

Рамановское рассеяние света в композитных наночастицах

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

st096157@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет (СПбГУ) физический факультет, Санкт-Петербург, Петергоф

² Петербургский институт ядерной физики (ПИЯФ) НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина

³ Center for Theoretical Physics of Complex Systems, Institute for Basic Science (IBS), Daejeon, Republic of Korea

⁴ Basic Science Program, Korea University of Science and Technology (UST), Republic of Korea

В рамках разработанного ранее [1,2] и успешно примененного для односоставных частиц [3,4] подхода, состоящего в комбинации решения уравнения Клейна-Фока-Гордона в евклидовом пространстве с беспорядком (ЕКFG) и модели поляризованных связей (BPM) численно исследована задача о рамановском рассеянии света на композитных (двухкомпонентных) наночастицах неполярных кристаллов, в частности, наноалмазов. При этом основное внимание было уделено двум практически важным случаям.

Во-первых, были рассмотрены алмазные наночастицы с кристаллическим ядром и аморфной (разупорядоченной) углеродной оболочкой (т.н. coating). Для описания последней использовалась простейшая качественно пригодная модель сильных примесей (например, вакансий) на решетке с концентрациями примесей порядка 1. Было показано, что положение максимума рамановского пика соответствует размеру кристаллического ядра, а аморфная оболочка дает существенный вклад справа от максимума, тем самым заметно изменяя общую форму пика. Данный эффект может быть качественно интерпретирован в терминах фононных мод как локализация оптических фононов в аморфной фазе на «сильных» примесях с соответствующим «перетеканием» плотности вибрационных мод в запрещенную для фононов область частот вблизи края зоны. Были подробно изучены зависимости формы и положения линий рамановского спектра от соотношения кристаллической и аморфной фаз в наночастицах.

Во-вторых, исследовались наночастицы, состоящие из двух кристаллических компонент (одна из которых - алмаз) с различными упругими характеристиками. Изучался вопрос, насколько рамановский спектр таких композитных частиц отличается от спектра смеси двух частиц с характеристиками, соответствующими различным компонентам, а также от однородных частиц с некоторыми усредненными параметрами.

Для обеих рассмотренных задач было получено, что в случае достаточной «контрастности» фаз композитные частицы могут быть с хорошей точностью идентифицированы по рамановскому спектру. В работе также обсуждаются препятствующие этому факторы и явления.

Ссылки

1. O.I. Utesov, A.G. Yashenkin, S.V. Koniakhin, "Raman spectra of nonpolar crystalline nanoparticles: elasticity theory-like approach for optical phonons", J. Phys. Chem. C 122, 22738 (2018).
2. S.V. Koniakhin, O.I. Utesov, A.G. Yashenkin, "Raman peak shift and broadening in crystalline nanoparticles with lattice impurities", Diamond and Related Materials 146, 111182 (2024)
3. A.G. Yashenkin, O.I. Utesov, S.V. Koniakhin, "Bench tests for microscopic theory of Raman scattering in powders of disordered nonpolar crystals: Nanodiamonds and beyond", Journal of Raman Spectroscopy 52, 1847 (2021)
4. S.V. Koniakhin, O.I. Utesov, Vitaly I. Korepanov, A.G. Yashenkin, "Rapid Determination of Nanodiamond Size Distribution and Impurity Concentration from Raman Spectra Using an Open Machine-Learning Toolbox", arXiv:2511.23053