

不同堆垛石墨烯/氮化硼异质结的电子特性及压阻特性*

邢广峻¹⁾²⁾³⁾ 王率团¹⁾²⁾³⁾ 董琪琪¹⁾²⁾³⁾ 张鹏¹⁾²⁾³⁾
尉升升^{1)3)4)†} 王俊强^{1)2)3)‡}

1) (中北大学, 石墨烯传感材料与器件山西省重点实验室, 太原 030051)

2) (中北大学仪器与电子学院, 太原 030051)

3) (中北大学前沿交叉科学研究院, 太原 030051)

4) (中北大学半导体与物理学院, 太原 030051)

(2025 年 11 月 4 日收到; 2026 年 1 月 26 日收到修改稿)

石墨烯以其优异的电学特性、高载流子迁移率和良好的机械性能, 在纳米电子器件领域展现出巨大的应用潜力. 理论上, 本征石墨烯的狄拉克锥形能带结构赋予其独特的电学性质, 然而, 单独石墨烯由于缺乏支撑、对环境敏感等原因, 其实际应用受到限制. 近年来, 与石墨烯结构相似的二维材料六方氮化硼 (h-BN) 被引入作为制备异质结的理想材料, 不仅为石墨烯提供机械支撑和防护, 还可打开石墨烯带隙并调控其电子输运性质, 从而拓展其技术应用前景. 本文提出通过构建不同堆垛方式的石墨烯/氮化硼异质结构以实现石墨烯压阻系数优化的方案. 基于密度泛函理论和杂化密度泛函理论, 采用第一性原理计算系统分析了不同堆垛构型下异质结的压阻性能. 结果表明, 所有构型在单轴应变下的压阻系数均显著高于双轴应变; G-BN2 堆垛构型在两种应变条件下均表现出最高的压阻系数, 这为石墨烯基压阻器件的设计提供了理论依据.

关键词: 石墨烯/氮化硼异质结, 电子特性, 压阻系数, 第一性原理

DOI: 10.7498/aps.75.20251502

CSTR: 32037.14.aps.75.20251502

1 引言

石墨烯具有良好的导电性、优秀的延展性以及高温下的稳定性^[1-3], 这些优势使其有可能取代硅作为压力传感器等力学器件的核心敏感元件^[4-7]. 然而, 石墨烯自身存在压阻系数小 (1.06—2.08) 限制了其在力学传感器件中的应用^[8,9]. 因此改善石墨烯的电学特性成为了推动石墨烯应用的主要方向, 包括以其他材料作为衬底制成异质结构^[10] 或

对石墨烯进行掺杂^[11] 等方式.

Hu 等^[12-15] 分别将石墨烯与硅烯^[12]、磷烯^[13]、氧化锌^[14] 以及二硫化钼^[15] 相结合形成异质结构, 带隙宽度由原来的零带隙分别增大到 66 meV (硅烯)、37 meV (磷烯)、25 meV (氧化锌) 以及 25 meV (二硫化钼), 证明了构建石墨烯/宽带隙材料异质结有助于改善石墨烯的电学性能. Rashid 等^[16] 通过改变堆叠模式构建了 3 种不同的石墨烯/二维碳化硅异质结, 经第一性原理计算发现其带隙明显增加 (20—28 meV). Luo 等^[17] 通过对砷烯进行旋转

* 国家自然科学基金 (批准号: 62374152)、山西省自然科学基金 (批准号: 202203021221105) 和山西省重点研发计划 (批准号: 202502010201032) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sswei@nuc.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: wangjq210@nuc.edu.cn

构建了4种不同堆垛的石墨烯/砷烯异质结构,发现不同旋转角度后的石墨烯带隙宽度存在显著差异,分别为1.73 eV(0°), 1.38 eV(10.9°), 1.51 eV(19.1°), 1.8 eV(30°). Sattar等^[18]构建了石墨烯/氮化硼异质结以及引入氮化硼掺杂的石墨烯/氮化硼异质结,并通过调整石墨烯与氮化硼的层间距观察石墨烯带隙宽度的变化,发现间距越小,层间作用越强,石墨烯的带隙宽度越大;且在相同层间距下,掺杂后的石墨烯/氮化硼异质结相较于未掺杂的带隙宽度更大,带隙宽度的增长大约在30—40 meV. Bhandary等^[19]将石墨烯与氮化硼进行了斐波那契堆叠,使用LDA(local density approximation)及PBE-vdW (Perdew-Burke-Ernzerhof-van der Waals)计算其能带和形成能,发现这种多层堆垛下的带隙宽度大约在数十毫电子伏特. 上述研究在理论上证实了通过构建异质结可有效打开石墨烯的带隙,且改变异质结的几何构型有助于改善其电性能,为其在半导体领域的应用奠定了基础. 然而,关于异质结在压阻传感领域作为高性能敏感元件的应用潜力与研究较为欠缺,特别是异质结的不同堆垛构型对压阻效应的调制.

本研究构建了具有不同堆垛方式的石墨烯/氮化硼异质结结构,基于第一性原理,计算了不同堆垛的结合能、能带、态密度等参数. 通过调整异质结的晶格常数来模拟由外部应力引起的面内应变. 系统分析了各类构型在单轴与双轴应变下的电学特性,深入揭示了堆垛方式的不同对压阻性能的影响,并详细讨论了其微观物理机制与变化规律,为设计高性能石墨烯压阻传感器提供了重要的理论依据.

