第一图书网, tushu007.com

<<纳米结构与性能的理论计算与模拟>>

图书基本信息

书名：<<纳米结构与性能的理论计算与模拟>>

13位ISBN编号：9787030358530

10位ISBN编号：7030358538

出版时间：2013-1

出版时间：科学出版社

作者：帅志刚,夏钶等

页数：596

字数：750000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：http://www.tushu007.com

内容概要

《纳米结构与性能的理论计算与模拟》纳米科学与技术的核心在于受限尺度所带来光、电、磁、力学、生物等新效应，体现在电子在纳米尺度上的电荷与自旋的量子输运、光子纳米介质中的散射折射或透射、受限在纳米尺度的流体的新结构与输运等方面。
纳米体系覆盖金属、半导体和绝缘体，从无机到有机，包括团簇、低维碳材料（零维的富勒烯、一维的纳米管、二维的石墨烯等）、量子点与量子线，以及自组装结构，还包括在纳米尺度上控制性能的光电、磁电、热电等体相材料。
本书从基本原理到理论计算模拟，对以上内容作了较系统的阐述。

作者简介

帅志刚 1983年毕业于中山大学物理系，1989年获复旦大学理论物理专业博士学位，之后在比利时蒙斯大学从事研究工作。
2002年，获中国科学院“百人计划”支持，任中国科学院化学研究所研究员。
长期从事有机/高分子和碳基材料的光电功能理论研究，包括有机发光过程、电荷传输机理、光伏转换效率和电子关联与激发态电子结构等理论。
共发表论文260余篇，英文专著1部。
2004年获国家杰出青年科学基金资助，并获“百人计划”结题优秀成绩。
2008年至今为清华大学化学系“长江学者”特聘教授。
2006年入选“新世纪百千万人才工程”国家级人选，2008年当选为国际量子分子科学院院士，2009年当选为英国皇家化学会会士，2011年当选为欧洲人文与自然科学院(Academia Europaea)外籍院士，2012年获中国化学会-阿克苏诺贝尔化学奖。
社会兼职包括：中国化学会常务理事、副秘书长；《化学学报》副主编，Theor. Chem. Acc.、Nanoscale、《中国科学：化学》、《物理化学学报》等期刊编委；北京大学、南京大学等校兼职教授。

书籍目录

《纳米科学与技术》丛书序
第1章　量子输运
1．1引言
1．2电子输运理论方法简介
1．2．1 Boltzmann方程
1．2．2线性响应
1．2．3散射(Landauer—B／ittiker)公式
1．2．4非平衡态格林函数公式
1．2．5含时电子输运
1．3界面电阻
1．3．1金属的界面电阻
1．3．2 A1／A9界面各向异性的成因
1．3．3 A1／A9的界面无序散射
1．3．4 A1／A9界面的结构弛豫及其对输运的影响
1．3．5其他晶格匹配的界面
1．3．6晶格不匹配的界面
1．4非局域自旋阀中的自旋输运
1．4．1磁电电路理论
1．4．2非局域自旋阀输运的理论模型
1．4．3非局域角度磁电阻和自旋转矩
1．5铁磁／超导界面
1．5．1 Andreev电导的散射公式表示
1．5．2铁磁超导界面的BTK理论与自旋翻转效应
1．5．3 Andreev电导谱计算实例
1．6隧道结
1．6．1 Fe／vac／Fe的输运
1．6．2 Fe／M90／Fe的输运与自旋转矩效应
1．7总结
参考文献
第2章　半导体自组织量子点的微观赝势理论
第3章　纳米光子学常用的数值计算方法
第4章　基于石墨烯纳米带的电子器件设计
第5章　纳米尺度受限水的流动特性及浸润特性
第6章　多铁性纳米结构磁电效应的计算模拟与器件设计
第7章　基于理论计算的能带调控及热电材料设计
第8章　原子团簇的理论模拟
第9章　金属表面分子自组装的理论研究
参考文献

