

2023 年度年次報告書

革新的な量子情報処理技術基盤の創出

2021 年度採択研究代表者

大戸 達彦

名古屋大学 大学院工学研究科

准教授

第一原理計算と量子アルゴリズムをつなぐ多階層計算手法の開発

研究成果の概要

Ru 錯体分子ワイヤーに代表される、分子鎖長が増大しても電気伝導度の減衰が緩やかな分子の電気伝導機構については、電子が散乱を受けずに伝導するトンネル伝導なのか、分子振動を伴って伝導するホッピング伝導なのかが長年議論になっていた。2つの伝導機構を同時に記述することができるランダウアー・ビュティカープローブモデルを用いると、トンネル伝導では熱起電力が長さに依存して増大する一方、ホッピング伝導では熱起電力の長さ依存性がなくなることが予測された。実験ではトンネル伝導からホッピング伝導に至る長さまでの電気伝導度は観測できなかったため、さらに詳細な伝導機構の解明は今後の課題となる。そのために測定が必要な物理量の1つとして、電流によってどのような分子振動が励起されるかの指標を光量子アルゴリズムによって計算した。ホッピング電流が流れる際、分子は非常に短い時間、電子が1つ抜けた状態になり、再び電子が入ってきて安定な状態に戻るという過程を繰り返す。電子状態によって安定な構造は異なるため、電子の状態変化前後で変わる分子振動の重なり大きさはフランクコンドン因子と呼ばれ、この因子が大きいほど分子振動が励起されやすい。このフランクコンドン因子を、光量子コンピュータ上で動作するガウシアンボソンサンプリングによって計算した。電子状態の変化に伴う分子振動の変化を干渉などの光子への操作へ置き換えることで、そこを通過する光子が確率的に、実際の振動遷移に伴うエネルギーに出力されやすくなる。現状では計算速度は古典計算機に遅れをとるが、ガウシアンボソンサンプリングは光量子コンピュータによって古典計算機よりも高速に実行できるとされ、計算量が大きくなるにつれて光量子コンピュータの優位性が増すと期待される¹⁾。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Seebeck Effect in Molecular Wires Facilitating Long-Range Transport”, Jiung Jang, Jeong Woo Jo, Tatsuhiko Ohto, and Hyo Jae Yoon; *J. Am. Chem. Soc.* **146**, 4922 (2024).
- 2) “Durable high-entropy non-noble metal anodes for neutral seawater electrolysis”, Fumiya Shiokawa, Aimi Asilah Haji Tajuddin, Tatsuhiko Ohto, Yue Yu, Takeshi Fujita, Hisanori Tanimoto, Zeyu Xi, Samuel Jeong, and Yoshikazu Ito; *Chem. Eng. J.* **479**, 147862 (2024).
- 3) “Dynamic Variation of Rectification Observed in Supramolecular Mixed Mercaptoalkanoic Acid”, Gyu Don Kong, Jiung Jang, Suin Choi, Gayoung Lim, In Soo Kim, Tatsuhiko Ohto, Seiya Maeda, Hirokazu Tada, and Hyo Jae Yoon; *Small* **20**, 2305997 (2024).
- 4) “Suppression of Methanol and Formate Crossover through Sulfanilic-functionalized Holey Graphene as Proton Exchange Membranes”, Samuel Jeong, Tatsuhiko Ohto, Tomohiko Nishiuchi, Yuki Nagata, Jun-ichi Fujita, and Yoshikazu Ito; *Adv. Sci.* **10**, 2304082 (2023).
- 5) “Deposition Condition Impacts Charge Tunneling and Thermoelectric Properties of N-Heterocyclic Carbene Monolayers”, Hungu Kang, Jiung Jang, Gyu Don Kong, Sangmin Jung, Tatsuhiko Ohto and Hyo Jae Yoon; *J. Mater. Chem. A* **11**, 16233 (2023).