



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

Ab در آغاز فونون ها در  $Cu_2ZnSnSe_4$  نوع ST و KS

عنوان انگلیسی مقاله :

Ab initio Phonons in Kesterite and Stannite-Type  
 $Cu_2ZnSnSe_4$



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.



## بخشی از ترجمه مقاله

The experimental evidence about phonons in CZTSe is scarce; Altosaar *et al.*<sup>10</sup> reported a Raman spectrum of  $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{SnSe}_4$  powder, without specifying crystal structures. They emphasize that two peaks, at 173 and  $196\text{ cm}^{-1}$ , do not depend on Cd doping, whereas the position of the less intense peak in the  $231\text{--}253\text{ cm}^{-1}$  interval shifts with doping. This agrees with our attribution of vibration modes in kesterite, whereby the respective frequencies of the most Zn-sensitive ones seem to be at 174, 187,  $239\text{ cm}^{-1}$  (see Fig. 1).

Summarizing, we provided a first-principle description of zone-center phonons in KS and ST structures of CZTSe, supported by available experimental information. The predicted differences in frequency of some characteristic modes may be, in our opinion, useful for identifying KS or ST phases by means of vibrational spectroscopy.

شواهد تجربی در مورد فونون‌ها در CZTSe کمیاب می‌باشد، و Altosaar و همکارانش یک طیف IR پودر  $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{SnSe}_4$  را بدون تعیین ساختار کریستال گزارش کردند. آنها تأکید کردند که دو پیک در 173 و  $196\text{ cm}^{-1}$  بستگی به ناخالصی کادمیم ندارد در حالی که موقعیت پیکی با کمترین شدت در فاصله  $231\text{--}253\text{ cm}^{-1}$  با ناخالصی جابه‌جا می‌شود. این حالت، با انتساب ما از مدهای ارتعاشی در kesterite توافق دارد که به موجب آن، فرکانس‌های مربوطه‌ی بسیار حساس به Zn در  $174, 187, 239\text{ cm}^{-1}$  دیده می‌شوند.

بطور خلاصه، ما توصیفی از اولین اصل فونون‌های منطقه‌ی مرکزی در ساختارهای KS و CZTSe ST را که با اطلاعات تجربی قابل‌دسترس حمایت می‌شود ارائه دادیم. تفاوت‌های پیش‌بینی شده در بعضی از مدهای خاص، ممکن است از لحاظ ما برای شناسایی فازهای KS و ST با استفاده از طیف‌سنجی ارتعاشی مفید باشد.



### توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه می‌باشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت

ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.