

令和 2 年 5 月 22 日現在

機関番号：10101

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K14428

研究課題名(和文)多重極相互作用を取り込んだ近接場光励起のための第一原理分子動力学法の構築

研究課題名(英文)Ab initio molecular dynamics with the multipolar interaction for near-field photoexcitation

研究代表者

岩佐 豪 (Iwasa, Takeshi)

北海道大学・理学研究院・助教

研究者番号：80596685

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：物質近傍に局在する近接場光は双極子禁制励起を可能とし、新たな光化学反応の場としての応用が期待されているが、近接場光と分子の相互作用の理解を深めるためには双極子近似を超えた手法開発が必要になる。本研究では、近似前のハミルトニアンに立ち返って近接場光と分子の相互作用を定式化し、近接場光励起のEhrenfest分子動力学法を開発した。また、金属吸着分子の構造や電子物性および四重極励起などの双極子禁制励起状態における反応経路の解析、電場計算を取り込んだ振動励起、および近接場光による単分子共鳴ラマン分光実験の解析も行った。今後は、近接場光化学反応の研究に向けた、断熱的な方法論の開発を進めていく。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近接場光は伝搬光にはない局在性という特徴を持ち、双極子近似を超えた光学応答や、伝搬光とは異なる光化学反応も報告されている。また伝搬光は回折限界があるため、その空間分解能は波長の半分程度に制限されるが、近接場光ではこのような制限がなくなる。最近には特に走査型プローブ顕微鏡と組み合わせた実験も出てきており、単分子の分子内振動イメージングなどの原子レベルの分解能を持った分光や、単分子の光化学反応の誘起と解析も可能になってきている。近接場光と分子の相互作用から出てくる新しい科学を理解・開拓していくためには、双極子近似を超えた理論化学に基づいた本手法が必要であり、今後も更に発展させていく。

研究成果の概要(英文)：Near field, a highly localized non-uniform light field around a surface, can excite a molecule to dipole-forbidden excited states and can induce unexpected photochemical reactions. To understand the interactions between the near-field and molecule, a theoretical method beyond the widely used dipole approximation is required. We have developed a theory starting from the original form of the Hamiltonian before the dipole-approximation. The theory is applied to an Ehrenfest molecular dynamics. In addition, we studied structural and electronic properties and relaxation pathways in dipole-forbidden excited states of pure and adsorbed molecules relevant to the near-field excitations. Near-field vibrational excitations including near-field IR and Raman spectroscopic experiments have also been studied by means of an integrated computational chemistry and computational electrodynamics technique. In the future, a diabatic method for near-field photochemistry will be developed.

研究分野：分子物理学、物理化学、量子化学

キーワード：近接場光 多重極ハミルトニアン Ehrenfest分子動力学

1. 研究開始当初の背景

近接場光とは物質近傍に局在した伝搬しない電磁場成分であり、物質の形状やサイズに依存した振る舞いを示す。ナノメートルスケールの微小な空孔や金属短針を用いることで、局所的な光励起や回折限界を超えた空間分解能を有する局所顕微分光を可能とする。電磁場の空間的な局在は急峻な強度勾配を持つことを意味し、双極子禁制励起や非線形光学応答を引き起こすことができる。

近接場光技術の進展は目覚ましく、研究開始当時では顕微分光に加えて、光化学反応場として興味深い現象が報告されていた。凹凸を持つ半導体表面に光照射した際に発生する近接場光による CO₂ 分解や、酸素ラジカルの生成などが報告されており、これらの光化学反応で用いた入射光のエネルギーは、反応に必要なエネルギーよりも低い。本来起こるはずのない反応の機構としては、非断熱過程やフォノンの関与が提案されていた。また表面増強ラマン分光法(SERS)は、金属微粒子に誘起されるプラズモンの近接場を利用することで超高感度な分光測定を可能にする手法であるが、単分子 SERS への応用では対象分子からのシグナルに加えて、対象分子が分解、あるいは化学反応を起こした成分からの寄与も含まれることが報告されていた。金属からの電荷移動が化学反応の要因の一つとされているが、まだ反応機構は解明されていない。

