

<<分子纳电子器件学科导论>>

图书基本信息

书名：<<分子纳电子器件学科导论>>

13位ISBN编号：9787030245120

10位ISBN编号：7030245121

出版时间：2009-5

出版时间：科学出版社

作者：韩汝珊

页数：261

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>

## &lt;&lt;分子纳电子器件学科导论&gt;&gt;

## 前言

自从2000年美国时任总统克林顿宣布启动“国家纳米技术行动计划”(National Nanotechnology Initiative, NNI)以来,纳米科技研究已成为全球的热点,引领众多科学研究领域的发展。经过八九年的风风雨雨,各国政府更加清楚地认识到发展纳米技术的重要性和紧迫性;也进一步明确了发展纳米技术的路线图和近期的主要研究内容。

但是,从长远来看,物质在纳米尺度下表现出的奇异现象和规律,对现有的相关理论和框架提出的挑战性问题,尚不能得到圆满的答案。

人们已经可以按照事先的设计来操纵、控制和排列原子、分子,形成尺寸在1~100nm的“结构单元”

。这些“结构单元”的尺寸正好处于以原子、分子为代表的微观世界和以大块材料为代表的宏观世界之间的未知地带,使人们对物质世界的认识进入到崭新的阶段,需要建立新的理论体系。

纳米器件研究是纳米技术中具有战略意义的前瞻性研究领域,它的研究成果将对“后芯片(Beyond-CMOS)时代”的技术产生重要的影响。

在世界各国的政府研究计划中,无一例外地都将纳米器件的研究列为最重要的研究方向之一;中国也是如此。

实际上,在纳米器件的研究中,一方面是通过“自上而下”(top-down)的手段,不断地逐步使芯片或其他器件小型化,在十多年后最终达到技术或物理的极限;另一方面则是依靠“自下而上”

(bottom-up)的技术或分子纳米技术,即一个一个地或以组合方式任意操纵原子、分子,创造出在自然界中并不存在的纳米尺度的物质或纳米结构,并以此作为纳电子器件的基础。

分子或分子的积聚体(aggrega-tor)是理想的纳米结构之一,因此分子器件也成为人们关注的热点,并成为一个相对独立的分支领域。

分子和纳电子器件是以量子效应为基础的、人工的、独特的结构,它所涵盖的科学内容、技术挑战及潜在的应用前景,使之成为一个带动学科发展、交叉融合的新的生长点,从化学家和电子学家开始,波及若干相关科学和技术学科的许多领域。

应该指出的是,目前分子和纳电子器件的理论基础以及应用基础研究在世界各国风起云涌,实验的技术路线层出不穷,结果也不尽相同,理论解释更是呈现了百家争鸣的局面。

这使得从事这一领域工作的科学家不得不面对浩瀚的、往往是互不相洽的文献;而青年人更会感到无从入门。

## <<分子纳电子器件学科导论>>

### 内容概要

《分子纳电子器件学科导论》首先介绍了分子纳电子器件的研究现状，几个有代表性的分子器件实验，全原子水平的第一性原理——密度泛函-非平衡格林函数的理论框架以及对代表性分子器件重要的定性计算结果；论述了这是一个跨学科的科学课题。然后，从理论和实验等方面，指出进一步的研究方向。

《分子纳电子器件学科导论》适合分子纳米器件相关专业的研究生和教师以及研究人员使用和参考。

## <<分子纳电子器件学科导论>>

### 作者简介

韩汝珊，教授，博士生导师。  
1959年毕业于北京大学物理系。  
现为中国高等科学技术中心顾问委员会（CCAST）委员，北京大学科学与工程计算中心学术委员会委员，纳米器件物理与化学教育部重点实验室第一届学术委员会委员。  
长期从事电子结构理论，高温超导理论，纳器件物理等方面的物理研究。  
因参加高温超导研究，曾获1989年国家教委科技进步奖一等奖和北京大学特等奖；因参加C60研究，曾获1994年国家教委科技进步奖二等奖。  
因编著《高温超导物理》，获北京市教学成果奖一等奖（2000）、国家级教学成果奖二等奖（2001）

