

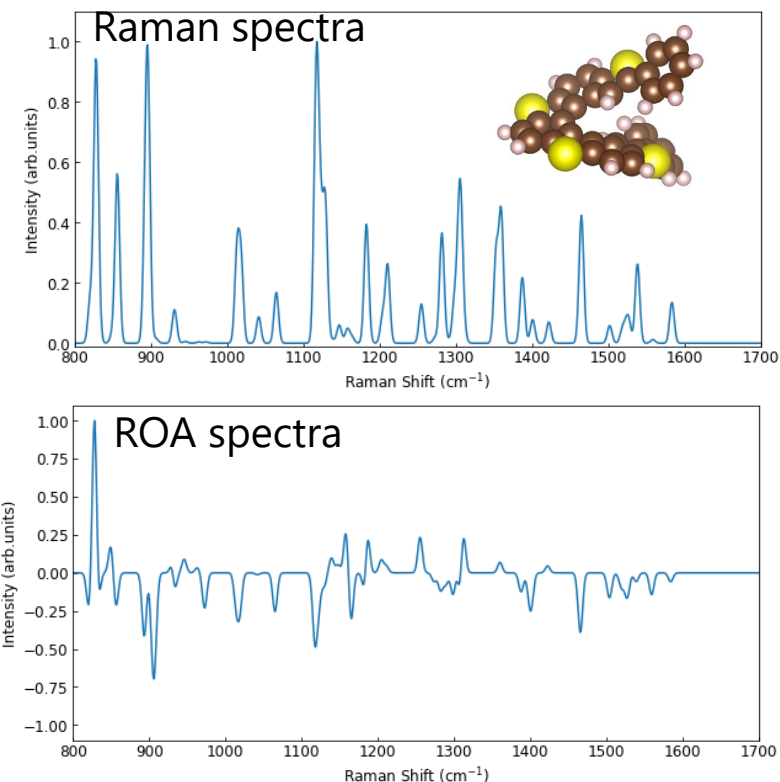
# 探針増強ラマン散乱と密度汎関数理論によるヘリセン分子の光学活性評価

大阪大学大学院工学研究科 服部卓磨

探針増強ラマン散乱は、ナノスケールという高い空間分解能で分子のラマンスペクトルを取得できる手法である。一方で、単分子レベルであるがゆえに、空間平均されたラマンスペクトルとは異なり、分子の配向によってスペクトル形状が異なる。そのため、配向に依存したラマンスペクトルを計算し、実験データと比較した。

OCTOPUSのgaussian16を用いて、実験で用いているヘリセン分子(図中の分子)のラマンスペクトルをDFTで計算した。配向を考慮すると、実験結果とよく一致することがわかった。また、現在ROAスペクトルを実験的に取得することを試みており、DFT計算結果を取得した。

利用した計算機 OCTOPUS 汎用CPUノード群  
ノード時間 4,655 時間  
gaussian16を使用



図：DFT計算によって得られたヘリセン分子のラマンスペクトルとROAスペクトル(図中にモデル分子を示す。茶色：C 黄色：S, 白色:H)