

## مطالعه ی مدهای فرکانسی محاسباتی - تجربی طیف رامان در ساختار ژرمانیم آلفا

طالبیان، احسان؛ ملک فر، رسول

گروه فیزیک اتمی مولکولی، بخش فیزیک، دانشکده علوم پایه دانشگاه تربیت مدرس، تهران

### چکیده

در این مقاله مدهای فرکانسی طیف رامان بصورت تئوری محاسبه و با طیف تجربی ثبت شده مقایسه شده است. محاسبه تئوری طیف رامان ژرمانیم آلفا این امکان را میدهد که مدهای فونون تجربی را تعیین نموده و آنرا گزارش نمائیم.

## The study of calculation - experimental Raman spectra of alpha-germanium

Talebian, Ehsan ; Malekfar, Rasoul

Atomic and Molecular Physics Department, Physics Division, Faculty of Basic Science, Tarbiat Modares University, Tehran

### Abstract

In this article, the Raman spectra calculated theoretically and compared with experimentally recorded spectra of the sample. The theoretical calculation of Raman spectra of germanium-alpha enables us to determine and report experimental phonon modes.

PACS No. 39

روشهای بسیار خوب در محاسبه ی خواص اپتیکی متعدد محسوب میشود. در این مقاله نیز ما با استفاده از این روش (DFT) به محاسبه ی حساسیت پذیری مرتبه دوم و محاسبه ی ضرایب الکترواپتیکی نمونه ی کوارتز نوع آلفا خواهیم پرداخت. طیف رامان نمونه ی مورد استفاده بر حسب موقعیت های فرکانسی و شدت مدها محاسبه میشوند. بر اساس محاسبات انجام شده در این مقاله، طیف رامان محاسبه شده برای ژرمانیم نوع آلفا توافق بسیار خوبی را با طیف ثبت شده ی تجربی نشان میدهد. همچنین مدهای فونونی وابسته محاسبه شد.

### مواد-ساختار-کارهای انجام یافته

ژرمانیم آلفا کریستالی میباشد که دارای ساختار سه گوش و گروه فضائی چپگرد P3<sub>1</sub>21 یا راستگرد P3<sub>2</sub>21 با ثابت شبکه ی  $a=4.985 \text{ \AA}^0$  و  $c=5.647 \text{ \AA}^0$  میباشد. برای کوارتز نوع آلفا

### مقدمه

استفاده و توسعه ی مواد برای قطعات اپتیکی غیر خطی همواره مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. بیشتر محققان به دنبال یافتن و ساخت مواد غیرخطی هستند که میزان غیر خطی بودن آنها بزرگتر باشد. کوارتز-آلفا به عنوان ماده ای پایه برای اندازه گیری زایش هارمونیک دوم استفاده میشود. همچنین از این ماده مثلاً به عنوان زیر لایه میتوان برای شناسایی سایر مواد در دستگاههایی نظیر دستگاه پراش اشعه ایکس یا دستگاه طیف سنجی رامان استفاده نمود.

مطالعات نظری بر روی خواص غیر اپتیکی مواد از سالیان دوری آغاز شده است. از جمله ی این مطالعات میتوان به نظریه تابعی چگالی اشاره نمود که بر روی سیستمهای متناوب و در حضور میدان الکتریکی خارجی اعمال میشوند [۱ و ۲ و ۳] و از

عملی در آزمایشگاه طیف سنجی رامان دانشگاه تربیت مدرس مقادیر تجربی بازیابی شدند. با مقایسه مقادیر محاسبه شده با نرم افزار با مقادیر بدست آمده از ثبت تجربی طیف رامان ژرمانیم آلفا، مطابقت بسیار خوبی مشاهده گردید.

