

第三届生物物理研究会论文集

轴向拉伸对Ni纳米线结构和稳定性的影响

滕玉永, 曾祥华#, 张海燕

(扬州大学物理科学与技术学院, 江苏 扬州 225002)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

采用推广模拟退火算法和Sutton-Chen势, 选取fcc[111]结构的Ni纳米线为初始构型, 研究了轴向拉伸对Ni纳米线的结构和稳定性的影响。研究表明: 拉伸程度的大小对Ni纳米线的结构和稳定性有很大的影响; 随着拉伸强度的变化, 纳米线结构分别为fcc[111]结构、(6, 0)型管+中心柱状结构(又为螺旋结构)、(6, 3)型管+中心柱状结构、fcc[110]结构、过渡结构(为规则结构)和缺陷结构; 从结合能分布来看, 结合能先减小, 再增大, 结合能最小时对应最稳定结构(6, 0)型管+中心柱状结构(又为螺旋结构)。

Atomic structures and stabilities of Ni nanowires are studied by using the generalized simulated annealing method with Sutton-Chen potential. The initial structure is face centered cubic [111] structure. The result shows that the length of the supercell strongly affects the structures and stabilities of Ni nanowires. fcc [111] structure, (6, 0), (6, 3) nanowires, fcc[110], transition structure and defect structure are found for different wire lengths. And from the analyses of the binding energy, it is found that (6, 0) nanowires (helical structure) is the most stable form.

关键词 [Ni纳米线](#) [推广模拟退火算法](#) [Sutton-Chen势](#)

分类号

DOI:

通讯作者:
曾祥华 xhzeng@yzu.edu.cn
作者个人主页:

滕玉永; 曾祥华#; 张海燕

扩展功能	
本文信息	
▶	Supporting info
▶	PDF(1370KB)
▶	[HTML全文](0KB)
▶	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
相关信息	
▶	本刊中包含“Ni纳米线”的相关文章
▶	本文作者相关文章
·	滕玉永
·	曾祥华
·	张海燕