

大規模ナノ炭素構造と無限リボンにおける 振動位相差とラマン活性の相関

(電通大院情報理工) ○浅見陸・山北佳宏

Correlation between vibrational phase difference and Raman activity in
carbon nano structures and ribbons

(Graduate School of Informatics and Engineering, Univ. of Electro-Communications)

○Riku Asami, Yoshihiro Yamakita

We calculated the vibrational dispersion relations for graphene nanoribbons (GNR) using the MO/8 model. This force field can treat off-diagonal interactions between distant CC bonds in polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) with eight parameters. It allows normal-coordinate calculations for large-scale PAHs with good accuracy. The vibrational dispersion curves were obtained depending on the phase difference between neighboring repeating units. The vibrational patterns of the large-scale PAHs were also obtained by the MO/8 model, and analyzed with respect to the phase difference. Correlations between the vibrational patterns and Raman intensities between GNRs (zigzag, armchair) and PAHs (D_{2h} , D_{3h}) were clarified with the help of DFT calculations.

Keywords : *graphene nanoribbon; dispersion relation; polycyclic aromatic hydrocarbons; phase difference; Raman activity*

グラフェンやカーボンナノチューブなどの大規模ナノ炭素構造を持つ炭素材料は、電子デバイスなどへの応用が期待されている。グラフェンを無限長のリボンとして切り出した構造を持つグラフェンナノリボン(GNR)の振動特性は、Yamada ら^[1]によってこれまで明らかにされている。そこで無限系の GNR および有限系の様々な形状を持つ多環芳香族炭化水素(PAH)における位相差の議論に興味を持たれる。

本研究では、GNR や様々な形状の PAH を対象に、PAH 内の CC 結合間の相互作用を考慮した面内基準振動力場(MO/8 モデル)を使って振動状態を計算した。また、無限系と相関する有限 PAH のラマン強度は DFT 計算を用いて計算した。計算レベルは B3LYP/6-31++G(d,p)である。Fig. 1 は zigzag 端を持つ GNR の D モード相当の振動モードを示す。GNR は太線で示した繰り返し単位の集合と考えることができ、単位間には振動の位相差が存在する。全ての振動状態を位相差 θ の関数である振動分散関係で表すことができる。Fig. 1 のモードは単位間で振動方向が逆であり、位相差 $\theta = \pi$ の振動である。Fig. 2 はヘキサセン 2 分子が縮合した有限 PAH の振動モードを示した。位相差 $\theta = \pi$ とみなすことができ、Fig. 1 と対応している。また、Fig. 3 は同分子のラマンスペクトルである。1580 cm^{-1} 付近の強いラマン活性は G モードであり、位相差 $\theta = 0$ である。一方 D モードと $\circ$ 囲みの部分は弱い。それは位相差の存在に由来する。Fig. 2 の ν_{124} も弱いラマン活性を示すモードに該当し、D モードと帰属した。弱いラマン活性は振動の位相差による分極の相殺作用によって理解でき、強いラマン活性は同位相振動に由来する。armchair 端を持つ GNR および D_{2h} 、 D_{3h} 対称性を持つ大規模 PAHs についても系統的に整理できる。

【参考文献】 [1] M. Yamada, Y. Yamakita, K. Ohno, *Phys. Rev. B* **77**, 054302, 1-13(2008).

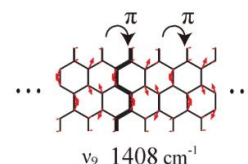


Fig. 1. Vibrational mode of zigzag nanoribbons with phase difference $\theta = \pi$.

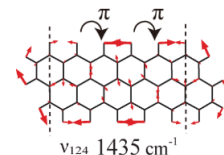


Fig. 2. Vibrational mode of PAH with phase difference $\theta = \pi$.

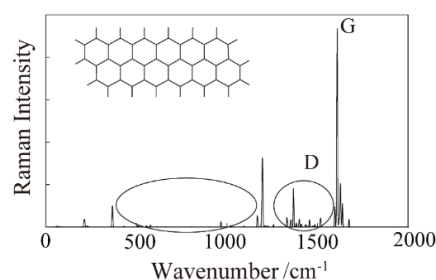


Fig. 3. Raman activity of PAH with finite structure.