

SiN 分子外电场情况下的发光特性*

徐国亮 谢会香[†] 袁伟 张现周 刘玉芳

(河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡 453007)

(2011年4月14日收到; 2011年5月6日收到修改稿)

为全面分析外电场对分子发光特性的影响, 本文采用密度泛函 B3P86 方法 6-31g(d) 基组, 对 SiN 分子进行了基态结构的优化, 进而使用含时密度泛函方法 (time dependent density functional theory, TDDFT), 计算了不同方向及大小的外电场情况下 SiN 分子的吸收谱、激发能、振子强度、跃迁偶极矩. 通过比较发现外电场对该分子的激发能、吸收谱、跃迁振子强度及跃迁偶极矩影响都比较明显, 说明了电场对 SiN 分子的激发特性影响比较复杂, 特别是在加场前后分子均有在可见光区波段的吸收谱, 这对研究分子的发光很有意义. 同时对该分子所发可见光谱的产生机理进行了分析, 并与已有实验结果进行比较.

关键词: SiN, 外电场, 激发特性

PACS: 31.15.-p, 31.15.ag, 31.50.Df

1 引言

含有硅和氮元素的小分子构成的材料具有良好的绝缘性、致密性和稳定性, 并且价格比较便宜, 因此其作为钝化膜、绝缘层、扩散掩膜等, 在集成电路技术中得到广泛的应用, 因而对含有氮和硅元素材料的研究一直很受重视^[1,2], 特别是它们在电致和光致条件下发出可见光而一直备受青睐^[3,4]. 外场作用下电子可以由基态跃迁至多种高能级的激发态, 从而可能使分子的特性发生极大地改变. 而分子的发光是由其内部电子在不同激发态及激发态与基态之间跃迁产生的, 因而激发态在研究材料发光方面起着非常重要的作用. 目前, 分子在外场作用下的特性研究也已成为许多领域重要的基础性工作, 具有一定的理论指导意义和实用价值^[5-7].

SiN 作为含有硅和氮的化合物中最小的分子单元, 是研究整个硅氮化合物家族很好的切入点, 而且分子是构成材料的基本单元, 材料的性质与其构成分子的特性也必然密切相关, 所以对其进行研究必定可以对研究其所构成材料的性质起到一定的指导作用. 并且它又是最早观察到的主要星际物质之一, 因此对它发光特性的研究对天体物理的探究也起着非常重要的作用. 自 SiN 分子光谱首

次得到测量以来, 对于 SiN 的分子的研究, 无论在实验上还是理论上都已有不少成果. 其基态及部分激发态的分子常量早已经得到确定^[8]; 而对其激发态的研究也已见著不少, 如 Bredohl 等人^[9] 在实验上测得 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$, $K^2\Sigma^+ - A^2\Pi_i$, $D^2\Pi_i - A^2\Pi_i$, $L^2\Pi_i - A^2\Pi_i$ 五个激发态到第一激发态及第二激发态到基态考虑转动及振动扰动的跃迁光谱; Foster, Cai, Yamada 等人^[10-16] 对 SiN ($A^2\Pi_i - X^2\Sigma^+$), ($B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$) 跃迁的发射光谱也已作过详细的试验及理论研究; 但是关于 SiN 分子在外电场作用下的分子激发特性的研究还未曾见报道. 因此, 本文采用密度泛函 B3P86 方法 6-31g(d) 基组, 对其在有无外电场作用下的分子结构进行了优化. 继而使用含时密度泛函方法 TD-B3P86/6-31g(d) 研究了分子的前 7 个激发态的激发能、吸收谱、振子强度、跃迁偶极矩等激发特性与外电场的关系.

2 计算原理

外电场作用下分子体系哈密顿量 H 为

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

其中, H_0 为无外场时的哈密顿量, H_{int} 为场与分子体系的相互作用哈密顿量. 在偶极近似下, 分子体

* 河南省高校青年骨干教师资助计划 (批准号: 2009GGJS-044), 河南省教育厅自然科学研究计划 (批准号: 2010A140008) 和河南师范大学国家级科研项目培育基金 (批准号: 2010PL02) 资助的课题.

