 N 亦与 ΔE_1 负相关. 另外随着 N 的增大, GZ_AA(N) 体系带隙越小, 体带也更多的向 E_F 靠近, 以及能带几乎是简并只有在 K 点尖端有极小的自旋劈裂.

本文所研究的 GZ_AA(N) 均具有半狄拉克锥. 结合双层石墨烯特性, 沿 K - X 方向的线性色散与 AA 堆垛相关; K - Y 方向是抛物色散与打开带隙的石墨烯相关 (与 GA_AB 沿 K - Y 方向上类似). 特别地, 抛物方向 Y_1 处 (Y_2 与 Y_1 对称) 的 CB 与 VB 处能隙 ΔE_1 依赖 N 或 w_G/w_R 都具有同向的单调递减特性. 条带宽度和条带占比将成为特定输运器件设计的重要参考.

3.4 电场调控对 GZ_AA(N) 电子结构的影响

在所研究的 GZ_AA(N) 体系中狄拉克 K 点都有细小带隙 (~ 0.03 eV) 可以通过电场的调控来关闭. 掺钾的黑磷薄膜是半狄拉克固体电子材料, 实验通过掺浓度和掺杂剂带来的垂直电场调控带隙大小甚至关闭了带隙 [18]. 我们也尝试利用电场

作用来关闭带隙, 文献 [18] 中采用的是层间的内部电场. 为了模拟层间内部电场的作用, 将体系超胞的底部和顶部添加两块足够面积的金属板覆盖超胞内原子且金属板与边缘原子保持足够间距. 这样就在金属板之间形成类平行板电容器之间的均匀垂直电场, 使体系中的原子都能感受到同样强度的垂直电场. 图 8(a), (b) 分别表示正负垂直电场调控下 GZ_AA(64) 沿路径 X - K - Y_1 的能带图; 图 8(c) 表示垂直电场设定为 -0.7 V/Å 时, GZ_AA(64) 在 K 点小范围内的能带, 正面为 K_x 方向, 侧面为 K_y 方向. 我们可以看到 CB 与 VB 在 K 附近类似一个卷曲的纸面与一个平坦的纸面相交而成. 以图 8(c) 中 K 点为 Γ - X 方向上的分割点所得半剖图的前半部分 Γ - K [图 8(d)] 和后半部分 K - X [图 8(e)]. 如图 8(d) 所示的前半部分 Γ - K , 深蓝色小球标记了 Y_1 - K - Y_2 方向局部色散: CB 呈现抛物色散, VB 呈现平带色散. 图 8(e) 所示为后半部分 K - X , 同样可以看到 Y_1 - K - Y_2 方向局部色散, 而且还发现交点 K , C , D 之间是有能隙的. 也就是说图 8(c) 仍所看到的卷曲子带和平坦子带的相交不是形成一个曲线 KCD , 而是 3 个交点 K , C , D . 图 8(f) 仍然是 GZ_AA(64) 处于 -0.7 V/Å 垂直电场下的三维能带图, 为了凸显 CB/VB 在 K 附近相交形成的 3 个交点 K , C , D 的接触透视的能带图, 其中 C , D 点是对称的. 引入与条带平面垂直的外电场来调控 GZ_AA(64) 能隙, 在较小的电场下便能发生相变由半导体转为金属如图 8(a), (b). 在较高的外电场下 K 点处能隙逐渐闭合, 但是电场使得 K 点位置由锥型接触转变为类似平面与另一弯曲面的相交接触如图 8(c) 所示. 沿路径 X - K - Y_1 的图 8(a), (b) 能带图中也反映出沿 K - Y_1 路径上, 对称 E_F 附近子带的一支根据正/负垂直电场分别转变为在 E_F 之上/下延伸的平带. 出现平带的外电场强度绝对值处于 0.5 — 1.0 V/Å 之间, 这是一个渐变的过程.

