

# サーベイ・研究計画

M1 前田

## 1 はじめに

本年度も前年に引き続き、Surface Enhanced Raman Scattering(SERS) についての研究を行いたいと思います。

大きなテーマとしては、「溶液の SERS スペクトルに基づく濃度評価方法の確立」を目指します。

SERS のスペクトルは特に溶液においては大きな不安定性があり、定量的な評価が難しい [1] 問題があります。これはスペクトルが、SERS の発現条件や化学種の吸着方法など様々なパラメータに依存して大きく変化してしまうためだと考えられます。

B4 での研究では、ここに機会学習

## 2 化学種の選定について

B4 での研究で示された通り、Glucose のような SERS 非活性分子の計測は非常に困難です。

B4 での研究での Linker を用いて疑似的に活性化にする手法も、問題をかえって複雑にするばかりで有効な手立てではありませんでした。

幸いなことに SERS 現象と相性の良いチオールやアミドは、多くの生体分子にも含まれており、これらを対象とする方が生体応用という目的整合性に適っていると考えられます。

特に代謝物の SERS 測定は質量分析に代わる高感度分析手法になり得る一方で、十分なスペクトルライブラリすら確立されておらず、十分に研究が進んでいない [2] ため、良い測定対象だと思われます。

最終的には細胞代謝物の測定などの応用実験も行えると考えます。グルタチオンやシステインなどの代謝物 SERS 測定は慶應義塾大学医学部でも行われています [3]。

このような対象分子を見据えつつも、まずは Rhodamine 6G などの SERS 活性分子を標準試料として、定量分析手法の研究を優先して行いたいと考えております。

ラボ内先行研究では標準試料として Rhodamine 6G のみが用いられていますが、一種類では不十分であり他の物質 (Crystal violet など) を用いた検討が必要だと思われます。また、Rhodamine 6G はアミドの増強であり、4-mercaptobenzoic acid などのチオールでの増強も標準試料として検討したほうがより良い指標になるのではないかと考えています。

## 3 SERS 発現条件について

ポリスチレンビーズに銀を蒸着する手法は、2008 年頃から [4] から報告されており、研究室内でもパラメータの最適化が行われてきました。

しかしながら単純ラマンとの比較のみで、他の手法との比較がなされていない、という問題が挙げられます。標準試料の不十分さも踏まえ、さらなる比較検討が必要だと考えられます。

また、最近では金属酸化物による SERS 発現も報告されており [5]、材料・手法双方の観点から再検討が必要です。

## 4 スペクトルの定量化について

## 5 Surface Enhanced Raman Scattering(SERS) と

SERS を扱う研究分野は多岐にわたりますが、大きく分けて 3 つのテーマが中心となっていると考えています。

### 1. SERS の物理的性質に関するテーマ

論文例: 1. Quantizing single-molecule surface-enhanced Raman scattering with DNA origami meta-molecules <https://advances.sciencemag.org/content/5/9/eaau4506>

### 2. SERS スペクトルの分析に関するテーマ

近年のデータ科学の発展に伴って、分析化学の分野においても、より複雑で大規模なスペクトルデータを取り扱うようになった。Raman、SERS も例外ではなく、

論文例: 1. Deep learning and artificial intelligence methods for Raman and surface-enhanced Raman scattering

### 3. SERS 現象の応用に関するテーマ

## 参考文献

- [1] Xin Gu *et al.* ANNU REV ANAL CHEM., **11**, 147 (2018)
- [2] Lindy M. Sherman *et al.* Talanta.,**210**, 120645 (2020)
- [3] Megumi Shiota *et al.* Nat. Commun., **9**, 1561 (2018)
- [4] Kwan Kim *et al.* J COLLOID INTERF SCI.,**318**, 195 (2008)
- [5] Meysam Keshavarz *et al.* Nanoscale Horiz.,**2**, 294 (2020)

Recent progress in surface-enhanced Raman spectroscopy for biological and biomedical applications: from cells to clinics

Deep learning and artificial intelligence methods for Raman and surface-enhanced Raman scattering  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0165993619305783>