

纳米金线的生长序列、奇特结构和性质*

王广厚 王保林

(南京大学固体微结构物理国家重点实验室 南京 210093)

摘要 文章扼要报道了用遗传算法和分子动力学以及密度泛函理论对纳米金线的结构和电子性质随直径变化进行系统研究的结果.发现对于较细的纳米金线,主要呈螺旋和多层壁的圆柱结构,而当纳米金线的直径大于 3nm 时,则呈 fcc 块体类结构,并且晶化过程是从轴心开始的.振动谱和电子性质也随纳米金线半径增大而由分子型向块体行为转变.

关键词 金纳米线,结构,性质

GROWTH SEQUENCE, NOVEL STRUCTURE AND PROPERTIES OF GOLD NANOWIRES

WANG Guang Hou WANG Bao Lin

(National Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

Abstract The novel structure and electronic properties of gold nanowires as a function of diameter are studied by means of molecular dynamics-based genetic algorithm simulation and local density function theory. Helical and multi-walled cylindrical structures are found for thin nanowires while for wires thicker than 3nm an fcc bulk-like structure appears from the axial core region. The transitions of vibrational and electronic properties are also found to change from molecule-like to bulk structure type as the thickness of the nanowires increases.

Key words gold nanowires, structure, properties

金属纳米线无论在低维物理的基础科学研究还是在未来纳米电子器件应用中都是非常重要的^[1,2].然而过去大多数研究集中在两端金属的点接触上^[3].最近,从实验上制备出直径为 0.6nm、长度为 6nm 的金纳米线,并观察到多层螺旋结构^[4].但这种纳米线的结构和性质尚待进一步研究.这里我们采用遗传算法和分子动力学以及密度泛函等理论方法,系统地研究了直径为 0.5—3.0nm 的金纳米线的结构序列、电子态密度和输运特性,不仅得到螺旋和多层壁圆柱等奇特结构,而且发现当直径大于 3nm 时具有类 fcc 的块体结构,由非晶向晶态转变是从轴心开始的,振动谱和电子性质也随纳米线半径增大由分子型向固态转变^[5].

图 1 给出部分金纳米线的结构.在直径较小(0.6nm)时,金线呈螺旋状结构,是由 3 到 4 股相同螺旋的原子链密堆地绕在一起的(图中 A1 和 A2).类似结构曾在 Pb 和 Al 纳米线中预言过^[6].当直径大于 0.6nm 时,纳米线的结构转为多层壁的圆柱状(A3—A6).这些多层壁结构是由几个密堆的弯曲面

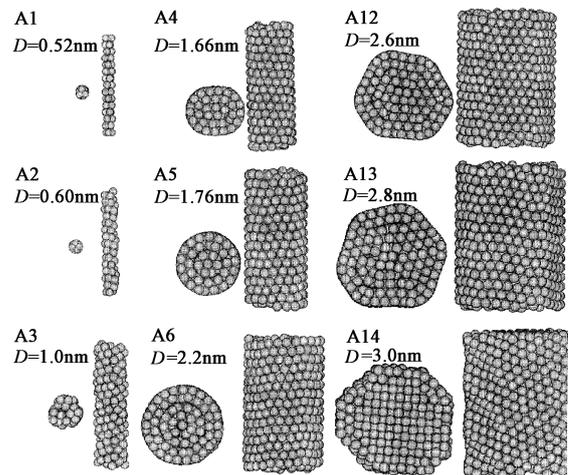


图 1 一些直径在 0.5—3.0nm 的纳米金线的结构

组成的,而曲面层可看成是由螺旋原子链绕丝轴组成的同轴管,称之为“曲表面外延”.我们所得到的这些

* 国家自然科学基金(批准号:29890210,10023001)资助项目
2001-04-02 收到初稿,2001-06-08 修回

多层壳结构与最近实验结果符合相当好^[4]. 模拟表明, $D = 1.0\text{nm}$ 时, 纳米丝为双层圆筒结构, $D =$

1.66nm 时的丝是三层圆柱状结构. 实验表明, $D = 0.6 - 1.0\text{nm}$ 的丝为双层结构, 而直径为 $1.1 - 1.3\text{nm}$