2 结构构建与计算方法

由于石墨烯与六方氮化硼(h-BN)晶格极为相似,因此我们使用MS(Materials Studio)对石墨烯和h-BN均采用 $4\times 4\times 1$ 扩胞建模并构建了3种石墨烯/h-BN异质结,分别为碳原子和氮、硼原子一一对齐(G-BN1)、氮原子在碳原子六元环中心(G-BN2)以及硼原子在六元环中心(G-BN3). 在异质结构中沿 c 轴引入15 Å的真空层^[20],以有效隔绝周期性边界条件引起的非物理镜像相互作用. 使用VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[21]对不同堆垛异质结构进行理论计算,基于广义梯度近

似和密度泛函理论对异质结构进行结构弛豫以获得最稳定的原子排列避免后续计算出现误差,同时基于结构弛豫结果进行结合能计算. 使用HSE06 (Heyd-Scuseria-Ernzerhof (2006))计算结构的能带和态密度数据. 在计算过程中,均采用 $9\times 9\times 1$ 的 k 点采样网格,截断能量设置为500 eV,考虑到石墨烯与h-BN之间主要为范德瓦耳斯力相互作用,因此在计算前的参数设置中添加IVDW = 12即采用DFT-D2方法对结构进行范德瓦耳斯修正^[22].

通过系统调整超晶胞的面内晶格常数以模拟外部应力引起的面内应变,是研究二维材料及其异质结应变效应的常用第一性原理方法^[23,24]: 晶格常数增大对应拉伸应变,减小则对应压缩应变,这也与文献^[25]的报道一致. 鉴于石墨烯在压阻传感器中的实际工况以受拉为主^[26],本研究主要关注拉伸应变的作用. 为此,我们通过控制石墨烯/h-BN异质结超胞的晶格常数,分别模拟了两种典型的面内拉伸应变模式: 单轴应变(仅沿 a 轴方向调整晶格常数, b 轴固定)与双轴应变(沿 a 轴和 b 轴等比例调整晶格常数). 为在保持结构稳定的前提下有效诱导电子结构响应,并参照同类研究中对小应变范围的选取依据^[27],所有应变幅度均设定为0.3%.

3 结果与讨论

在本研究中首先对本征石墨烯进行结构弛豫,计算后的结构、能带及态密度如图1和图2所示,石墨烯单胞晶格常数为2.46 Å, C—C键键长为1.42 Å,与文献^[28]报道结果一致.

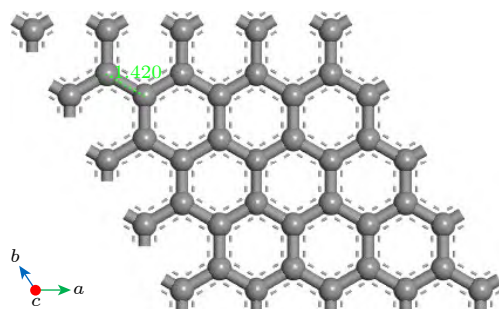


图1 结构弛豫后的石墨烯结构

Fig. 1. Graphene structure after structural relaxation.

结构弛豫后的3种堆垛如图3所示,石墨烯与h-BN层间距均在3.3 Å左右. 各子图分别对应其侧视图(图3(a1), (b1), (c1))与俯视图(图3(a2), (b2), (c2)). 沿 c 轴方向, G-BN1表现为石墨烯的

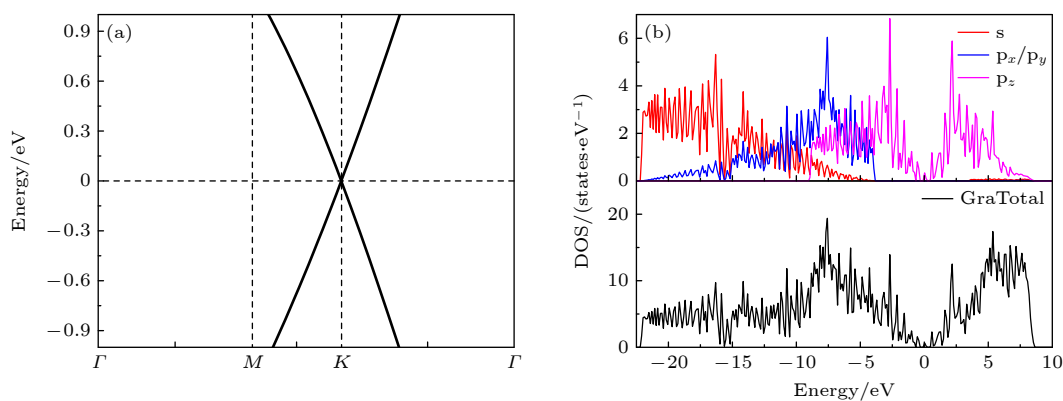


图 2 (a) 石墨烯能带结构; (b) 石墨烯态密度

Fig. 2. (a) Band structure of graphene; (b) density of states in graphene.

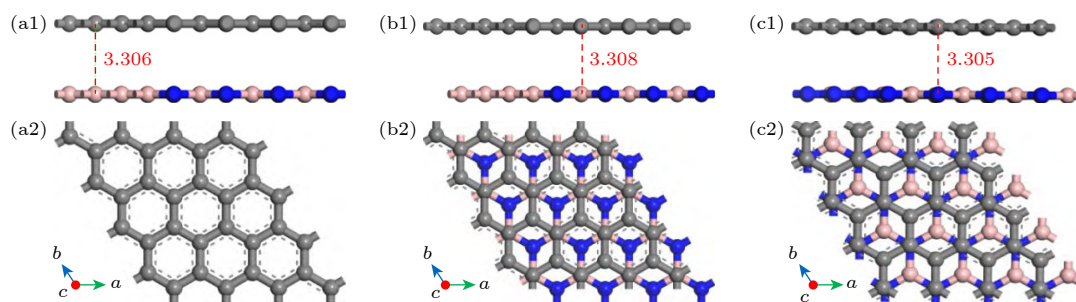


图 3 结构弛豫后的石墨烯/h-BN 堆垛构型 (a1), (a2) G-BN1 侧视图和俯视图; (b1), (b2) G-BN2 侧视图和俯视图; (c1), (c2) G-BN3 侧视图和俯视图

Fig. 3. Stacked configuration of graphene/h-BN after structural relaxation: (a1), (a2) G-BN1 side view and top view; (b1), (b2) G-BN2 side view and top view; (c1), (c2) G-BN3 side view and top view.

