

单/双层 ZrSiS 光学性质及表面等离激元性质*

樊浩江¹⁾ 卫临方^{1)†} 雍鑫¹⁾²⁾ 马向超^{1)‡} 刘德连¹⁾

1) (西安电子科技大学光电工程学院, 西安 710071)

2) (西安北方光电科技防务有限公司, 西安 710043)

(2025 年 11 月 18 日收到; 2025 年 12 月 9 日收到修改稿)

拓扑节线半金属 ZrSiS 因其独特的电子结构而在体相材料中展现出丰富的物理现象. 然而, 对其低维形式 (如单层和双层) 的光学与表面等离激元性质的研究尚不充分. 基于第一性原理计算, 本工作系统地研究了单层和双层 ZrSiS 的电子能带结构、光电导率、光学性质和表面等离激元极化激元 (SPP) 特性. 计算结果表明, 层状 ZrSiS 由于其拓扑节线能带而表现出独特的光电导特性, 在红外区域显示出显著的带内响应, 同时在可见光范围内显示出明显的带间响应. 此外其光学性质表明, 单层和双层结构都具有很高的光吸收率 (显著超过石墨烯) 以及从红外到可见光谱的可调反射/透射窗口. 此外, 研究发现单层和双层 ZrSiS 在表面等离激元特性上支持从红外到可见光范围的表面等离激元 (单层: 0.5—4 eV; 双层: 0.4—2.5 eV). 这些表面等离激元相较于体材料表现出更为出色的局域化特性. 综上所述, 层状 ZrSiS 在纳米光子学、高性能红外光电探测器以及可调谐等离激元器件的应用方面具有巨大潜力.

关键词: 表面等离激元, 单双层 ZrSiS, 光学性质, 第一性原理计算

DOI: 10.7498/aps.75.20251566

CSTR: 32037.14.aps.75.20251566

1 引言

在过去的十年中, 二维量子材料的探索一直是凝聚态物理和材料科学的核心主题^[1]. 最近一段时间, 除了典型的石墨烯和过渡金属硫化物, 一类被称为拓扑节线半金属的新材料体系 (NLMS) 已经出现, 展现出迷人的电子特性^[2-5]. 这些材料的体相中存在受晶体对称性和拓扑保护的狄拉克锥, 从而产生了超高载流子迁移率和巨大的线性磁阻^[6]. 其中, 非共形化合物 ZrSiS 作为范式的拓扑节线半金属受到了广泛关注, 其热稳定性高, 廉价无毒且高质量的单晶样品已能够可控制备^[7]. 在其体相形式中, ZrSiS 拥有受对称性保护的稳健节线费米面和

费米能级附近的狄拉克型能带色散, 这些已通过角分辨光电子能谱 (ARPES)^[8] 和量子振荡测量^[2] 得到了广泛证实.

最近, 有研究人员在实验中观测到了 ZrSiS 的 3 个等离激元模式, 其中两个与表面态有关^[9], 表面态也成为研究人员目前关注的重点. 此外, 通过 ARPES 实验和 DFT 理论计算, 发现 ZrSiS 的表面存在一个准自由的、类单层的电子结构^[10]. 目前的研究主要集中在块体材料中, 而块体材料的体态对于表面态可能存在较大的干扰^[10,11]. 因此通过研究单层或少层排除体态的干扰成为研究 ZrSiS 表面态的有效手段.

尽管块体 ZrSiS 的电子结构已得到充分研究, 但机械剥离技术的最新进展使得分离出少层甚至

* 陕西省自然科学基金 (批准号: 2022JZ-04)、国家自然科学基金 (批准号: 62274124) 和中央高校基本科研业务费专项资金项目 (批准号: XJSJ23173) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: weilinfang@xidian.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xcma@xidian.edu.cn

单层 ZrSiS 成为可能^[12], 这为研究其二维特性开辟了新前沿. 尽管有一些研究探索了 ZrSiS 单层的性质^[13], 但是基本也止步于能带层面, 对于层状结构的电导率, 光学性质以及光激发 SPP 的探索和载流子输运效应的研究依旧处于空白状态.

本文旨在对单层和双层 ZrSiS 的电子、介电、等离激元和载流子输运性质进行综合研究. 首先通过第一性原理计算阐明其电导率; 基于此, 进一步计算了其吸收反射等光学特性; 最后从理论上得到了表面等离激元 (SPP) 性质, 为后续研究层状 ZrSiS 的特性提供了有效的参考和指导, 并展现了单层 ZrSiS 在高性能纳米电子学和纳米光子学中的卓越潜力.