章节摘录

1.1 引言　　在1921年Stern-Gerlach的实验[1]之后不久，Kronig、Uhlenbeck和Goudsmit[2]就从理论上（1925年）提出：电子除了具有电荷、质量之外，还有一个内禀性质——自旋。
自旋是量子力学中的一个内禀角动量，并且直接和磁矩相联系。
在Fe/Cr和Co/Cu多层膜中层间交换耦合振荡[3]和Fe/Cr多层膜中的巨磁阻（GMR）效应[4，5]被发现之前，电子学仅仅在各向异性磁电阻的研究中考虑了电子自旋。
操纵电子自旋这个自由度及其所携带的信息对传统电子学提出了新的、激动人心的挑战。
发现GMR效应之后，磁电子学[6，7]这个新学科就诞生了，并极快地成长起来，渗透到很多不同的研究领域中。
磁电子学把源于载流子自旋和材料磁性之间相互作用的自旋相关效应与传统的微电子学相结合，为人们提供了一个发展下一代电子器件的机遇。
　　GMR是在铁磁金属（FM）和非磁金属（NM）相间排列构成的磁性多层膜结构FM/NM/FM中观测到的一种量子力学效应，是指系统的总的电阻随两相邻磁性层的磁矩间的夹角变化而变化的效应。
　　传导电流的电子实际上由两类组成，根据电子自旋在一个给定量子化轴的投影为+./2还是../2，可以把电子分成两个磁自旋态：自旋向上和自旋向下态。
非磁金属的特征是两种自旋态的电子具有相同的数目。
而铁磁金属则是费米能（EF）上的自旋向上和自旋向下电子的态数存在不平衡。
这类材料中两种自旋的动力学和输运行为是不同的。
　　材料中磁矩的方向由外加磁场操纵。
当铁磁层间的磁矩平行排列时，载流子的散射较小，系统具有较小电阻。
当磁矩反平行排列时，载流子的散射较大，系统具有较大电阻。
图1.1描绘了这种散射机制。
每个磁性层的作用就相当于一个自旋选择阀。
磁化方向决定了通过它的电子是自旋向上还是自旋向下的。
这种散射在平行排列时导致低电阻而反平行排列时导致高电阻，可以用双通道模型来解释，如图1.1所示。
以上讨论的模型中没有考虑自旋翻转，自旋向上和自旋向下的电子在两个分离的自旋通道中独立传播。
实际上，自旋－轨道耦合和磁振子散射都可能造成自旋翻转。
　　另一个有趣的现象是隧道磁电阻（TMR）效应，有时也称为隧道结磁电阻（JMR）。
与GMR类似，磁性隧道结（MTJ）是在两个铁磁电极之间放入一个很　　图1.1 电子在FM/NM/FM多层膜中的散射示意图。
（a）磁矩平行排列时，只有一个自旋方向的电子受到较强散射；（b）反平行排列时，两个自旋方向的电子在磁性层中都遇到较强散射。
双通道模型表明磁矩平行时（c）的电阻值低而磁矩反平行时（d）的电阻值高　　薄的绝缘层（通常约为1nm）从而形成FM/I/FM结构。
在MTJ结构中，自旋极化的电子从一边的铁磁电极通过薄绝缘势垒隧穿到另一个铁磁电极中。
众所周知，隧道效应是一个用来描述电子的量子力学本质的教科书例子。
TMR效应最先由Julliere[8]在Fe/Ge氧化物/Co隧道结的开创性工作中提出。
Moodera等[9]发现室温下CoFe/AlOx/Co隧道结有较大TMR比率，这引起了人们的广泛兴趣并大大加速了该研究领域中对自旋相关输运的研究。
最近，Parkin等[10]和Yuasa等[11]在Fe/MgO/Fe（001）结构中测量到的TMR值超过了1100%。
通常，FM/I/FM隧道结中的FM是3d过渡铁磁金属Fe、Co、Ni及它们的合金。
　　由于GMR和TMR效应在磁电子学器件，如传感器、硬盘磁头和磁性随机动态存储器（MRAMs）的应用有着极大的潜力，因而受到广泛关注。
如果不用电荷，而用载流子自旋或磁性存储数据，就可能做成不易挥发的MRAMs。

