

纳米功能材料的性能模拟

Simulations for the Properties of Nanostructured Functional Materials

项目批准号: 59871044

湘潭大学物理系 颜晓红*、杨奇斌、丁建文、唐翌、曹觉先、韦世豪

我们发展了一种新的电子晶体学方程，对理解波函数和晶体势间的相互作用有着奇特的优势，发展了新的重正化群方法、转移矩阵方法、微扰近似方法、密度泛函理论和 sp^3s^* 杂化理论等理论研究方法多角度研究了纳米结构及其材料的电子结构、电子输运等性能。

研究成果

☆ 纳米结构材料的电导特性

发展实空间重正化群和转移矩阵等理论研究方法，研究了纳米结构材料的粒度分布、界面结构、晶格畸变等因素对导电性能的影响，分析了 hopping 电导、弹道电导和扩散电导等不同的导电机制，预示了新现象。

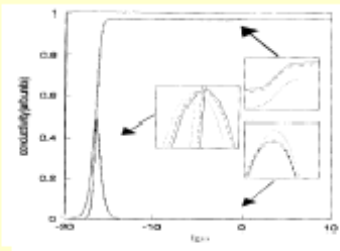


图1 纳米结构链hopping电导随粒度分布的变化 [J. Europhys. J. B 20(2001), in press]

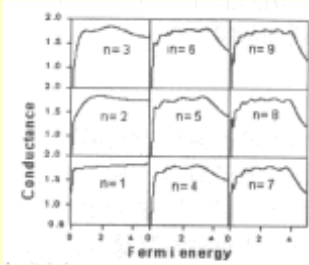


图2 电磁调制下纳米超晶格弹道电导的共振分裂效应 [Phys. Rev. B60 (1999),1515]

☆ 纳米结构的理论模型及其电子性质

首次发展了 sp^3s^* 杂化理论研究纳米碳管的能带结构，结果正确解释了相关实验现象，被 "J. Phys. C" 审稿人认为 "interesting, timely and sound"。发展密度泛函理论研究 Ti 金属纳米结构的电子结构及其稳定性，得到了新的结构幻数，澄清了一些实验事实 (JCP)。

Tube	Our Sp^3s^* TB Model		Energy gap (eV)	Sp^3 TB Model	LDA
	Bottom of the Conduction(eV)	Top of the Valance(eV)			
[6,0]	0.0558	-0.1133	0.1791	0.05	-0.33
[7,0]	0.4656	-0.5808	1.0463	1.04	0.09
[8,0]	0.5643	-0.5723	1.1366	1.19	0.62
[9,0]	0.0249	-0.0505	0.0754	0.07	0.17

表1 考虑 sp^3s^* 杂化纳米碳管的能带结构 [J. Phys: Conden. Matter (Letter to the Editor) 13, L271(2001)]

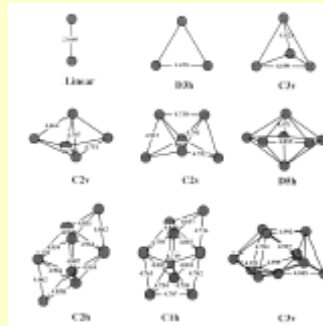


图3 考虑内壳层效应金属Ti团簇的稳定结构及电子结构 [J.Chem.Phys.113,11127(2000)]

☆ 涉及纳米尺度样品的电子晶体学

发展了一种新的电子动力学衍射方法，比 POA 等传统方法精度和分辨率高出一个数量级，被 "Ul trami croscopy" 杂志审稿人认为 "represent a significant advance in our understanding"。

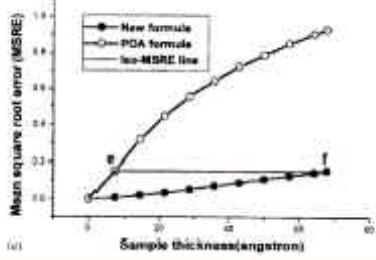


图4 新方法与其它方法计算结果的均方差随层厚的变化
[Ultramicroscopy 2084, 1-10, (2001)]

工程与材料科学部、国际合作局 主办
数理科学部、化学科学部 协办