碳原子与 h-BN 中的硼、氮原子一一对齐; G-BN2 中 h-BN 的氮原子位于石墨烯碳六元环的中心; 而 G-BN3 中则为 h-BN 的硼原子位于石墨烯碳六元环的中心. 根据结合能计算公式^[29]:

$$E_b = E_{\text{hetero}} - (E_{\text{gra}} + E_{\text{hbn}}). \quad (1)$$

即结合能 (E_b) 为异质结能量 (E_{hetero}) 减去单层石墨烯 (E_{gra}) 和 h-BN 能量 (E_{hbn}) 的总和, 3 种堆垛的结合能如表 1 所列.

表 1 3 种堆垛结合能

Table 1. Binding energy of three types of stacking.

结构	结合能/eV
G-BN1	-1.34
G-BN2	-1.61
G-BN3	-1.42

从表 1 分析得出, 3 种堆垛的结合能均小于 0, 表明其结构均稳定, 在实际转移或生长过程中均有可能出现. 其中, G-BN2 结构结合能最低, 稳定性最高, 这也意味着石墨烯与 h-BN 的层间相互作用

会更强.

通过分析各构型的差分电荷密度 (图 4) 发现, 3 类构型中的石墨烯与 h-BN 界面处均存在电荷的转移和局域化, 其中 G-BN2 (图 4(b1), (b2)) 的电荷转移及局域化更显著, 这说明了其层间作用更强, 与结合能阶段的分析一致. 石墨烯与 h-BN 界面处的电荷重新分布会导致石墨烯的狄拉克点附近出现不对称的势能场, 打破其原始的对称性. h-BN 的原子排列可能使石墨烯的两个子晶格处于不等价的环境 (如一个子晶格靠近 B 原子, 另一个靠近 N 原子), 破坏子晶格对称性, 直接导致带隙打开. 同时极性键 (B—N 键) 与石墨烯的 π 电子云相互作用, 可能诱导石墨烯产生局域电偶极矩, 从而在狄拉克点附近引入等效的“质量项” (即带隙).

未施加应变时, 3 种构型的能带结构与态密度 (DOS) 见图 5. 其中, G-BN1, G-BN2 和 G-BN3 的带隙分别为 60 meV, 40 meV 和 70 meV, 与文献^[30]报道的实验结果相近. 态密度图分为上下两部分: 上半部分为异质结中各元素的分波态密度 (PDOS),

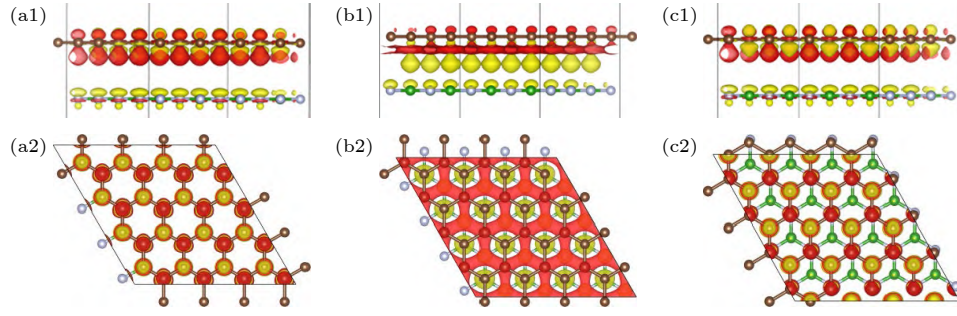


图 4 各构型差分电荷密度 (a1), (a2) G-BN1 侧视图和俯视图; (b1), (b2) G-BN2 侧视图和俯视图; (c1), (c2) G-BN3 侧视图和俯视图

Fig. 4. Differential charge density for each configuration: (a1), (a2) G-BN1 side view and top view; (b1), (b2) G-BN2 side view and top view; (c1), (c2) G-BN3 side view and top view.