近接場光化学の更なる進展には、これらの提案されている機構の検証に加えて、実験からはまだよく分かっていない動的な過程を明らかにする必要があり、計算化学的なアプローチは必要不可欠である。ただ、通常量子化学計算では近接場光と分子の相互作用を考慮できず、汎用的な計算手法は無かったため、理論的な研究は困難であった。その要因は、近接場光と分子の相互作用においては、通常光と分子の相互作用を考える際に用いられている双極子近似が破綻するからである。伝搬光と分子の相互作用であれば、光の波長は分子に比べて長いので、分子を点双極子として記述できる。通常量子化学計算プログラムでは、双極子近似が前提として励起状態計算が実装されている。一方、近接場光と分子の相互作用には、通常光照射に対応する双極子近似との違いは2点あり、1つめは光源と対象分子の距離が近いので、少なからず互いに影響を及ぼしあうことである。もう1点は、電場が空間的に一様でない事である。その結果、双極子近似を超えた記述が必要になる。近接場光は光源となる物質の形状に依存することから、実際の分子系への適用のためには任意の電場を考慮する必要がある。

研究代表者はこのような近接場光と分子の相互作用に興味を持って、多重極ハミルトニアンに基づいた独自の計算手法を開発してきた。この手法では、量子化学計算から得られる分子の分極をそのまま扱うことにより、無限次までの多重極相互作用を取り込むことができ、また任意の電磁場に適用出来るため、光源となる金属微粒子などの形状に依存する近接場光の取り扱いも容易になる。本研究の開始当初までに、この手法を用いて、近接場光による電子励起を調べて非線形光学応答や特異的な電子励起状態が生成することを明らかにしてきた。また、分子振動励起への拡張によって近接場振動分光の研究も進めてきた。本研究では、近接場光によって誘起される特異的な電子励起状態に基づいた化学反応を明らかにするために、多重極相互作用を考慮した第一原理分子動力学法を開発することで、実際の分子の化学反応に関する知見を得ることができると考えた。

2. 研究の目的

本研究では、近接場光が引き起こす光化学の解析と新たな反応探求を目的として、近接場光と分子の相互作用を露わに取り込んだ第一原理分子動力学法への展開を行う。近接場光による電子励起状態に由来する分子のダイナミクスの解明と方法論の検証を行い、近接場光による光化学反応機構解明に取り組む。併せて SERS 測定中の化学反応に関連する知見を得るための量子化学計算も行う。得られた知見をもとに、新たな光化学反応をもたらす近接場光の提案や、様々なナノ構造体周辺の近接場光中の分子動力学を明らかにして、近接場光を用いた新たな光化学反応の開拓を目指した。

3. 研究の方法

本研究では、近接場光が引き起こす光物理化学現象の解明に向けて、主に多重極ハミルトニアンに基づいた相互作用を取り込んだ第一原理分子動力学法と、実在のナノ構造体周囲に生成する電場を計算した結果を利用する手法を開発する。近接場光による電子励起状態に由来する電子・分子ダイナミクスの計算と解析を行い近接場光による光解離反応や、SERS 測定中の化学反応機構を解明し、新たな光化学反応を開拓する。

4. 研究成果

多重極相互作用に由来する励起状態に対する第一原理分子動力学法の開発

通常の第一原理分子動力学においては、電子と原子核の運動を切り離れた断熱近似を用い、光励起後に特定の電子状態(ポテンシャルエネルギー曲面)上の運動を追跡する。一方、本研究では双極子近似が破綻するような系を中心に研究を行うため、ポテンシャルエネルギー曲面という考え方が適用されるかどうかは自明ではない。過去の研究から近接場光励起では、多数の励起状態が混合することが予想されるため、本研究では複数の電子状態が関与する電子ダイナミクスに基づいた分子動力学法である、Ehrenfest法を用いることにした。

近接場光と分子の相互作用は多重極ハミルトニアンに基づいて記述した。多重極相互作用は電場と分極の内積の空間積分で表現されるが、分極を定義式のまま利用することで、双極子近似などで無視される任意の電場の空間分布の効果を完全に取り込む方法であり、研究代表者がこれまで独自に開発してきた。多重極の効果は有効電場という項で表現でき、そしてこの有効電場は励起状態を計算する際に一度だけ計算するルーチンであり計算コストは従来の分子動力学法とほとんど変わらず、また様々な電子状態プログラムに組み込むことが出来ることが特色である。この多重極相互作用を実時間・実空間差分法を用いる電子ダイナミクスプログラムに実装した。また、分子動力学計算に必要な光によって誘起された電子励起状態でのエネルギー勾配を計算できるようにした。このエネルギー勾配を用いたEhrenfest法での分子動力学に関しては、双極子近似の範囲において、強いレーザー光照射のもとでの水素二原子分子の解離過程に適用を行った。しかし、現在のアルゴリズムでは計算コストが非常にかかることもわかってきたので、今後の課題として計算コストを落とすための時間発展演算子の見直しや、ガウス基底や平面波基底を用いた電子状態計算を利用する方法についても検討を進めていきたい。