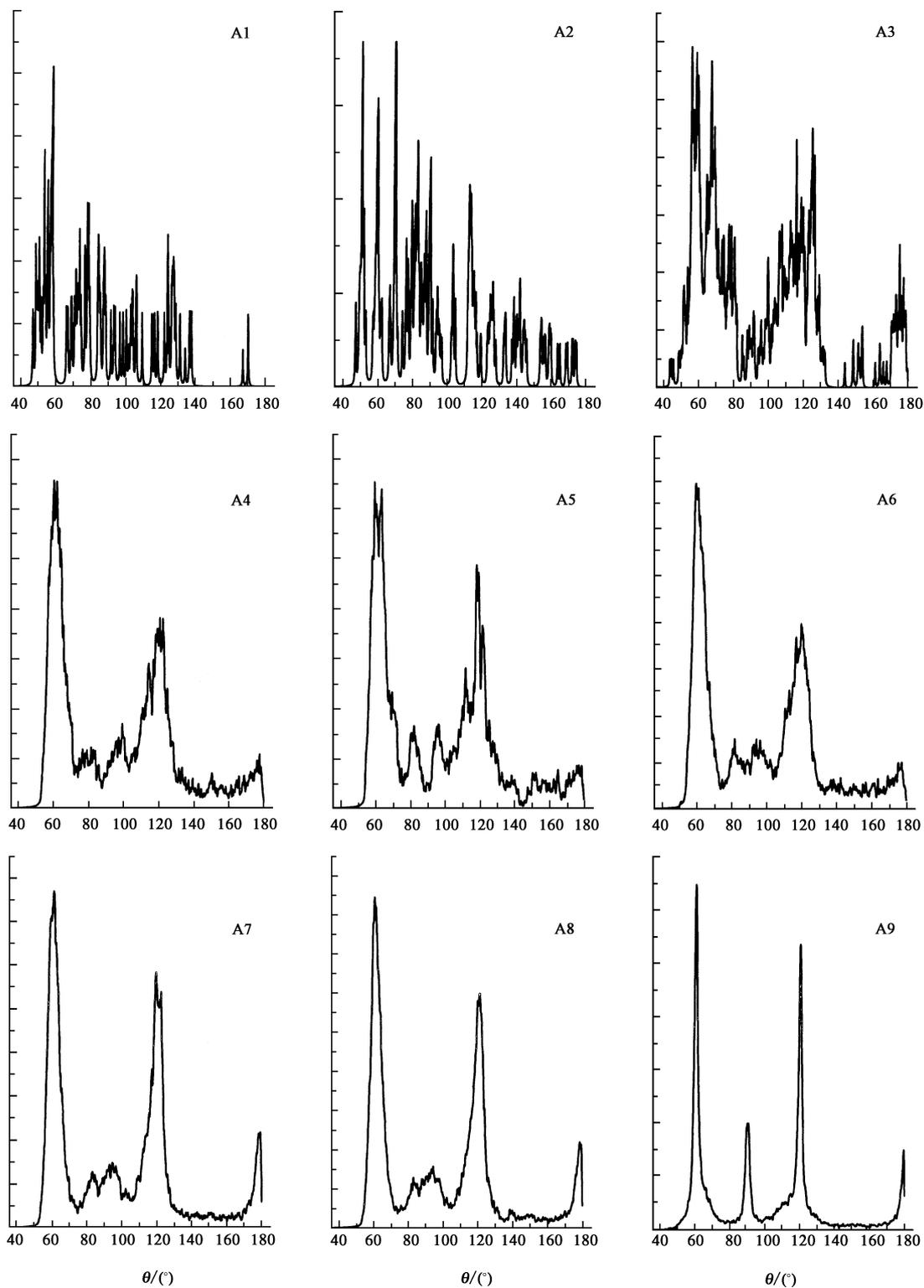


图2 图1所示各纳米金丝的角关联函数(ACF)
(A9的ACF类似于块体金)

的丝具有三层结构.当丝的直径进一步增大 ($>2.6\text{nm}$)时,发现晶体 fcc 结构开始在纳米丝中心部分出现(A7 和 A8).由图 1 的断面可以看出,在 A7 和 A8 金丝有一个晶态的芯,周围被四层原子壁围绕着,可以看成是一个很细的晶丝被重构的非晶表面层包裹着. A9 的纳米金丝内部基本上是晶态 fcc

