

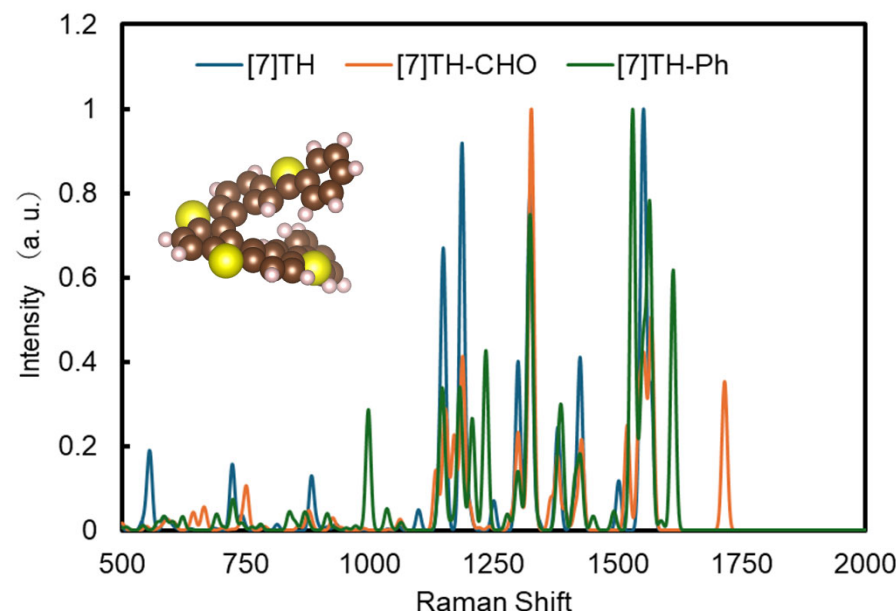
探針増強ラマン散乱と密度汎関数理論によるヘリセン分子の光学活性評価

大阪大学大学院工学研究科 服部卓磨

分子のラマンスペクトルを高分解能で取得できる探針増強ラマン散乱は、単分子レベルでの置換基や、吸着構造、配向性などを調べることができる画期的な測定手法である。一方で、測定時のレーザー光による熱や光刺激によって分子が破壊されてしまう可能性があり、理論計算と比較して議論することが必要不可欠である。

そこで、OCTOPUSのgaussian16を用いて、実験で用いているさまざまなヘリセン分子のラマンスペクトルをDFTで計算を行った。置換基の違いによって、スペクトルが異なっており、特に1630cm⁻¹付近に見られるジフェニルヘリセン特有のスペクトルは、実験で得られた探針増強ラマン散乱の結果とよく一致した。

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([7]TH), ジアルデヒドヘリセン([7]TH-CHO), ジフェニルヘリセン([7]TH-Ph)のラマンスペクトル (図中内にヘリセンのモデル分子を示す。茶色：C 黄色：S, 白色:H)