

接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响

张华; 陈小华; 张振华; 邱明

(长沙理工大学物理与电子科学系, 长沙 410076; 湖南大学材料科学与工程学院, 长沙 410082; 复旦大学物理系, 上海 200433)

摘要:

基于局域密度泛函理论, 采用第一原理方法, 建立了(5, 5)型和(8, 0)型有限长碳纳米管的原子模型, 并在两个端口接枝1~8个羟基官能团, 先用DMol3中BLYP方法对其结构进行优化, 再利用CASTEP软件计算其电子分布和态密度的变化, 从而讨论羟基官能团对碳纳米管电子结构和电子输运特性的影响. 计算表明, 接枝羟基的碳纳米管的电子结构明显改变, 费米能级上的电子态密度下降, 最高占据轨道上电子的非定域程度减弱, 致使电子输运性能呈下降趋势.

关键词: 碳纳米管 密度泛函理论 电子结构 态密度 羟基官能团

收稿日期 2006-01-11 修回日期 2006-04-17 网络版发布日期 2006-09-04

通讯作者: 张振华 Email: cscuzzh@163.com

本刊中的类似文章

1. 褚道葆; 尹晓娟; 冯德香; 林华水; 田昭武. 乙醇在Pt/nanoTiO₂-CNT复合催化剂上的电催化氧化[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1238-1242
2. 窦文龄; 辛霞; 徐桂英. 两亲分子对碳纳米管的分散稳定作用[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 382-388
3. 周振华; 武小满; 王毅; 林国栋; 张鸿斌. 氢气在碳纳米管基材料上的吸附-脱附特性[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 692-698
4. 周龙梅; 刘宏英; 李凤生. Y₂O₃ 纳米粒子/碳纳米管复合体的制备及其催化高氯酸铵热分解[J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 627-630
5. 易双萍; 张海燕; 裴磊; 胡寿乐; 曾国勋; 陈进. 氮气热处理对CNTs-LaNi₅电极电化学性能的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 436-440
6. 张宇; 吴汜昕; 张鸿斌; 林国栋; 袁友珠; 蔡启瑞. 碳纳米管负载铈催化剂上丙烯氢甲酰化[J]. 物理化学学报, 1997, 13(12): 1057-1060
7. 南小林; 张锦; 刘忠范; 施祖进; 顾镇南. 单壁碳纳米管在金表面的图形化组装[J]. 物理化学学报, 2001, 17(05): 393-396
8. 褚道葆; 张莉艳; 张金花; 张秀梅; 尹晓娟. NanoTiO₂-CNT复合膜电极在DMF溶液中对糠醛的异相电催化还原[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 373-377
9. 吕建中; 朱雷; 宋捷; 李郁芬; 黄丰; 黄荣彬; 郑兰荪. 碳纳米管激光等离子体的质谱研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(01): 9-11
10. 边成香; 徐学诚; 余维; 陈奕卫; 成荣明; 石岩; 李相美; 晋圣松. 磺化聚苯乙烯/多壁碳纳米管复合材料导电机理研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1185-1190
11. 江奇; 卢晓英; 赵勇; 朱晓彤; 蔡玉冬; 钱兰. 活化条件对活性炭纳米管比表面积的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 43-47
12. 陈灿辉; 李红; 朱伟; 张全新. 二茂铁及其与DNA复合物的电化学行为[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1067-1072
13. 陈煜; 唐亚文; 孔令涌; 刘长鹏; 邢巍; 陆天虹. 碳纳米管表面修饰程度对碳纳米管载Pt电催化性能的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 119-123
14. 徐斌; 吴锋; 陈人杰; 陈实; 王国庆. 碳纳米管在室温熔盐中的电容特性[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1164-1168
15. 周晓龙; 柴扬; 李萍剑; 潘光虎; 孙晖; 申自勇; 张琦锋; 吴锦雷. 多壁碳纳米管的掺氮改性及场效应管特性研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1127-1131
16. 李娟; 方征平; 王建国; 顾媛娟; 佟立芳; 刘芙. 碳纳米管在接枝二元胺过程中微结构的变化[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1244-1248
17. 李志; 巩前明; 梁吉; 黄启忠; 黄伯云. 新型ACNT/C纳米复合材料氧化性能的初步研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 316-321
18. 张增富; 罗国华; 范壮军; 项荣; 周丽; 魏飞. 不同结构碳纳米管的电磁波吸收性能研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 296-300
19. 黄祥平; 吕海峰; 黄新堂. 聚乙烯醇用于碳纳米管的开口及修饰研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(10): 1242-1244