结构,最外层呈非晶结构^[5].角关联函数(ACF)是结构中每一个原子周围最近邻原子间键合的角度关系.纳米金丝的结构特点也可以用角关联函数表征出来,如图 2 所示.对于那些很细的纳米丝,有很多尖峰,分布范围也宽,表明非晶结构不可能只有少数固定的键角.随着丝变粗,角关联函数谱逐渐变成只

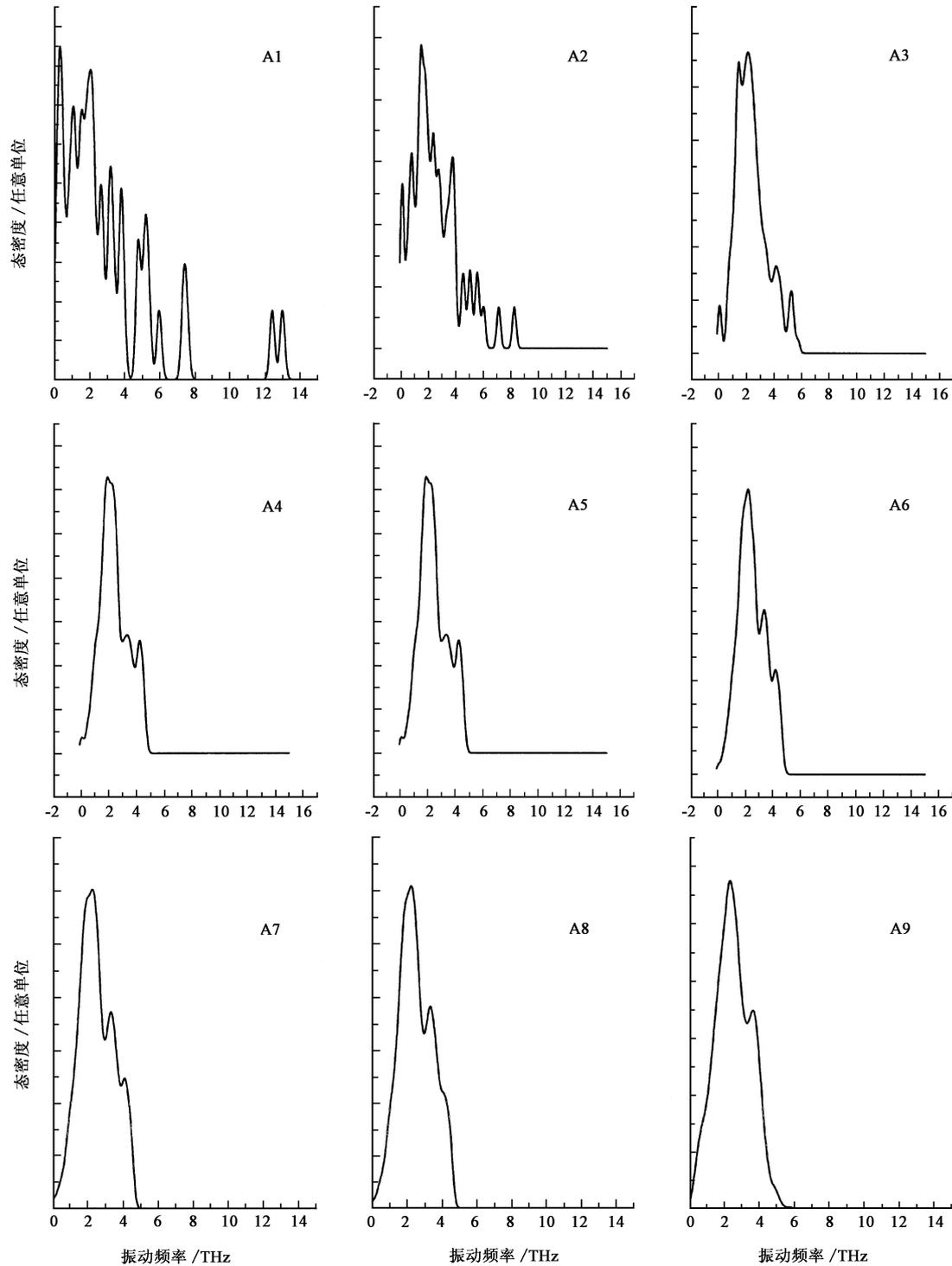


图 3 A1—A9 纳米金丝的振动谱

有 3 个主峰,位置分别在 60° , 90° 和 120° ,相当于块体 fcc 结构的键角.对于 A9 的纳米丝,这 3 个峰很尖.因此,直径大于 3.0nm 无端接的金纳米丝基本处于晶态.