2 计算方案

采用密度泛函理论 (DFT) 从第一性原理计算了电子结构、声子谱和电子-声子矩阵元. 这是通过开源代码 JDFTx 软件^[14] 实现的. 使用了全相对论守恒范数赝势和 Perdew, Burke 和 Ernzerhof 的广义梯度近似泛函来描述交换关联能. 采用截断库仑相互作用来分离二维系统的周期像^[15]. 添加 30 Å 的真空层以避免层间效应影响. 平面波截断能设为 25 hartrees (1 hartree = 110.5×10^{-21} J), 费米-狄拉克散射能为 0.01 hartrees. 对于结构和电子性质的计算, 在 ZrSiS 的第一布里渊区使用了 $10 \times 10 \times 1$ 的 k 点网格. 声子计算采用了 $2 \times 2 \times 1$ 的超胞. 这些参数经过测试以确保良好的收敛性. 本文计算方法在之前研究块体 ZrSiS 的计算中与实验结果有良好的一致性^[16].

电导率的计算方法可参考文献 [17,18] 的工作. 此外, 对于二维层状材料的 SPP 色散关系, 使用下式进行计算^[19]:

$$\beta = 2i\epsilon_0\omega/\sigma_{2D}, \quad (1)$$

其中, β 为 SPP 波矢量, ϵ_0 为真空介电函数, ω 为频率, σ_{2D} 为二维材料的面电导率.

3 结果讨论

3.1 晶体结构及能带结构

ZrSiS 的结构如图 1(a) 所示, 按照如图位置切割自然解离面^[20] 获得 001 面的单层和双层结构如图 1(b), (c) 所示.

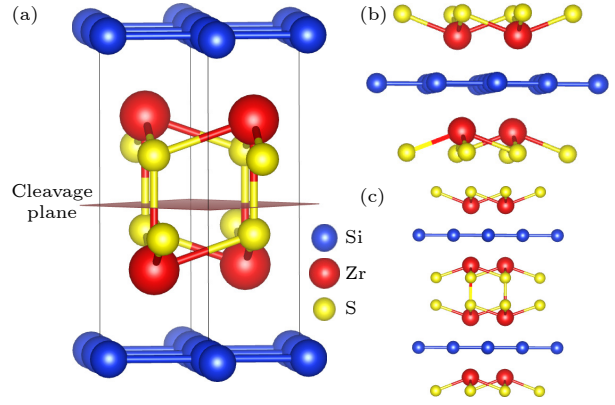


图 1 (a) 块体, (b) 单层和 (c) 双层 ZrSiS 晶体结构
Fig. 1. The ZrSiS crystal structure of the (a) bulk, (b) monolayer, and (c) bilayer.

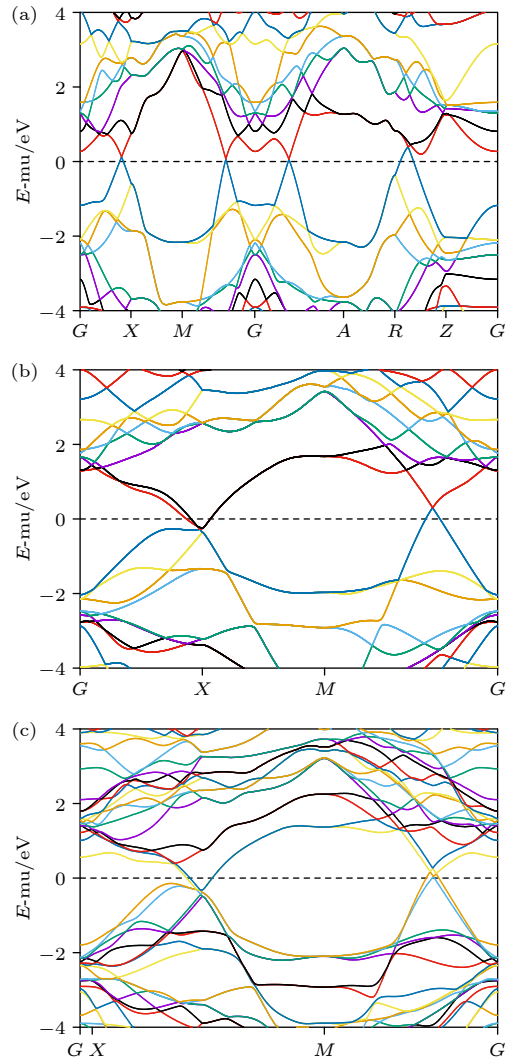


图 2 (a) 块体, (b) 单层, (c) 双层 ZrSiS 能带结构
Fig. 2. ZrSiS's band structure of (a) bulk, (b) monolayer, and (c) bilayer.

ZrSiS 的能带结构如图 2 所示, 本文计算结果与之前的计算结果一致^[20]. 此外, 在我们的计算中

忽略了自旋效应, 对于单层来说加入自旋后能带结构会打开一个约 20 meV 的带隙^[20], 但是在室温条件下这个带隙带来的影响基本可以忽略.

