

## 光電場＋古典電子分子動力学法による 水液相の非共鳴表面増強ラマン散乱シミュレーション

(防衛大<sup>1</sup>) ○ 山田 篤志<sup>1</sup>

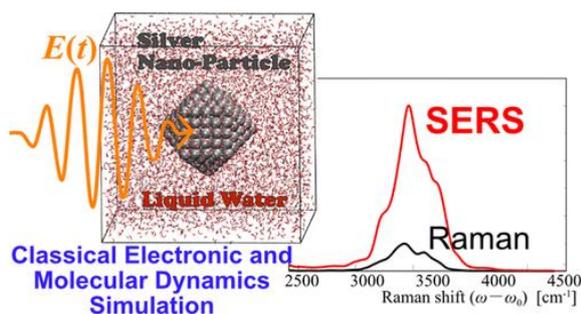
Light electric field + classical electronic and molecular dynamics simulation of nonresonant surface-enhanced Raman scattering of liquid water (<sup>1</sup>*Department of Applied Chemistry, National Defense Academy of Japan*) ○Atsushi Yamada<sup>1</sup>

We have applied our recently developed simulation, light electric-field + classical electronic and molecular dynamics [1,2], to nonresonant surface-enhanced Raman scattering (SERS) spectroscopy to verify the simulation method[3]. The method is capable of treating plasmon resonance excitation of metal by incorporating classical equation of motion of free electrons into metal force-field. We analyzed signal enhancement process of the Raman scattering of liquid water containing a metal nanoparticle under the visible electric field.

**Keywords :** *SERS, Light + classical electronic and molecular dynamics simulation, plasmon resonance, metal nanoparticle, liquid water*

我々は近年、可視領域での溶液内金属の光応答を原子レベルかつ優れた計算効率で記述可能にするための新たな分子シミュレーションを開発した[1,2]。これは力場による分子動力学法の枠組みに金属内自由電子の古典運動ならびに光振動電場を組み入れた計算手法である（光電場＋古典電子分子動力学法）。この手法を用いることにより、可視領域における光吸収やプラズモン共鳴励起といったナノ金属の光応答を時間領域で記述することができる。また、分極可能力場モデルを溶媒分子の光 - 分子相互作用に利用することで、非共鳴な領域での光電場に対する電子分極、ラマン散乱、溶媒効果等を適切に取り入れることができる。

今回は上記手法を水液相に対する非共鳴表面増強ラマン分光（SERS）の系へ適用した[3]。金属ナノ粒子を含む水溶液に対して可視光を入射すると、金属粒子によるプラズモン共鳴により、水液相のラマン散乱シグナルが大きく増強される。従来の計算研究は単一低分子を標的とした SERS であったのに対し、本研究は液相の扱いが可能になった。本講演では、こうした近接場分光に対する本手法の有効性を検証した結果を報告する。



- 1) A. Yamada, "Classical electronic and molecular dynamics simulation for optical response of metal system", *J. Chem. Phys.*, **155**, 174118 (2021)
- 2) A. Yamada, "Computational analyses of plasmonics of a silver nanoparticle in a vacuum and in a water solution by classical electronic and molecular dynamics simulations", *J. Phys. Chem. A*, **126**, 4762 (2022)
- 3) A. Yamada, "Molecular Simulation Study of Surface-Enhanced Raman Scattering of Liquid Water", *J. Phys. Chem. A*, *To be published* (2023) : <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.3c05027>