[†] E-mail: huixiang0414@126.com

系与外电场强度 F 的相互作用能为

$$H_{\text{int}} = -\mu \cdot F, \quad (2)$$

F 代表辐射电场, μ 为分子电偶极矩矢量. 振子强度 f 可表示为

$$g_l f_{lu} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} s = 3.03966 \times 10^{-6} \sigma s, \quad (3)$$

且

$$g_l A_{lu} = \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{m c} g_l f_{lu} = 0.667486 \sigma^2 g_l f_{lu}, \quad (4)$$

式中线强 S , 原子单位 ($e^2 a_0^2$),

$$S = |\langle aA || er || a'A' \rangle|^2. \quad (5)$$

根据电子跃迁定则具有相同自旋多重度的状态才可以发生跃迁, 所以文章中仅考虑相同自旋多重度下的电子跃迁.

3 计算结果与分析

3.1 无外场作用时 SiN 分子的激发特性

本文采用密度泛函 B3P86 方法 6-31g(d) 基组对 SiN 基态分子构型的优化, 结果如图 1 所示, 并在此基础上使用 TD-B3P86 方法计算了无外电场情况下分子前 7 个激发态的激发能 E 、波长 λ 、跃迁偶极矩 μ 、和振子强度 f , 计算结果如表 1 所示.

由计算得到, 第 1、第 2 激发态, 第 4 和第 5 激发态为能量简并状态, 基态到第 1、第 2 激发态有跃迁发生, 吸收能量是 0.2680 eV, 波长是 4626.7 nm, 而实验上也观察到波长为 5 μm 的发射波^[13]; 第三激发态相对于基态的能量是 3.1106 eV, 这与实验数值 3.091 eV^[17] 符合很好, 而且所吸收的光子

波长为 398 nm 在可见光范围内, 对研究材料的发光性质起到重要的作用, 同时在实验上也观测到了 $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ 跃迁所发射的波长在 390—430 nm^[15] 的光子; 基态到第 6 激发态也有跃迁发生, 吸收波长为 321.28 nm 能量为 3.8591 eV 的光子, 而基态到第 4、第 5 及第 7 激发态没有跃迁发生.

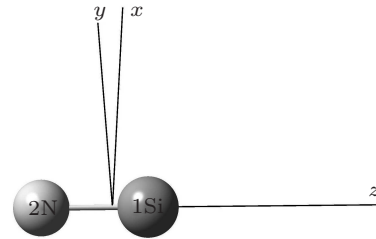


图 1 SiN 分子基态结构

本文所得到的 321 nm 的吸收谱与实验中氮化硅光致发光的激发谱 350 nm^[18] 符合很好, 电子吸收这一能量的光子, 跃迁至状态为 $^2\Sigma^+$ 的第 6 激发态, 通过内部能量转化有可能又从第 6 激发态跃迁至第 1 激发态从而发射能量为 3.59 eV, 波长为 345 nm 的光子; 而电子也有可能吸收 3.1106 eV 的能量的光子跃迁至第 3 激发态, 通过内部能量传递后跃迁至第 1 激发态, 进而再跃迁至基态. 而且 $\Sigma^+ \times \Pi = \Pi$, $\Pi \times \Sigma^+ = \Pi$, 自旋 $\Delta S = 0$, 所以从跃迁定则上来讲对于 $C_{\infty v}$ 群的分子, 电子由 Σ^+ 状态到 Π 状态及 Π 状态到 Σ 状态的跃迁也是允许的. 这时发射出能量为 2.84 eV, 波长为 436 nm 的光子, 这与实验观察到的能量为的 2.8 eV 的发光峰一致^[18], 具有这一波长的光子在可见光波段在难得的蓝光范围内.

表 1 SiN 分子由基态到前 7 个激发态的激发能 E 、波长 λ 、振子强度 f 、跃迁偶极矩 μ

	第 1 激发态	第 2 激发态	第 3 激发态	第 4 激发态	第 5 激发态	第 6 激发态	第 7 激发态
S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
E/eV	0.2680	0.2680	3.1106	3.7252	3.7252	3.8591	4.4555
λ/nm	4626.7	4626.7	398.59	332.82	332.82	321.28	278.27
f	0.0012	0.0012	0.0082	0.0000	0.0000	0.0281	0.0000
μ	0.4354	0.4354	0.3280	0.0000	0.0000	0.5449	0.0000

3.2 外电场作用下 SiN 分子的激发特性

为能够很好的研究外电场对 SiN 分子光学性质的影响, 本文从不同方向上对分子加外电场, 考虑分子的共振吸收及分子的对称性, 电场分别加到分子轴线 z 方向上强度为 0.018 a.u., 0.024 a.u., 0.030 a.u., 0.036 a.u., 0.042 a.u., 0.048 a.u. 和 y 方向

上强度为 0.018 a.u., 0.024 a.u., 0.030 a.u., 0.036 a.u., 0.042 a.u., 0.048 a.u.. 用 B3P86/6-31g(d) 先优化出不同外场条件下 SiN 分子的基态稳定结构, 然后使用 TD-B3P86 方法计算出不同外电场条件下电子从基态到前 7 个激发态的激发能 E 、波长 λ 、跃迁偶极矩 μ 、及振子强度 f . 计算结果分别如表 2、表 3 所示.