从图 2 可以看出, 相较于块体图 2(a) 的结果而言, 单层结构图在高对称点 G 点的带隙明显增大, G 点带隙的打开, 可能是由于 z 方向的对称性破缺导致的结果. 而随着单层结构变成双层, 由于对称性得到了一定程度上的恢复, 从而使得其 G 点的带隙减小. 本文计算结果表明层状结构的狄拉克锥依旧存在, 说明该材料的拓扑电子结构是内在且稳定的, 不依赖于材料的厚度, 具有良好的鲁棒性, 证明了其来源于拓扑性质, 这与 Wang 等^[10]通过角分辨光电子能谱 ARPES 所观测到的结论是一致的. 此外双层能带结构相较于单层能带简并性被破坏, 能带出现了分离, 这一特点为单双层的电导率等性质带来了一些特殊的性质.

3.2 光电导及直流电导率

电导率是研究 SPP 光吸收和热载流子性能的基础. 在单/双层材料中, 由于真空层的存在, 体材料

常用的体电导率表述变得没有参考意义. 因此对于单/双层材料, 采用面电导率 $\sigma_{2D}(\omega)$ 来评价其光电导. 以石墨烯为代表的二维材料受到了广泛的关注. Sundararaman 等^[19]在研究中发现银烯作为二维材料相较于石墨烯在红外范围表现出更好的载流子性质以及 SPP 性质, 因此我们将单/双层 ZrSiS 计算结果与银烯比较. 对于电导率实部 $\text{Re}\sigma_{2D}(\omega)$ 可以通过计算直接得到, 而电导率函数的虚部 $\text{Im}\sigma_{2D}(\omega)$ 可以由其实部通过克拉莫-克若尼关系得到. 图 3 展示了单层 (monolayer) 和双层 (bilayer) 的 ZrSiS 电导率的计算结果以及其与银烯 (argentene)^[19] 的对比.

光学响应电导率实部数据如图 3(a) 所示, 在低能量区域 (0—1 eV) 较高且随能量增大而下降, 这源于带内跃迁 (德鲁德响应) 的贡献, 表现出了典型的金属性行为. 此外, 相较于银烯而言, 层状 ZrSiS 的电导率在此能量范围相对更低. $\text{Re}\sigma_{2D}(\omega)$ 在能量大于 1 eV 后, 再次上升, 这对应于带间跃迁贡献. 而银烯则并没有展示出类似的行为, 这可能是由于 ZrSiS 作为拓扑节线半金属所具有的