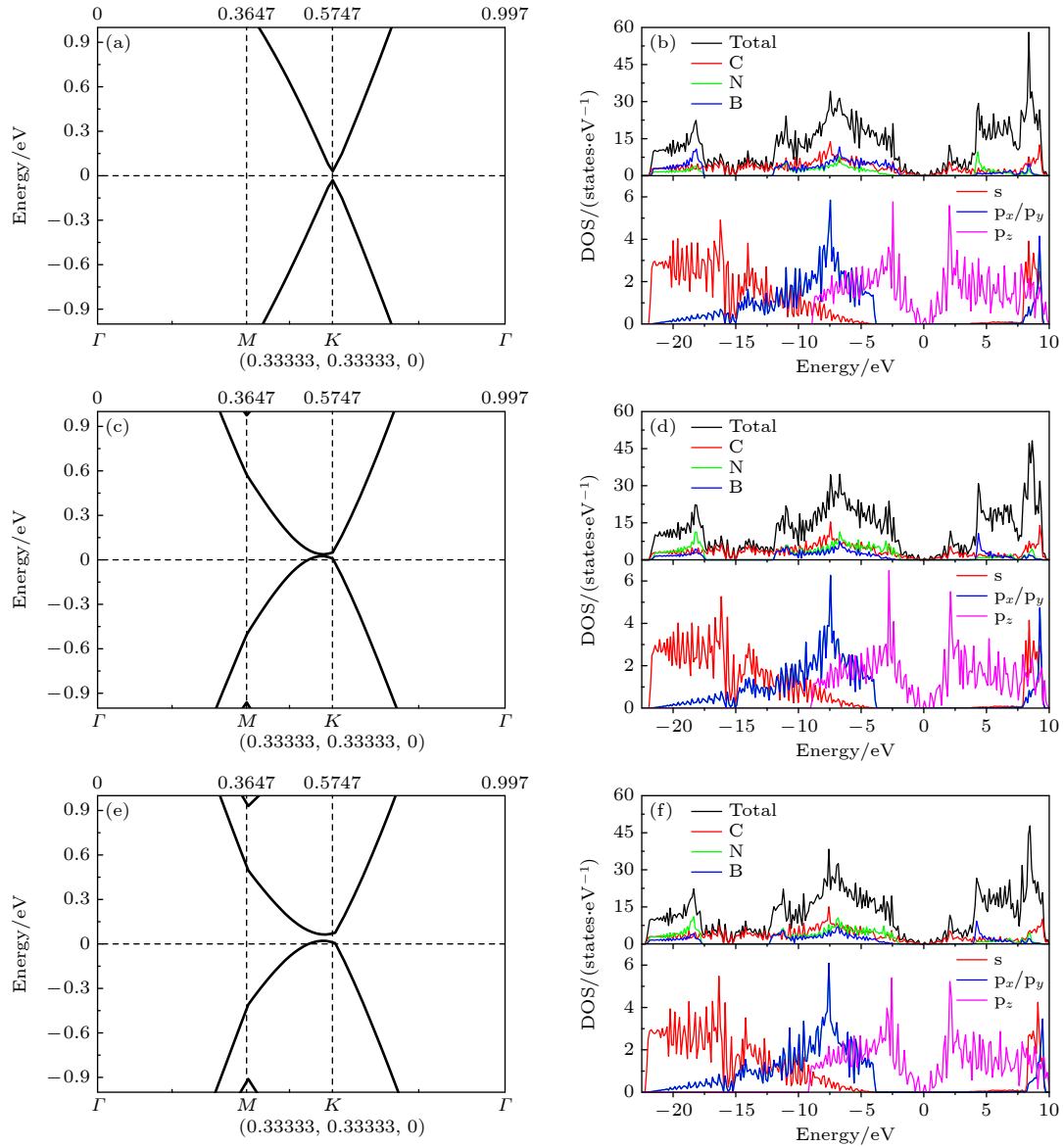


图 5 未施加应变下各构型能带及态密度 (a), (b) G-BN1 能带及态密度; (c), (d) G-BN2 能带及态密度; (e), (f) G-BN3 能带及态密度 (无应变时, K 点布里渊区相对坐标为 $(0.33333, 0.33333, 0)$)

Fig. 5. Band structure and density of states of each configuration without applied strain: (a), (b) G-BN1 band structure and density of states; (c), (d) G-BN2 band structure and density of states; (e), (f) G-BN3 band structure and density of states (in the absence of strain, the relative coordinates of the K -point Brillouin zone are $(0.33333, 0.33333, 0)$).

用于分析不同原子对电子态的贡献; 下半部分则为石墨烯层碳轨道各自的态密度, 用于明确石墨烯本身电子结构在异质结中的变化.

与本征石墨烯的能带结构相比, 当石墨烯与 h-BN 形成范德瓦耳斯异质结时, 在界面范德瓦耳斯耦合的作用下, 石墨烯的带隙被打开. 通过对不同堆叠构型的分波态密度及石墨烯层内碳轨道态密度的分析发现, 费米能级附近的电子态仍主要源于 C 原子的 p_z 轨道贡献. 由于本研究中未在石墨烯中引入缺陷或化学掺杂, s 轨道、 p_x 和 p_y 轨道在

费米能级附近的电子态分布未发生显著变化, 与之形成鲜明对比的是, p_z 轨道在该能量区间的态密度出现了明显改变. 这一结果明确表明, h-BN 中的 B—N 键与石墨烯的 π 电子云 (主要由 p_z 轨道构成) 之间存在明显的相互作用, 从而调控了石墨烯的 π 电子能带结构, 并诱导了带隙的打开.

根据第 2 节中施加应变的具体方法, 对 3 种构型进行了单轴应变和双轴应变的计算. 单轴应变下 3 种堆垛方式的能带结构及态密度如图 6 所示, 双轴应变下的相应结果如图 7 所示.

