

计算赋能,探索前沿: 构建基于 CASTEP/VESTA 的固体物理探究式教学

何俊荣 薛 丽

(湖北科技学院电子与电气工程学院,湖北 咸宁 437100)

摘 要 为应对固体物理课程中抽象概念多、理论与前沿脱节的教学挑战,本文开展以“双层转角 MoS_2 能带结构研究”为核心的探究式教学案例。本案例将“转角电子学”前沿课题引入课堂,借助第一性原理计算软件 CASTEP 与晶体可视化软件 VESTA,完成从莫尔超晶格结构构建、结构优化到电子能带计算分析的全流程研究。期望通过这种“科研驱动、计算赋能”的模式,促进学生对晶体对称性、能带理论等核心概念的学习,提升其计算模拟、数据分析与解决复杂问题的综合能力,实现知识传授、能力培养与前沿启蒙的有机结合,探索理工科基础课程教学改革范式。

关键词 固体物理;转角电子学;探究式学习;CASTEP;VESTA

DOI: 10.27024/j.wlygc.2025.12.04.01

FROM TWISTRONICS TO THE CLASSROOM: A CASE-BASED APPROACH TO EXPLORATORY SOLID-STATE PHYSICS TEACHING USING CASTEP/VESTA

HE Junrong XUE Li

(School of Electronic and Electrical Engineering, Hubei University of Science and Technology, Xianning, Hubei 437100)

Abstract To address the teaching challenges in solid-state physics, such as the abstraction of core concepts and the disconnect between theoretical instruction and frontier research, this paper presents an inquiry-based teaching case centered on the band-structure study of twisted bilayer MoS_2 . By introducing the frontier topic of twistrionics into the classroom, the case guides students through the complete research process, including moiré superlattice construction, structural optimization, and electron band-structure calculation and analysis. With the aid of the first-principles calculation software CASTEP and the crystal visualization software VESTA, students construct a 21.79° twisted bilayer MoS_2 model, optimize its atomic geometry, and analyze its electronic band structure. This research-driven and computationally empowered teaching model helps students understand key concepts such as crystal symmetry and band theory, while also improving their abilities in computational simulation, data analysis, and complex problem solving. By integrating knowledge instruction, ability development, and exposure to frontier research, this case provides a practical paradigm for reforming foundational science and engineering courses.

Key words solid-state physics; twistrionics; inquiry-based learning; CASTEP; VESTA

收稿日期: 2025-12-04; 修回日期: 2026-04-03; 出版日期: 2026-05-20

基金项目: 湖北科技学院教学研究项目(2024RZ006); 湖北省自然科学基金-咸宁联合资助项目(2025AFD397, 2025AFD409)。

通信作者: 薛丽, xueli0610@163.com。

引文格式: 何俊荣, 薛丽. 计算赋能, 探索前沿: 构建基于 CASTEP/VESTA 的固体物理探究式教学[J]. 物理与工程, 2026, 36(3): 166-170.

Cite this article: HE J R, XUE L. From twistrionics to the classroom: A case-based approach to exploratory solid-state physics teaching using CASTEP/VESTA[J]. Physics and Engineering, 2026, 36(3): 166-170. (in Chinese)

固体物理作为材料科学、凝聚态物理等专业的核心课程,其理论体系包含晶格结构、能带理论、电子输运等内容。然而,传统教学模式存在局限,晶体倒空间、布里渊区等概念抽象难懂,学生难以建立直观物理图像;教学多局限于近自由电子等简化模型,缺乏与真实材料体系及现代计算方法的联系;课程内容更新缓慢,与以“转角电子学”为代表的凝聚态物理前沿进展脱节,难以激发学生兴趣与创新思维。

近年来,“转角电子学”领域的进展为固体物理教学改革提供了新的契机。通过调控二维材料层间转角,可在原子尺度实现对材料电子结构和性质的调控。这一前沿课题融合了晶体对称性、能带工程、莫尔物理等固体物理的核心知识点,是连接基础理论、现代计算基础与学科前沿的理想桥梁^[1,2]。

二维过渡金属硫化物(TMDs)因其优异的物理化学性质,例如半金属磁性、量子自旋霍尔绝缘性、高载流子迁移率和开关电流比^[3-5],在超导、电子元器件、光电子等领域受到了广泛关注^[6-8]。自魔角石墨烯发现关联绝缘体和超导态^[9,10]以来,转角 TMDs 体系中也相继观测到莫特绝缘态、广义维格纳晶体等新奇物态^[11-13]。研究表明,其莫尔超晶格产生的周期势可导致能带折叠与平带形成,为研究强关联物理提供了可控的平台^[14,15]。理解并亲手构建这类复杂晶体结构,是探索其新奇物性的第一步,也成为深化固体物理教学的宝贵切入点。

