

Perylene-3,4,9,10-tetracarboxylic dihydride(PTCDA)の テラヘルツ吸収ピークの帰属解析

Attribution analysis of absorption peaks in terahertz spectrum of

Perylene - 3,4,9,10 - tetracarboxylic - dihydride (PTCDA)

○千葉大融合科学¹, 大塚電子², 産業技術総合研究所³

○金 春梅¹, 泉谷 悠介², 北岸 恵子², 都築 誠二³, 折田 秀夫³, 大須賀 敏明¹

Chiba Univ.¹, Otsuka Electronics², Nat'l Inst. Advanced Industrial Science and Technology³

○Jin Chunmei¹, Yusuke Izutani², Keiko Kitagishi², Seiji Tsuzuki³, Hideo Orita³, Toshiaki Osuga¹

E-mail: artisankoshik@yahoo.co.jp

物質に固有のテラヘルツスペクトルの吸収ピークは、結晶の振動モードに対応すると考えられ解析された報告がある¹。結晶の周期境界と密度汎関数理論で計算する結晶振動は、測定されたピークの周波数に一致する。本研究では 4THz 以下の結晶振動は、格子振動と同様に温度エネルギーが各振動モードに割り当てられることに注目して、吸収ピークの周波数と吸収強度を計算して実験と合う傾向を得た。

同じ温度エネルギーによる振動でも、周波数の高い振動モードほど分子が変形する部分が多く 振動のエネルギーも大きく振幅は小さくなるのがわかった。従って、吸収強度を決める電荷の移動は小さく、結晶のテラヘルツ吸収スペクトルは、2 THz を中心として±1 THz の幅に集中した吸収ピークを作ることが判明した。分子の並進と回転の振動も分子の変形を伴い、この吸収ピークを構成することを解明した。

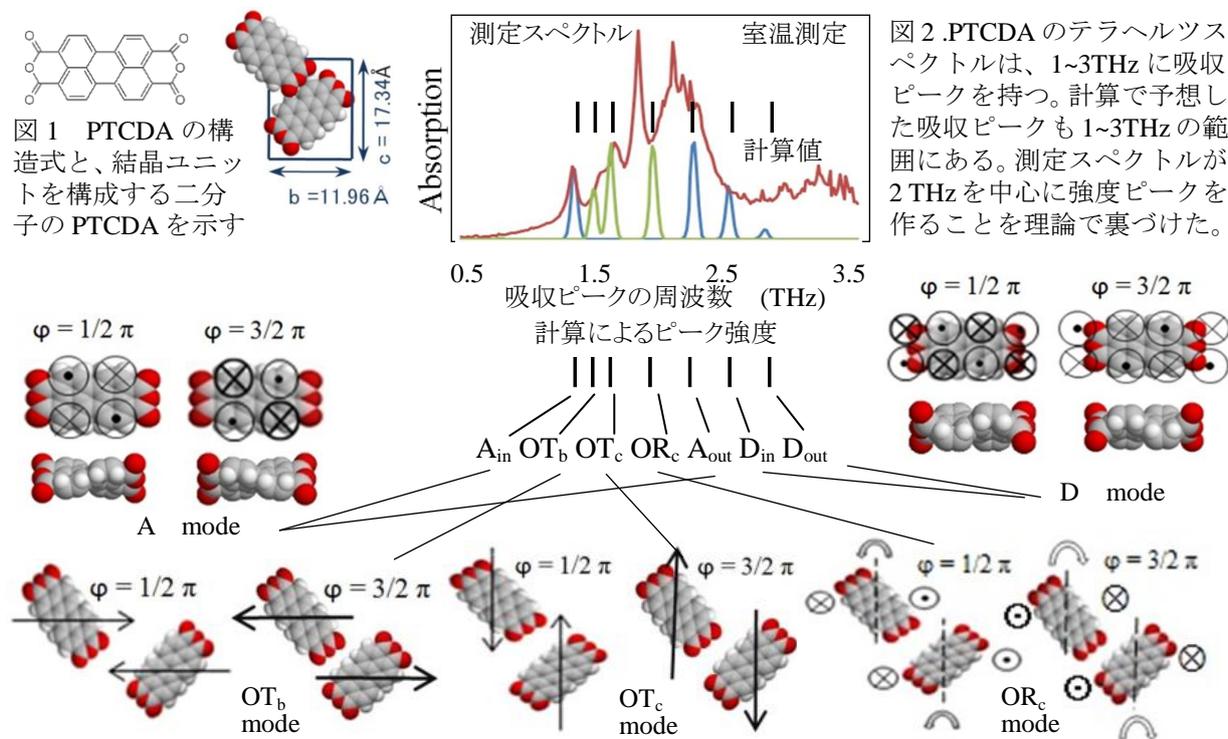


図 3 1~3THz の吸収ピークを構成する PTCDA の 5 種類の振動モードにおける原子の変位方向
 (⊗は紙面の向こう側、⊙は紙面のこちらへ向かう方向)

参考文献

1) P.M. Hakey, M.R.Hudson, D. G.Allis, W. Ouellette and T. M. Korter *J. Phys. Chem.* **113** 13013 (2009).