多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアン

電子ダイナミクスプログラムに、多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアンを実装して近接場光励起の理論的な記述法についての検証を行った。多重極ハミルトニアンの場合には磁場の効果は無視し、最小結合ハミルトニアンではベクトルポテンシャルを無視した際の両ハミルトニアンを持ちいて電子ダイナミクス計算を比較した結果は良く一致した。また最小結合ハミルトニアンを用いて、近接場光励起のモデル計算においてベクトルポテンシャルの寄与が無視でき、スカラーポテンシャルのみで記述可能なことを明らかにした。

実電場計算と表面増強赤外分光法への応用

金属ナノ構造表面の近接場を利用した表面増強赤外分光法(SEIRAS)では、電場構造を考慮した理論的枠組が必要となる。我々は多重極ハミルトニアンに基づき、任意の電場を考慮できる方法論の開発を行ってきた。本研究では、境界要素法による電場計算を組み込んだ手法開発と、SEIRASへの適用を行った。実験を参考に、図1a-cに示す様に銀ナノ粒子にp-ニトロ安息香酸を吸着させた系を考えた。近接場の計算にはscuff-EMを用い、長径15nm、短径5nmの銀楕円体周辺の電場計算を行った(図1d-e)。図1fにPNBAを一様電場、および近接場で励起した場合の赤外吸収スペクトルを示す。実電場計算を取り込んだ計算結果は実験結果をよく再現しており、IRで見られる1600cm⁻¹のピークはSEIRASでは消失しており、電場方向に振動成分を持つNO₂とCO₂の対称振動が強く応答している。

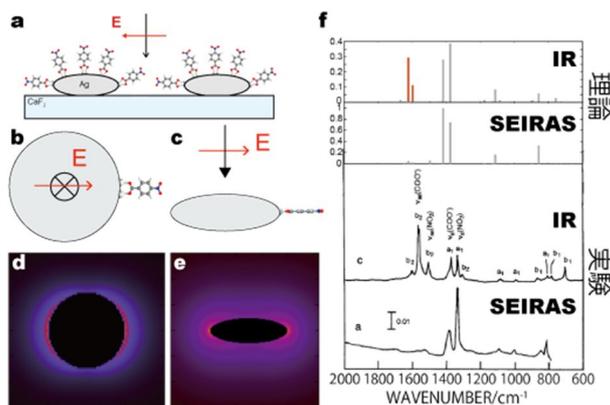


図1. (a) SEIRASの模式図、(b) 銀ナノプレートの上面図と(c) 側面図、(d) 銀ナノプレート周りの電場強度分布の上面図と(e) 側面図、(f) 理論および実験[M. Osawa et al., Appl. Spectrosc. 47, 1497, (1993)]でのIRとSEIRAS。

合金材料を用いた表面増強ラマン分光

近接場光と分子の相互作用の実際の系として、合金材料を用いた表面増強ラマン分光実験を対象として実験グループとの共同研究を行い、実験、電場計算、量子化学計算を用いた解析を行った。電場の計算ではFinite-difference time-domain法を用いて、金属表面の荒さを取り込んだモデルで計算を行ったが、金、銀、および金銀合金において顕著な違いは見られなかった。一方で、量子化学計算としてDFT-D3法で分子吸着構造の計算を行ったところ、合金への吸着では比較的

表面が乱れやすいことが分かった。ラマンスペクトルは実験結果を定量的に再現できなかったが、表面吸着に関する知見は得ることができた。

表面増強ラマン分光における電荷移動励起状態に対する共鳴効果と長距離補正汎関数の重要性

表面増強ラマン分光では、金属ナノ構造体に生成するプラズモンの近接場がそのラマンスペクトルの増強に大きな役割を果たすとされてきた。本研究では電荷移動型の励起状態に着目した計算を行い、共鳴効果の重要性を指摘した。金属ナノ粒子を Ag_{20} でモデル化し、その周囲に生成する電場の増強度も検討したが、電場増強よりも電荷移動励起状態の共鳴効果の方が影響が大きいことを、少なくとも小さな金属クラスターを用いた表面増強ラマンにおいては見いだした。また電荷移動状態の励起状態の記述には長距離補正汎関数を利用することも重要である。

STM-TERS を用いた単分子共鳴ラマン効果

通常の表面増強ラマン分光では金属ナノ粒子の表面に吸着した多数の分子からのシグナルを観測している。本研究では、走査型プローブ顕微鏡 (STM) の探針を利用した単分子の共鳴条件下での探針増強ラマンスペクトル (TERS) の実験結果に対して、分子周りの電場の検討とラマンテンソル解析などを行い、その選択則に対しては近接場の表面水平成分が重要性であることを明らかにした。本研究と同じ STM 探針周りの近接場を用いた光化学反応の実験も報告されており、本研究で得た近接場の分布などの知見は近接場化学の研究においても重要となる。

