

## ピリミジン-4-カルボン酸単結晶のテラヘルツ帯振動モードの方位依存性

### Oriental dependence of terahertz vibrational modes

#### in a single crystal of pyrimidine-4-carboxylic acid

秋田大院理工<sup>1</sup>, 秋田大地方創生セ<sup>2</sup> °島田 凌<sup>1</sup>, 淀川 信一<sup>1</sup>, 倉林 徹<sup>1</sup>, 丹野 剛紀<sup>2</sup>

Akita Univ., Grad. Sch. of Engineering Sci.<sup>1</sup>,

Akita Univ., Ctr for Regional Revitalization in Research & Education<sup>2</sup>,

°Ryo Shimada<sup>1</sup>, Shinichi Yodokawa<sup>1</sup>, Toru Kurabayashi<sup>1</sup>, Takenori Tanno<sup>2</sup>

E-mail: m8019416@s.akita-u.ac.jp

### 1. はじめに

テラヘルツ分光では、分子結晶の骨格振動や分子間相互作用などの低周波数の振動現象を検出することができるため、有機結晶の物性を評価する手法として幅広い分野で注目されている。

### 2. 研究内容と実験結果

本研究では、有機単結晶内に生じる各振動モードについて解析することを目的とし、直線偏光テラヘルツ波を発生させる GaP テラヘルツ分光器を用い、結晶の透過スペクトルの方位依存性から振動モードを分析する偏光分光分析を行った。

ピリミジン-4-カルボン酸を対象とし、粉末試料とポリエチレンを混合したペレット(透過スペクトル比較用)を調製し、透過スペクトルを測定した。(Fig. 1) また、薄片状単結晶を 30°ずつ回転させながら透過スペクトルを測定した。(Fig. 2) その後、得られた透過スペクトルと Gaussian03 を用いた量子化学計算の結果を比較し、振動モードの推定を行った。析出実験により *c* 面が発達した単結晶が得られた。この単結晶は、ツイスト振動とバタフライ振動は *c* 面に平行な振動方向のためスペクトルが角度依存性を持つ。また、屈曲振動は *c* 面に垂直(光路に平行)な振動方向のためスペクトルが角度依存性を持たない。測定した結晶とペレットの透過スペクトルを比較したところ、1.3 THz, 1.9 THz, 2.4 THz, 4.3 THz, 4.8 THz 付近に吸収ピークがあり、Gaussian03 (基底関数:CC-pVTZ) で得られた各モード (Table 1) の振動方向および赤外強度を考慮すると、角度依存性を有する吸収ピークのうち、赤外強度が大きいバタフライ振動が 2.4 THz; 赤外強度の小さいツイスト振動が 1.9 THz; 1.3 THz のピークは非常に鋭いためフォノンと考えられる。4.3 THz

および 4.8 THz の吸収ピークは角度依存性がないため、光路に平行な双極子モーメントをもつ屈曲振動と考えられる。(Fig. 1)

### 3. まとめ

偏光分光分析と量子化学計算を用いて振動モード解析し、分子結晶特有の骨格振動や分子間相互作用による振動を観測した。振動モードの方向と方位依存性が合理的に説明された。

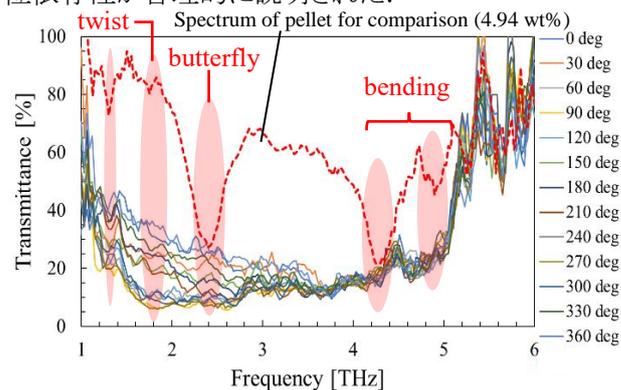


Fig. 1 Experimental spectra

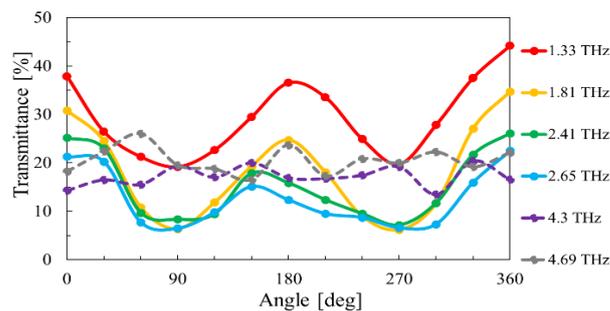


Fig. 2 Orientational dependence

Table 1 Calculated results of single molecule

Calculated frequency	Vibrational mode	Infrared intensity
1.33 THz	twist (out of plane)	0.0717
4.98 THz	butterfly (out of plane)	0.3216
7.28 THz	bending (in plane)	0.2783