表 2 加 z 方向电场后 SiN 分子的前 7 个激发态激发波长 λ 、振子强度 f 、跃迁偶极矩 μ

$F/a.u.$		第 1 激发态	第 2 激发态	第 3 激发态	第 4 激发态	第 5 激发态	第 6 激发态	第 7 激发态
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.018	λ/nm	5326.4	5326.4	406.54	338.77	338.77	320.14	282.36
	f	0.0012	0.0012	0.0073	0.0000	0.0000	0.0279	0.000
	μ	0.4533	0.4533	0.3126	0.0000	0.0000	0.5424	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.024	λ/nm	5713.8	5713.8	409.64	341.05	341.05	319.68	283.93
	f	0.0011	0.0011	0.0070	0.0000	0.0000	0.0278	0.0000
	μ	0.4618	0.4618	0.3076	0.0000	0.0000	0.5408	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.030	λ/nm	6154.1	6154.1	413.02	343.52	343.52	319.17	285.62
	f	0.0011	0.0011	0.0067	0.0000	0.0000	0.0276	0.0000
	μ	0.4727	0.4727	0.3028	0.0000	0.0000	0.5389	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.036	λ/nm	6726.3	6726.3	416.70	346.20	346.20	318.60	287.45
	f	0.0011	0.0011	0.0065	0.0000	0.0000	0.0274	0.0000
	μ	0.4867	0.4867	0.2982	0.0000	0.0000	0.5366	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.042	λ/nm	7511.7	7511.7	420.76	349.13	349.13	317.98	289.44
	f	0.0010	0.0010	0.0062	0.0000	0.0000	0.0272	0.0000
	μ	0.5058	0.5058	0.2938	0.0000	0.0000	0.5337	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.048	λ/nm	8687.2	8687.2	425.28	352.36	352.36	317.28	291.65
	f	0.0010	0.0010	0.0060	0.0000	0.0000	0.0269	0.0000
	μ	0.5338	0.5338	0.2895	0.0000	0.0000	0.5303	0.0000

表 3 加 y 方向电场后 SiN 分子的前 7 个激发态激发波长 λ 、振子强度 f 、跃迁偶极矩 μ

$F/a.u.$		第 1 激发态	第 2 激发态	第 3 激发态	第 4 激发态	第 5 激发态	第 6 激发态	第 7 激发态
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.018	λ/nm	6559.9	6559.9	415.70	345.47	345.47	318.76	267.34
	f	0.0011	0.0011	0.0066	0.0000	0.0000	0.0275	0.0000
	μ	0.4826	0.4826	0.2994	0.0000	0.0000	0.5372	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.024	λ/nm	7021.34	7021.34	418.35	347.39	347.39	318.35	288.26
	f	0.0011	0.0011	0.0064	0.0000	0.0000	0.0274	0.0000
	μ	0.4938	0.4938	0.2963	0.0000	0.0000	0.5354	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.030	λ/nm	7350.38	7350.38	420.01	348.58	348.58	318.09	289.07
	f	0.0010	0.0010	0.0063	0.0000	0.0000	0.0273	0.0000
	μ	0.5018	0.5018	0.2945	0.0000	0.0000	0.5342	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.036	λ/nm	7586.2	7586.2	421.10	349.37	349.37	317.93	289.61
	f	0.0010	0.0010	0.0062	0.0000	0.0000	0.0272	0.0000
	μ	0.5075	0.5075	0.2934	0.0000	0.0000	0.5334	0.0000
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.042	λ/nm	7756.81	7756.81	421.84	349.90	349.90	317.81	289.97
	f	0.0010	0.0010	0.0062	0.0000	0.0000	0.0271	0.0000
	μ	0.5115	0.5115	0.2927	0.0000	0.0000	0.5329	0.0000