图 3 示出纳米金丝 A1 至 A9 振动态密度的计算结果.纳米丝 A9 的振动谱的最大频率约为 4.9THz 以及两个位置分别在 2.3THz 和 3.7THz 的峰,类似于 fcc 块体金的振动谱^[7].在 A4 至 A8 丝谱中还可以看到 4.2THz 的峰.这个峰随着丝变粗而逐渐减弱,最后消失.它可能来源于曲面外延原子层间振动模式.最细的两根丝(A1 和 A2)由于没有空间对称性而出现许多分立的振动带.A1 的最大振动频率为 13.0THz, A2 是 8.5THz.这比多层壁结构和 fcc 结构的振动频率要高许多,而与单原子金链和双原子的振动频率相当^[8].

关于纳米金丝电子态密度随尺寸变化的特性在结构优化基础上进行局域密度泛函计算得到的.当丝很细时,态密度(DOS)与分子相似,有许多分立的

能级.A3 之后,这些峰彼此交叠,逐渐形成连续的带结构.A9 的 DOS 谱与块体金的带宽相同,并且谱形取块体 DOS 的平均值,但精细结构仍有不少差别.所以,直径大于 3.0nm 的纳米金丝的电子性质在全局上与块体相似,但并不完全相同.电子输运性质研究表明,纳米金丝电导随尺寸变粗而增大,且对称性较高的 A5 具有特别强的电导.显示纳米丝的电子输运性质不仅与尺寸有关,而且与几何结构有关.

参 考 文 献

- [1] Landman U *et al.* Science, 1990, 248 :454
- [2] Pascual J I *et al.* Science, 1995, 267 :1793
- [3] Nakamura A *et al.* Phys. Rev. Lett., 1999, 82 :1538
- [4] Kondo Y, Takayanagi K. Science, 2000, 289 :606
- [5] Wang B L, Ying S Y, Wang G H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2001, 86 : 2046
- [6] Gulseren O *et al.* Phys. Rev. Lett., 1998, 80 :3775
- [7] Lynn J W *et al.* Phys. Rev., 1973, B8 :3493
- [8] Sanchez Potal D *et al.* Phys. Rev. Lett., 1999, 83 :3884

• 书评和书讯 •

科学出版社物理类图书精品推荐

书 名	作(译)者	定价	出版日期	发行号
计算物理学(英文影印版)	K. H. Hoffman	49	2000 年 12 月	O- 1296
星系形成(英文影印版)	M. S. Longair	67	2000 年 12 月	O- 1297
高等原子分子物理学	徐克尊	25	2000 年 9 月	O- 1232
固体内耗理论基础 晶界弛豫与晶界结构	葛庭燧	45	2000 年 7 月	O- 1171
纳米材料与纳米结构	张立德	35	2001 年 3 月	O- 1236
微米/纳米尺度传热学	刘 静	23	2001 年 3 月	O- 1289
近场光学显微镜及其应用	张树霖	22	2000 年 11 月	O- 121
先进陶瓷物理与化学原理及技术	高瑞平	27	2001 年 2 月	O- 1205
陶瓷材料的分形研究	熊兆贵	18	2000 年 9 月	TQ- 0035
拉曼布里渊散射原理及应用	程兴煦	48	2001 年 3 月	O- 1301

即日起,欢迎各界人士邮购科学出版社各类图书.凡购书者免邮费,且可享受各种折扣优惠.请按以下方式联系我们:

电 话:(010)64011127,64002234 传 真:(010)64034622

电子邮件:directselling@sina.com

通讯地址:北京东黄城根北街 16 号,科学出版社,邮政编码:100717

联 系 人:卢秀明

同时欢迎访问科学出版社网址: <http://www.sciencep.com.cn>