

探針増強ラマン散乱によるキラル分子の振動モード評価

大阪大学大学院 工学研究科 服部 卓磨

目的 実験で得られたヘリセン分子の探針増強ラマン散乱スペクトル(TERS)を、理論計算と比較する

内容 gaussian16により、ヘリセン分子の構造最適化並びにラマン振動モードのDFT計算を行った

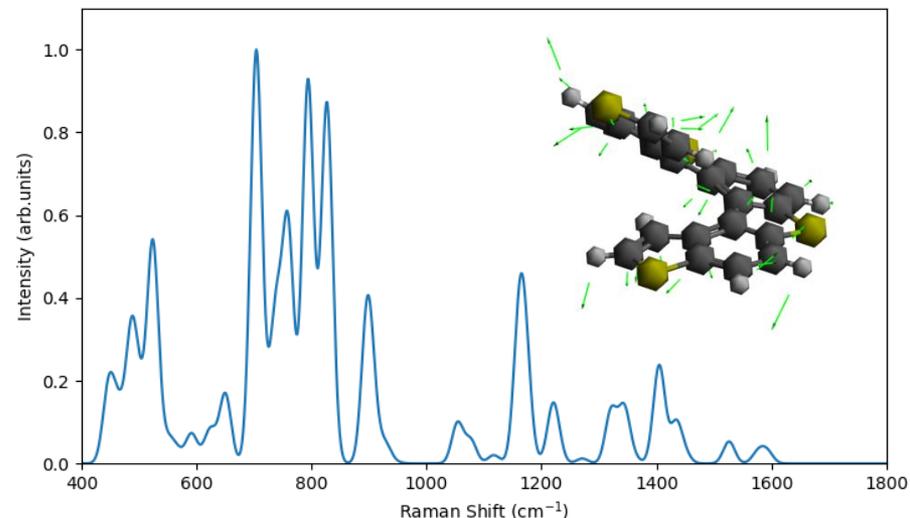
結果 ラマンスペクトルの理論計算値が、実験値と一致したため、目的の分子のTERSスペクトルが測定できていることを確認した。また、振動モードを帰属した。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ

OCTOPUS

282時間
46GB



DFT計算によるヘリセン分子のラマンスペクトル