

1,4-苯二硫醇分子的表面增强共振拉曼散射的化学增强

Chemical Enhancement on Surface-Enhanced Resonance Raman Scattering of Au₃-1,4-Benzenedithiol-Au₃ Junction

摘要点击 154 全文点击 89 投稿时间: 2011-6-21 采用时间: 2011-7-12

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/06/665-671

中文关键词 [表面增强拉曼散射](#) [1,4-苯二硫醇分子](#) [表面增强共振拉曼散射](#) [电荷转移](#)

英文关键词 [Surface-enhanced Raman scattering](#) [1,4-Benzenedithiol molecule](#) [Surface-enhanced resonance Raman scattering](#) [Charge transfer](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
赵秀明	大连理工大学物理与光电工程学院, 高科技研究院, 大连116024	
田小锐	中国科学院北京物理所凝聚态物理国家实验室, 北京100190	
刘莎莎	东北大学化学系, 沈阳110004	
李源作	大连理工大学物理与光电工程学院, 高科技研究院, 大连116024; 中国科学院北京物理所凝聚态物理国家实验室, 北京100190	
陈茂笃*	大连理工大学物理与光电工程学院, 高科技研究院, 大连116024	mdchen@dlut.edu.cn

中文摘要

利用密度泛函和含时密度泛函理论方法研究了1,4-苯二硫醇分子在两个金团簇之间的表面增强拉曼散射及表面增强共振拉曼散射光谱. 采用对应四种不同形式的电荷转移激发态能量的入射光, 计算了表面增强共振拉曼光谱. 结果显示, 光谱增强的效果与电荷转移的形式密切相关. 不同的电荷转移形式对增强因子的贡献是有差异的.

英文摘要

Surface-enhanced Raman scattering (SERS) and surface-enhanced resonance Raman scattering (SERRS) spectra of the 1,4-benzenedithiol molecule in the junction of two Au₃ clusters have been calculated using density functional theory (DFT) and time-dependent DFT method. In order to investigate the contribution of charge transfer (CT) enhancement, the wavelengths of incident light are chosen to be at resonance with four representative excited states, which correspond to CT in four different forms. Compared with SERS spectrum, SERRS spectra are enhanced enormously with distinct enhancement factors, which can be attributed to CT resonance in different forms.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计