

纳米金线的生长螺旋、奇异结构和性质

Growth Sequence and Novel Properties of Gold Nanowires

项目批准号：29890210、10074024

南京大学 王宝林、殷霜叶、王广厚等

用分子动力学模拟, 加上遗传算法优化系统研究0.4-3.0nm的纳米金线的结构, 振动态和电子性质, 又用局域密度泛函理论和格林函数法研究其最佳组结构的电子结构和电导特性, 得到纳米金线一些重要的结构和性质:

- (1) 第一次获得纳米金线的生长螺旋, 随着尺寸(截面)由小到大, 其最佳结构由螺旋线形, 多壁圆柱形直至密堆的fcc结构;
- (2) 由非晶态向晶态(fcc-like)结构转变是从中心开始的, 当尺寸大于3.0nm时基本变成晶态结构;
- (3) 金纳米线的振动谱具有明显的尺寸相关性: 小尺寸时类似于分子振动谱, 大尺寸(3.0nm)时类似于固体;
- (4) 电子态密度(DOS)的带宽随着丝变粗而逐渐变窄, 在尺寸为3.0nm时类似于固态结构;
- (5) 电导特性不仅与尺寸有关而且与丝的结构有关. 这些奇异特性部分地为已有实验观察所证实, 而且为未来制备纳米量子器件提供十分有价值的信息。

● 主要研究成果

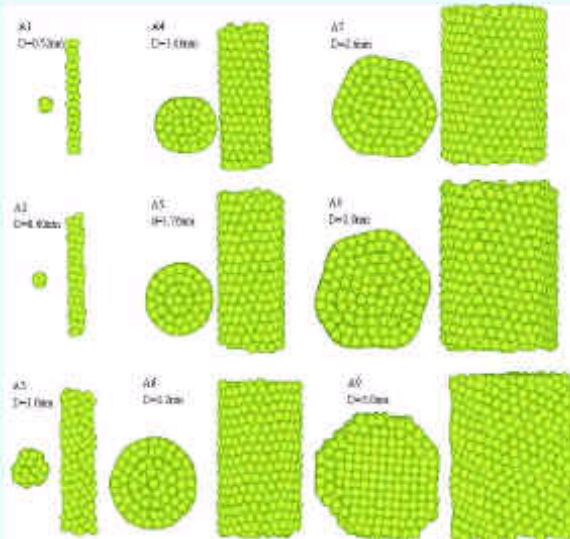


图1、纳米金线的生长螺旋

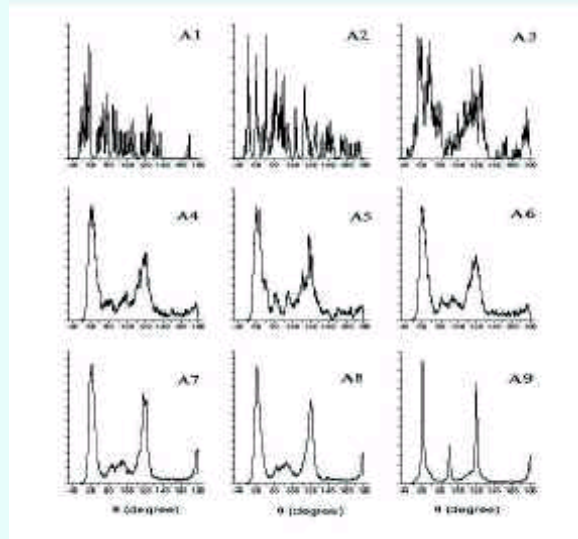


图2、纳米金线振动谱随尺寸的变化

● 代表性论文

1. B. L. Wang, S. Y. Ying, G. H. Wang, A. Buldum, J. J. Zhao. Novel Structures and Properties of Gold Nanowires, Phys. Rev. Lett., 86(10), 2046(2001)