表3 续表

$F/a.u.$		第1激发态	第2激发态	第3激发态	第4激发态	第5激发态	第6激发态	第7激发态
	S	$^2\Pi$	$^2\Pi$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$	$^2\Sigma^+$
0.048	λ/nm	7881.5	7881.5	422.36	350.27	350.27	317.73	290.22
	f	0.0010	0.0010	0.0061	0.0000	0.0000	0.0271	0.0000
	μ	0.5146	0.5146	0.2922	0.0000	0.0000	0.5325	0.0000

从以上的计算结果可以看出:

1) 加 z 方向外电场时各激发态能量的简并情况相对于无外场时没有发生改变, 依然是第 1,2 激发态能量简并, 第 4,5 激发态能量简并, 第 3,6,7 激发态的能量为不简并状态, 但是各激发态能量相对于无外电场时的能量变化都相对比较大. 随着 z 方向外电场的增大各激发态的能量变化情况是除第 6 激发态能量随外电场的增大有轻微的增大外, 其余各激发态能量均随外电场的增大而减小, 但是减小幅度各不相同, 第 4 激发态和第 7 激发态的激发能随电场变化减小的幅度比较大, 而第 1 激发态和第 3 激发态的激发能变化相对较小, 如图 2 所示; 对于加 y 方向的电场各激发态的简并情况相对于无外电场时也没有发生改变, 相对与无电场时的激发能变化很明显, 除第 6 激发态激发能随外电场增大而增大外, 其余激发态能量均是随外电场变大而减小, 但是减小幅度都很小, 如图 3 所示. 总体来看不管是 z 方向加外电场还是 y 方向加外电场, SiN 分子的激发能随外电场变化都很小, 也就是说 SiN 分子的激发能对电场大小的变化不是很敏感, 对有无电场变化很敏感.

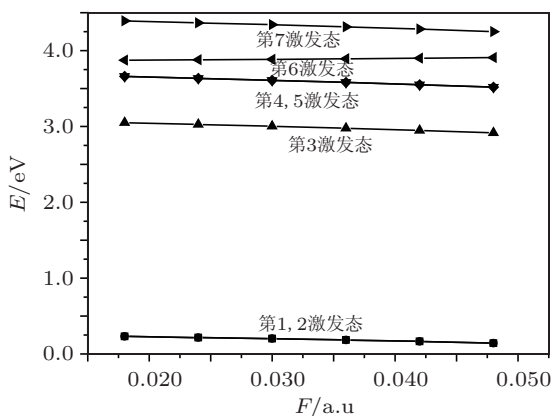


图2 加 z 方向外电场 SiN 分子激发能

2) 由以上结果可以看出各激发态的振子强度也受外电场变化的影响, 不管是对于 z 方向的外电场, 还是 y 方向的外电场, 所计算出的分子由基态到前 7 个激发态的跃迁振子强度都随外电场的增大而减小, 减小的幅度都很小. 而且

相对于无电场时的振子强度也有变化, 但是基态到第 3 激发态跃迁的跃迁振子强度一直相对较大. 振子强度反映电子跃迁能力的大小, 由式子 $f_{kj} = [8\pi^2m/(3h^2e^2)] \times (E_k - E_j) \times |\mu_{kj}|^2$ 可以看出, 振子强度 f_{kj} 的大小取决于电子能级间隔 $E_k - E_j$ 和跃迁偶极矩的平方 $|\mu_{kj}|^2$ 的大小^[19], 而由以上计算可以看出外电场作用下跃迁偶极矩的变化比较复杂, 因而电场的大小对振子强度的影响也比较复杂.