分析垂直电场的作用下产生相变和平带的原因, 可以通过图 8(f) 以垂直电场逐渐减小的方向反演出图 7(b) 的能带图景 (此时图 7(b) 可以看成由两个弯曲的 CB 与 VB 平面在 K 处接触形成有带隙的半狄拉克点): 垂直电场逐渐减小, 图 8(f) 中 K 点与附近 C , D 交点处能量间隙会增大, 且 CD 处能隙增大速度明显大于 K 点处, 相应的 KCD 所在平面的边缘逐渐向下方卷曲, 就形成了

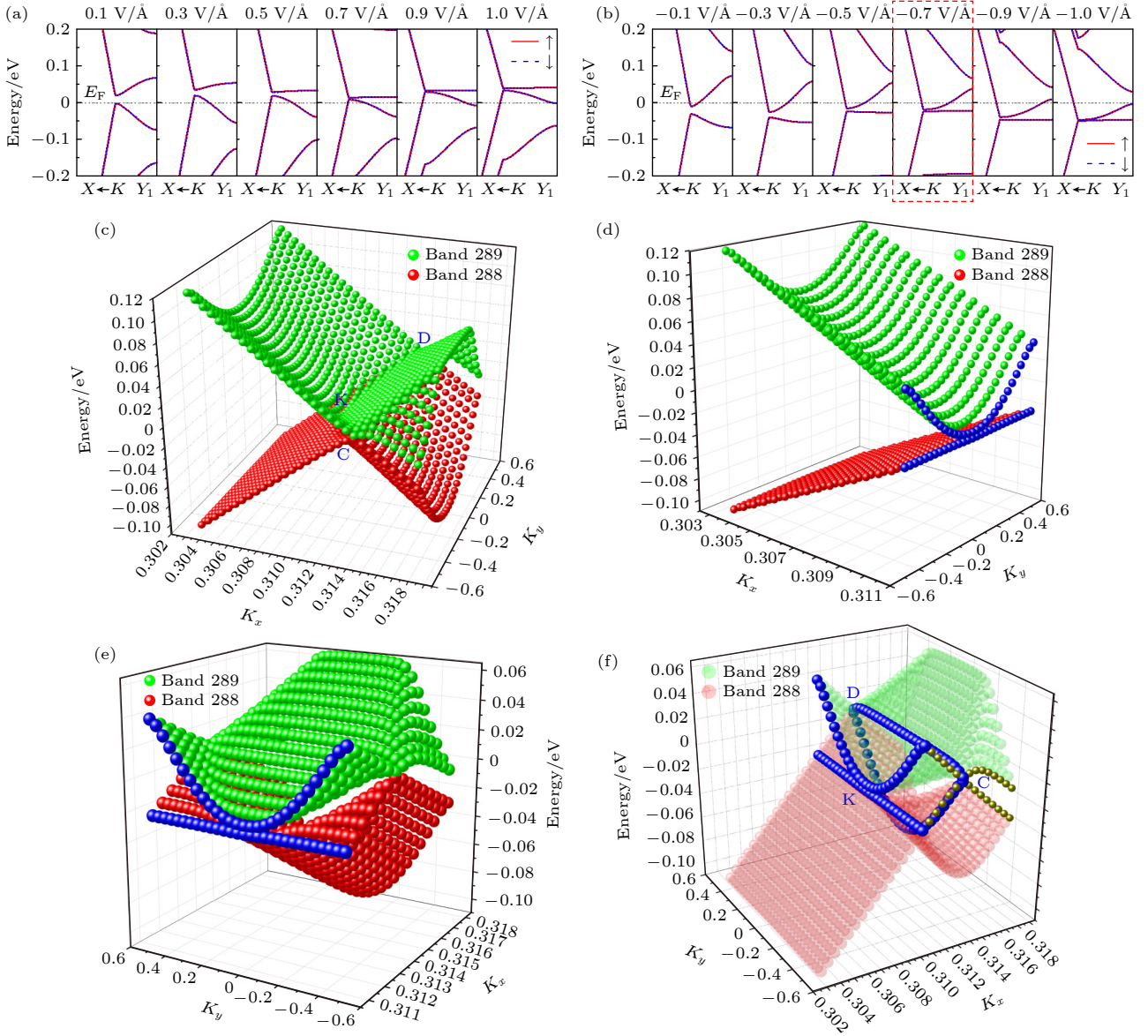


图 8 (a), (b) 分别表示正负垂直电场调控下 GZ_AA(64) 沿路径 X-K-Y₁ 的能带图; (c) 垂直电场为 -0.7 V/Å 下, GZ_AA(64) 在 K 点小范围内的能带; (d), (e) 分别对应图 (c) 剖面图前半部分和后半部分; (f) 包括 K 点在内的两条子带相交产生 3 个交点 K, C, D 处的能带情况

Fig. 8. Energy bands of GZ_AA (64) along the path X-K-Y₁ tuned by positive (a) and negative (b) vertical electric fields modulate; (c) under a vertical electric field of -0.7 V/Å, the energy bands of GZ_AA (64) within a small range around point K; (d), (e) corresponding to the left and right halves of the vertical-sectional