جدول ۱: فرکانسهای محاسبه شده ژرمانیم آلفا

تجربی						
در این مقاله	[۴۱]	[۴۰]	[۳۹]	[۳۸]	[۳۷]	[۳۶]
۱۲۳	۱۲۳	۱۲۲	۱۲۳	-	۱۲۴	۱۲۳
-	-	۱۶۴	۱۶۶	-	۱۶۸	۱۶۶
۲۱۶	۲۱۳	-	۲۱۲	-	-	۲۱۲
-	-	-	-	-	۲۴۹	۲۴۷
۲۶۴	۲۷۰	-	-	۲۶۳	-	-
-	۳۴۰	-	-	-	-	-
۳۳۸	-	۳۷۲	۳۷۲	۳۶۴	-	-
-	-	۴۵۶	-	-	-	-
۵۲۵	۵۲۵	۵۱۴	۵۱۶	۵۱۷	۵۱۶	۵۱۶
۵۹۸	۶۰۰	۵۹۵	۵۹۳	۵۹۵	۵۹۵	۵۹۵
-	۸۷۰	-	-	-	-	-
۹۴۶	-	۹۴۹	۹۴۹	-	۹۵۰	۹۵۰
۹۶۹	۹۷۵	۹۷۰	۹۷۳	۹۶۰	۹۷۱	۹۷۱

جدول ۲: فرکانسهای ثبت شده (بطور تجربی) ژرمانیم آلفا

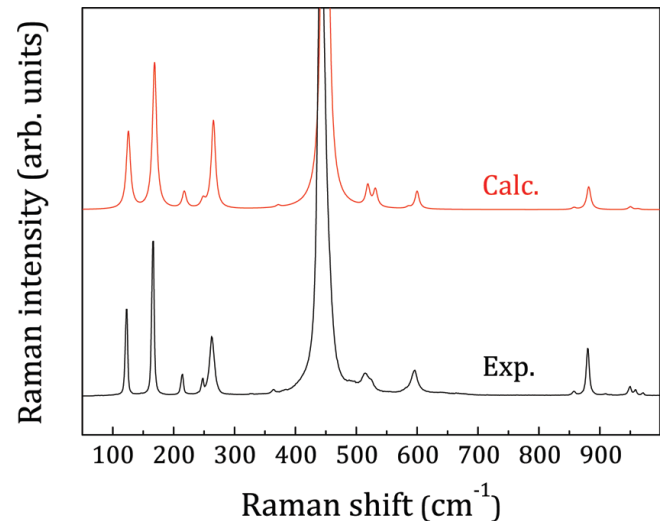
محاسباتی	
در این مقاله	[۳۸]
۱۲۳	۱۲۵
-	-
۲۱۹	۲۲۱
-	-
۲۶۴	۲۶۵
-	-
۳۷۳	۳۷۷
-	-
۵۲۹	۵۳۱
۵۹۸	۵۹۳
-	-
۹۴۲	۹۳۶
۹۷۰	۹۷۶

مقادیر  $a$  و  $b$  به ترتیب برابر  $۴.۹۲۱$  و  $۵.۴۱۶$  آنگستروم میباشد. تمامی مقادیر ذکر شده در بالا در دمای اتاق یعنی  $۳۰۰$  درجه کلوین میباشد [۴].

محاسبات عددی انجام یافته در این مقاله در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم افزار گوسین انجام یافته است [۵ و ۶]. انرژی تابعی تبدیلی همبسته با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) ارزیابی شده است [۷]. شبه پتانسیل ها نیز با شبه پتانسیل های معرفی شده توسط نویسندگان مرجع؟ جایگزین شده اند. در نمونه ژرمانیم نوع آلفا نیز الکترونیهای ژرمانیم و اکسیژن به عنوان ترازهای ظرفیت در ساختمان بندی شبه پتانسیل ها بررسی میشوند.