基于此,本文以双层转角 MoS_2 为研究对象,利

用 CASTEP^[16] 和 VESTA^[17] 软件,旨在通过项目式学习达成三个目标。一是将分散的晶体学、能带理论等知识贯穿于一个研究项目中;二是训练学生运用现代科研工具(数据库、计算软件、可视化平台)解决复杂问题的实践能力;三是以前沿问题激发学习兴趣,培养学生的创新思维和科学洞察力。

1 CASTEP 和 VESTA 在双层 MoS_2 转角教学中的深度融合

1.1 双层 MoS_2 莫尔超晶格的构建:从抽象对称性到直观模型

学生对二维材料不同堆叠方式(如 AA、AB、转角堆叠)及其对称性差异普遍缺乏直观的空间理解。本文以双层 MoS_2 为例,利用 CASTEP 和 VESTA 软件将抽象概念转化为可视、可操作的原子模型。

首先从 Crystallography Open Database(COD)数据库中获取块体 MoS_2 的晶体结构文件(.cif 格式)。将其导入到 CASTEP 软件后,可显示其球棍模型如图 1(a)所示。其中深色(绿色)球代表 Mo 原子,浅色(黄色)球是 S 原子。由图可见,每个 Mo 原子周围配位六个 S 原子,晶胞内包含两层 MoS_2 单元。单层由 Mo 原子层夹在两层 S 原子层中构成。进而通过 CASTEP 中的“Cleave Surfaces”截取(001)晶面,可获得单层 MoS_2 结构,其俯视图如图 1(b)所示。该层中 S 原子和 Mo 原子共同构成蜂窝状晶格。为消除周期性边界条件下层间相互作用的影响,沿垂直方向添加厚度为 $15\text{\AA}$ 的真空层。

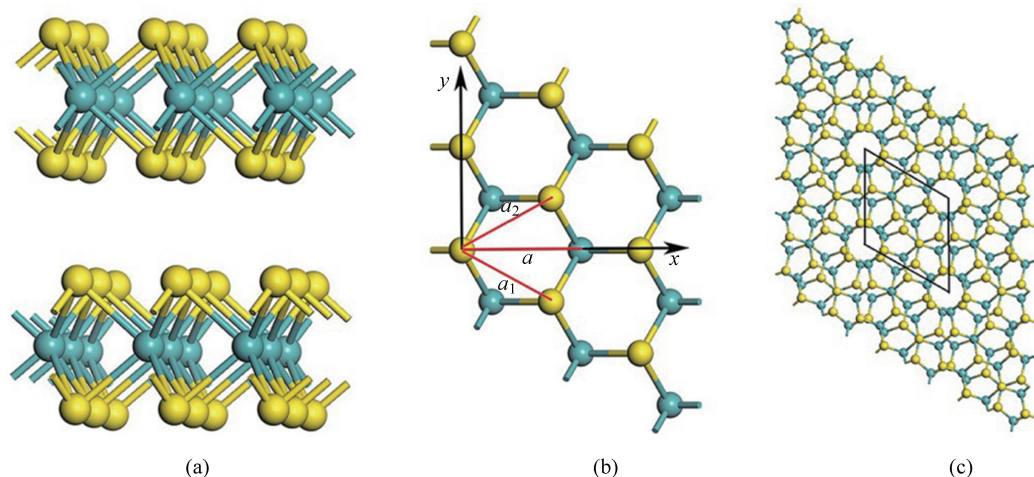


图 1 晶体的球棍模型

(a) 块体 MoS_2 的球棍模型; (b) 单层 MoS_2 的俯视图; (c) 转角为 21.79° 双层 MoS_2 的俯视图

单层 MoS_2 的原胞基矢如图 1(b) 中的 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$ 所示, 表述如下

$$\mathbf{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} - \frac{1}{2} \mathbf{j} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} + \frac{1}{2} \mathbf{j} \right) \quad (1)$$

$$\mathbf{b}_1 = b \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} - \frac{1}{2} \mathbf{j} \right), \quad \mathbf{b}_2 = b \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} + \frac{1}{2} \mathbf{j} \right) \quad (2)$$