view in (c), respectively; (f) illustrates the energy band at three intersection points, K, C, D, resulting from the intersection of two sub-bands, including point K.

图 7(b). 反演过程中在三者的共同作用下: 接触点 KCD 处能隙增大, KCD 平面能带卷曲以及电场变化所致的费米能量浮动至禁带区域, 实现了非锥型接触向锥型接触的转变以及由此带来的结构由金属相向半导体相的转变. 总之, 垂直电场的调控首先缩小了半导体相的能隙并使费米能量随正/负垂直电场而向下/上浮, 直接带隙半导体材料转变为金属, 半导体材料中的半狄拉克锥转变为非锥型接触的模式, 并且在 E_F 附近形成经过 K 点在动量

空间 Y 方向的平带.

4 结 论

本文研究了单层石墨烯与纳米条带堆垛体系根据条带边缘类型和堆垛方式 (AA 和 AB 堆垛), 分成 4 种体系讨论, 即 GA_AA, GA_AB, GZ_AA 和 GZ_AB. 4 种体系的能量基态均与条带的能量基态一致, 即 GA_ 均为无磁态, 而 GZ_ 均为反铁

磁态. 分别在 GA_AA 结构中能够找到具有线性色散关系的无带隙狄拉克 K 点, 在 GA_AB 结构中能够找到具有非线性色散关系的直接带隙 K 点. 而且 GZ_体系中 GZ_AB, GZ_AA 结构在 K 点附近色散都是各向异性的. 特别地, GZ_AA 结构的 K 点附近, 沿 K - X 方向上是线性色散关系, 沿 K - Y 方向上是抛物色散, 符合半狄拉克电子态特性.