### مدهای فونون اپتیکی

مدهای فونون اپتیکی ژرمانیم-آلفا میتواند بر اساس نمایشهای غیرقابل تقلیل گروه نقطه ای  $D_3$  به  $4A_1 \oplus 9E \oplus 5A_2$  طبقه بندی شود که در آن یک مد  $A_2$  و یک مد  $E$  مدهای عرضی یکسان هستند. مدهای  $E$  و  $A_1$  مدهای فعال رامان هستند. مد  $E$  بطور عمودی و مد  $A_1$  بطور موازی با محور سه گانه ژرمانیم آلفا می باشند. جدول ۱ و ۲ فرکانس های عرضی و طولی فونون ژرمانیم آلفا را که در این مقاله محاسبه شده است در مقایسه با مراجع دیگر نشان میدهد. همانگونه که از جدول ۱ و ۲ مشاهده میشود مقادیر مختلفی برای فرکانس های ارتعاشی یک نمونه واحد تک کریستال ژرمانیم آلفا با کیفیت بالا توسط نویسندگان مراجع مختلف بدست آمده است که ناشی از نمونه های مختلف مورد استفاده است. بطور تئوری این اختلافات ناشی از روشهای میدان نیروی اعمالی میباشد [۸ و ۹]. همچنین، هنگامیکه روشهای مبتنی بر پایه محور مرتبه اول در نظر گرفته میشود، بررسی خطوط طیف رامان تجربی ژرمانیم آلفا بطور معمول توسط محاسبه ی مکانهای پیک بدون در نظر گرفتن شدتهایشان میباشد [۱۰ و ۱۱]. شکل ۱ طیف رامان تجربی و محاسبه شده با استفاده از نرم افزار گوسین  $۰.۳$  را در دمای معمولی اتاق ( $۳۰۰$  درجه کلوین) نشان میدهد. در شکل ۱ شدتها برای هردو مد عرضی و طولی محاسبه شده است. موقعیت فرکانسی خطوط رامان محاسبه شده با دقتی در حدود  $۰.۳\%$  در کل ناحیه فرکانسی محاسبه شده است. همچنین با طیف نگاری



شکل ۱: طیف رامان تجربی (سیاه رنگ) و طیف رامان محاسبه شده (قرمز رنگ) نمونه تک کریستال ژرمانیم آلفا برای خط تهییجی ۴۷۳ نانومتر.

## نتیجه گیری

برای نمونه ی ژرمانیم نوع آلفا طیف رامان با استفاده از نظریه تابعی چگالی محاسبه و رسم شد. با مقایسه ی طیف محاسبه شده با طیف تجربی ثبت شده در آزمایشگاه مشاهده گردید که این دو طیف تطابق بالایی دارند. همچنین طیف بدست آمده با طیف سایر مراجع نیز مقایسه گردید که محاسبات این مقاله در مجموع بهتر از سایر مقالات منتشر شده بودند.

## مرجع ها

- [1] Wei, X.; Hong, S. C.; Zhuang, X.; Goto, T.; Shen, Y. R. *Phys. Rev. E* 2000, **62**, 5160–5172.
- [2] Nunes, R. W.; Gonze, X. *Phys. Rev. B* 2001, **63**, 155107.
- [3] Veithen, M.; Gonze, X.; Ghosez, Ph. *Phys. Rev. B* 2005, **71**,
- [4] P. Hermet, G. Frayssé, A. Lignie, P. Armand, Ph. Papet, *J. Phys. Chem. C* 2012, **116**, 8692–8698.
- [5] Gonze, X.; Amadon, B.; Anglade, P. M.; Beuken, J. M.; Bottin, F.; Boulanger, P.; Bruneval, F.; Caliste, D.; Caracas, R.; Cote, M.; et al. *Comput. Phys. Commun.* 2009, **180**, 2582–2615.
- [6] Perdew, J. P.; Wang, Y. *Phys. Rev. B* 1992, **45**, 13244–13249.
- [7] Ceperley, D. M.; Alder, B. J. *Phys. Rev. Lett.* 1980, **45**, 566–569.
- [8] Ghobadi, E.; Capobianco, J. A. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2000, **2**, 5761–5763.
- [9] Sato, T.; Suda, J. *J. Phys. Soc. Jpn.* 1998, **67**, 3809–3815.
- [10] Bielz, T.; Soisuwan, S.; Kaindl, R.; Tessadri, R.; Többens, D. M.; Klötzer, B.; Penner, S. *J. Phys. Chem. C* 2011, **115**, 9706–9712.
- [11] Kaindl, R.; Többens, D. M.; Penner, S.; Bielz, T.; Soisuwan, S.; Klötzer, B. *Phys. Chem. Minerals* 2012, **39**, 47–55.

Surf and download all data from SID.ir: [www.SID.ir](http://www.SID.ir)

Translate via STRS.ir: [www.STRS.ir](http://www.STRS.ir)

Follow our scientific posts via our Blog: [www.sid.ir/blog](http://www.sid.ir/blog)

Use our educational service (Courses, Workshops, Videos and etc.) via Workshop: [www.sid.ir/workshop](http://www.sid.ir/workshop)