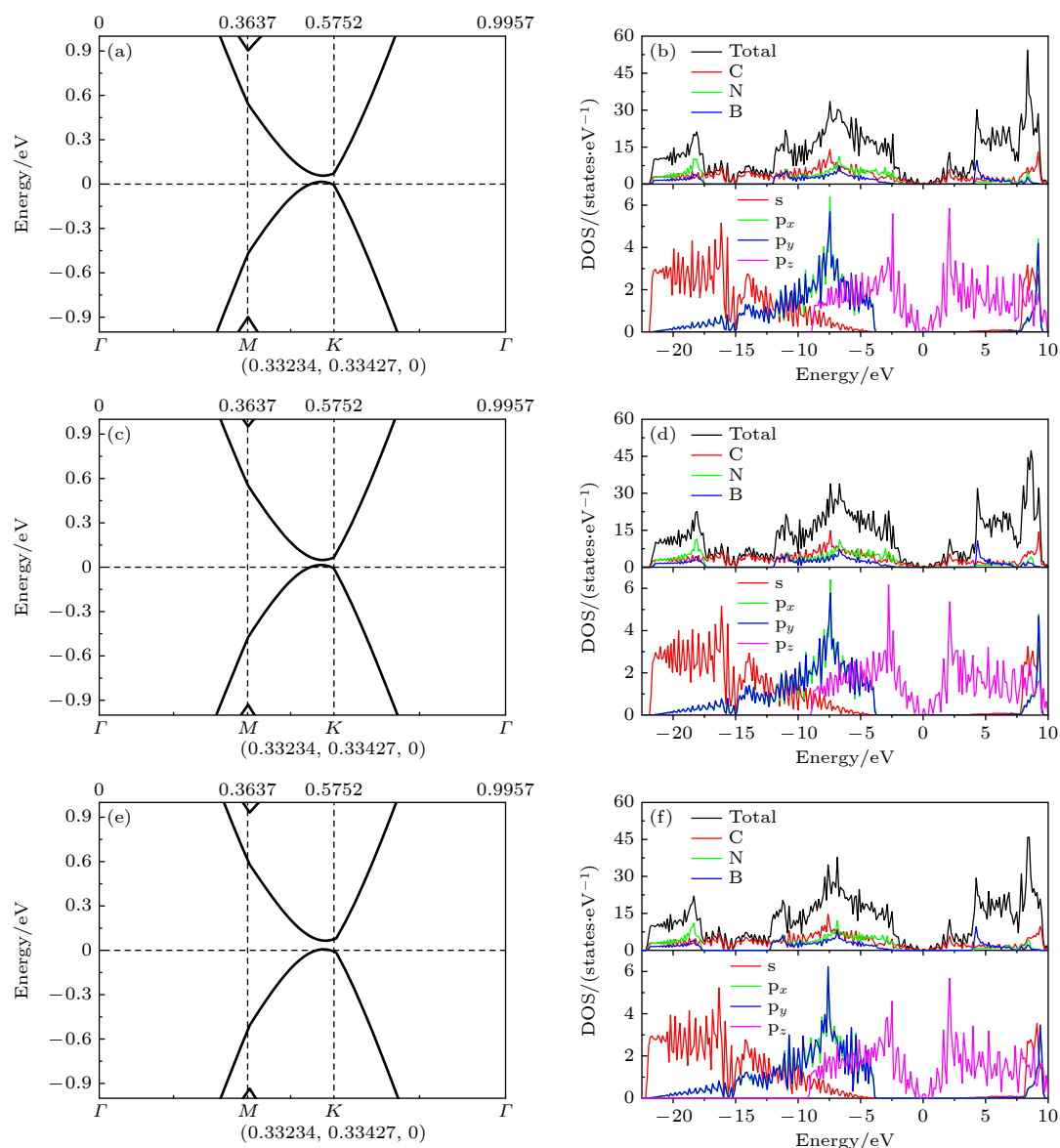


图 6 0.3% 单轴拉伸应变下各构型能带及态密度 (a), (b) G-BN1 能带及态密度; (c), (d) G-BN2 能带及态密度; (e), (f) G-BN3 能带及态密度 (0.3% 单轴拉伸应变时, K 点布里渊区相对坐标为 (0.33234, 0.33427, 0))

Fig. 6. Band structures and density of states for each configuration under 0.3% uniaxial tensile strain: (a), (b) G-BN1 band structure and density of states; (c), (d) G-BN2 band structure and density of states; (e), (f) G-BN3 band structure and density of states (at 0.3% uniaxial tensile strain, the relative coordinates of the K -point Brillouin zone are (0.33234, 0.33427, 0)).

分析图 6 和图 7 可知, 在单轴应变下, 3 种堆垛构型的带隙均呈现不同程度的增大 (G-BN1: 70 meV, G-BN2: 60 meV, G-BN3: 90 meV), 而在双轴应变下带隙均有所收窄 (分别对应 40 meV, 50 meV, 70 meV). 这一差异源于两种应变模式对异质结电子结构的差异化调制机制.

从对称性角度看, 单轴应变会明显降低结构的对称性, 导致原本简并的 p_x 与 p_y 轨道在态密度中发生分化. 这种轨道分化反映出声子模与电子态各

向异性增强, 进而使得石墨烯的两个子晶格 (A 与 B) 在 h-BN 作用下所处的局域势场差异增大, 子晶格不对称性被进一步放大. 与此同时, 单轴应变会引起狄拉克点沿应变方向发生移动, 并在垂直方向产生能带畸变, 这种“狄拉克锥倾斜”效应会改变载流子的群速度分布 [31], 从而直接影响电导对外部应变的响应灵敏度.