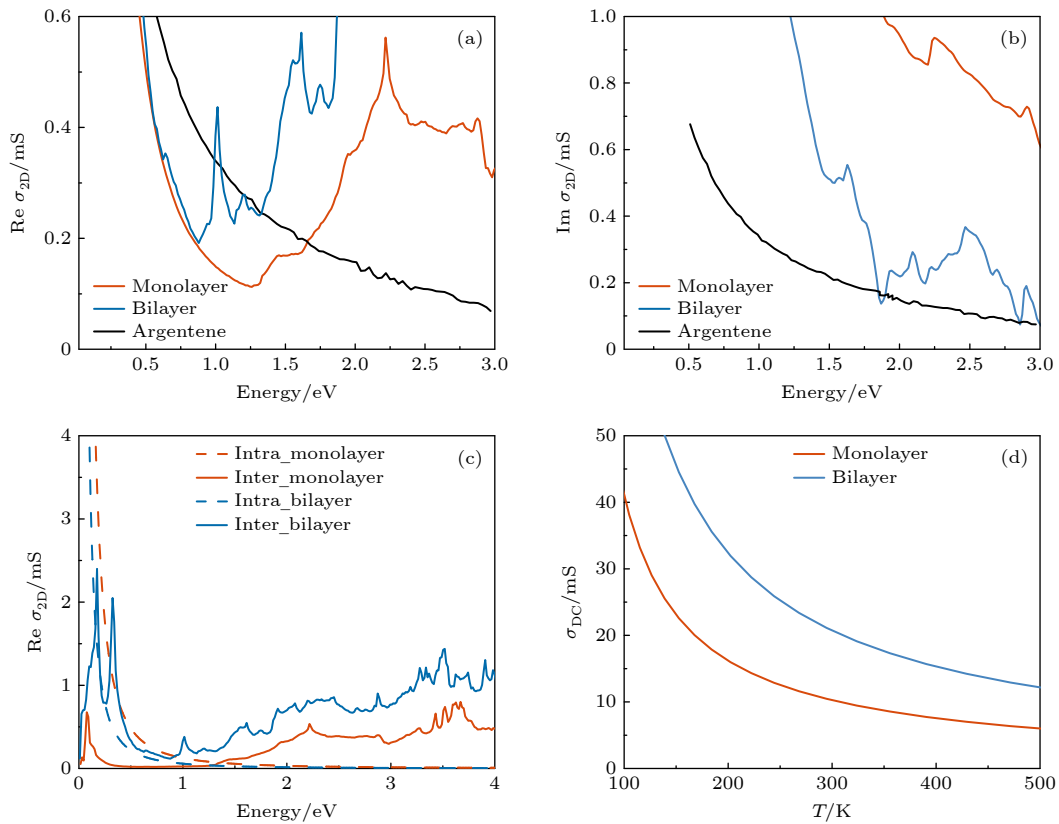


图 3 (a) ZrSiS 单、双层与银烯电导率实部以及 (b) 虚部对比; (c) ZrSiS 光电导率带间以及带内贡献; (d) ZrSiS 直流电导率

Fig. 3. (a) The real part and (b) imaginary part of optical conductivity of ZrSiS compared with argentene; (c) contributions of interband and intraband transitions to the real part of conductivity; (d) the DC conductivity of ZrSiS.

特殊表面态, 导致的在特定能量处出现独特的带间响应. 这些拓扑表面态具有线性色散和高迁移率的特性, 从而贡献了巨大的带间电导. 此外, 相较于单层 ZrSiS 而言, 双层的电导率在高能量范围更大, 这可能是因为双层材料的能带分裂增加了其带间响应.

图 3(b) 展示了 ZrSiS 的单双层结构与银烯的光学电导率虚部. 整体来看, 相较于银烯, 层状 ZrSiS 的 $\text{Im}\sigma_{2D}(\omega)$ 大很多. 其次, 单层 ZrSiS 的 $\text{Im}\sigma_{2D}(\omega)$ 略高于双层, 表明单层有更强的量子约束和更低的损耗. 单层的峰值高于双层, 这表明单层具有更强的介电响应和更低的光学损耗.

为了进一步分析和验证我们对于图 3(a) 的分析, 分别计算了电导率实部来自带内 (intraband) 和带间 (interband) 的贡献. 首先关于带内贡献: 在低能量区域主导, 随能量增大而迅速下降. 这源于自由载流子的散射, 行为类似经典德鲁德模型. 其中单层略高于双层, 表明单层有更高的载流子迁移率或更长的散射时间. 其次, 关于带间的贡献: 贡献在低能量几乎为零, 在约 0.2 eV 出现一个峰后, 并在 1 eV 之后逐渐递增. 这表明 ZrSiS 的带间跃迁阈值较低, 可能与其拓扑节点线结构相关. 其次, 双层在 0.2—0.5 eV 的低能量范围内出现的峰, 这可能是由于双层结构的能带兼并性被破坏, 能带分裂所导致的.

除了光电导之外, 我们还计算了 ZrSiS 的直流电导率 (DC) σ_{DC} , 结果如图 3(d) 所示. 单层和双层的 DC 随温度升高而单调下降, 这是金属性材料的典型行为, 因为温度升高增加声子散射, 降低了载流子迁移率. 并且相较于银烯在 298 K 处约 60 mS 的电导率^[19], ZrSiS 的单双层表现出了相当的电导率. 此外, 单层的直流电导率始终高于双层, 表明单层具有更少的散射中心或更高的载流子迁移率. 这可能源于单层中较少的层间散射和更强的量子限制效应.

综合来看, 层状 ZrSiS 由于其独特的节线能带, 使得其在高能量时具有更高的光电导率, 在可见光范围内 (1.6—3 eV) 时具有更大的电导率, 而在低能量时虽小于银烯, 但也在同一数量级, 同时考虑到银烯的成本问题, ZrSiS 单/双层在红外范围内仍然有非常大的应用潜能.

3.3 ZrSiS 光学性质

经过 3.2 节关于电导率的讨论, 发现层状 ZrSiS

拥有很高的光电导, 分别利用下式计算垂直入射时的反射率 $R(\omega)$ 和透过率 $T(\omega)$ ^[21]:

$$R(\omega) = \left| \frac{-\sigma_{2D}(\omega)\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}}{2 + \sigma_{2D}(\omega)\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}} \right|^2, \quad (2)$$

$$T(\omega) = \left| \frac{2}{2 + \sigma_{2D}(\omega)\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}} \right|^2, \quad (3)$$

其中 μ_0 与 ε_0 为真空磁导率与真空介电常数, 计算结果如图 4 所示.

