

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

CdX和ZnX(X=Te; Se; S)团簇的理论研究

徐淑宏, 王春雷, 崔一平

东南大学电子科学与工程学院先进光子学中心, 南京 210096

摘要:

研究了一系列的六边形和四面体CdX和ZnX(X=Te; Se; S)团簇及其性质. 研究表明, CdTe, CdSe, CdS和ZnTe, ZnSe, ZnS的频率, HOMO-LUMO能隙, 偶极矩和拉曼光谱等性质均呈规律性变化. 计算吸收光谱按CdTe, CdSe, CdS和ZnTe, ZnSe, ZnS顺序蓝移. 最后, WBI计算表明Te和Cd, Zn原子间存在更强的作用力.

关键词: 拉曼光谱; 吸收光谱; 团簇

Theoretical Investigation of CdX and ZnX(X=Te, Se, S)

XU Shu-Hong, WANG Chun-Lei, CUI Yi-Ping*

Advanced Photonics Center, School of Electronic Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China

Abstract:

Zinc blende and wurtzite structures CdX, ZnX(with X=Te; Se and S) clusters are investigated in this paper. The analyzed results show that the lowest vibrational frequencies, HOMO-LUMO gaps, dipole moment and Raman spectra present regular changes. The calculated absorption peaks shift to blue in order of CdTe, CdSe, CdS in CdX structures and ZnTe, ZnSe, ZnS in ZnX clusters. Finally, WBI values prove that Cd and Zn atoms have stronger interaction with Te atom than with Se and S atoms.

Keywords: Raman spectrum; Absorbed spectrum; Cluster

收稿日期 2009-07-28 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 60877024)资助.

通讯作者: 崔一平, 男, 博士, 教授, 主要从事信息光电子及全光通信器件与技术等方面研究. E-mail: cyp@seu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

- [1]Zhang H., Zhou Z., Yang B., et al.. J. Phys. Chem. B[J], 2003, 107: 8—13
- [2]Wang C., Zhang H., Xu S., et al.. J. Phys. Chem. C[J], 2009, 113: 827—833
- [3]Baumle M., Stamou D., Segura J. M., et al.. Langmuir[J], 2004, 20: 3828—3831
- [4]Peng Z. A., Peng X. G.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2001, 123: 183—184
- [5]Murray C. B., Norris D. J., Bawendi M. G.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1993, 115: 8706—8715
- [6]Rakhshani A. E.. Semicond. Sci. Technol.[J], 2004, 19: 543—547
- [7]Cozzoli P. D., Manna L., Curri M. L., et al.. Chem. Mater.[J], 2005, 17: 1296—1306
- [8]Kim D. J., Koo K. K.. Cryst. Growth. Des.[J], 2009, 9: 1153—1157
- [9]Huang Y. Z., Chen L., Wu L. M.. Inorg. Chem.[J], 2008, 47: 10723—10728
- [10]Wang C., Zhang H., Zhang J., et al.. J. Phys. Chem. C[J], 2008, 112: 6330—6336
- [11]Wang C., Zhang H., Zhang J., et al.. J. Phys. Chem. C[J], 2007, 111: 2465—2469
- [12]Shavel A., Gaponik N., Eychmuller A.. J. Phys. Chem. B[J], 2004, 108: 5905—5908
- [13]Zhang Y., Gan C., Muhammad J., et al.. J. Phys. Chem. B[J], 2008, 112: 20200—20205
- [14]Rakovich Y. P., Gerlach M., Donegan J. F., et al.. Phys. E[J], 2005, 26: 28—32

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(221KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

拉曼光谱; 吸收光谱; 团簇

本文作者相关文章

PubMed

- [15]Vinogradov V. S., Karczewski G., Kucherenko I. V., et al.. Phys. Solid State[J], 2008, 50: 159—167
[16]Dzhagan V. M., Valakh M. Y., Raevskaya A. E., et al.. Nanotechnology[J], 2008, 19: 305707
[17]Bhattacharya S. K., Kshirsagar A.. Phys. Rev.[J], 2007, 75: 035402
[18]Matxain J. M., Irigoras A., Fowler J. E., et al.. Phys. Rev. A[J], 2001, 64: 013201
[19]Bhattacharya S. K., Kshirsagar A.. Eur. Phys. J. D[J], 2008, 48: 355—364
[20]Gomez J. A., Guenzburger D., Ellis D. E., et al.. Phys. Rev.[J], 2003, 67: 115340

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 4095

Copyright 2008 by 高等学校化学学报