其中, a 是晶格参数, $\mathbf{i}$ 和 $\mathbf{j}$ 是 x 和 y 轴上的单位矢量。两基矢夹角为 60° 。

为构造转角为 θ 的双层结构, 需为上下两层分别构建超胞, 其超胞基矢分别为 $\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_2 \end{pmatrix}$, 同时超胞基矢夹角仍为 60° 且两超胞基矢的模长相等 ($|\mathbf{A}_1| = |\mathbf{A}_2| = |\mathbf{B}_1| = |\mathbf{B}_2|$)。超胞基矢与原胞基矢满足的关系式可用转移矩阵表示

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & m \\ -m & n+m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n' & m' \\ -m' & m' + n' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中, m, n, m', n' 均为整数。 $P_1 = \begin{pmatrix} n & m \\ -m & n+m \end{pmatrix}$ 和 $P_2 = \begin{pmatrix} n' & m' \\ -m' & m' + n' \end{pmatrix}$ 分别对应第一层和第二层的转移矩阵。此时, 两层之间的转角满足

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{B}_1}{|\mathbf{A}_1| |\mathbf{B}_1|} \\ &= \frac{3(n+m)(n'+m') + (n-m)(n'-m')}{4\sqrt{n^2+mn+m^2}\sqrt{n'^2+m'n'+m'^2}} \end{aligned} \quad (5)$$

双层转角 MoS_2 中的原子数 $N = 6(n^2 + mn + m^2)$ 。

基于上述理论, 通过 Matlab 编程求解不同转角 θ 对应的转移矩阵 P_1 和 P_2 。表 1 中列出了部分转角下两层 MoS_2 对应的转移矩阵以及双层结构中的原子数 N 。从表 1 中可以发现对于任意转角 θ , 均存在一个互补转角 $(60^\circ - \theta)$, 且两者对应的超胞原子数相等。这是由于双层 MoS_2 具有六重旋转对称性。 θ 和 $(60^\circ - \theta)$ 在几何上是等价的, 只是旋转方向相反, 因此它们形成的莫尔超晶格具有相同的周期性, 即相同的超胞大小 $\sqrt{n^2 + mn + m^2} a$ (a 为单层的晶格常数)。另外, 当 $0 < \theta < 30^\circ$ 时, 随着转角 θ 减小, 超胞的原子数 N 不断增大。这是因为小角度下两层晶格几乎平行, 需要构造尺寸很大的超胞才能获得较高的原子位置重合度, 实现莫尔周期的描述; 反之, 较大转角时晶格失配更快, 仅需较小的超胞即可捕捉到其重复单元。这一关系直接影响了后续计算模拟的复杂度与资源需求。

在理论计算基础上, 我们进一步使用晶体结构可视化软件 VESTA 完成转角模型的构建。具体流程为: 将两个单层 MoS_2 的结构文件分别导入 VESTA, 通过在编辑窗口输入其对应的转移矩阵 P_1 或 P_2 , 对上下两层晶格分别进行旋转操作; 随后将两个经变换后的结构整合于同一体系中, 即得到目标转角下的双层 MoS_2 原子模型。图 1(c) 展示了转角 $\theta = 21.79^\circ$ 时构建的球棍模型, 可直观观察其堆垛形貌与莫尔周期图案, 图中黑色

表 1 不同转角下双层 MoS_2 对应的转移矩阵 (P_1 和 P_2) 以及总原子数 (N)

$\theta/^\circ$	P_1	P_2	N	$\theta/^\circ$	P_1	P_2	N
0	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	6	60	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	6
4.41	$\begin{pmatrix} 7 & 8 \\ -8 & 15 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 8 & 7 \\ -7 & 15 \end{pmatrix}$	1014	55.59	$\begin{pmatrix} 7 & 8 \\ -8 & 15 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -7 & 15 \\ -15 & 8 \end{pmatrix}$	1014
9.43	$\begin{pmatrix} 3 & 4 \\ -4 & 7 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 4 & 3 \\ -3 & 7 \end{pmatrix}$	222	50.57	$\begin{pmatrix} 3 & 4 \\ -4 & 7 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -3 & 7 \\ -7 & 4 \end{pmatrix}$	222
13.17	$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -3 & 5 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$	114	46.83	$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5 & -2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$	114
21.79	$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$	42	38.21	$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}$	42