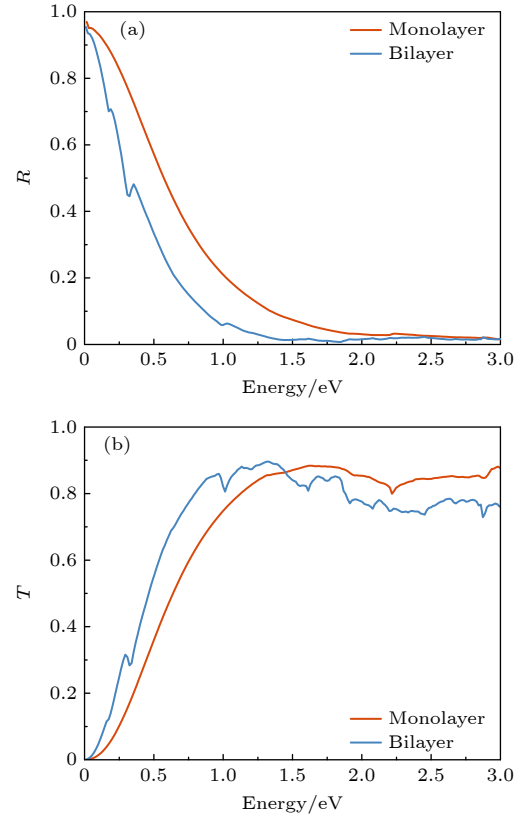


图 4 单、双层 ZrSiS(a) 反射率与 (b) 透射率对比
Fig. 4. Comparison of (a) reflectance and (b) transmittance for monolayer and bilayer ZrSiS.

通过图 4(a), (b) 可以看到, 无论是单层还是双层, ZrSiS 的反射率和透过率对入射光波长非常敏感, 在红外波段具有高的反射率和低的透射率, 而在可见光波段具有低的反射率和高透射率, 这种波长选择性可以使得其在镀膜方向有很好的应用. 此外可以看到双层材料较单层材料而言出现了明显的红移 (向低能量移动), 这使得我们可以通过调整层数对其的波长选择性进行进一步的调控.

此外, 根据能量守恒可以得到吸收率 $A(\omega) = 1 - R(\omega) - T(\omega)$, 结果如图 5 所示. 首先不难发现单层和双层的 ZrSiS 在整个红外到可见光波段都

具有不错的吸收率, 相较于石墨烯约 3.5% 的吸收率而言高出不少 [22]. 此外, 吸收率对层数非常敏感, 双层和单层的吸收率差异非常明显, 双层的吸收率高很多, 尤其是在 0.5 eV 附近的位置, 双层的吸收率是单层的 3 倍左右, 同时在 1.2 eV 出现了一个额外的峰. 其在红外波段的良好吸收使得其在红外探测器方向有很好的应用潜力, 且由于其对层数敏感, 可通过调控层数控制吸收峰来做到波长选择.

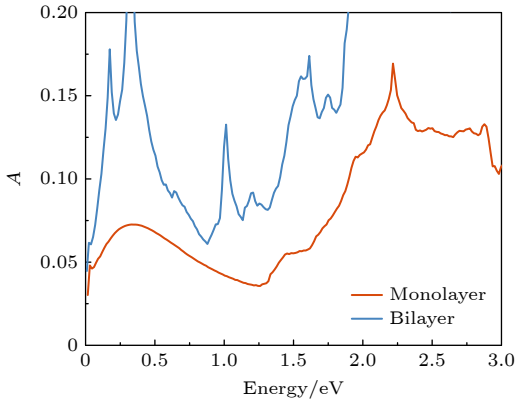


图 5 单双层 ZrSiS 吸收率

Fig. 5. Absorbance of monolayer and bilayer ZrSiS.

3.4 ZrSiS 表面等离激元性质

根据 SPP 的色散关系 (1) 式, 我们计算了 ZrSiS 的单层以及双层结构真空 SPP 色散关系, 并将其与块体 (bulk)ZrSiS 进行对比 [16], 其实部与虚部分别如图 6(a), (b) 所示, 其中 LC 为光锥. 此外, 块体的响应区间为 0—0.8 eV 以及 2 eV 以上, 中间的部分由于不满足表面等离激元的激发条件, 即介电函数实部 $\epsilon < 0$, 因此在画图时删除了不满足产生 SPP 的部分, 以降低无关数据对图像的影响.

对于单双层的 ZrSiS 而言, 产生 SPP 需要满足 $\text{Re}\beta > k_0$, 故从图 6(a) 不难发现, 单、双层产生 SPP 的响应频率分别为 0.5—4 eV 和 0.4—2.5 eV, 相较于块体的响应区间为 0—0.8 eV 以及 2 eV 以上而言, 能够更好地覆盖可见光的波段范围. 其次其波矢实部对于块体而言距离光锥更远, 这意味着其 β 相较于块体中 SPP, 与 k_0 的差值更大, 从而使得其更难通过直接辐射辐射到自由空间, 这意味着层状结构相较于块体而言, SPP 会被更好地束缚在表面. 此外对于 SPP 响应对层数是敏感的, 单层相较于双层而言有更广的响应区间, 但是在响应区间的约束更小, 这使得在使用时可以通过改变层数来达到调控 SPP 响应的结果.