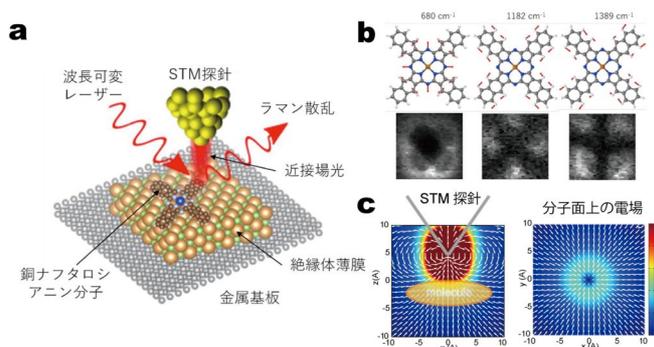


図 2. (a) STM-TERS の模式図、(b)振動モードと STM-TERS イメージング図、(c)STM-TERS における電場の様子。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 17件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 M. Takenaka, T. Taketsugu, T. Iwasa	4. 巻 152
2. 論文標題 Combined Computational Quantum Chemistry and Classical Electrodynamics Approach for Surface Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 164103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5143855	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 R. B. Jaculbia, H. Imada, K. Miwa, T. Iwasa, M. Takenaka, B. Yang, E. Kazuma, N. Hayazawa, T. Taketsugu, Y. Kim	4. 巻 15
2. 論文標題 Single-molecule resonance Raman effect in a plasmonic nanocavity	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 105-110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41565-019-0614-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 T. Tsuneda, T. Iwasa, T. Taketsugu	4. 巻 151
2. 論文標題 Roles of silver nanoclusters in surface-enhanced Raman spectroscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 94102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5111944	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 T. Machida, T. Iwasa, T. Taketsugu, K. Sada, K. Kokado	4. 巻 -
2. 論文標題 Photo-Induced Pyramidal Inversion Behavior of Phosphines Involved with the Aggregation-Induced Emission (AIE) Behavior	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry-A European Journal	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.202000264	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Raman K. Singh Takeshi Iwasa Tetsuya Taketsugu	4. 巻 39
2. 論文標題 Insights into geometries, stabilities, electronic structures, reactivity descriptors, and magnetic properties of bimetallic NiCu _m -m (m=1, 2; n=3-13) clusters: Comparison with pure copper clusters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1878-1889
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25361	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yasuchika Hasegawa, Yui Miura, Yuichi Kitagawa, Satoshi Wada, Takayuki Nakanishi, Koji Fushimi, Tomohiro Seki, Hajime Ito, Takeshi Iwasa, Tetsuya Taketsugu, Masayuki Gon, Kazuo Tanaka, Yoshiki Chujo, Shingo Hattori, Masanobu Karasawa and Kazuyuki Ishii	4. 巻 54
2. 論文標題 Spiral Eu(III) coordination polymers with circularly polarized luminescence	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 10695-10697
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CC05147J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Kiritoshi, T. Iwasa, K. Araki, Y. Kawabata, T. Taketsugu, S. Hinokuma, and M. Machida	4. 巻 8
2. 論文標題 Supported binary Cu _x catalysts with high activity and thermal stability for the combustion of NH ₃ as a carbon-free energy source	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 41491-41498
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8RA07969B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Takenaka, Y. Hashimoto, T. Iwasa, T. Taketsugu, G. Seniutinas, A. Balcytis, S. Juodkazise, Y. Nishijima	4. 巻 40
2. 論文標題 First principles calculations toward understanding SERS of 2,2'-bipyridyl adsorbed on Au, Ag and Au-Ag alloy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 925-932
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25603	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yusuke KONDO, Rina TAKAHARA, Hirono MOHRI, Makito TAKAGI, Satoshi MAEDA, Takeshi IWASA, Tetsuya TAKETSUGU	4. 巻 18
2. 論文標題 Structural and Electronic Properties, Isomerization, and NO Dissociation Reactions on Au, Ag, Cu Clusters	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry-Japan	6. 最初と最後の頁 64-69
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2018-0044	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Iwasa, T. Sato, M. Takagi, M. Gao, A. Lyalin, M. Kobayashi, K. Shimizu, S. Maeda, T. Taketsugu	4. 巻 123
2. 論文標題 Combined Automated Reaction Pathway Searches and Sparse Modeling Analysis for Catalytic Properties of Lowest Energy Twins of Cu ₁₃	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 210-217
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b08868	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 S. Hinokuma, K. Araki, T. Iwasa, S. Kiritoshi, Y. Kawabata, T. Taketsugu, and M. Machida	4. 巻 123
2. 論文標題 Ammonia-rich combustion and ammonia combustive decomposition properties of various supported catalysts	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Catalysis Communications	6. 最初と最後の頁 64-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.catcom.2019.02.005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Shichibu, M. Zhang, T. Iwasa, Y. Ono, T. Taketsugu, S. Omagari, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, K. Konishi	4. 巻 123
