	研究代表者	静岡大学・電子工学研究所・特任准教授 柳澤 啓史 (やなぎさわ ひろふみ)	研究者番号: 40454128
	研究課題 情報	課題番号: 24B201 キーワード: 1 分子、量子、電子顕微鏡、計算科学	研究期間: 2024年度~2026年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか (研究の背景・目的)

●研究の全体像

本研究は 1 分子電子源の学理を追求し、さらにそれを量子デバイス応用へとつなげていくプロジェクトである。1 分子電子源は、図 1 (a) に示すように金属針の上に形成される 1 分子突起であり、この 1 分子から電子が放出され 1 分子電子源となる。1 分子電子源を用いることで、現在のコンピュータスイッチの千倍から百万倍速い超高速 1 分子スイッチが作製でき、さらには 1 分子の量子性を用いることで、そのような超高速スイッチを 1 分子につめこむ技術の開発が期待されている。このように、1 分子電子源はその特異な量子性を用いることで、これまでないデバイスの作製が期待されている。一方で、1 分子電子源の詳細な構造や電子状態はまだまだ分かっていないことが多く、その学理構築は完全になされていない。結果としてデバイス応用への妨げとなっている。学理構築のためには、より高度な計算モデルの構築、より精密な原子構造観察、より詳細な電子状態観察が必要になってくる。我々は異なる分野のチームが集まることで、それを達成しようと考えた。ここでは図 1 (b) が示すように鬼頭、大島、柳澤の 3 つのチームが集まることでこれを達成する。本プロジェクトでは、これに並走して、1 分子電子源の量子デバイスとしての応用を推し進める。そのために、量子の専門家である Lambert チームが加わり、柳澤チームと連携することで、実験と理論の両側面から新奇・量子機能の開拓・検証を行う。

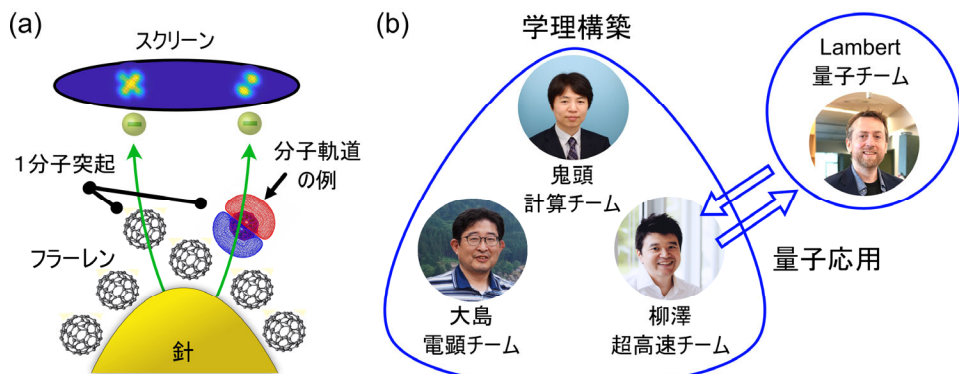


図1 (a) 1 分子電子源と(b)研究領域のイメージ図

● 1 分子電子源の特徴 (顕微鏡としての応用)

1 分子電子源の興味深いところは、これを活かして、1 分子中の電子の分布 (分子軌道) が観測できることである。分子軌道とは、図 1 (a) に示すような、1 分子中での特異な電子の分布、このような特異な分布はまさに電子の持つ“量子性”を表している。図 1 (a) で示すように、1 分子から放出された電子の分布をスクリーンに投影して見ることで、これら分子軌道を観察することができる。

● 1 分子電子源の特徴 (1 分子へスイッチ集積化)