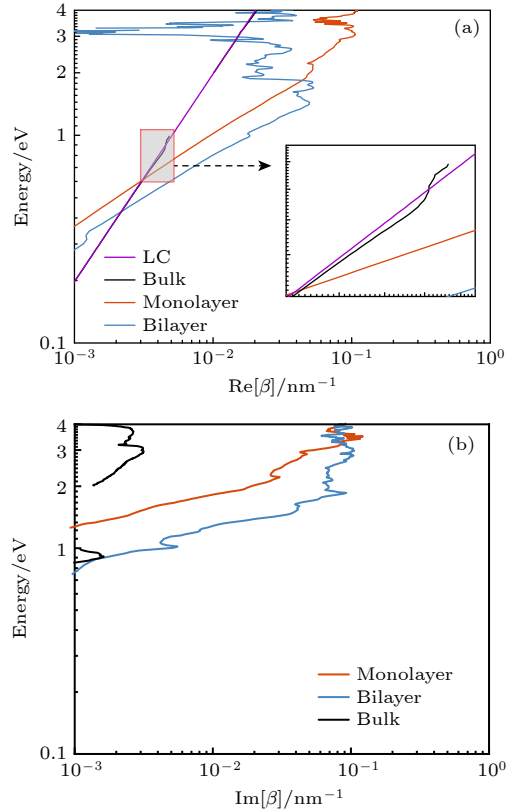


图 6 ZrSiS 的 SPP 色散关系 (a) 实部以及 (b) 虚部

Fig. 6. (a) The real part and (b) imaginary part of the SPP dispersion relation of ZrSiS.

从图 3(b) 可以看出, 相较于块体, 单双层的色散关系虚部大很多, 即层状材料在有更明显的 SPP 响应的同时也具有更明显的损耗.

研究 SPP 性质时, 表面局域性和传播长度是研究人员关注的重点 [23,24]. 为了方便量化 SPP 的表面局域性和传播方向的衰减长度, 分别使用约束比 $\frac{\lambda_{\text{air}}}{\lambda_{\text{spp}}} = \frac{2\pi/k_0}{2\pi/\text{Re}[\beta]} = \frac{\text{Re}[\beta]}{k_0}$ (λ_{air} 为介质波长, 这里以空气为例, λ_{spp} 为 SPP 的波长) 表示 SPP 的约束比, 反映了 SPP 对电磁波的约束程度, 以及 $L = \frac{1}{2\text{Im}[\beta]}$ [25] 表示其传播长度, 表示 SPP 在损失大部分能量之前的传播长度, 传播长度越大表明 SPP 的损耗越低. 结果如图 7 所示.

通过图 7(a) 可以发现, 层状结构的约束程度较块体性能高很多, 具有更加优秀的局域性, 而相应的传播长度如图 7(b) 所示也相对较小但是在红外范围内依旧有微米量级, 但是随着能量增大快速减小, 在高能量区域传播长度较低. 这也符合 SPP 局域性越强, 传播长度越短的一般特点. 单双层的约束比在红外波段是块体材料的数倍, 这意味

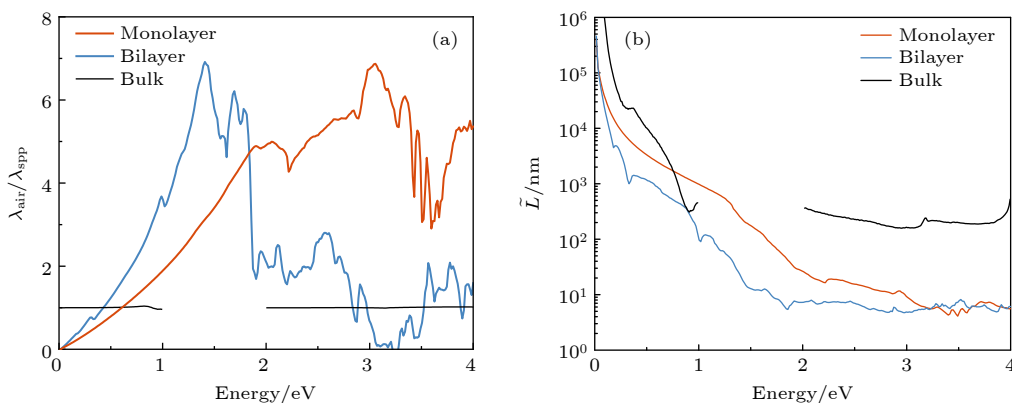


图7 ZrSiS 约束比 (a) 以及传播长度 (b)

Fig. 7. The confinement ratio (a) and propagation length (b) of ZrSiS.

着当利用单/双层 ZrSiS 来传导光 (如作为波导) 或激发等离激元时, 光能量将被极度局域, 这是块体材料根本无法实现的. 同时具有高局域性和较长的传播长度带来了很多好处, 如超高光子态密度 (强局域性将光禁锢在微小体积内, 极大地提高了能量密度, 同时, 长传播距离保证了光子与物质有更长的相互作用时间. 这两者结合, 产生了极强的光-物质相互作用) 以及低相位误差 (长传播距离意味着 SPP 波在传播过程中能保持其波前形状和相干性, 这对于构建需要干涉和相位匹配的精密光学电路至关重要).

