

当前位置: 首页 >> 正文

Physical Review B: 首次采用第一性原理的计算方法证明石墨烯拓扑受限态的电子性质

2022-05-27 08:00 审核人:

自2004年石墨烯在实验上被成功机械剥离以来,由于其独特的物理特性引起了研究人员极大关注。石墨烯是研究无质量狄拉克费米子本质属性的理想平台,通过在单层石墨烯上施加AB交错的子晶格势或者在AB堆垛的双层石墨烯上施加垂直电场破坏其空间反演对称性,将引起能谷相反的贝里曲率和轨道磁化,有望应用于谷电子学器件。当狄拉克费米子的质量项在实空间中改变符号时,在零场区域会出现一种一维拓扑受限态,也称为零线模(ZLMs)。由于拓扑性质的本质,这种拓扑受限态电子运输呈无散射状态,类似于弹道运输,在实际电子器件应用中极具应用潜力。

山西师范大学严志博士(导师:许小红教授和中科大乔振华教授)及其合作者设计了如图1(a)所示的AB-BA堆叠线缺陷双层石墨烯器件装置图,利用第一性原理计算系统地研究了石墨烯ZLMs的电子性质,研究发现给线缺陷双层石墨烯施加垂直面内的电场可以诱导出ZLMs【图1(h-j)中红色标记的能带】。而对于完美的AB堆叠双层石墨烯(图2),需要给其左右两侧施加相反方向的电场才能形成ZLMs。此外,还定量地证明了线缺陷石墨烯比完美的双层石墨烯实现ZLMs要求的尺寸更小。本研究首次报道了石墨烯ZLMs的第一性原理计算结果,不仅起到了连接原子模型与实验研究石墨烯ZLMs的桥梁作用,而且为ZLMs的进一步实验探究提供了有益的理论基础。

相关成果以《Electronic properties of zero-line modes in bilayer graphene: An *ab initio* study》为题发表在Phys. Rev. B 105, 035425 (2022)。