菱形代表是 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 的超胞。鉴于计算资源与模型复杂度的平衡,本文选取 21.79° 转角体系作为研究对象,以探究其电子结构特性。

上述原子模型的建立,为学生们提供了双层转角 MoS_2 在实空间的直观几何图像。然而,材料的电学性质本质上是由其电子结构决定的。为建立“结构-性质”之间的定量关联,我们将已构建的原子模型导入CASTEP软件,基于密度泛函理论求解体系的能带结构。

1.2 双层转角 MoS_2 的能带结构

能带理论是固体物理学中十分重要的内容,对学生的知识结构要求很高。学生普遍反映理解困难。CASTEP是基于密度泛函理论,认为多电子体系(如包含数十个原子的双层转角 MoS_2)的基态性质(如能量、电子结构)仅由电子密度分布 $\rho(r)$ 决定,它将复杂的多电子相互作用问题转化为一个无相互作用电子体系在有效场中运动的问题。该势场($V_{\text{eff}}(r)$)包含了所有相互作用的贡献^[18]

$$V_{\text{eff}}(r) = V_{\text{ext}}(r) + V_H(r) + V_{\text{XC}}(r) \quad (6)$$

其中, $V_{\text{ext}}(r)$ 是原子核产生的外部势, $V_H(r)$ 是描述电子间的经典库伦排斥的哈特里势, $V_{\text{XC}}(r)$ 是包含所有量子力学效应的交换关联势。通过求解Kohn-Sham方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(r) \right] \varphi_i(r) = E_i \varphi_i(r) \quad (7)$$

直到电子密度、势场和总能量达到自洽。沿布里渊区的高对称路径求解本征值 $E_i(\mathbf{k})$,即得到能带结构。

首先对 21.79° 转角双层 MoS_2 的结构进行几何优化,并基于弛豫后的稳定构型计算其电子能带结构。计算所沿高对称路径($\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma$)如图2所示,所得能带图如图3所示。结果表明, 21.79° 转角双层 MoS_2 为间接带隙的半导体,其价带顶位于 Γ 点,而导带底位于 K 点,能隙值大小为 1.256eV 。该转角体系的实空间晶格常数变大($a = 8.4313 \text{ \AA}$),导致其倒易空间晶格常数 $b = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} = 0.8605 \text{ \AA}^{-1}$ 变小,布里渊区随之缩小。因此,原单层的大布里渊区会被折叠进超胞对应的小布里渊区中。由于层间耦合和折叠效应,价带顶的能带曲率较小,即能带较平,这表明载流子具有较大的

有效质量 $m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E(k)}{dk^2} \right)^{-1}$,会限制载流子迁移率。