由于带隙很小, 垂直电场可以关闭能隙, 并使 GZ_AA 从直接带隙半导体相变为金属. 本征 GZ_AA 的 VB 和 CB 是只有一个接触点 K 的锥型接触, 在电场作用下 VB 和 CB 转化为平面与曲面 K , C , D 三个接触点的非锥型接触, 能隙随着电场增强而越小甚至关闭. 沿电场减小的方向反演, 分析得到在以下三者共同作用下: 增大接触点 KCD 处能隙, 卷曲能带以及费米能量的浮动, 实现了非锥型接触向锥型接触的转变形成了半狄拉克锥. 有趣的是, 垂直电场作用下费米能量会相应的发生浮动, K 的位置沿 Γ - X 方向上也有小范围变动, K 附近的子带开始进入费米面发生相变, 而且外电场强度绝对值处于 $0.5\text{--}1.0\text{ V/\AA}$ 之间时, E_F 附近产生方向依赖性的平带.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Wang Y, Liang Y L, Xing X Y 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 047301 (in chinese) [王玉, 梁钰林, 邢燕霞 2025 物理学报 **74** 047301]
- [3] Katnelson M I, Novoselov K S, Geim A K 2006 *Nat. Phys.* **2** 620
- [4] Shao Y M, Moon S, Rudenko A N, Wang J, Herzog-Arbeitman J, Ozerov M, Graf D, Sun Z Y, Queiroz R, Lee S H, Zhu Y L, Mao Z Q, Katsnelson M I, Bernevig B A, Smirnov D, Millis A J, Basov D N 2024 *Phys. Rev. X* **14** 041057
- [5] Volovik G E 2001 *JETP Lett.* **73** 162
- [6] Hasegawa Y, Konno R, Nakano H, Kohmoto M 2006 *Phys. Rev. B* **74** 033413
- [7] Montambaux G, Piechon F 2009 *Eur. Phys. J. B* **72** 509
- [8] Huang Y P, Zeng W, Shen R 2023 *Phys. Lett. A* **463** 128671
- [9] Chan W J, Ang L K, Ang Y S 2023 *Appl. Phys. Lett.* **122** 163102
- [10] Li Z, Cao H, Fu L B 2015 *Phys. Rev. A* **91** 023623
- [11] Aftab T, Sabeeh K 2022 *J. Phys. Condens. Mat.* **34** 425701
- [12] Sisakht E T, Fazileh F, Hashemifar S J, Peeters F M 2023 *Phys. Rev. B* **107** 125417
- [13] Xiong Q Y, Ba J Y, Duan H J, Deng M X, Wang Y M, Wang R Q 2023 *Phys. Rev. B* **107** 155150
- [14] Yan C X, Tan C Y, Guo H, Chang H R 2023 *Phys. Rev. B* **108** 195427
- [15] Makino T, Katagiri Y, Ohata C, Nomura K and Haruyama J 2017 *RSC Adv.* **7** 23427
- [16] Ji Y X, Zhang M K, Li Y 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 18 (in Chinese) [纪雨萱, 张明楷, 李妍 2024 物理学报 **73** 18]
- [17] Cao H X, Mei J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 194301 (in Chinese) [曹惠娴, 梅军 2015 物理学报 **64** 194301]
- [18] Kim J, Baik S S, Ryu S H, Sohn Y, Park S, Park B G, Denlinger J, Yi Y, Choi H J, Kim K S 2015 *Science* **349** 723
- [19] Baik S S, Kim K S, Yi Y, Choi H J 2015 *Nano Lett.* **15** 7788
- [20] Zhu H F, Pan X Y, Liu G Z 2022 *Phys. Rev. B* **105** 085136
- [21] Sukhachov P O, Oriekhov D O, Gorbar E V 2023 *Phys. Rev. B* **108** 075166
- [22] Zhong C Y, Chen Y P, Xie Y, Sun Y Y, Zhang S B 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 3820
- [23] Tang S, Dresselhaus M S 2012 *Nanoscale* **4** 7786
- [24] Pardo V, Pickett W E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 166803
- [25] Pardo V, Pickett W E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 035111
- [26] Huang H Q, Liu Z R, Zhang H B, Duan W H, Vanderbilt D 2015 *Phys. Rev. B* **92** 161115(R)
- [27] Wang C, Xia Q L, Nie Y Z, Rahman M, Guo G H 2016 *AIP Adv.* **6** 035204
- [28] Tarruell L, Greif D, Uehlinger T, Jotzu G, Esslinger T 2012 *Nature* **483** 302
- [29] Li Y Y, Chen M X, Weinert M, Li L 2014 *Nat. Commun.* **5** 4311
- [30] Chen M X, Weinert M 2016 *Phys. Rev. B* **94** 035433
- [31] Ding W C, Liu G, Li X B, Zhou G H 2023 *Chin. J. Chem. Phys.* **36** 717
- [32] Nakada K, Fujita M, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 17954

Semi-Dirac electronic states in anisotropic stacked graphene structure*

DING Wence^{1)2)†} LIU Pu¹⁾²⁾ ZHU Xianzhe³⁾ LI Xiaobo⁴⁾
YANG Kaikē⁵⁾ ZHOU Guanghui³⁾⁵⁾

1) (*School of Microelectronics and Physics, Hunan University of Technology and Business, Changsha 410205, China*)

