

论文

超细钛金属线的电子性质

李爱玉¹; 文玉华¹; 朱梓忠^{1,2}; 杨勇²

- 1. 厦门大学物理系
- 2. 固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门 361005

摘要:

使用第一性原理方法计算研究了一系列无限长、超细的钛金属线的结合能和电子性质, 并得到了这些超细金属线的电导. 结果表明, 超细钛金属线单位原子的结合能比体材料的结合能低得多, 而且与金属线截面半径的倒数在所计算的纳米范围内成线性反比关系. 钛金属线的电子结构性质表现出渐进的尺寸演化和明显的结构关联, 当金属线直径大于1 nm时表现出类似体材料的电子结构, 这与Ti团簇的电子结构性质相似. 对电导的计算发现, 金属线的电导随着线尺寸的变粗而增大, 电导通道的数目由金属线的结构对称性和粗细所决定.

关键词: 钛超细金属线 电子结构 从头计算

Electronic Properties of Ultrathin Titanium-wires

LI Ai-Yu¹; WEN Yu-Hua¹; ZHU Zi-Zhong^{1,2*}; YANG Yong²

- 1. Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005, China
- 2. State Key Laboratory for Physical Chemistry of Solid Surfaces, Xiamen University, Xiamen 361005, China

Abstract:

We carried out first-principle electronic structures and energy calculations for a series of infinitely long, ultrathin titanium wires. The electric conductance of these wires was computed. The present results show that, for the nanoscale regime we studied, the cohesive energies per atom of the wires are much lower than that of Ti bulk, and are roughly linear with the reciprocal of the radius of the wires. The electronic structures of the ultrathin wires show strong correlations to the sizes and structures of the wires and start to show bulk behavior when the wires are around 1 nm in diameter, which are similar to the properties of Ti clusters. The electric conductance of the wire increased as the diameter of the wire increased, and the number of channels open for conduction is decided by the size and structural symmetry of the wire.

Keywords: Titanium ultrathin wire Electronic structure Ab initio calculation

收稿日期 2005-08-01 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 朱梓忠

作者简介:

参考文献:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(433KB)

[HTML全文](OKB)

参考文献[PDF]

参考文献

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 钛超细金属线

▶ 电子结构

▶ 从头计算

本文作者相关文章

▶ 李爱玉

▶ 文玉华

▶ 朱梓忠

▶ 杨勇

▶ 李爱玉

▶ 文玉华

▶ 朱梓忠

▶ 杨勇

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

本刊中的类似文章

1. 欧阳生德, 易院平, 耿华, 帅志刚 . 扩展苯基衍生物分子器件的电子输运的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 952-954
2. 陈保国 ; 张明瑜 ; 赵媛媛 ; 张坚 ; 孙家锺 . 4-二羟基硼苯丙氨酸(BPA)及其多羟基衍生物BPA(OH)_n (n=1,2,4)的电子结构的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1307-1310
3. 李会学, 萧泰 . 3-苯基-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑的电子结构和光谱性质的含时密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 747-750
4. 李思殿, 任光明, 苗常青, 李栋东 . 含有平面六配位碳的第二及第三过渡系金属夹心配合物密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 129-131
5. 潘清江, 周欣, 张红星, 付宏刚 . Au(I)电荷转移配合物光谱性质的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 330-333
6. 贾虎生, 王丽平, 韩培德, 刘旭光, 许并社 . 金属富勒烯Y@C₃₆结构和性能的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1958-1961
7. 严六明, 纪晓波, 朱素华, 陆文聪 . 分子结的非弹性隧道谱和电子-振动的耦合[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2381-2384
8. 矫玉秋, 潘清江, 张红星 . [Au(PH₃)]⁺修饰的芳香基炔基配合物发光机制的从头计算研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 159-164
9. 矫玉秋, 潘清江, 张红星 . [Au(PH₃)]⁺修饰下苯的激发态性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 389-395
10. 郝金库, 申勇立, 白冬花, 诸葛尚琦, 曹映玉, 杨恩翠 . 3,4',5-三甲氧基-1,2-二苯乙烯合成、晶体结构与量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 324-327
11. 甘利华, 舒春英, 王春儒. 富勒烯结构Si₆₀的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1106-1108
12. 王一, 王永, 韩克利. 非血红素配合物[FeIV(O)(TMC)(NCMe)]₂⁺与[FeIV(O)(TMCS)]⁺的几何结构、电子结构、成键性和反应活性比较[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2469-2473
13. 薛冰纯, 蔡文生, 邵学广. 有限长Y型碳纳米管结构和性质的第一性原理研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2407-2412
14. 彭谦, 牛英利, 帅志刚. 二苯多烯分子的光物理性质与共轭长度的关系[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2435-2439
15. 蒋洁, 孟素慈, 马晶. 二聚(2,5-噻吩乙烯撑)基态和激发态的电子结构: 桥基和芳环取代的影响[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 370-376

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-11-16	frsahfkjsdagjk	hsjkafh@sdk.com	ugg boots	Ugg Boots Sale Online Ugg Boots Discount Uggs Di Ugg Ugg Shoes S: Sale Cheap Ugg Cheap Uggs ugg