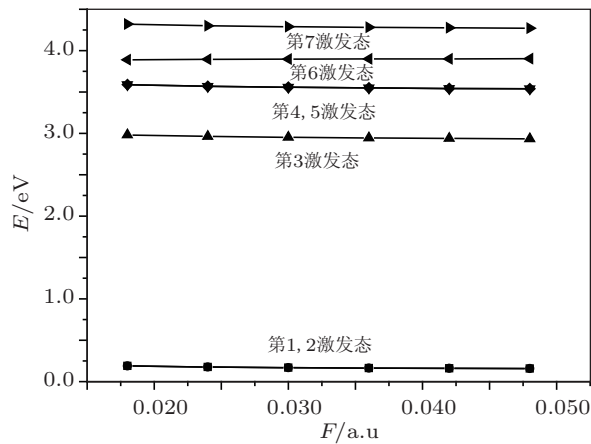


图3 加 y 方向外电场 SiN 分子激发能

3.3 外场作用下 SiN 分子的吸收谱

对于各激发态的吸收谱我们可以看到对于加不同方向外电场情况下吸收谱变化很复杂: 在 z 方向的外电场作用下出现了 310—420 nm 的紫外光及可见光的较强吸收谱, 这对研究 SiN 分子的可见光发射谱很重要. 而且第 1、第 2、第 3、第 4、第 5 及第 7 激发态的吸收谱都是随外电场的增大波长增大, 只有第 6 激发态的吸收谱随外电场的增大一直减小; 在 y 方向的外电场作用下也是除第 6 激发态的吸收谱随外电场的增加波长减小外, 其余各激发态的吸收波长均随外电场的增大而增大, 同样出现了可见光及可见光附近波长的吸收谱. 但是同无外电场时情况一样, 电子吸收光子的能量由基态跃迁到第 3、第 6 激发态后通过分子内部能量的传递可能先跃迁到第 1, 2 激发态进而再跃迁至基

态, 并且对于 $C_{\infty v}$ 群的分子自旋 $\Delta S = 0$, 的情况下, $\Sigma^+ \times \Pi = \Pi$, $\Pi \times \Sigma^+ = \Pi$, 所以从跃迁定则上来讲这些状态的跃迁也是可以发生的. 从而发出能量在 2.778—3.765 eV, 波长在 450—330 nm 范围的光子, 均在可见光及其附近的紫外光波长范围内, 且与实验中所观察到的光谱波长范围一致 [20]. 而且发射光还有可能通过分子内部能量的传递, 使发射光谱出现红移, 从而全部进入可见光范围内. 在可见光范围的发射谱便于观察, 对材料的发光研究有重要的意义.

4 结论

本文用 Gaussian03 程序包 [21] 中的 TD-B3P86 方法计算了有无电场情况下 SiN 分子前 7 个激发态的发光特性, 对比分析发现有无电场情况下分子在紫外及可见光光区均存在比较强的吸收谱. 外电场对各个激发态的激发能及

跃迁偶极矩的影响比较大, 跃迁振子强度受也受到电场一定范围的影响, 吸收光谱变化也很明显, 相对无外电场时出现了新的吸收峰, 而且发现有无电场对分子激发特性影响比较大, 但是电场大小变化对该分子的激发特性影响却不是很大. 因此我们只需要对该分子施加一定程度大小的电场就可以实现其激发特性的调节, 获得我们所需要的光谱. 特别值得提出的是分析发现 SiN 分子有无电场情况下均有蓝光光谱的吸收, 理论上讲吸收谱与发射谱是一致的, 而在实验上也观察到 SiN 具有珍贵且丰富的蓝光的发射光谱, 这对光电管的全色成像具有重要的意义. 激发特性在外电场影响下发生的改变说明了电场对分子发光特性的影响很明显, 同时文章对该分子所发可见光谱的产生机理进行了分析. 该研究结果不仅对以后在 SiN 的发光应用上有一定的指导作用, 而且通过本文的研究对氮化硅材料性质的研究起到一定参考及指导的作用.

