

光谱学与光谱分析

非晶碳薄膜振动拉曼光谱的第一性原理研究

牛丽^{1, 2}, 朱嘉琦^{1*}, 高巍³, 杜善义¹

1. 哈尔滨工业大学复合材料与结构研究所, 黑龙江 哈尔滨 150080
2. 哈尔滨师范大学物理与电子工程学院, 黑龙江 哈尔滨 150025
3. 北京航空制造工程研究所高能束流加工重点实验室, 北京 100024

收稿日期 2008-7-28 修回日期 2008-10-29 网络版发布日期 2009-9-1

摘要 采用基于第一性原理的赝势平面波方法, 对3个不同密度(2.6, 2.9和3.2 g·cm⁻³)非晶碳结构的振动态密度和振动拉曼光谱进行了研究。结构模型由快速“液体-淬火”方法模拟得到, 振动频率和本征模由线性响应理论决定, 拉曼耦合张量由有限电场方法计算。计算结果表明: 当密度从2.6增加到3.2 g·cm⁻³时, sp³碳含量从50%增加到84.4%, G峰向高频区偏移, D峰和G峰的强度之比 I_D/I_G 减小, T峰向低频区偏移且T峰和G峰的强度之比 I_T/I_G 增大。该结果与实验结果显示出很好的一致性。依据原子振动的分析结果证实: 拉曼光谱的G峰和D峰均来自于sp²碳原子的振动贡献, 且G峰是由任何成对的sp²碳原子的伸缩振动产生的, T峰来自于sp³杂化碳原子的振动贡献, G峰和T峰峰位随结构的色散是由键长变化导致的。

关键词 [第一性原理](#) [非晶碳薄膜](#) [拉曼光谱](#) [振动态密度](#)

分类号 [O657.3](#), [O751](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)09-2438-04](#)

通讯作者:

朱嘉琦 zhujq@hit.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(997KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“第一性原理”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [牛丽](#)

·

· [朱嘉琦](#)

· [高巍](#)

· [杜善义](#)