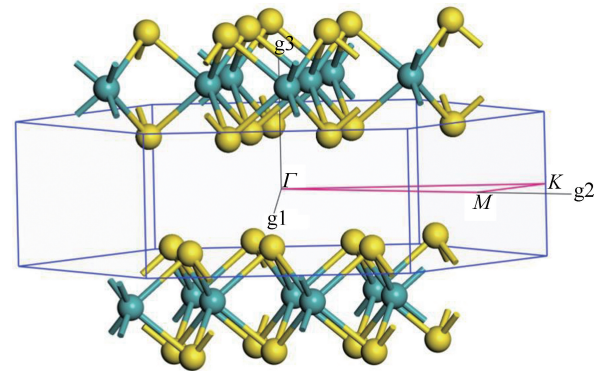


图2 布里渊区示意图

深色(蓝色)多边形为第一布里渊区边界,浅色(红色)折线代表能带计算所选取的高对称路径, g_1 、 g_2 与 g_3 为倒易空间基矢

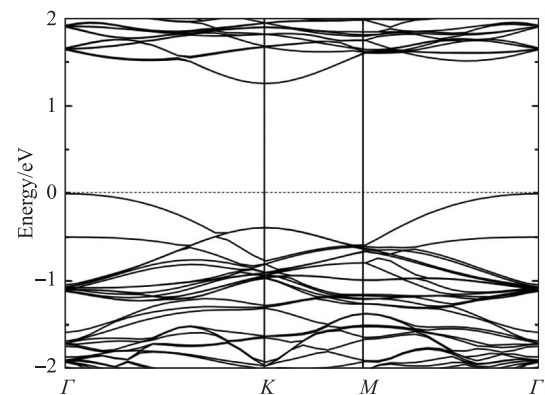


图3 21.79° 转角双层 MoS_2 的能带结构图

通过CASTEP软件的计算与可视化,抽象的能带理论以图形的方式直观呈现,有助于学生建立从原子结构到电子物性的完整认识框架,深化对“结构决定性质”的理解。

2 结论

本文设计了一个以“双层转角 MoS_2 能带结构研究”为核心的探究式教学案例,通过融合第一性原理计算软件CASTEP与晶体可视化软件VESTA,从结构搭建到能带结构分析、从软件操作到物理机理探究的完整流程,采取“科研驱动、计算赋能”的教学模式,引导学生在解决一个前沿问题的过程中,主动构建并深刻理解固体物理的核心知识体系。这种融合信息技术与科研实践的探究式教学,可以有效提升学生的科研思维与创

新能力。

参 考 文 献

- [1] 陈明星, 欧阳方平. 科研反哺教学的固体物理课程教学改革与实践[J]. 物理与工程, 2023, 33(3): 10-13, 20.
CHEN M X, OUYANG F P. Reform and exploration of integrating research into the teaching of solid state physics [J]. Physics and Engineering, 2023, 33(3): 10-13, 20. (in Chinese)
- [2] 陈明星. 双层转角石墨烯结构的构建方法浅析[J]. 大学物理, 2021, 40(8): 8-10.
CHEN M X. A brief analysis of the method for constructing the structures of twisted graphene bilayers [J]. College Physics, 2021, 40(8): 8-10. (in Chinese)
- [3] DING W J, LI X, ZHAO Z, et al. Half-metallic magnetism in 2D MX_2 ($\text{M} = \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}$, and Fe ; $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$, and Te) intercalated with 1D MX chains [J]. Journal of Applied Physics, 2023, 134: 184302.
- [4] TAO T, LIANG D, XIONG Y, et al. Quantum spin Hall states in MX_2 ($\text{M} = \text{Ru}, \text{Os}$; $\text{X} = \text{As}, \text{Sb}$) monolayers [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2025, 27: 156-163.
- [5] LI M Y, SHI Y, CHENG C C, et al. Epitaxial growth of a monolayer WSe_2 - MoS_2 lateral p-n junction with an atomically sharp interface [J]. Science, 2015, 349: 524.
- [6] TAKADA K, SAKURAI H, TAKAYAMA-MUROMACHI E, et al. Superconductivity in two-dimensional CoO_2 layers [J]. Nature, 2003, 422: 53.
- [7] WANG Y, CHHOWALLA M. Making clean electrical contacts on 2D transition metal dichalcogenides [J]. Nature Reviews Physics, 2022, 4: 101-112.
- [8] SHAHBAZI I, TAHIR M, LI L, et al. Advancements in 2D transition metal dichalcogenides (TMDs) inks for printed optoelectronics: A comprehensive review [J]. Materials Today, 2024, 77: 142-184.
- [9] CAO Y, FATEMI V, FANG S, et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices [J]. Nature, 2018, 556: 80.
- [10] CAO Y, FATEMI V, FANG S, et al. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices [J]. Nature, 2018, 556: 43.
- [11] WANG L, SHIH E M, GHIOTTO A, et al. Correlated electronic phases in twisted bilayer transition metal dichalcogenides [J]. Nature Materials, 2020, 19: 861.
- [12] TANG Y, LI L, LI T, et al. Simulation of Hubbard model physics in WSe_2/WS_2 moiré superlattices [J]. Nature, 2020, 579: 353.
- [13] REGAN E C, WANG D, JIN C, et al. Mott and generalized Wigner crystal states in WSe_2/WS_2 moiré superlattices [J]. Nature, 2020, 579: 359.
- [14] WU F, LOVORN T, TUTUC E, et al. Hubbard model physics in transition metal dichalcogenide moiré bands [J]. Physical Review Letters, 2018, 121: 26402.
- [15] RAMOS-ALONSO A, REMEZ B, BENNETT D, et al. Flat and tunable moiré phonons in twisted transition-metal dichalcogenides [J]. Physical Review Letters, 2025, 134: 026501.
- [16] SEGALL M D, LINDAN P J, PROBERT M A, et al. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(11): 2717.
- [17] MOMMA K, IZUMI F. VESTA: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis [J]. Journal of Applied Crystallography, 2008, 41: 653-658.
- [18] KOHN W, SHAM L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects [J]. Physical Review, 1965, 140 (4A): A1133.