第一图书网, tushu007.com

<<纳米铝二元团簇结构及其吸附性能研 >

图书基本信息

书名：<<纳米铝二元团簇结构及其吸附性能研究>>

13位ISBN编号：9787030242549

10位ISBN编号：7030242548

出版时间：2009-4

出版时间：科学出版社

作者：郭玲

页数：168

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

前言

材料是人类社会发展的物质基础与先导，每一种重大新材料的发现和应用都把人类支配自然的能力提高到一个全新的高度，材料已成为人类发展的里程碑。
20世纪中期单晶硅材料和半导体晶体管的发明及其硅集成电路的研制成功，引发了电子工业大革命，使微电子技术和计算机技术得到飞速发展。
70年代初石英光纤维和砷化镓（GaAs）等Ⅲ－Ⅴ族化合物半导体激光材料的出现，促进了光导纤维通信技术迅速发展并逐步形成高技术产业。
超品格概念的提出，分子束外延技术（MBE）、金属有机物化学气相沉积（MOCVD）先进生长技术的发展和完善以及超品格量子阱材料包括一维量子线、零维量子点材料的研制成功，彻底改变了光电器件的设计思想，使半导体器件的设计与制造从过去的“杂质工程”发展到“能带工程”，出现了以“电学特性和光学特性的剪裁”为特征的新范畴，使人类跨人到以量子效应为基础和低维结构为特征的固态量子器件和电路的新时代，并极有可能触发新的技术革命。
半导体微电子和光电子材料已成为21世纪信息社会的两大支柱高技术产业的基础材料。
它的发展将会使通信、高技术计算、大容量信息处理、储存与显示、空间防御、电子对抗以及武器装备的微型化智能化等这些对于国民经济和国家安全都至关重要的领域产生巨大的技术进步，因而受到国内外极为广泛的重视。
以砷化镓（GaAs）、磷化铟（InP）、磷化镓（（3aP）等为代表的Ⅲ－Ⅴ族化合物半导体材料大多是直接带隙材料，与硅相比，具有光学跃迁概率、电子饱和漂移速度高以及耐高温、抗辐照等特点，在超高速、超高频、低功耗、低噪声器件和电路，特别是在光电子器件和光电子储存等方面占有独特的优势，受到广泛重视，成为第二代半导体材料的代表。
直径为2—3in的N型和P型GaAs和InP单晶材料主要用于光电器件的衬底，常用水平布里奇曼（HB）或高压液封直拉法（LEC）制备，其掺杂浓度、均匀性和晶体完整性（除InP单晶位错密度需进一步降低外）可基本满足传统光电子和微电子器件的需求。
未掺杂半绝缘（Si）GaAs单晶是GaAs集成电路的基础材料，主要采用LEC法制备，已形成工业化生产规模。

内容概要

纳米铝二元团簇结构及其吸附性能的研究是当前团簇科学研究的热点，本书采用第一性原理中的各种方法对系列含铝团簇的几何结构和电子性质等进行理论研究，发现该类团簇的结构及其成键特征，为其他团簇的计算提供更为详尽的信息。
在研究团簇的基础上，首次探讨二元团簇氮化铝、磷化铝与小分子的化学吸附反应，寻找吸附后团簇稳定性幻数，总结吸附反应规律。
为指导实验产生新型团簇、发现新型吸附储氢材料及理解团簇催化反应机理提供理论依据。
本书可供化学、材料、物理专业的科研人员、高校教师和研究生阅读参考。

书籍目录

第1章 团簇概述. 1.1 引言 1.2 团簇的性质 1.2.1 幻数分布 1.2.2 基态结构 1.2.3 巨大的表体比和化学活性 1.2.4 电离能和电子亲和能 1.2.5 五重轴对称性 1.2.6 显著的弛豫效应 1.2.7 库仑爆炸和碎片化 1.2.8 磁性 1.2.9 团簇裂变和原子核裂变 1.2.10 团簇的嵌埋和组合 1.3 团簇的产生和检测 1.3.1 团簇源概述 1.3.2 团簇的合成方法简介 1.3.3 团簇的表征和检测 1.4 Ⅲ～V族化合物半导体材料和Ⅲ～V族团簇 1.4.1 Ⅲ～V族化合物半导体的一般性质 1.4.2 Ⅲ～V族化合物半导体的晶体结构 1.4.3 Ⅲ～V族化合物半导体晶体的化学键和极性 1.4.4 Ⅲ～V族化合物半导体晶体的能带结构 1.4.5 Ⅲ～V族团簇的研究现状 参考文献第2章 量子化学方法 2.1 第一性原理与Hartree-Fock近似 2.2 从头计算方法和分子轨道理论 2.3 密度泛函理论 2.4 价键理论 2.5 Gaussian98程序 参考文献第3章 二元团簇磷化铝的理论研究 3.1 等比磷化铝中性及其离子团簇几何结构和电子性质的演变规律研究 3.2 第一性原理对AlP团簇的最低能量结构及其电子性质的研究 参考文献第4章 二元团簇氮化铝的理论研究 4.1 氮化铝团簇研究进展 4.2 方法简介 4.3 密度泛涵理论研究AlN团簇的基态结构及其稳定性 参考文献第5章 二元团簇砷化铝的理论研究 5.1 引言 ……第6章 二元铝合金团簇铝钴AlnCo（n=8-17）的密度泛函理论研究第7章 团簇表面吸附的量子化学研究第8章 氮化铝和磷化铝团簇吸附性能研究致谢

章节摘录

插图：第1章 团簇概述1.1 引言材料是人类社会发展的物质基础与先导，每一种重大新材料的发现和应用都把人类支配自然的能力提高到一个全新的高度，材料已成为人类发展的里程碑。
20世纪中期单晶硅材料和半导体晶体管的发明及其硅集成电路的研制成功，引发了电子工业大革命，使微电子技术和计算机技术得到飞速发展。
70年代初石英光纤维和砷化镓(GaAs)等Ⅲ～Ⅴ族化合物半导体激光材料的出现，促进了光导纤维通信技术迅速发展并逐步形成高技术产业。
超晶格概念的提出，分子束外延技术(MBE)、金属有机物化学气相沉积(MOCVD)先进生长技术的发展和完善以及超晶格量子阱材料包括一维量子线、零维量子点材料的研制成功，彻底改变了光电器件的设计思想，使半导体器件的设计与制造从过去的“杂质工程”发展到“能带工程”，出现了以“电学特性和光学特性的剪裁”为特征的新范畴，使人类跨入到以量子效应为基础和低维结构为特征的固态量子器件和电路的新时代，并极有可能触发新的技术革命。
半导体微电子和光电子材料已成为21世纪信息社会的两大支柱高技术产业的基础材料。
它的发展将会使通信、高技术计算、大容量信息处理、储存与显示、空间防御、电子对抗以及武器装备的微型化智能化等这些对于国民经济和国家安全都至关重要的领域产生巨大的技术进步，因而受到国内外极为广泛的重视。

编辑推荐

《纳米铝二元团簇结构及其吸附性能研究》可供化学、材料、物理专业的科研人员、高校教师和研究生阅读参考。

第一图书网, tushu007.com
<<纳米铝二元团簇结构及其吸附性能研 >

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