扩展功能

本文信息

PDF(1185KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 碳纳米管

▶ 密度泛函理论

▶ 电子结构

▶ 态密度

▶ 羟基官能团

本文作者相关文章

▶ 张华

▶ 陈小华

▶ 张振华

▶ 邱明

20. 李玉平;曹宏斌;张懿.血红蛋白在碳纳米管修饰碳糊电极上的直接电化学行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 187-181
21. 朱海滨;李振华;刘子阳;王凤飞;王新庆;王淼.利用无水乙醇分解制备碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2004,20(02): 191-193
22. 牛佳莉;邹红玲;张锦;刘忠范.单壁碳纳米管氧化过程的银纳米粒子跟踪[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 1-4
23. 王海芳;邓小勇;王竞;高兴发;邢更妹;施祖进;顾镇南;刘元方;赵宇亮.XPS研究单壁碳纳米管(SWNTs)上碳与碘形成的共价键[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 673-675
24. 江奇;卢晓英;赵勇;于作龙.碳纳米管微结构的改变对其容量性能的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 546-549
25. 张琦锋;于洁;宋教花;张耿民;张兆祥;薛增泉;吴锦雷.碳纳米管阵列的气相沉积制备及场发射特性[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 409-413
26. 李欢军;官轮辉;施祖进;顾镇南.豆荚型纳米材料C₆₀@SWNTs的制备和表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 373-376
27. 韦进全;江斌;李延辉;吴德海.碳化硼纳米线的制备和结构[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 256-259
28. 陈代武;谢青季;蒋雪琴;姚守拙.榭皮素与酪蛋白和牛血清白蛋白的相互作用及共存碳纳米管的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 379-387
29. 陈雨婷;张海燕;张国庆;陈易明;朱清峰.储氢合金电极中添加碳纳米管对SC型高功率电池性能的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 527-532
30. 曹灵超;刘云圻;王钰;魏大程;付磊;胡平安;张洪亮;黄丽平;于贵.湿法纯化碳纳米管阵列及其对碳纳米管阵列形貌的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 951-954
31. 李世鸿;张永平;李丽英.铬酸及硝酸混合液处理以增强碳纳米管场发射[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1411-1416
32. 张旭志;焦奎.单壁碳纳米管和室温离子液体胶修饰电极[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1439-1444
33. 马若彪;付延鲍;马晓华.二氧化锡填充多壁碳纳米管材料的制备及电化学性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 441-445
34. 王晓峰;王大志;梁吉.载氧化钨碳纳米管超级电容器电极[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 509-513
35. 王进;陈鸿博;云虹;林敬东;易军;张鸿斌;廖代伟.合成甲醇的催化剂Rh-ZnO/MWNTs的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 65-69
36. 刘霁欣;谢有畅.W-Fe-MgO催化分解CH₄制备单壁碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 1093-1096
37. 朱素冰;孙思修;周薇薇;许军舰;李彦.以吡啶为原料制备氮掺杂碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1320-1323
38. 王晓峰;王大志;梁吉.超细氢氧化亚镍的溶胶凝胶法制备及其准电容特性[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 117-122
39. 王育煌;张强;刘朝阳;黄荣彬;郑兰荪.脉冲激光溅射下固液界面生长的碳纳米管及其机理初探[J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 905-909
40. 曹优明;王志永;施祖进;顾镇南.Pd/SWNTs负载型催化剂的制备及其催化性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 825-828
41. 吴彬;白录;巩前明;梁吉.非离子表面活性剂对多壁碳纳米管在乙醇中高浓度分散的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1065-1069
42. 朱玉振;王胜;魏贤龙;丁力;张志勇;梁学磊;陈清;彭练矛.多壁碳纳米管互连的单壁碳纳米管晶体管的频率特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2122-2127
43. 陈西良;马明旺;杨小敏;杨康;吉特;吴胜伟;朱智勇.MWNTs/HDPE复合体系在太赫兹波段的光电性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1969-1974
44. 张维;崔晓莉;江志裕.复合方式对MWCNTs/TiO₂纳米复合薄膜光电化学性能的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1975-1980
45. 傅坚亮;张兴旺;雷乐成.Fe修饰多壁碳纳米管电极高效产H₂O₂[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1157-1162
46. 陈昕;张漪丽;苏育华;孟文华;谢青季;姚守拙.镀金和碳纳米管修饰金电极上吸附态葡萄糖氧化酶比活性的EQCM研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1201-1206
47. 叶超;巩前明;卢方平;梁吉.中分子毒素在碳纳米管上的吸附[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1321-1324
48. 邱汉迅;王志永;施祖进;顾镇南;邱介山.二茂铁填充的双壁碳纳米管的合成与红外光谱表征[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1451-1453
49. 李国华;田伟;汤俊艳;马淳安.WC/CNT纳米复合材料制备及其对甲醇氧化的电催化性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1370-1374
50. 吴玉程;刘晓璐;叶敏;解挺;黄新民.碳纳米管负载纳米TiO₂复合材料的制备及其性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 97-102
51. 许兴中;杨建锋;李小年;严新焕.激光溅射法制备Pt/CNTs催化剂用于邻氯硝基苯的液相加氢反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 121-126
52. 支少锋;张振华;邱明;彭景翠.单壁碳纳米管的电子速度及有效质量[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 275-280
53. 袁剑辉;程玉民.接枝羧基对单壁碳纳米管弹性性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 889-894
54. 郑海涛;李永亮;梁剑莹;沈培康.甲醇在Pd基电催化剂上的氧化[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 993-996