相比之下, 双轴等比例应变保留了结构的对称性, 因此 p_x 与 p_y 轨道仍保持简并, 子晶格势场梯

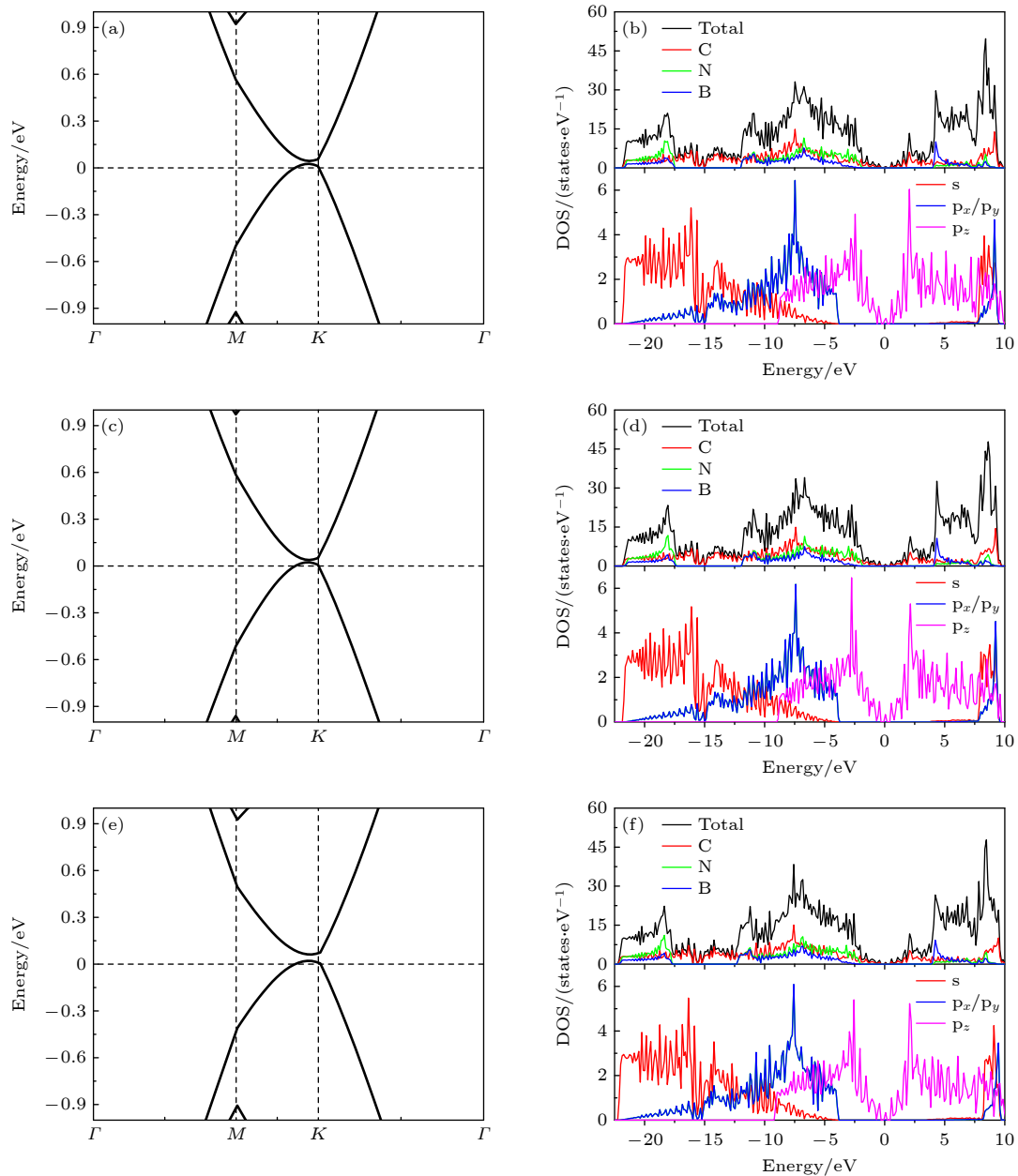


图 7 0.3% 双轴拉伸应变下各构型能带及态密度 (a), (b) G-BN1 能带及态密度; (c), (d) G-BN2 能带及态密度; (e), (f) G-BN3 能带及态密度

Fig. 7. Band structures and density of states for each configuration at 0.3% biaxial tensile strain: (a), (b) G-BN1 band structure and density of states; (c), (d) G-BN2 band structure and density of states; (e), (f) G-BN3 band structure and density of states.

表 2 3 种堆垛单双轴应变费米速度及压阻系数

Table 2. Fermi velocity and piezoresistive coefficient of three types of single and double-axis stacking.

堆垛	无应变 ν_F	单轴应变		双轴应变	
		ν_F	G_F	ν_F	G_F
G-BN1	8.59	8.55	4.13	8.57	1.55
G-BN2	8.95	8.90	4.77	8.92	2.25
G-BN3	8.89	8.85	4.02	8.87	1.5

度变化较小. 此外, 双轴应变往往会通过泊松效应诱发面外晶格收缩, 在一定程度上弱化石墨烯与 h-BN 之间的层间耦合. 更重要的是, 双轴应变导致石墨烯晶格均匀膨胀、C—C 键长增大, 使得布里渊区 K 点附近的跃迁积分减小, 从而抑制了带隙的打开. 这种均匀膨胀虽可引起载流子浓度变化, 但由于缺乏对称性破缺与轨道各向异性, 其对电阻的调制能力远弱于单轴应变.

通过计算压阻系数 (G_F) 来对比不同堆垛的压阻特性, 压阻系数的计算公式为^[32,33]

$$G_F = \left| \frac{\Delta R}{R_0 \varepsilon} \right|. \quad (2)$$

电阻变化率计算公式为

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{R - R_0}{R_0} = \frac{\nu_F(0)^2 (1 + \varepsilon_{xx})}{\nu_F(\varepsilon)^2 (1 + \varepsilon_{yy})} - 1, \quad (3)$$

式中, ΔR 为应变后电阻 (R) 减去应变前电阻 (R_0), ε 为应变比例, ε_{xx} 为 x 轴应变分量, ε_{yy} 为 y 轴应变分量, ν_F 为费米速度. 本研究主要关注石墨烯压阻系数的灵敏度, 因此在 (2) 式中取绝对值, 旨在直接表征压阻响应灵敏度的大小, 以便于比较不同构型在应变下电阻相对变化的强弱. 费米速度可通过计算能带中高对称点附近的斜率得出. 最终得到各构型在无应变、单轴应变、双轴应变下的费米速度及压阻系数的计算结果如表 2 所列.

根据表 2 所列结果, 3 种堆垛方式在单轴应变下的压阻系数均高于双轴应变. 这主要源于单轴应变可显著降低异质结的对称性, 从而增强 h-BN 对石墨烯两个子晶格 (A 位与 B 位) 的势场差异, 进一步加剧子晶格不对称性. 同时, 单轴应变诱发了电子轨道响应的各向异性, 使原本简并的 p_x 和 p_y 轨道发生分化. 这种轨道特性的改变会影响载流子的有效质量与散射率, 共同贡献于压阻效应的增强.