这意味着其静态功耗为零。
而我们知道，静态功耗在总功耗中的比例是随着电子原件的尺度减小而急剧增加的。
这种存储器由二维MTJ或GMR元的阵列构成，其中每个单元代表1bit。
读取操作通过测量电阻来进行，写操作则通过邻近导线的电流脉冲诱导出磁场来实现。
GMR和MTJ元的电阻大小决定了其不同的用途，通常前者（具有较低的电阻）适合应用于硬盘，而后者（具有极高的电阻）适合应用于存储器件。
　　从电子学的观点看来，实现基于半导体的自旋电子学（spintronics）的关键在于向半导体中注入（高）自旋极化的电流[12]。
一个自旋电子学器件包括：一端的铁　　第1章 量子输运　　磁注入器，一个半导体输运介质（既可以是常规也可以是磁性半导体），以及另一端的自旋探测器。
这导致电导依赖于两个接触磁化的相对取向[13]。
其操作原理如下：自旋极化的电子由磁性源（注入器）注入，在它们到达磁性漏极（探测器）被收集前由加在半导体输运介质上的门电压来操纵和控制。
把铁磁体和半导体结合起来，使系统中的自旋相关输运产生了很多新的可能，同时还要求铁磁注入器和探测器是具有高自旋极化的材料，并且能和半导体输运介质相容。
这个领域的综述见文献[14]。
　　在早先提到的自旋相关输运效应的范畴（GMR、TMR、交换耦合振荡以及半导体中自旋的注入和探测[15]）内，典型的磁电子学结构为铁磁金属（如Fe、Co、Ni及它们的合金）和非磁金属（Al、Cr、Cu、Au等）薄膜，绝缘体（如MgO）以及半导体（如GaAs）混合组成的异质结构。
磁电子学的基础研究很快地转移到更小的结构和新颖的材料上。
随着器件尺寸的减小，界面散射开始支配电流的输运[16，17]，因此如何可靠地描述界面上电子的透射和反射就成为一个重要的基本问题。
量子力学的计算表明界面散射的效果是非常显著的，并且常常决定器件的性质。
很明显，仔细考虑电子在磁性界面上的透射和反射，系统地研究由真实材料构成的磁性界面以及材料不均匀化对自旋相关输运的影响[18]，对于理解交换耦合振荡、巨磁阻、隧穿磁电阻、自旋转矩、自旋泵、自旋注入等物理现象有着重要的作用。
利用真实材料的电子结构信息来进行电子输运计算，可以让我们更深入地了解这些材料中的自旋相关输运特性，在理论上澄清实验观测结果和指导实验设计。
　　1.2 电子输运理论方法简介　　本节我们简单介绍一些常用的研究电子输运的理论方法，以帮助读者对电子输运理论有一个较为全面的了解。
相关理论的更详细描述可以在本书的参考文献中找到[19，20]。
　　1.2.1 Boltzmann方程　　很多教科书都对半经典的Boltzmann输运理论作过介绍，它不仅在处理块体材料输运问题时有用，在处理小尺寸体系的尺寸效应方面同样有效。
Boltzmann输运理论虽然是半经典理论，但也包含了许多量子力学的信息。
如果在量子力学框架下计算出碰撞项，那么单点上的多重散射问题就能够被严格处理。
当缺陷的浓度很低时，不同杂质之间的相干散射较弱，可以被忽略，Boltzmann输运理论是严格的。
　　……

编辑推荐

帅志刚、夏钶等编写的这本《纳米结构与性能的理论计算与模拟》是纳米科学与技术系列丛书之一。全书共分9章，内容包括：量子输运，半导体自组织量子点的微观赝势理论，纳米光子学常用的数值计算方法，基于石墨烯纳米带的电子器件设计，纳米尺度受限水的流动特性及浸润特性，多铁性纳米结构磁电效应的计算模拟与器件设计，基于理论计算的能带调控及热电材料设计，原子团簇的理论模拟，金属表面分子自组装的理论研究。

本书适合广大纳米科技工作者阅读参考，同时也适合广大实验工作者参考。

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:http://www.tushu007.com