- [1] Huang R, Wang D Q, Song J, Ding H L, Wang X, Guo Y Q, Chen K J, Xu J, Li Wei, Ma Z Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5823 (in Chinese) [黄锐, 王旦清, 宋捷, 丁宏林, 王祥, 郭艳青, 陈坤基, 徐骏, 李伟, 马忠元 2010 物理学报 **59** 5823]
- [2] Cristiana D V, Giorgio P, Gianfranco P 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 561
- [3] Wan G X, Chen Q H 2008 *J. Lanzhou Jiaotong University* **27** 160 (in Chinese) [万桂新, 陈全海 2008 兰州交通大学学报 **27** 160]
- [4] Chen Q Y, Duan M Y, Zhou H P, Dong C J, Wei Y, Ji H X, Huang J S, Chen W D, Xu M 2008 *Chin. J. Lumin.* **29** 363 (in Chinese) [陈青云, 段满益, 周海平, 董成军, 魏屹, 纪红莹, 黄劲松, 陈卫东, 徐明 2008 发光学报 **29** 363]
- [5] Xu G L, Liu X F, Xia Y Z, Zhang X Z, Liu Y F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7756 (in Chinese) [徐国亮, 刘雪峰, 夏要争, 张琨周, 刘玉芳 2010 物理学报 **59** 7756]
- [6] Ruan W, Luo W L, Zhang L, Zhu Z H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6207 (in Chinese) [阮文, 罗文浪, 张莉, 朱正和 2008 物理学报 **57** 6207]
- [7] Xu G L, Liu X F, Xie H X, Zhang X Z, Liu Y F 2011 *Chin. Phys. B* **20** 0131011
- [8] Yamada C, Hirota E, Yamamoto S, Saito S 1988 *J. Chem. Phys.* **88** 46
- [9] Bredohl H, Dubois I, Houbrechts Y, Singh M 1976 *Can. J. Phys.* **54** 680
- [10] Foster S C, Lubic K G, Amana T 1985 *J. Chem. Phys.* **82** 709
- [11] Cai Z L, Martin J M L, Francois J P, Gijbels R 1996 *Chem. Phys. Lett.* **252** 398
- [12] Yamada C, Hirota E 1985 *J. Chem. Phys.* **82** 2547
- [13] Elhanine M, Hanoune B, Guelachvili G, Amiot C 1992 *J. Phys. II France* **2** 931
- [14] Ito H, Suzuki K, Kondow T, Kuchitsu K 1993 *Chem. Phys. Lett.* **208** 328
- [15] Borin A C 1996 *Chem. Phys. Lett.* **262** 80
- [16] Stevens A E, Ferguson H I S 1963 *Can. J. Phys.* **41** 240
- [17] Bruna P J, Ohmann H, Peyerimhoff S D 1984 *Can. J. Phys.* **62** 1508
- [18] Mo C M, Zhang L D, Xi C Y, Wang T 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 5185
- [19] Xu G L, Lü W J, Liu Y F, Zhu Z L, Zhang X Z, Sun J F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3058 (in Chinese) [徐国亮, 吕文静, 刘玉芳, 朱遵略, 张琨周, 孙金锋 2009 物理学报 **58** 3058]
- [20] Pei Z W, Chang Y R, Hwang H L 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2839
- [21] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, Scuseria G E, Robb M A, Cheeseman J R, Zakrewski V G, Montgomery Jr J A, Stratmann R E, Burant J C, Dapprich S, Millam J M, Daniels A D, Kudin K N, Strain M C, Farkas O, Tomasi J, Barone V, Cossi M, Cammi R, Mennucci B, Pomelli C, Adamo C, Clifford S, Ochterski J, Petersson G A, Ayala P Y, Cui Q, Morokuma K, Malick D K, Rabuck A D, Raghavachari K, Malick D K, Rabuck A D, Raghavachari A G, Stefanov B B, Liu G, Liashenko A, Piskorz P, Komaromi I, Gomperts R, Martin R L, Fox D J, Keith T, Al-Laham M A, Peng C Y, Nanayakkara A, Challacombe M, Gill P M W, Johnson B, Chen W, Wong M W, Andres J L, Gonzalez C, Head-Gordon M, Replogle E S, Pople J A. 2003 Gaussian 03, Revision B.03 (Pittsburgh PA: Gaussian Inc.)

Electroluminescence properties of SiN molecule under different external electric fields*

Xu Guo-Liang Xie Hui-Xiang[†] Yuan Wei Zhang Xian-Zhou Liu Yu-Fang

(College of Physics and Information Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

(Received 14 April 2011; revised manuscript received 6 May 2011)

Abstract

In order to find how the external electric field affects the SiN molecule completely, in the present work the density functional B3P86/6-31(g) method is adopted to optimize the ground state structure and the time dependent density functional theory TDDFT/6-31(g) is used to study the absorption spectra, emission spectra, excited energies, oscillator strengths and dipole moments of SiN molecule under different external electric fields. We find that the absorption spectrum, excited energy, oscillator strength and dipole moment of SiN molecule are affected strongly by external electric field. One of the valuable results is that the absorption spectra in violet light and blue wavelength ranges of SiN molecule each have a red shift. The luminescence mechanism of visible light for SiN molecule is also investigated and compared with the experimental data.

Keywords: SiN, external electric field, excited properties

PACS: 31.15.-p, 31.15.ag, 31.50.Df

* Project supported by the Foundation for University Young Core Instructors of Henan Province, China (Grant No. 2009GGJS-044), the Natural Science Foundation of the Education Bureau of Henan Province, China (Grant No. 2010A140008), and the Cultivating Fund of Henan Normal University (Grant No. 2010PL02).

[†] E-mail: huixiang0414@126.com