值得注意的是, 在 3 种堆垛方式中, G-BN2(即氮原子位于碳六元环中心) 的压阻系数显著高于 G-BN1 和 G-BN3. 这一优势可从差分电荷密度与

态密度分析中得到进一步阐明: G-BN2 界面处呈现更显著的电荷转移与局域化特征, 表明氮原子强电负性诱导的深电势阱能有效吸引石墨烯的 π 电子, 增强层间耦合, 并大幅提升子晶格势场的不对称性. 对应的态密度显示, G-BN2 在费米能级附近碳 p_z 轨道的态密度分布受应变调制最为明显, 说明其电子结构对外部形变具有更高的灵敏度与可调制性, 从而在应变下能更有效地调控载流子的输运行为, 产生更强的压阻效应.

相比之下, G-BN1 与 G-BN3 构型的压阻性能相对较差, 其根源在于原子堆垛方式所导致的界面耦合强度、子晶格不对称性及应变响应能力的明显不足. 具体而言, G-BN1 构型中碳原子与 h-BN 层中 B, N 原子直接对齐, 界面耦合较弱 (结合能最高, -1.34 eV). 应变 (尤其是单轴应变) 虽也能引入一定的对称性破缺, 但由于缺乏可供应变调制的本征势场梯度, 应变能量更多地被晶格形变吸收, 而难以高效转化为界面势场的有效重构, 因此其电子结构对应变的敏感度较低, 压阻系数提升有限. G-BN3 构型虽然具有硼原子位于碳六元环中心的几何特征, 但由于硼原子电负性较弱, 所形成的局域电势阱较浅, 对石墨烯 π 电子云的调制能力不足, 导致其诱导的子晶格不对称性较弱, 界面电荷重分布在应变下的响应不显著, 因而压阻系数仍低于 G-BN2. 综上所述, 优异的压阻性能依赖于强界面耦合、显著的本征子晶格不对称性以及中心原子高电负性所带来的深势阱调制作用. G-BN2 构型因同时满足上述条件而表现出最优的压阻特性, 而 G-BN1 与 G-BN3 则分别因对称性过高与中心原子电负性不足而在压阻响应上存在本质局限.

4 结 论

本研究基于第一性原理计算方法系统研究了不同堆垛方式下石墨烯/h-BN 异质结在无应变、单轴应变及双轴应变下的电子结构与压阻特性. 结

果表明, 在无应变下石墨烯的带隙打开主要是由 h-BN 与石墨烯 π 轨道相互作用引起的; 受益于对称性破缺的影响, 所有构型在单轴应变下的压阻系数均显著高于双轴应变, 其中 G-BN2 堆垛构型在两种应变条件下均表现出最高的压阻系数. 该研究为石墨烯压阻传感器的优化设计提供了重要理论参考.

参考文献

- [1] Cheng T T, Zhang K, Luo M, Meng Y X, Zu Y Z, Wang Y J, Wang P, Yu C H 2023 *J. Infrared Millim. Waves* **42** 666 (in Chinese) [成田恬, 张坤, 罗曼, 孟雨欣, 祖源泽, 王奕锦, 王鹏, 余晨辉 2023 *红外与毫米波学报* **42** 666]
- [2] Sun Y, Xu B, Yi L 2020 *Chin. Phys. B* **29** 023102
- [3] Wu X M, Xiong L, Feng Y L, Wang C, Gao G Y 2019 *J. Chem. Phys.* **150** 064103
- [4] Shukla V, Jena N K, Grigoriev A, Ahuja R 2017 *ACS Appl. Mater. interfaces* **9** 39945
- [5] An Y P, Jiao J T, Hou Y S, Wang H, Wu R Q, Liu C Y, Chen X N, Wang T X, Wang K 2019 *J. Phys.: Condens. Matter* **31** 065301
- [6] Zheng Q R, Zhan F Z, She J Y, Wang J Y, Shi R L, Meng G D 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 086101 (in Chinese) [郑钦仁, 詹浩至, 折俊艺, 王建宇, 石若立, 孟国栋 2024 *物理学报* **73** 086101]
- [7] Li L L, Meng F W, Zou K, Huang Y, Peng Y T 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 086801 (in Chinese) [李亮亮, 孟凡伟, 邹鲲, 黄瑶, 彭倚天 2021 *物理学报* **70** 086801]
- [8] Wang J Q, Lei S, Su N N, Hou W, Li M W, Zheng S Y, Zhang H K, Lv B L 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 243502
- [9] Averill F W, Morris J R, Cooper V R 2009 *Phys. Rev. B* **80** 195411
- [10] Sakai Y, Saito S, Cohen M L 2015 *J. Phys. Soc. Jpn.* **84** 121002
- [11] Jiang M, Zhang W C, Zhao K, Guan F, Wang Y 2021 *Int. J. Mod. Phys. B* **35** 2150067
- [12] Hu W, Li Z Y, Yang J L 2013 *J. Chem. Phys.* **139** 154702
- [13] Hu W, Wang T, Yang J L 2015 *J. Mater. Chem. C* **3** 4756
- [14] Hu W, Li Z Y, Yang J L 2013 *J. Chem. Phys.* **138** 124706
- [15] Hu W, Wang T, Zhang R Q, Yang J L 2016 *J. Mater. Chem. C* **4** 1776
- [16] Rashid A S, Islam M S, Ferdous N, Park J, Nahid M A I, Shaikh M A 2019 *J. Comput. Electron.* **18** 836
- [17] Luo Z, Han D D, Dong J C, Li H J, Yu W, Zhang S D, Zhang X, Wang Y 2019 *Jpn. J. Appl. Phys.* **58** SBBH01
- [18] Sattar A, Moazzam U, Bashir A I, Ahmad I, Ahmad R 2021 *Nanotechnology* **32** 225705
- [19] Bhandary S, Haldar S, Sanyal B 2022 *Physica Status Solidi (b)* **259** 2100423
- [20] Qin R, Zhu W J, Zhang Y L, Deng X L 2014 *Nanoscale Res. Lett.* **9** 521
- [21] Huang C, Li X Y, Zhu Y, Pan Y F, Fan J Y, Shi D N, Ma C L 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 117102 (in Chinese) [黄灿, 李小影, 朱岩, 潘燕飞, 樊济宇, 施大宁, 马春兰 2018 *物理学报* **67** 117102]
- [22] Zhang S F, Wang Z W 2023 *Results Phys.* **44** 106189
- [23] Lu H, Su N N, Wang J Q, Ti H, Wu S S, Li M W 2024 *Micro Nanostruct.* **192** 207878
- [24] Guo W Y, Cao J M, Sun S T, Ye X 2021 *Physica E* **128** 114583
- [25] Li S R, Wang H, Wang C Y, Zhao P X, Zhang C F, Qiao D W 2024 *J. Mol. Model.* **30** 56
- [26] Zhang Z, Liu Q, Ma H L, Ke N F, Ding J, Zhang W D, Fan X G 2024 *IEEE Sensor. J.* **24** 25227
- [27] Zhao J, He C L, Yang R, Shi Z W, Cheng M, Yang W, Xie G B, Wang D M, Shi D X, Zhang G Y 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 063112
- [28] Qin G, Qin Z Z, Wang H M, Hu M 2018 *Comput. Mater. Sci.* **151** 153
- [29] Liu Y, Yao J, Chen C, Miao L, Jiang J J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 063601 (in Chinese) [刘源, 姚洁, 陈驰, 缪灵, 江建军 2013 *物理学报* **62** 063601]
- [30] Chen Z G, Shi Z W, Yang W, Lu X B, Lai Y, Yan H G, Wang F, Zhang G Y, Li Z Q 2014 *Nat. Commun.* **5** 4461
- [31] Al-Marzoog R, Rezaeil A, Noorinejad Z, Amini M, Ghanbari-Adivi M, Jafari S A 2024 *Phys. Rev. B* **110** 165427
- [32] Wang V, Xu N, Liu J C, Tang G, Geng W T 2021 *Comput. Phys. Commun.* **267** 108033
- [33] Smith A D, Niklaus F, Paussa A, Vaziri S, Fischer A C, Sterner M, Forsberg F, Delin A, Esseni D, Palestri P, Ostling M, Lemme M C 2016 *ACS Nano* **10** 9879

