

ПОЯВЛЕНИЕ В СПЕКТРЕ КРС МАЛЫХ ЧАСТОТ НАНОЧАСТИЦ ПАРАДИБРОМБЕНЗОЛА КОЛЕБАНИЙ С $k \neq 0$

М.А. Коршунов

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН,
660036 Красноярск, Академгородок, 50/38, Россия
e-mail: mkor@iph.krasn.ru*

OCCURRENCE IN RAMAN SPECTRUM OF SMALL FREQUENCIES OF PARADIBROMBENZENE NANOPARTICLES OF FLUCTUATIONS WITH $k \neq 0$

M.A. Korshunov

*Federal state budgetary establishment of science "Institute of physics n.a. L.V. Kirensky"
of the Siberian Branch of the Russian Academy of Science,
Russia, 660036, Krasnoyarsk, Academgorodok, 50/38,
E-mail: mkor@iph.krasn.ru*

Doubling of lines in Raman spectrum of paradibrombenzene nanoparticles small frequencies is registered at reduction of their size. Therewith the distance between the doubled lines increases upon the reduction of the nanoparticles size. The additional lines emerge. Thus their intensity increases. The calculations of frequencies' spectra carried out via the Dyne method have shown that the additional lines are caused by occurrence of fluctuations with $k \neq 0$. Doubling of lines is caused by display of orientation fluctuations from the ends of Brillouin zone.

Отмечается удвоение линий в спектре решеточных колебаний наночастиц парадибромбензола при уменьшении их размера. При этом расстояние между удвоенными линиями возрастает при уменьшении размера наночастиц. Появляются дополнительные линии. При этом их интенсивность возрастает. Проведенные расчеты спектров частот по методу Дина показали, что дополнительные линии обусловлены появлением колебаний с $k \neq 0$. Удвоение линий обусловлено проявлением ориентационных колебаний с концов зоны Бриллюэна.

В идеальном объемном кристалле в комбинационном рассеянии участвуют колебания с волновым вектором $\mathbf{k}=0$ (центр зоны Бриллюэна). В нанокристаллах при ограничении размеров наблюдается проявление колебаний из разных точек зоны Бриллюэна [1]. Смещения частот линий в низкочастотную область в спектре органического молекулярного нанокристалла отмечалось в работе [2]. При исследовании спектров наночастиц парадибромбензола с уменьшением их размера найдено уменьшение частот линий появление дополнительных линий, интенсивность которых возрастает с уменьшением размера наночастиц, а также наблюдается удвоение интенсивных линий спектра наиболее заметное для отдельно отстоящих линий. В парадибромбензоле это линия 20 см^{-1} . Это видно на приведенном рисунке. В объемном кристалле подобного разделения линий не наблюдается. Кроме этого при уменьшении размеров наночастиц расстояние между удвоенными линиями увеличивается. Размеры наночастиц определялись на электронном микроскопе.

Для объяснения наблюдаемых изменений в спектре наночастиц парадибромбензола был проведен расчет решеточных колебаний при различных значениях волнового вектора \mathbf{k} по методу Дина [3]. Найдено, что величина расщепления равна разности частот на дисперсионной ветви, предельных значений \mathbf{k} . Это относится к интенсивным линиям, обусловленным колебаниями, имеющими ориентационный характер. Дисперсионная кривая имеет дискретный

характер, и мы наблюдаем в спектре при разных значениях волнового вектора дополнительные линии, интенсивность которых возрастает. При этом они имеют ориентационно-трансляционный характер.

Поэтому в спектре наблюдается по две интенсивные линии с предельными значениями \mathbf{k} и ряд менее интенсивных линий при других значениях \mathbf{k} .

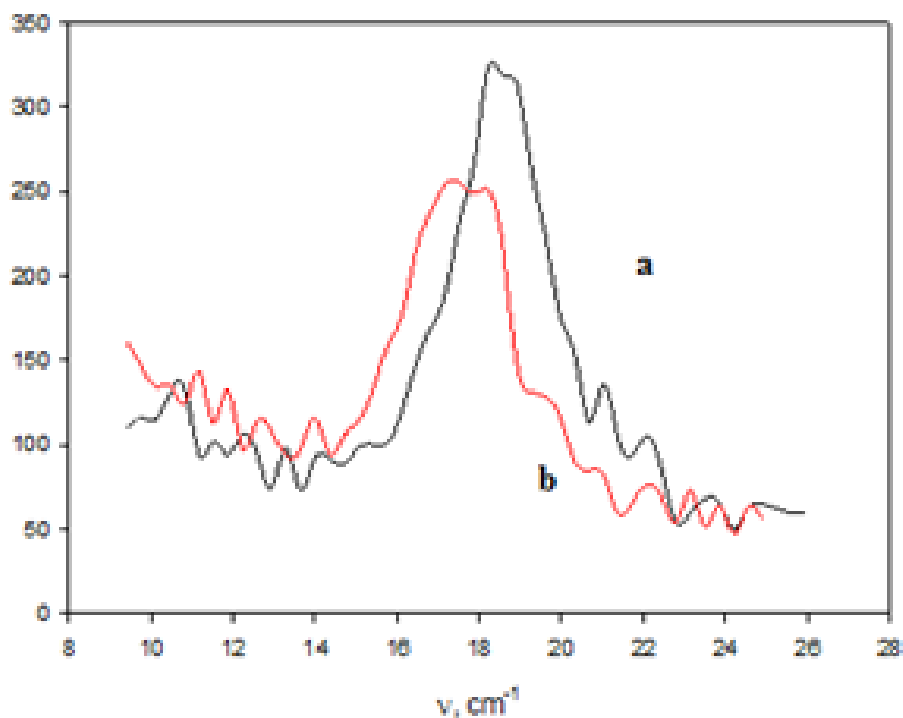


Рис: Линия спектра в области 20 см^{-1} решеточных колебаний парадибромбензола при размере частиц $\sim 200 \text{ нм}$ (a) и $\sim 120 \text{ нм}$ (b).

Таким образом, расчеты показали, что в спектре появляются дополнительные линии, связанные с ориентационно-трансляционными колебаниями. Удвоение линий обусловлено проявлением в спектре наночастиц колебаний с $\mathbf{K} \neq 0$. Это согласуется с полученными экспериментальными спектрами решеточными колебаниями наночастиц парадибромбензола.

Список литературы:

1. Гусев А.И. Наноматериалы, структуры, технологии. Москва, Физматлит (2007)
2. Коршунов М. А.// Опт. и Спектр., 2010. Т.109. С.1387
3. Дин П. В. Вычислительные методы в теории твердого тела, Мир, Москва, 1975.