2) (*Xiangjiang Laboratory, Changsha 410205, China*)

3) (*College of Sciences, Shaoyang University, Shaoyang 422001, China*)

4) (*School of Physics and Optoelectronic Engineering, Hainan University, Haikou 570228, China*)

5) (*Key Laboratory of Low Dimensional Quantum Structures and Quantum Control of Ministry of Education, Hunan Normal University, Changsha 410081, China*)

(Received 13 June 2025; revised manuscript received 26 July 2025)

Abstract

Anisotropic semi-Dirac materials exhibit unique manipulation selectivity in carrier conduction. Currently, the behavior of semi-Dirac electrons has been successfully observed in black phosphorus thin films and topological metal ZrSiS materials. This behavior manifests as linear and parabolic dispersion relations along two mutually perpendicular high-symmetry paths near the semi-Dirac point. Based on first-principles calculations, it is predicted that semi-Dirac electronic states can be realized in the structural system of anisotropic stacked graphene nanoribbon arrays on a graphene substrate in this work. The effects of nanoribbon width, the ratio of graphene width to nanoribbon width in the supercell, and external electric field on this semi-Dirac system band are further investigated. It is worth noting that the processes of the conduction band and valence band transitioning from non-conical-contact to conical-contact under an applied perpendicular electric field to form the semi-Dirac point are analyzed through computational simulation. Correspondingly, the system transforms from a metal with direction-dependent flat bands near the Fermi level to a direct bandgap semiconductor. The research provides theoretical reference for realizing and tuning semi-Dirac electronic states in two-dimensional material nanostructures.

Keywords: graphene and nanoribbon, anisotropic-stacked, semi-Dirac electronic states, first-principles calculation

PACS: 71.15.Mb, 73.22.-f, 64.70.Nd, 68.65.Pq

DOI: [10.7498/aps.74.20250758](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250758)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250758](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250758)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61801520, 12174100, 12174099), the Fundamental Research Funds for Key Laboratory of Low Dimensional Quantum Structures and Quantum Control of Ministry of Education, China (Grant No. QSQC2410), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2024JJ5111), the Fundamental Research Funds for Hunan Provincial Xiangjiang Laboratory, China (Grant No. 22XJ03017), and the Natural Science Foundation of Changsha City, China (Grant No. kq2208055).

† Corresponding author. E-mail: wenceding@hutb.edu.cn

石墨烯条带各向异性堆垛结构中的半狄拉克电子态

丁文策 刘璞 祝先哲 李晓波 杨凯科 周光辉

Semi-Dirac electronic states in anisotropic stacked graphene structure

DING Wence LIU Pu ZHU Xianzhe LI Xiaobo YANG Kaike ZHOU Guanghui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 197101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250758

CSTR: 32037.14.aps.74.20250758

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250758>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

硅石墨烯 g - SiC_7 的Si分布和结构的第一性原理研究

First principles study of distributions of Si atoms and structures of siligraphene g - SiC_7

物理学报. 2021, 70(19): 196101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210621>

铁原子吸附联苯烯单层电子结构的第一性原理

First-principles study of Fe atom adsorbed biphenylene monolayer

物理学报. 2022, 71(3): 036801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211631>

氧原子在氟化石墨烯上扩散的第一性原理计算

First-principles calculations of O-atom diffusion on fluorinated graphene

物理学报. 2023, 72(1): 016801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221630>

二维光子晶体中的双波段半狄拉克锥与零折射率材料

Dual-band semi-Dirac cones in two-dimensional photonic crystal and zero-index material

物理学报. 2024, 73(18): 181101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240800>

Ca-Co(Zn)共掺杂对M型锶铁氧体性能影响的第一性原理计算研究

First-principles study of effects of Ca-Co (Zn) co-doping on properties of M-type strontium ferrite

物理学报. 2025, 74(6): 067501 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241626>

基于第一性原理计算单层IrSCl和IrSI的载流子迁移率

First-principles calculations of carrier mobility in monolayer IrSCl and IrSI

物理学报. 2024, 73(21): 217201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241044>