Electronic and piezoresistive properties of different stacked graphene/boron nitride heterojunctions*

XING Guangjun¹⁾²⁾³⁾ WANG Shuaituan¹⁾²⁾³⁾ DONG Qiqi¹⁾²⁾³⁾
 ZHANG Peng¹⁾²⁾³⁾ WEI Shengsheng^{1)3)4)†} WANG Junqiang^{1)2)3)‡}

1) (*Shanxi Provincial Key Laboratory of Graphene Sensing Materials and Devices, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

2) (*School of Instrumentation and Electronics, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

3) (*Institute of Frontier Interdisciplinary Sciences, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

4) (*School of Semiconductors and Physics, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

(Received 4 November 2025; revised manuscript received 26 January 2026)

Abstract

Graphene holds great promise in the field of nanoelectronic devices owing to its high carrier mobility, excellent electrical properties, and robust mechanical performance. Theoretically, the Dirac cone band structure of intrinsic graphene endows it with unique electronic characteristics. However, the practical utility of standalone graphene layers is limited by challenges such as insufficient mechanical self-support and high environmental sensitivity. In recent years, hexagonal boron nitride (h-BN), a two-dimensional material structurally analogous to graphene, has emerged as an ideal candidate for constructing van der Waals heterostructures. These heterostructures not only provide mechanical support and environmental protection for graphene, but also modulate its band structure and electronic transport properties, thereby broadening its technological applicability. This paper investigates three distinct stacking configurations of graphene/hexagonal boron nitride (h-BN) heterostructures, focusing on their structural, electronic, and piezoresistive properties. The three configurations along the *c*-axis are defined as follows: carbon atoms aligned with both nitrogen and boron atoms (G-BN1), nitrogen atoms centered within the carbon hexagonal rings (G-BN2), and boron atoms centered within the carbon hexagonal rings (G-BN3). Structural optimization of these heterostructures is performed using density functional theory (DFT) with the generalized gradient approximation (GGA). Interlayer binding energy calculations reveal that G-BN2 exhibits the lowest binding energy, indicating relatively stronger interlayer interactions between graphene and h-BN in this configuration. The band structures and density of states (DOS) for all three stacking arrangements are computed using the Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06) hybrid functional. The results demonstrate that h-BN induces a bandgap in graphene by modulating its π -electron band structure. In-plane uniaxial and biaxial tensile strains induced by external stress are simulated by increasing the lattice constants along the *a*-axis and along both the *a*- and *b*-axes, respectively. The band structure variations and piezoresistive properties of the three stacking configurations under these strain conditions are calculated. Compared with the unstrained structures, the bandgaps of all heterostructures significantly increase under uniaxial strain but narrow under biaxial strain. Furthermore, graphene/h-BN heterostructures substantially enhance the piezoresistive coefficient of graphene, with the anisotropic response of electronic orbitals yielding higher piezoresistive coefficients under uniaxial strain across all configurations. Among them, the G-BN2 stacking configuration exhibits the highest piezoresistive coefficient under both strain conditions. This study provides a theoretical foundation for the future design of high-performance graphene-based piezoresistive devices.

Keywords: graphene/boron nitride heterojunction, electronic properties, piezoresistive coefficient, first-principles calculations

DOI: [10.7498/aps.75.20251502](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251502)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251502](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251502)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62374152), the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China (Grant No. 202203021221105), and the Key Research and Development Program Project of Shanxi Province, China (Grant No. 202502010201032).

† Corresponding author. E-mail: sswei@nuc.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wangjq210@nuc.edu.cn