4 总结

本文通过第一性原理计算了单双层 ZrSiS 的能带结构、电导率、光学特性, 并进一步分析了其 SPP 性质. 在能带结构研究中, 我们发现层状 ZrSiS 保留了拓扑狄拉克锥, 这与之前的研究结果一致, 同时双层结构能带简并性遭到了破坏. 随后在电导率的研究中发现, 材料在红外波段展现金属性电导, 在可见光区因带间跃迁而增强. 而其光学响应具有显著的波长选择性, 对层数敏感, 可通过控制层数进行调控, 且在红外至可见光波段具有高吸收率. 此外, 其单层与双层 ZrSiS 在可见光范围内支持强局域化的表面等离激元, 其约束能力远超块体材料. 尽管损耗较高, 但在红外波段仍能实现微米量级的传播, 成功平衡了高局域性与足够传播距离. 最后考虑到其成本相对低廉, 层状 ZrSiS 集可调谐能带结构、高效光吸收与强局域等离激元等优点于一身, 是发展高性能纳米光子器件和红外光子技术的理想平台.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Jiang D, Schedin F, Booth T J, Khotkevich V, Morozov S V, Geim A K 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **102** 10451
- [2] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015001
- [3] Huang H Q, Liu J P, Vanderbilt D, Duan W H 2016 *Phys. Rev. B* **93** 201114
- [4] Weng H M, Dai X, Fang Z 2016 *J. Phys.: Condens. Matter* **28** 303001
- [5] Fang C, Chen Y G, Kee H Y, Fu L 2015 *Phys. Rev. B* **92** 081201
- [6] Hussain G Rao X, Li N, Chu W J, Liu X G, Zhao X, Sun X F 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126938
- [7] Lv B Q, Qian T, Ding H 2021 *Rev. Mod. Phys.* **93** 025002
- [8] Neupane M, Belopolski I, Hosen M M, et al. 2016 *Phys. Rev. B* **93** 201104
- [9] Xue S W, Wang M Y, Li Y, Zhang S Y, Jia X, Zhou J H, Shi Y G, Zhu X T, Yao Y G, Guo J D 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 186802
- [10] Wang X F, Pan X C, Gao M, Yu J H, Jiang J, Zhang J R, Zuo H K, Zhang M H, Wei Z X, Niu W, Xia Z C, Wan X G, Chen Y L, Song F Q, Xu Y B, Wang B G, Wang G H, Zhang R 2016 *Adv. Electron. Mater.* **2** 1600228
- [11] Topp A, Queiroz R, Grüneis A, Mütchler L, Rost A W, Varykhalov A, Marchenko D, Krivenkov M, Rodolakis F, McChesney J L, Lotsch B V, Schoop L M, Ast C R 2017 *Phys. Rev. X* **7** 041073
- [12] Ansari L, Monaghan S, McEvoy N, Coileáin C Ó, Cullen C P, Lin J, Siris R, Stimpel-Lindner T, Burke K F, Mirabelli G, Duffy R, Caruso E, Nagle R E, Duesberg G S, Hurley P K, Gity F 2019 *npj 2D Mater. Appl.* **3** 33
- [13] Xu Q N, Song Z D, Nie S M, Fang Z, Dai X 2015 *Phys. Rev. B* **92** 205310
- [14] Sundararaman R, Letchworth-Weaver K, Schwarz K A, Gunceler D, Ozhaves Y, Arias T A D 2017 *SoftwareX* **6** 278
- [15] Sundararaman R, Arias T 2013 *Phys. Rev. B* **87** 165122
- [16] Fan H J, Ma X C, Wei L F, Wu X, Liu D L 2025 *Opt. Express* **33** 3361
- [17] Jian C C, Ma X C, Zhang J Q, Li J L 2022 *Nanophotonics* **11** 531
- [18] Zhang C X, Ma X C, Zhang J Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 227801 [张彩霞, 马向超, 张建奇 2022 物理学报 **71** 227801]
- [19] Sundararaman R, Christensen T, Ping Y, Rivera N, Joannopoulos J D, Soljačić M, Narang P 2018 *Phys. Rev. Mater.* **4** 074011
- [20] Schoop L M, Ali M N, Straßer C, Topp A, Varykhalov A, Marchenko D, Duppel V, Parkin S S P, Lotsch B V, Ast C R

- 2016 *Nat. Commun.* **7** 11696
- [21] Falkovsky L A 2008 *J. Phys. : Conf. Ser.* **129** 012004
- [22] Dawlaty J M, Shivaramana S, Strait J, George P, Chandrashekar M, Rana F, Spencer M G, Veksler D, Chen Y Q 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 131905
- [23] Zhu Y S, Xu H X, Yu P, Wang Z M 2021 *Appl. Phys. Rev.* **8** 021305;
- [24] Linic S, Chavez S, Elias R 2021 *Nat. Mater.* **20** 916
- [25] Maier S A (translated by Zhang T, Wang Q L, Zhang X Y, Li C) 2014 *Plasmonics: Fundamentals and Applications* (Nanjing: Southeast University Press) p20 (in Chinese) [麦尔 S A 著 (张彤, 王琦龙, 张晓阳, 李晨, 译) 2014 等离激元学基础与应用 (南京: 东南大学出版社) 第 20 页]

