

# はじめにお読みください

この文章は、研究室に所属する学生が研究活動の一環として作成してくれたものです。研究室セミナーの時間に輪番で発表してもらい、研究に関連した事項の基礎知識の向上をはかりました。内容・文章ともに未だ不完全なものもありますが、2018 年度に調査してくれたものを公開いたします。

※学生の作成してくれたファイルをそのまま公開しております。ところどころ誤った記述もあるため、内容については保証いたしかねます。ご注意ください。  
(2019 年度以降、少しずつ改訂していく予定です。)

2018 年 3 月 名古屋工業大学 川崎・石井研究室  
<http://kawasaki.web.nitech.ac.jp/jp/tips/index.shtml>

## 【執筆者一覧】

### ・ 卒研究生

伊達 怜実、堀之内 理紗、山田 えみり、吉谷 駿、渡邊 裕介

### ・ M1

浅井 七海、亀岡 真祐子、近藤 航平、長谷川 毅、横井 和真、高橋 実夏子

### ・ M2

石亀 弘基、久野 潤也、中村 元海、林 遼治、松下 一樹、眞鍋 駿

### ・ D3

李 蒼昊

## 【ラマン・赤外分光法】

グラファイトとグラフェンの振動モードを図示してください。

作成日： 2018 年 10 月 25 日

担当者： 眞鍋 駿

グラフェンはひし形の単位格子をつくる (Fig.1)。ひし形の二辺は基本格子ベクトル  $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$  に対応し、単位格子ベクトルの長さを  $a$  とすると、

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2}\right), \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2}\right)$$

のように表される。これに対応する逆格子ベクトル  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$  は

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}, \frac{2\pi}{a}\right), \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{a}\right)$$

で与えられる。これらの逆格子に対応するブリルアン領域は  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$  で作られるひし形であるが、元の結晶の対称性を考えて、六角形になる (Fig.2)。Fig.2 には対称性の高い点の記号  $\Gamma$ 、 $K$ 、 $M$  を示している。

グラフェンの単位格子中には二つの原子があり、それによってブリルアン領域の中心  $\Gamma$  に六つの固有振動を持つ(そのうち二つは二重縮退している。)。基準振動モード  $\Gamma$  は、

$$\Gamma = A_{2u} + B_{2g} + E_{1u} + E_{2g}$$

で表される。このうち面内光学モードである  $E_{2g}$  と、面外光学モードである  $B_{2g}$  に縮重が起こっている。また、 $E_{2g}$  モードはラマン活性であり、 $A_{2u}$ 、 $E_{1u}$  が赤外活性、 $B_{2g}$  がラマン及び赤外不活性である。

グラファイトでは、ダビドフ分裂 (結晶の単位胞内に存在する二つ以上の分子が互いに相互作用することで電子や振動スペクトルが分裂する現象) によって光学モードは二倍になる。グラファイトの基準振動モード  $\Gamma$  は

$$\Gamma = 2(A_{2u} + B_{2g} + E_{1u} + E_{2g})$$

で表される。グラフェン及びグラファイトの振動モードを Fig.3 に図示する。

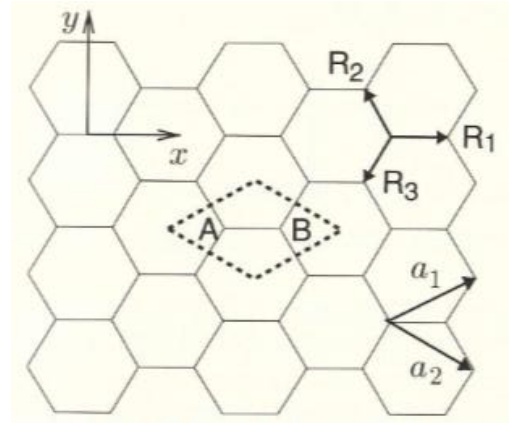


Fig.1 グラフェンの六角格子 <sup>[1]</sup>  
(図中のひし形が単位格子)

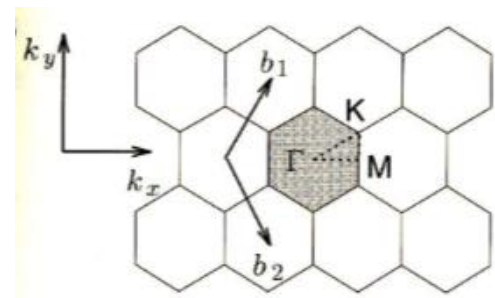


Fig.2 グラフェンの逆格子  
(影の部分がブリルアン領域)

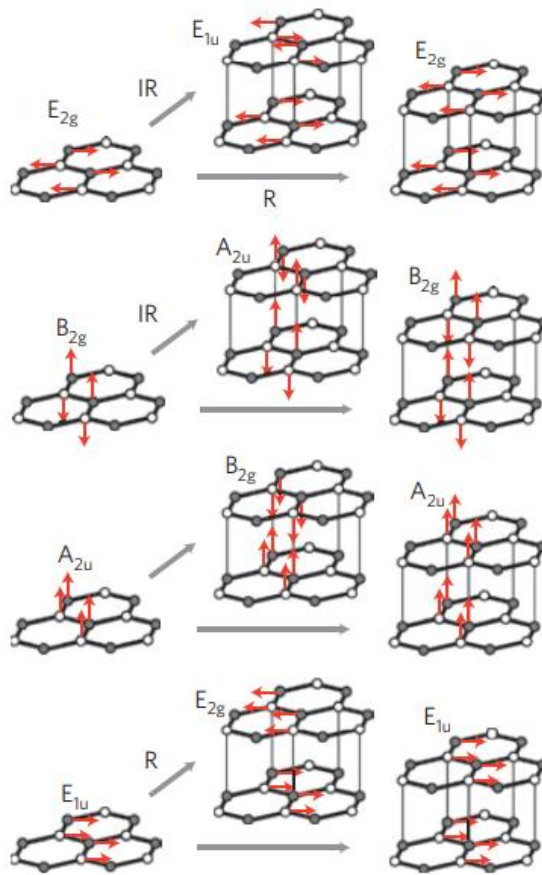


Fig.3 グラフェン及びグラファイトの振動モード [2]

グラフェンのラマンピークを Fig.4 に示す。G バンドピークは、高周波側の  $E_{2g}$  にあたる。D バンドピークは六員環の呼吸モード (breathing mode) にあたり (Fig.5)、その振動には欠陥が必要である。

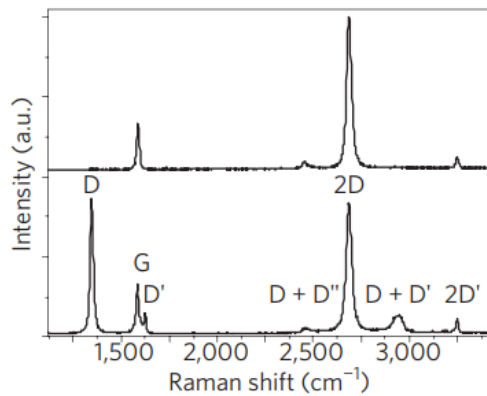


Fig.4 グラフェンのラマンスペクトル  
(上 : pristine、下 : defected)

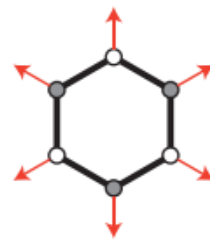


Fig.5 六員環の呼吸モード

[1] フラーレン・ナノチューブ・グラフェンの科学 齋藤理一郎 共立出版株式会社

[2] Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene

Andrea C. Ferrari and Denis M. Basko