

ラマン分光法によるグラファイト様物質の同位体効果

Raman spectroscopic investigation of the isotopic effects in graphite

森下 和彦 [1]; 奈良 雅之 [2]; 松田 准一 [3]

Kazuhiko Morishita[1]; Masayuki Nara[2]; Jun-ichi Matsuda[3]

[1] 阪大・理・宇宙地球科学; [2] 東医歯大・教養; [3] 阪大・理・宇宙地球

[1] Earth and Space Science, Osaka Univ.; [2] Coll. Lib. Arts Sci., Tokyo Med. Dent. Univ.; [3] Earth and Space Sci., Osaka Univ.

[はじめに]

隕石中には、重い希ガスの大部分を担っている“Q”と呼ばれる相がある。Qが持つ希ガスは太陽系の希ガスの代表成分であり多くの研究がされているが、Q単体の取り出し例はなく、その主成分が炭素物質であることが報告されている。近年、炭素材料の構造評価にX線回折測定法と同じく、レーザーラマン分光法が用いられるようになった。炭素物質のラマンスペクトルをとると、主に2つのピークGバンド(1580cm^{-1})とD1バンド(1350cm^{-1})が現れる。Gバンドの起源については E_{2g} 振動モードであることがよく知られているが、D1バンドの起源については諸説あり、K点まわりでのフォノンが関係するという考え方や、結晶対称性の緩和によって A_{1g} 振動モードがラマン活性になるという考え方などが報告されている。今回、ラマン分光における同位体効果の測定結果をもとにD1等のバンドの起源について考え、グラファイト物質の結晶対称性等の評価を試みた。

[サンプルと実験]

^{12}C アモルファスカーボン(純度99.9%、Feを3.9ppm含む)、 ^{13}C アモルファスカーボン(純度99.0%、Feを9.7ppm含む)を同位体効果検証のためのサンプルとした。また鉄隕石であるElbogen(Graphite・Diamond含む)をサンプルに加えて結晶対称性の評価を行った。測定には東京医科歯科大学教養学部にあるKaiser社の顕微ラマン分光装置を用いた。励起光はYAGレーザー(532nm、約3mW)、ビーム径は2マイクロメートルだった。

[結果と考察]

ほとんどのサンプルにおいて、5成分のラマンピークをもったスペクトルが得られた。 ^{12}C カーボンでのピーク位置は低波数から順にD1バンド(1350cm^{-1})、Gバンド(1580cm^{-1})、D2バンド(1620cm^{-1})、G'バンド(2700cm^{-1})、D''バンド(2950cm^{-1})である。 ^{13}C のピーク位置を ^{12}C と比較したところ、5つのバンドすべてにおいて低波数シフトがみられ、変化の割合は0.96であった。この値はちょうど $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ の質量比のルートに一致する。2原子分子における簡単な格子振動モデルを用いると、この変化の割合が説明できることから、5つのバンドはすべて伸縮モードに由来するものであるということが確かめられた。

結晶性の評価にはグラフェンシートのa軸の長さを求めるための公式(Knight Formula)を用いた。さらにGバンドの肩に見られたD2バンド(1620cm^{-1})を用いD1バンドと比較したところ同等の評価ができることがわかった。このことから今までに用いられてきたKnightの公式を書き換えることができ、D2バンドもD1バンドとならんでグラファイトの結晶対称性の評価の指標になると思われる。