Optical and surface plasmon polariton properties of monolayer and bilayer ZrSiS*

FAN Haojiang¹⁾ WEI Linfang^{1)†} YONG Xin¹⁾²⁾
 MA Xiangchao^{1)‡} LIU Delian¹⁾

1) (*School of Optoelectronic Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China*)

2) (*North Electro-optic Co., Ltd., Xi'an 710043, China*)

(Received 18 November 2025; revised manuscript received 9 December 2025)

Abstract

Topological nodal-line semimetals have emerged as a fascinating class of materials due to their protected band crossings and unique electronic properties. Among them, ZrSiS stands out as a typical system with nodal-line and high carrier mobility. Although its bulk properties have been extensively studied, the optical and plasmonic behaviors of its monolayer and bilayer ZrSiS are still unexplored. Understanding these low-dimensional forms is crucial for harnessing their potential in nanophotonics and optoelectronic devices. This work, based on first-principles calculations, systematically investigates the electronic band structure, optoelectronic conductivity, optical response, and surface plasmon polariton (SPP) characteristics of monolayer and bilayer ZrSiS. The results are compared with those of bulk materials and typical two-dimensional materials, argentene, to explore their advantages and disadvantages in all aspects and application prospects. Our results show that layered ZrSiS exhibits distinctive conductivity features arising from its topological nodal-line bands, displaying a significant intraband response in the infrared regime and interband response in the visible range. Analysis of the optical properties reveals that both monolayer and bilayer structures possess high absorption (significantly higher than that of graphene) and tunable reflection and transmission windows in the infrared-to-visible spectrum range. Furthermore, regarding plasmonic properties, we find that monolayer ZrSiS and bilayer ZrSiS support SPPs in the infrared-to-visible range (monolayer: 0.5–4 eV; bilayer: 0.4–2.5 eV). These SPPs are highly localized, with confinement ratios several times larger than those of bulk ZrSiS, while maintaining propagation lengths on the order of micrometers in the infrared regime. In summary, monolayer and bilayer ZrSiS combine tunable electronic structure, high optical absorption, and strongly confined surface plasmons, making them promising candidates for advanced nanophotonic and infrared optoelectronic applications. Their layer-dependent properties provide additional degrees of freedom for device design, paving the way for next-generation tunable plasmonic and photonic devices.

Keywords: surface plasmon polariton, mono/bilayer ZrSiS, optical properties, first-principles calculate

DOI: [10.7498/aps.75.20251566](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251566)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251566](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251566)

* Project supported by the Natural Science Basic Research Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2022JZ-04), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62274124), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. XJSJ23173).

† Corresponding author. E-mail: weilinfang@xidian.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: xcma@xidian.edu.cn



单/双层ZrSiS光学性质及表面等离子激元性质

樊浩江 卫临方 雍鑫 马向超 刘德连

Optical and surface plasmon polariton properties of monolayer and bilayer ZrSiS

FAN Haojiang WEI Linfang YONG Xin MA Xiangchao LIU Delian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 050703 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251566

CSTR: 32037.14.aps.75.20251566

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251566>

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

硫掺杂氧化锌纳米线电子性质和光学性质的第一性原理研究

First-principles study of electronic and optical properties of sulfur-doped zinc oxide nanowires

物理学报. 2025, 74(18): 186302 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250495>

金属基底上光学偶极纳米天线的自发辐射宽带增强: 表面等离子激元直观模型

Broadband enhancement of spontaneous emission by optical dipole nanoantenna on metallic substrate: An intuitive model of surface plasmon polariton

物理学报. 2022, 71(11): 118101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20212290>

单层CrI₃电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of strain-tunable charge carrier transport properties and optical properties of CrI₃ monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

Au(111)薄膜表面等离子激元和热载流子输运性质的理论研究

Theoretical study on surface plasmon and hot carrier transport properties of Au(111) films

物理学报. 2022, 71(22): 227801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221166>

稀土元素掺杂含单碲空位缺陷单层WTe₂光学性质的第一性原理

First-principles study on optical properties of rare-earth doped monolayer WTe₂ with single tellurium vacancies

物理学报. 2025, 74(22): 223101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251196>

电场对GaN/g-C₃N₄异质结电子结构和光学性质影响的第一性原理研究

First-principles study of influence of electric field on electronic structure and optical properties of GaN/g-C₃N₄ heterojunction

物理学报. 2022, 71(9): 097301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212261>