



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

دینامیک شبکه ای و ساختار الکترونی در $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ نوع kesterite با استفاده از محاسبات اصول اولیه

عنوان انگلیسی مقاله :

Electronic structure and lattice dynamics in kesterite-type $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ from first-principles calculations



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

V. CONCLUSION

5. نتیجه گیری

Our calculation reveals expected similarities in the electronic structure of CZTSe kesterite with CZTS, or with stannite phase of CZTSe studied and explained in detail before. The LDA yields a small negative indirect gap, at variance with experiment but in apparent agreement with other calculations. The vibration spectrum, in our knowledge not calculated before, reveals features which can be traced back to CIS but remain “silent” (or, not zone-center) in this compound. On the contrary, the diversification of cations in kesterite into three species gives rise to additional modes which should become visible in experiment spectra. A comparison with calculated vibration spectrum of stannite underlines close similarities but also some noticeable differences with that of kesterite. We suggest that notably the differences might turn out useful for structural identification of these structurally close phases of CZTSe.

محاسبه‌ی ما، شباهت‌های مورد انتظاری را در ساختار الکترونی اکستریت CZTSe با CZTS یا با فاز استانیت CZTSe قبلاً مطالعه و توضیح داد شده بطور مفصل نشان می‌دهد. LDA یک شکاف منفی کوچک در واریانس با آزمایش اما در ظاهر موافق با سایر محاسبات نتیجه می‌دهد. طیف ارتعاشی در دانش ما، قبلاً محاسبه نشد، این طیف خصوصیتی را آشکار می‌سازد که می‌تواند برای CIS پیش‌بینی شوند اما بصورت غیر فعال یا نه منطقه مرکزی در این ترکیب باقی می‌مانند. در مقابل، تنوع کاتیون‌ها در کاستریت در سه گونه، مدهای اضافی را که باید در طیف تجربی قابل رویت شوند نتیجه می‌دهد. مقایسه با طیف ارتعاشی محاسبه شده‌ی استانیت، شباهت‌های نزدیک اما همچنین برخی تفاوت‌های قابل توجه را با طیف ارتعاشی کاستریت تأکید می‌کند. ما پیشنهاد می‌کنیم که بطور ویژه، تفاوت‌ها ممکن است برای شناسایی ساختاری این فازهای CZTSe نزدیک به لحاظ ساختاری مفید باشند.



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.