

先端増強線形・非線形ラマン散乱における非局所応答理論 —単一分子の電子共鳴と多重極効果—

大阪大学 基礎工学研究科物質創成専攻芦田研究室 五十川 弘行

目的： 先端増強ラマン散乱(TERS)による単一分子観察について、電子禁制遷移を介した散乱や非線形応答(TECARS)を利用した新奇の測定を提案する。

内容： 理論を新たに構築し、ペンタセン分子に対して電子禁制TERS像、TECARS像を計算・検証を行なった。特に、分子の電子軌道、振動の計算においてSQUID汎用CPUノードを使用した。

結果： 電子禁制遷移からのTERSでは、許容遷移からのTERSを超える振動選択性を持った測定が可能となることを示した(図1)。また、TECARSがTERSを超える空間分解能を有することも示した。

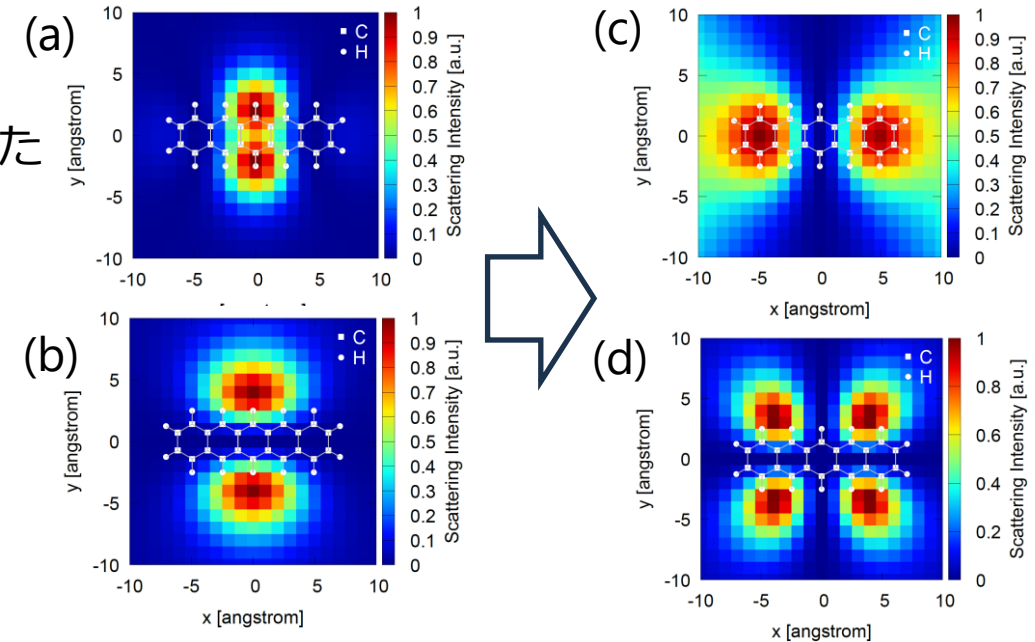


図1. (a)(b)は電子許容遷移を介した、二つの分子振動に関するTERS像。(c)(d)は同じ振動に対して、電子禁制遷移を介したTERS像。(a)(b)では酷似した分子像が示されているが、(c)(d)では顕著な違いが現れている。

Adapted from Ikagawa et al.,
Nano Letters(2026),

<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5c06490>,
licensed under CC BY 4.0.