55. 王锐;徐化明;李聘;梁吉.定位生长法制备AFM单壁碳纳米管针尖[J].物理化学学报,2007,23(04):565-568
56. 钟起玲;张兵;丁月敏;饶贵仕;王国富;蒋玉雄;任斌;田中群.微波法在碳纳米管上负载铂纳米粒子[J].物理化学学报,2007,23(03):429-432
57. 邹红玲;杨延莲;武斌;卿泉;李清文;张锦;刘忠范.CVD法制备单壁碳纳米管的纯化与表征[J].物理化学学报,2002,18(05):409-413
58. 梁逵;陈艾;冯哲圣;叶芝祥.碳纳米管电极超大容量离子电容器交流阻抗特性 [J].物理化学学报,2002,18(04):381-384
59. 魏忠;陈言;刘忠范.单壁碳纳米管的CVD合成及管径分布 [J].物理化学学报,2001,17(08):718-722
60. 魏忠;陈言;刘忠范.单壁碳纳米管短管的制备 [J].物理化学学报,2001,17(08):687-691
61. 李秀兰;刘惟敏;薛增泉;李建昌;侯士敏;张灶利;彭练矛;施祖进;顾镇南.碳纳米管向金刚石纳米晶粒的转变[J].物理化学学报,2000,16(09):772-775
62. 刘赛锦;申自勇;侯士敏;顾镇南;薛增泉.用原子力显微镜操纵碳纳米管的研究[J].物理化学学报,2003,19(03):233-236
63. 朴铃钰;李永丹.气凝胶催化剂上甲烷裂解制备的碳纳米管结构特征[J].物理化学学报,2003,19(04):347-351
64. 王垚;王昊;魏飞;金涌.破碎-絮凝法分离细长碳纳米管与碳纤维[J].物理化学学报,2003,19(04):376-379
65. 郑青榕;顾安忠;林文胜;李明;鲁雪生.氢在多壁碳纳米管上吸附行为研究[J].物理化学学报,2003,19(02):139-143
66. 邓梅根;张治安;胡永达;汪斌华;杨邦朝.活化和表面改性对碳纳米管超级电容器性能的影响[J].物理化学学报,2004,20(04):432-435
67. 李瑞芳;尚贞锋;许秀芳;王贵昌.扶手椅型单壁碳纳米管生长机理的理论研究[J].物理化学学报,2006,22(11):1388-1392
68. 裘凯栋;黎维彬.水溶液中六价铬在碳纳米管上的吸附[J].物理化学学报,2006,22(12):1542-1546
69. 吕亚芬;印亚静;吴萍;蔡称心.肌红蛋白在碳纳米管修饰电极上的直接电化学和电催化性能[J].物理化学学报,2007,23(01):5-11
70. 杨闵昊;梁涛;彭宇才;陈清.碳纳米管/ZnO纳米复合体的制备和表征[J].物理化学学报,2007,23(02):145-151
71. 卢月美, 巩前明, 梁吉.碳纳米管/活性炭复合微球的制备及其对 VB_{12} 的吸附应用[J].物理化学学报, 0,(): 0-0