## &lt;&lt;分子纳电子器件学科导论&gt;&gt;

## 书籍目录

《纳米科学技术大系》序序前言第一部分 研究现状简介第一章 引言参考文献第二章 制备方法和几个代表性的实验2.1 制备方法2.2 分子结的性质参考文献第三章 分子纳器件运输的定性概念3.1 介观物理中的一些概念3.2 纳分子器件中的基本要素3.3 小结：纳层次问题参考文献第四章 第一性原理理论框架：非平衡格林函数结合密度泛函理论4.1 第一性原理理论框架简介4.2 分子器件理论研究结果4.3 结果是定性的原因4.4 在现有的NEGF+DFT框架下可拓展的工作参考文献第五章 密度泛函理论5.1 范弗莱克灾变5.2 H-K定理、K-S方程及LDA的巨大成功5.3 超出常规量子化学5.4 关于LDA与GGA5.5 精确Kohn-Sham势(Exx)5.6 Koopmans定理和扩展的Koopmans定理(EKT)5.7 寻求极好的泛函5.8 另一条发展战略-混合(杂化)方法5.9 激发态与TDDFT5.10 流密度泛函及任意变量密度泛函5.11 激发态个别激发轨道准确计算的条件5.12 氢键及范德瓦尔斯作用研究进展参考文献第六章 小结参考文献第二部分 分子纳器件研究进展与面临的挑战及进一步的研究建议第一章 引言第二章 分子纳器件包含强关联部分2.1 强关联的概念2.2 分子纳器件中包含的强关联2.3 小分子在金属表面的吸附问题2.4 Newns对强关联的分析及引入Anderson模型的必要性2.5 表面吸附的计算研究2.6 强关联与局域态2.7 模型研究必须引入纳器件研究参考文献第三章 分子纳器件运输是个多尺度问题3.1 多尺度概念3.2 纳器件中的多尺度参考文献第四章 分子纳器件是个限制性新体系4.1 最小碳纳米管CNT之争4.2 CNT中形成c纳米链——涉及限制体系的性质4.3 量子热力学参考文献第五章 分子纳器件课题举例5.1 DNA的电学性质5.2 关联无序及Carpena的工作简介5.3 生命科学相关的分子纳器件论题5.4 信息团簇的综合解读5.5 流密度泛函与流体力学的结合5.6 开体系的非整电子数的激发态研究参考文献第六章 相关新进展6.1 石墨烯中的无质量狄拉克费米子6.2 超绝缘体6.3 忆阻——新的电子学元件参考文献第七章 小结参考文献附录化学名词与缩略语(英汉对照)索引彩色插图

## <<分子纳电子器件学科导论>>

### 章节摘录

第一部分 研究现状简介 第一章 引言 在本书第一部分中将重点介绍分子纳器件电输运行为研究已取得的有代表性的重要进展。

并指出在已有理论框架下,可进一步开展的工作及应注意的问题。

关于拓宽视角,进一步建立分子纳器件学科的研究新电路,放到本书第二部分中介绍。

2006年初,美国基础研究科学家得到了一份贵重的新年礼物——根据《科学》(Science)杂志在线新闻报道,在美国总统布什计划于2月7日递交国会的2007年度预算方案中,能源部的科学研究预算增加5.04亿美元,增幅为14%,达到41亿美元;国家科学基金委员会的预算增加4.35亿美元,增幅7.8%,达到60.2亿美元。

远远大于同期联邦研究和发展总预算(达1370亿美元)的增幅(不足2%)。

正如总统科学顾问Jack Marburger所言,预算方案的中心是强调物质科学中基础研究的重要性,通过创造新技术来提升美国的竞争力。

要加强的领域包括纳米技术、网络和信息技术、材料科学、工程学,以及化学、物理学和数学的部分领域。

纳米技术放在首位不是偶然的。

早在克林顿任总统时期,美国即以国家科学基金委员会、国防部、能源部、航空航天局、商务部、卫生研究所为中心进行纳米技术研发,2000财政年度投入2.7亿美元,2001财政年度投入4.97亿美元,作为“国家最优先考虑的战略”。

由于这个战略,世界对纳米技术领域的兴趣随之提高:竞争异常激烈。

在美国总统科学顾问的报告中关于纳米技术强调的是分子纳米技术,即一个一个地或以组合方式任意操纵原子、分子,创造出从结构上说在自然界中并不存在的物质和现象,并确立新电子元件的基础。

纳米技术就是发现量子效应的人工的、独特的结构技术。

纳米技术将有可能引起计算机革命、光学革命和生物工程革命。

美国的国家纳米技术战略涵盖众多领域,原因正在于此。

## <<分子纳电子器件学科导论>>

### 编辑推荐

《分子纳电子器件学科导论》的内容分为两大部分：一是通过对简单分子纳器件的实验和理论探索，介绍器件制作、表征、计算模拟等的进展；二是介绍当前研究情况和对发展动态的评估，对进一步研究所涉及的重要课题以及相关建议。  
这是一本适用于纳米器件相关专业的研究生、教师和研究人员的的重要参考书。

<<分子纳电子器件学科导论>>

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>