

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】

シリコンとダイヤモンドの振動モードを図示してください。

作成日： 2018 年 10 月 26 日

担当者： 眞鍋 駿

・ダイヤモンド

ダイヤモンドは、炭素が正四面体構造で結合したような単位格子を持ち (Fig.1)、立方晶型と六方晶型の二種類が存在する。

立方晶型のダイヤモンド (3C-diamond) は面心立方格子の四面体孔を一つ置きに原子が占めた構造をしており、閃亜鉛鉱構造をしている (Fig.2)。

六方晶型のダイヤモンド (ロズデーライト、6H-diamond) は、炭素の正四面体が集まって六角柱のような構造をしており、これはウルツ鉱型構造と同じである。(Fig.3)

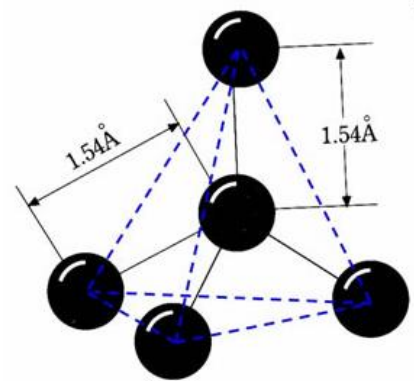


Fig.1 ダイヤモンドの単位格子^[1]

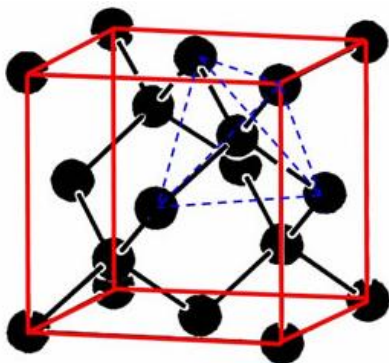


Fig.2 立方晶ダイヤモンド(シリコン)の結晶構造

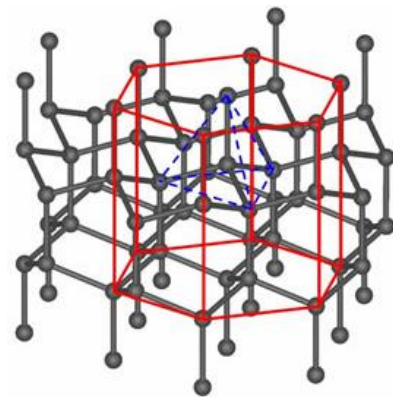


Fig.3 六方晶ダイヤモンドの結晶構造

立方晶ダイヤモンドの振動モード Γ は、

$$\Gamma = F_2$$

であり、三重に縮退している。F₂はラマン活性であり、1333cm⁻¹に(計算値では1329)に鋭いピークを示す(Fig.4)。

一方、六方晶型のダイヤモンドの振動モード Γ は、

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

で表される。このうち E_{2g}、A_{1g}、E_{1g} がラマン活性で、残りの三つがラマン及び赤外不活性である。

Fig.5、6 にダイヤモンドの振動モードを図示する。

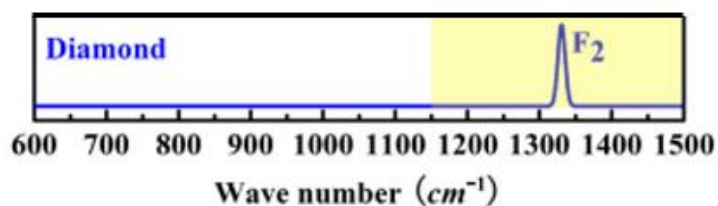


Fig.4 立方晶ダイヤモンドのラマンスペクトル^[2]

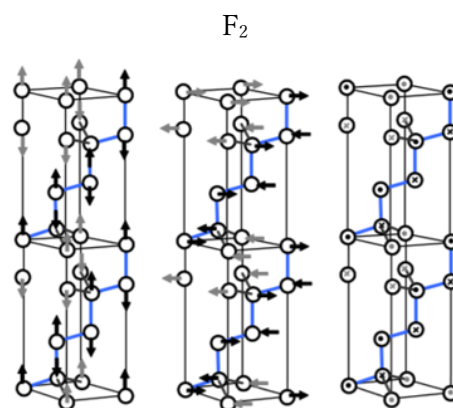


Fig.5 立方晶ダイヤモンド（シリコン）の振動モード

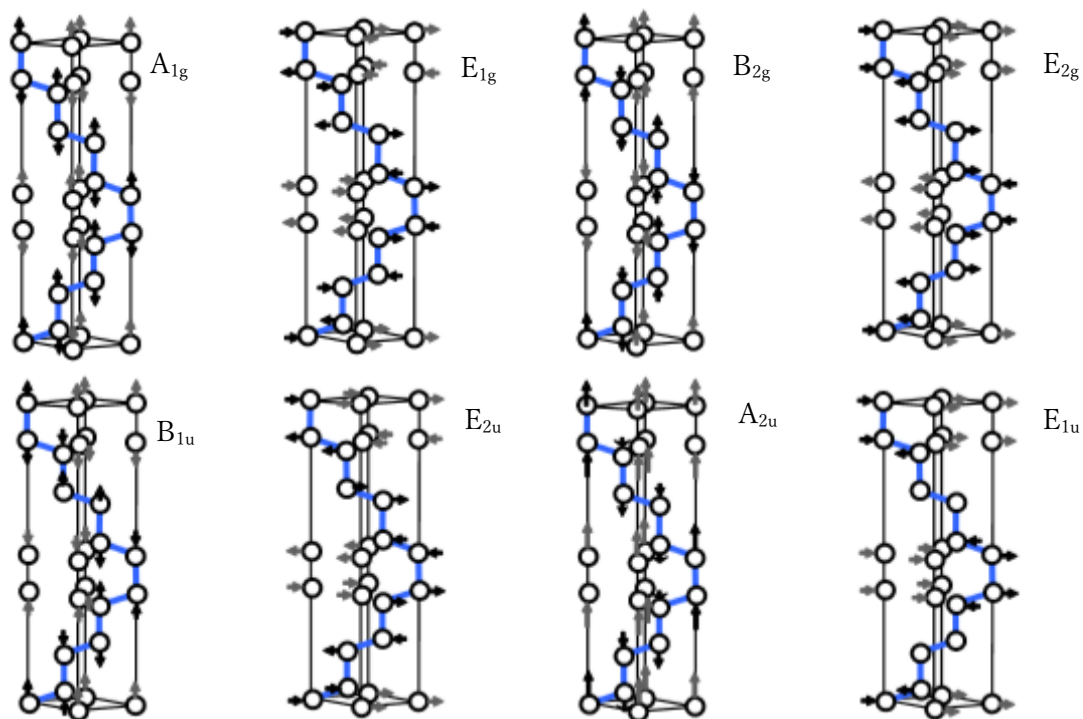


Fig.6 六方晶ダイヤモンドの振動モード

・シリコン

シリコンは立方晶ダイヤモンドと同じ構造及び同じ振動モードを持つ。(Fig.2、5)

[1] 大人の科学.net 今宵の逸品 ウルヴァリン : X-MEN ZERO

<http://otonanokagaku.net/issue/cinema/vol11/index.html>

[2] Structural and vibrational properties of the 6H diamond: First-principles study

Diamond & Related Materials 16 (2007) 21–28