

研究タイトル：

## 原子層物質の共鳴ラマン分光



物理学  
物性物理学

氏名： 佐藤 健太郎 / SATO Kentaro E-mail: kentaro@sendai-nct.ac.jp

職名： 准教授 学位： 博士(理学)

所属学会・協会： 日本物理学会, フラーレン・ナノチューブ・グラフェン学会

研究分野： 物性物理学

キーワード： グラフェン, カーボンナノチューブ, 原子層物質, 共鳴ラマン分光, 物性理論

技術相談

提供可能技術：

- ・原子層物質, 特にグラフェンの共鳴ラマンスpekトルの理論計算および解析
- ・カーボンナノチューブの光学遷移エネルギーの理論計算および解析
- ・共鳴ラマン分光によるグラフェンやカーボンナノチューブの試料評価における理論的解析

### 研究内容：

炭素原子からなる原子1個分の厚さのシートであるグラフェンや、グラフェンを円筒形にしたカーボンナノチューブは様々な応用が期待されている炭素材料である。グラフェンを少数枚重ねた少数層グラフェンの物性は積層構造に依存し、またカーボンナノチューブの物性も立体構造に依存することが知られている。積層構造や立体構造の制御法の開発は基礎研究および応用研究にとって重要であり、また作成した試料に含まれる少数層グラフェンやカーボンナノチューブの結晶構造を正確に素早く評価する方法の開発も重要である。グラフェンやカーボンナノチューブ試料の評価には共鳴ラマン分光が世界中で一般的に使われている。共鳴ラマン分光からは格子振動や電子状態に関する情報が得られる。グラフェンとカーボンナノチューブにおけるラマンスpekトルと結晶構造、また入射光エネルギーとの関係が理論的に解明されていれば、実験における試料評価の指針となると期待される。

本研究では、カーボンナノチューブやグラフェンの電子状態、フォノン分散関係、電子とフォノンまた電子と光子の相互作用を計算するプログラム群、それらをまとめてラマンスpekトルを計算するプログラムを作成、改良し、グラフェンとカーボンナノチューブの光物性についての理論的な研究を実験グループとの共同研究を通しておこなってきた。

例えば、図1のような3層グラフェンのABA積層とABC積層という二つの積層構造はMバンドと呼ばれるラマンピークから判別できることを理論計算と共同研究者らによる実験値から求めた入射光と散乱光のエネルギー差(ラマンシフト)と入射光エネルギーの関係との比較から明らかにした。特にMバンドからグラフェンの層数だけではなく、ABA積層とABC積層といった積層の違いも判別できることを示した点が重要である。

また、図2のように上下の層が角度 $\theta_w$ だけずれて重なった2層グラフェンは特定の $\theta_w$ と入射光エネルギーの組み合わせにおいて光吸収が増強されることが知られている。電子状態の計算値と共同研究者らにより測定されたラマンスpekトルの解析から $\theta_w$ と入射光エネルギーの関係を求めたことにより、共鳴ラマン分光を利用したグラフェンの基礎・応用研究に対して一つの指針を示した点が重要である。

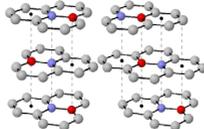


図1. 3層グラフェンのABA積層(左)とABC積層(右)の結晶構造。

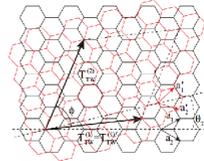


図2. 上(赤色)と下(黒色)の層が角度 $\theta_w$ だけずれて重なった2層グラフェンの結晶構造。

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)

名称・型番(メーカー)	