分子軌道は電子のエネルギーの違いによりその分布が変化する。これも電子の量子性の 1 つである。1 分子電子源のもう一つの興味深い特徴として、放出される電子のエネルギーを光を用いて変えることで、観測する分子軌道を変えることができる。例えば図 2 のように A と B の違う分子軌道があった場合、光を用いることで電子を A の分子軌道から出したり、B の分子軌道から出したりと制御することが可能で、実際に図 1 (a) の顕微鏡を用いることでその変化を観測することができる。この機能を用いると、1 分子にそのサイズを変えることなく超高速スイッチをどんどんと詰め込むことが可能になってくる。通常スイッチを並べれば、どんどんとデバイスの大きさが変わり大きくなるが、このスイッチでは 1 分子からサイズが変わらない。どのくらいスイッチを詰め込めるか? はまさにこのプロジェクトの主たるテーマの一つである。さらにこの量子性を用いることで、新奇量子デバイスの開発も期待されている。

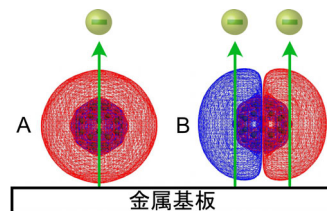


図2 1 分子電子源を光駆動した際の分子軌道のスイッチングイメージ図

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●プロジェクトの目標

1 分子電子源の学理構築のために、ここでは次の 3 つのことを達成する。1. 1 分子の電子状態の詳細を明らかにできる新奇電子顕微鏡を開発、2. 1 分子電子の詳細な構造を観測するための顕微手法の確立、そして、3. その原子構造・電子状態を精度よく予測・解析できる新規計算手法の構築。この 3 点を達成することで、1 分子電子源のすべてを理解し、デバイス応用の基盤を構築する。ここで構築した手法により、図 3 に概念的に示したように、より多くの超高速スイッチを 1 分子に集積化する技術の確立を目指す。また、1 分子電子源の量子応用のために、これを用いた量子ビットの作製が可能かどうかの検証を実験・理論の両面から行う。

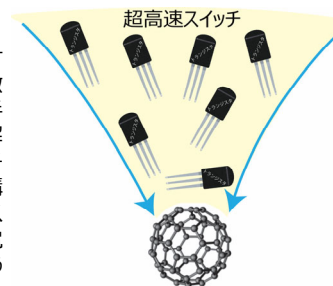


図3 超高速スイッチの 1 分子集積化のイメージ図

● SmoleQ ネットワークの構築

本プロジェクトのキーワードは“1 分子”、“量子”である。これらの言葉から、プロジェクトを Single Molecule Quantum (SmoleQ) と名付けた (呼び方はスモール Q)。我々はこのプロジェクトを推進する過程で、SmoleQ のネットワークを広げていく。その際には 1 分子電子源の枠組みに狭くとらわれることなく、夢のあるような研究をされている研究者とネットワークを構築することを目標とする。興味深い研究と我々の研究が如何に相互作用を及ぼし、どうしたら新しいものが生み出せるのか? といった観点からネットワークの構築を行っていく。ネットワーク拡大のために、具体的には国内外問わず関連する技術を持った研究者にセミナーをお願いし、また小規模・中規模のワークショップを開催することで、ネットワークの拡大に努める。SmoleQ プロジェクトで構築したネットワークを基に、大きな学術領域を創出し、さらに大きなプロジェクトを開始することを目標とする。

●アウトリーチ活動の推進

SmoleQ プロジェクトで使用する、1 分子電子源を用いた顕微鏡法は非常に構築が簡単で、顕微鏡を安価に作製されることが期待される。通常、分子軌道のような量子の世界の観察には数千万円の装置を購入する必要があるが、この顕微鏡では価格を 100 分の 1 から 10 分の 1 に抑えられる。これを基に小・中高や高校でも量子の世界 (分子軌道) が気軽に見ることのできる電子顕微鏡の開発が期待される。この顕微鏡開発に Quantum Kids Project (QKP) が現在立ち上がっており、QKP と SmoleQ が並走することで、QKP の目標を達成し、実際の教育現場で量子の世界が見られるように努力する。