全文链接: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.105.035425>

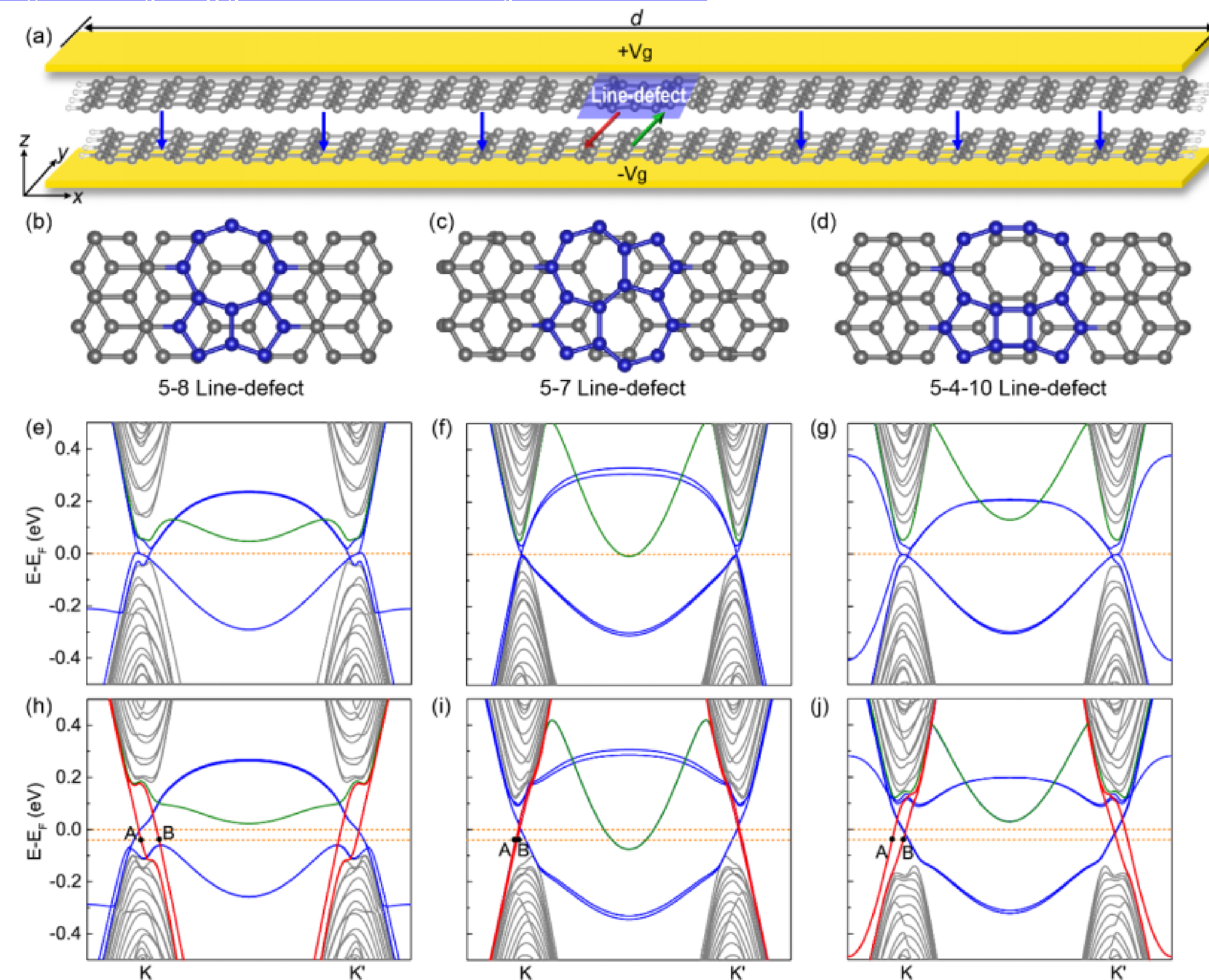


图1: (a) 线缺陷双层石墨烯的器件示意图; (b-d) 三种线缺陷双层石墨烯构型; (e-j) 三种线缺陷石墨烯的电子能带结构图: (e-g) 无外加电场, (h-j) 施加外电场。

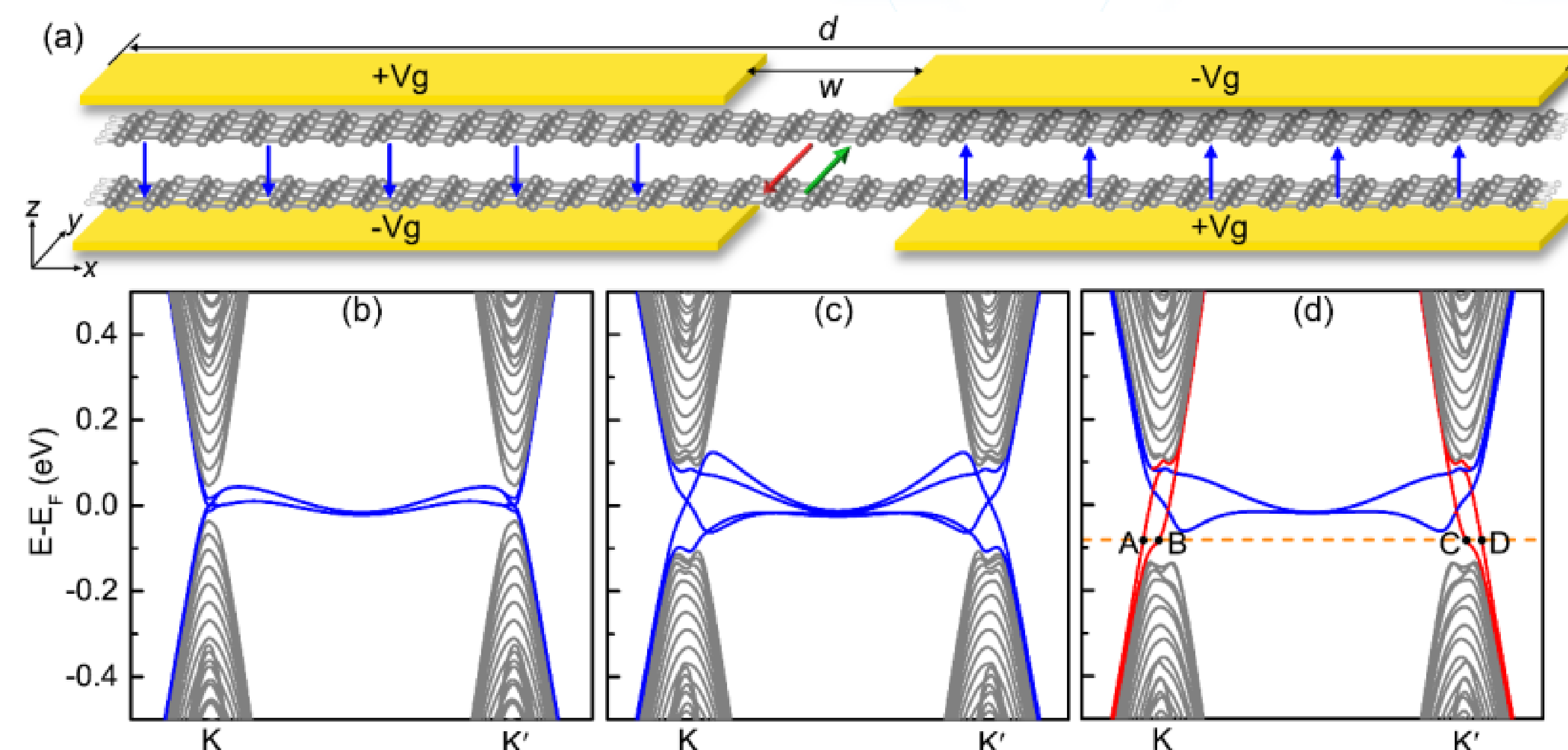


图2: (a) 完美双层石墨烯的器件示意图; (b-d) 完美双层石墨烯条带的电子能带结构图: (b) 无外加电场, (c) 存在左右两侧方向一致的电场, (d) 施加左右相反方向的电场。

【关闭窗口】