

Рассеяние Бриллюэна-Мандельштама в слабо неупорядоченных нанокристаллах

Яшенкин А.Г.^{1,2}, *Коняхин С.В.*^{3,4}, *Утесов И.О.*⁵

ayash@mail.ru

¹ СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

² ПИЯФ НИЦ КИ, Гатчина, Россия

³ Institute for Basic Science, Тэджон, Республика Корея

⁴ University of Science and Technology, Тэджон, Республика Корея

⁵ Institute of Basic Science, Тэджон, Республика Корея

Сформулирован микроскопический подход к рассеянию света на акустических фонах (рассеяние Бриллюэна-Мандельштама (ВМ)) в наночастицах неполярных кристаллов, аналогичный построенной ранее теории рамановского рассеяния в тех же объектах [1,2]. Полученные с помощью дискретного атомистического метода динамической матрицы (DMM) длинноволновые акустические спектры изучены в зависимости от размеров и формы частиц. Исследованы особенности формулировки соответствующей континуальной задачи. Найдено скейлинговое выражение, позволяющее быстро проводить усреднение наночастиц по размерам в ансамбле.

Аналитически и численно исследован вклад в уширение спектральных линий, возникающий из-за несовершенства кристалла. Изучены слабые протяженные и точечные неоднородности, а также сильные точечные примеси (NV-центры), получена зависимость ширины линий от размеров и формы наночастиц, силы и концентрации беспорядка. Показано, что, как и в рамановских спектрах, возникновение режимов разделенных и перекрывающихся уровней для акустических фононов также имеет место, однако происходит по иному сценарию. Проанализирована способность сильных примесей локализовывать акустические моды.

В рамках модели поляризованных связей (ВРМ) изучен вопрос о ВМ-"молчащих" и ВМ-"активных" акустических модах и о вкладе последних в ВМ-спектры. Продемонстрировано, что ВМ-спектроскопия может служить комплементарным по отношению к рамановской спектроскопии методом исследования массивов наночастиц, дополняя данные по Раману в тех аспектах, в которых она оказывается более предсказательной.

Ссылки

[1] С. В. Коняхин, О. И. Утесов, И. Н. Тертеров, А. В. Сиклицкая, Д. Солнышков, А. Г. Яшенкин. J. Phys. Chem. C (2018), 122, 19219.

[2] О. И. Утесов, А. Г. Яшенкин, С. В. Коняхин, J. Phys. Chem. C (2018), 122, 22738.