



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

طیف ارتعاشی محاسبه شده تک شیب Cu_2SnSe_3 در مقایسه
با $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ نوع اکستریت

عنوان انگلیسی مقاله :

Calculated vibration spectrum of monoclinic Cu_2SnSe_3
in comparison with kesterite-type $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$



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

Remarkably, the numbering of modes within each group is consistent, in view that CTSe has three times more modes than CZTSe; thus, the throughout numbers of modes in the middle group are 10–13 in CZTSe and 30–39 in CTSe. A detailed analysis group by group and snapshots of characteristic modes can be found in Ref. [3]. In a nutshell, the modes within the softest group are zone-boundary acoustic branches, folded onto zone center of CTSe due to a large unit cell size; the middle group hosts optical modes predominantly stemming from bond bending, and the upper group contains bond-stretching modes. Some modes of CTSe are pronouncedly related to specific structure patterns, in that they “live” on continuous SnSe stripes (planar zigzag chains) or on CuSe chains, both being absent in CZTSe. Certain modes are “twinned”, *i.e.*, a given vibration pattern occurs either in phase, or in counter-phase (but at almost equal frequency) between two identical fragments traversing the same unit cell. For comparison, in CZTSe kesterite the degeneracy of modes occurs exclusively due to $x \leftrightarrow y$ equivalence in the tetragonal structure. Moreover, all cation chains in the kesterite structure are “broken” (*i.e.*, all cations intervene in them in alternation), and no “pure” continuous chains involving only a certain cation occur. One can conclude that the existing difference in vibration spectra are much more due to topological differences (connectivity on the cation sublattice) than to chemical aspect (presence or absence of Zn in the formula).

شایان ذکر است، شماره‌گذاری مدها داخل هر گروه سازگار می‌باشد، از این نظر که CTSe، سه برابر مد بیشتری نسبت به CZTSe دارد بنابراین، تمام شماره‌ها مدها در گروه میانی CZTSe 13-10 در و 30-39 در CTSe می‌باشد. یک تجزیه و تحلیل دقیق گروه با گروه و عکس‌های مدهای مشخصه در مرجع 3 یافت می‌شوند. بطور خلاصه، مدها در نرم‌ترین گروه، شاخه‌های آگوستیک zoneboundary هستند و به دلیل اندازه‌ی بزرگ سلول واحد، در مرکز منطقه‌ی CTSe تا خورد می‌باشند. گروه میانی، میزبان مدهای نوری می‌باشند که بطور عمده از خمیدگی پیوند ناشی شده‌اند. و گروه بالاتر شامل مدهای کششی پیوند می‌باشند. برخی از مدهای CTSe مربوط به الگوهای ساختار خاص می‌شوند به ین دلیل که آنها در نوار SnSe پیوسته (زنجیره‌های زیگزاگ صفحه‌ای) یا در زنجیره‌های CuSe قرار دارند، هر دو در CZTSe وجود ندارند. مدهای خاص جفت شده هستند یعنی الگوی ارتعاشی داده شده هم در فاز و هم در فاز مخالف بین دو قطعه‌ی یکسان عبوری از یک سلول واحد یکسان رخ می‌دهند. برای مقایسه، در کاستریت CZTSe، به دلیل هم‌ارزی $x \leftrightarrow y$ در ساختار چهاروجهی، هم‌تازی مدها منحصراً رخ می‌دهد. بعلاوه تمام زنجیره‌های کاتیونی شکسته می‌شوند (یعنی تمام کاتیون‌ها در تعویض خود دخالت می‌کنند) و هیچ زنجیره‌ی پیوسته‌ی خالصی شامل تنها یک کاتیون خاص، رخ نمی‌دهد. می‌توان در نظر گرفت که تفاوت طیف‌های ارتعاشی بیشتر به دلیل تفاوت توپولوژی (اتصال به زیر شبکه‌ی کاتیونی) تا جنبه‌های شیمیایی (وجود یا عدم وجود Zn در فرمول) می‌باشد.



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.