2. 論文標題 Photoluminescence Properties of [Core+exo]-Type Au ₆ Clusters: Insights into the Effect of Ligand Environments on the Excitation Dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 6934-6939
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b01810	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M. Ebina, Y. Kondo, T. Iwasa, T. Taketsugu	4. 巻 58
2. 論文標題 Low-lying Excited States of hqxCH and Zn-hqxc Complex: Toward Understanding Intramolecular Proton Transfer Emission	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4686-4698
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b00410	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ebina Masanori, Iwasa Takeshi, Harabuchi Yu, Taketsugu Tetsuya	4. 巻 122
2. 論文標題 Time-Dependent Density Functional Theory Study on Higher Low-Lying Excited States of Au ₂₅ (SR) ₁₈ -	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 4097 ~ 4104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b12723	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kokado Kenta, Machida Takashi, Iwasa Takeshi, Taketsugu Tetsuya, Sada Kazuki	4. 巻 122
2. 論文標題 Twist of C=C Bond Plays a Crucial Role in the Quenching of AIE-Active Tetraphenylethene Derivatives in Solution	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 245 ~ 251
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b11248	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshiaki Nishijima, Shogo Shimizu, Keisuke Kurihara, Yoshikazu Hashimoto, Hajime Takahashi, Armandas Balcytis, Gediminas Seniutinas, Shinji Okazaki, Jurga Juodkazyte, Takeshi Iwasa, Tetsuya Taketsugu, Yoriko Tominaga, and Saulius Juodkazis	4. 巻 25
2. 論文標題 Optical readout of hydrogen storage in films of Au and Pd	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Optics Express	6. 最初と最後の頁 24081 ~ 24092
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OE.25.024081	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Seki Tomohiro, Tokodai Noriaki, Omagari Shun, Nakanishi Takayuki, Hasegawa Yasuchika, Iwasa Takeshi, Taketsugu Tetsuya, Ito Hajime	4. 巻 139
2. 論文標題 Luminescent Mechanochromic 9-Anthryl Gold(I) Isocyanide Complex with an Emission Maximum at 900 nm after Mechanical Stimulation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of The American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 6514 ~ 6517
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b00587	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 戸田敬二郎、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 近接場光によるジメチルジスルフィド光解離反応の理論研究
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 竹中将斗、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 チップ増強ラマン分光イメージングの理論研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩佐豪、竹中将斗、武次徹也
2. 発表標題 近接場光が誘起する電子励起状態
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Takenaka, Y. Hashimoto, T. Iwasa, T. Taketsugu, G. Seniutinas, A. Balcytis, S. Juodkazise, Y. Nishijima
2. 発表標題 Computational studies of Adsorption and SERS spectra of 2,2'-Bipyridyl on Au, Ag, and Au-Ag Nanoalloy
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 竹中将斗、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 プラズモン増強ラマン分光法における電磁気学的増強に関する理論研究
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岩佐豪、海老澤修一、武次徹也
2. 発表標題 近接場光と分子の相互作用：多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアンの比較
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 竹中将斗、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 非一様電場下でのラマン分光計算手法の開発
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岩佐豪
2. 発表標題 双極子近似を超えた光と分子の相互作用：未知の光学現象と光反応と分子科学の未来
3. 学会等名 分子研研究会 光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岩佐豪、竹中将斗、武次徹也
2. 発表標題 近接場光励起の電子・分子ダイナミクス
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 竹中将斗、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 プラスモン場を用いたラマン分光理論
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岩佐豪、海老澤修一、武次徹也
2. 発表標題 近接場光と分子の相互作用：多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアンの比較
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 海老澤修一、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 近接場光励起の電子ダイナミクス
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2018年冬季研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Masato Takenaka, Takeshi Iwasa, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Theoretical Study on Near-field Infrared Absorption Spectroscopy using the Multipolar Hamiltonian
3. 学会等名 CPMD2017 Workshop
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 竹中将斗、岩佐豪、武次徹也
2. 発表標題 近接場光による分子の電子励起の理論研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論階
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

https://wwwchem.sci.hokudai.ac.jp/~qc/member/takeshi_iwasa/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----