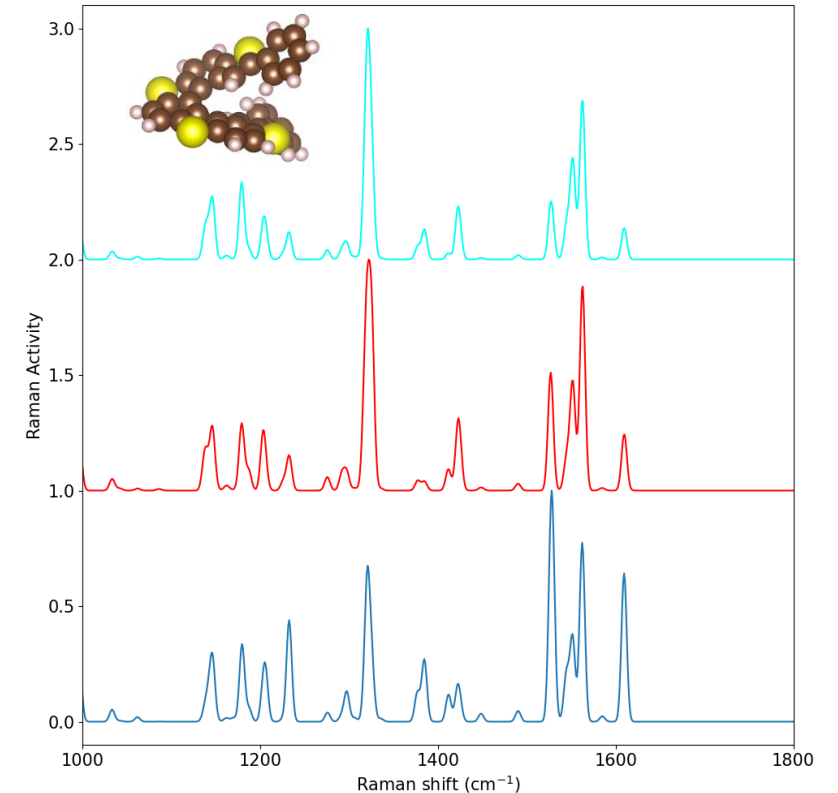


探針増強ラマン散乱と密度汎関数理論による ヘリセン分子の光学活性評価

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（TERS）は、単分子レベルで、ラマン分光を計測することができる。空間平均された通常のラマンスペクトルとは異なり、基板への吸着による分子の配向の変化によって、ピーク強度比が異なることがある。そこで、SQUIDのgaussian16を用いて、我々がTERS測定に用いているジフェニルヘリセン分子（右図）のラマンスペクトルの計算を行った。まず、実験で得られたTERSスペクトルと、理論計算のラマンスペクトルは、振動モードの位置がよく一致した。次に計算で得られた分極率をもとに、分子を回転させた場合のラマンスペクトルの変化を評価した。その結果、特に 1630cm^{-1} 付近に見られるジフェニルヘリセンのフェニル基由来のピークは、分子の向きに応じて、ラマンスペクトルの強度が大きく変化することが分かった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
gaussian16を使用



図：DFT計算によって得られたヘリセン分子 ([7]TH) 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)。下が空間平均された分子のラマンスペクトル。真ん中、上は孤立分子を回転させたときのスペクトル。