

令和 2 年 4 月 15 日現在

機関番号：17102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K14440

研究課題名(和文)分子集合体における量子干渉現象の予測と制御

研究課題名(英文) Prediction and control of quantum interference phenomena in molecular assemblies

研究代表者

辻 雄太 (Tsuji, Yuta)

九州大学・先導物質化学研究所・助教

研究者番号：80727074

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題は分子集合体における量子干渉現象の予測と制御を目的として、2017年度から2019年度にかけて実施された。本研究の研究成果は約20報の原著論文として発表された。その中でも特に顕著なものとして、以下のものがあげられる。(1)量子干渉現象のグラフ理論的解釈の確立、(2)ジラジカル性と量子干渉現象の相関を利用した分子設計、(3)非交互炭化水素分子における量子干渉現象の予測法の確立、(4)(1)～(3)の理論を用いたスタック分子集合体系における量子干渉現象の予測と制御

研究成果の学術的意義や社会的意義

研究成果の学術的意義：本研究課題では非常に重要な量子現象である量子干渉現象をさまざまな理論化学的ツールを用いて解析し、それをさらに複雑な系へと応用していく際に重要となる基礎概念を確立することに成功した。この成果はさまざまな量子技術への展開において重要であり、非常に大きな学術的意義を持つだろう。

研究成果の社会的意義：量子干渉現象にはさまざまな応用が考えられる。例えば、高機能分子デバイスや太陽電池などである。これらのデバイスの性能向上のための重要な基礎研究として本研究は位置づけられ、非常に大きな社会的意義を有している。

研究成果の概要(英文)：This research project was carried out from FY 2017 to FY 2019 to predict and control quantum interference phenomena in molecular assemblies. The results of this study have been published in about 20 original papers. Among the most prominent of these are the following: (1) Establishment of graphical theoretical interpretation of quantum interference phenomena, (2) molecular design using the correlation between diradical character and quantum interference phenomena, (3) establishment of a method for predicting quantum interference phenomena in non-alternant hydrocarbon molecules, and (4) prediction and control of quantum interference phenomena in  $\pi$ -stacked molecular assembly systems using the theories of (1) to (3).

研究分野：理論化学

キーワード：量子干渉 分子デバイス 分子エレクトロニクス 分子伝導 コンダクタンス グリーン関数

## 1. 研究開始当初の背景

単一の分子が電極間に挟まれたナノ構造体(単分子接合)はナノスケールにおける電荷輸送の基礎的なメカニズムを研究するための興味深い対象となるだけでなく将来的なナノエレクトロニクスデバイス開発の重要な足掛かりとなる[1]。

単分子接合では、その極小のサイズのために古典的な電子回路とは一線を画した量子力学的な物性がいくつか発見されている。その一つに量子干渉現象(Quantum Interference)がある[2]。

近年、量子干渉の理論的解析およびそれを用いた新規デバイスの開拓が国内外で非常に注目を集めている。また、最近では分子の様々な物性や化学概念と量子干渉との間に密接な関係があることが次第に明らかになりつつある。量子干渉は分子エレクトロニクスの範囲だけにとどまらず、化学全体に大きな影響を与えるポテンシャルを有している。

## 2. 研究の目的

これまでのところ、量子干渉は単分子の共役系でのみ報告されている。しかし、最近ではスタックにより形成された分子集合体などの伝導度測定がなされ、そこでは量子干渉と考えなければ説明がつかない現象が見つかっている[3]。従って、本研究計画では分子集合体における量子干渉の発現メカニズムの解明、予測、制御を三本柱とし、将来的な分子デバイスの設計へとつなげることを目的とした。

## 3. 研究の方法

本研究では量子干渉の解析にグリーン関数法[4]を用いる。グリーン関数  $G$  は電極表面から分子に流れ込んだ電子の波動関数の係数とみなすことができる。二つの異なる経路を通った電子の波動関数が互いに逆の位相を持っていれば量子干渉が起きる。それは即ちそれぞれのグリーン関数が逆の位相を持っている状態である。既に我々はグリーン関数の位相から量子干渉を判定する手法を確立している[5]。本研究ではその手法を更に発展させ、量子干渉現象を研究することとした。

## 4. 研究成果

本研究の成果は主に以下の5つである。

### (1) 非交互炭化水素における量子干渉現象の解析

これまでに様々な量子干渉現象の解釈が提出されてきたが、そのほとんどが交互炭化水素に対するものであり、非交互炭化水素における量子干渉現象の理解や予測手法が求められてきた。我々は分子を電極に接続する際に用いる硫黄などのリンカーに着目し、それらの官能基上にある p 軌道が局在しやすいという特徴を使って効果的に非交互炭化水素における量子干渉現象を予測する手法を提案し、第一原理計算を用いてその手法の有効性を確認した。

### (2) グラフ理論による量子干渉現象の解析

分子は原子と結合からなるが、数学的にはノードとエッジからなるグラフとして理解することが可能である。これはグラフ理論と呼ばれる分野である。我々はグラフ理論における隣接行列とヒュッケル法におけるハミルトニアンとの類似性に着目し、分子の伝導性を予測できるグラフ理論的な指標として隣接行列の逆行列を提案した。さらに、隣接行列の逆行列はケイリー・ハミルトンの定理により、隣接行列の  $n$  乗の和で書くことができることを証明した。隣接行列の  $n$  乗はグラフ上の  $n$  歩の歩数と関係しており、交互炭化水素における伝導性や量子干渉現象がその分子に対応するグラフ上の歩数と関係づけられることを示した。

### (3) 分子伝導と分子長の関連についての研究

通常、分子ワイヤは長くなるほど分子伝導性は減衰することが知られている。これは伝導性がトンネル効果によってもたらされていることを考えれば当然のことであろう。しかしながら、量子干渉現象が起きる系の伝導性は通常のトンネル効果として理解することはできず、興味深い現象が発現する。我々は量子干渉現象によって分子伝導性が増幅される系に着目し、分子ワイヤの長さが長くなるにつれて伝導性がさらに高くなるという興味深い分子系を見出した。さらに、そのような分子ワイヤを設計するための指針を確立した。

### (4) 分子並列回路における量子干渉現象と芳香族性との関係

分子を分子グラフとして考えた場合、環状の分子は並列回路に対するグラフとしてみなすことができる。一方で、環状の共役系には芳香族性という重要な指標もある。近年、芳香族性と分

子伝導性の関係が指摘されている。共役系の直鎖分子が並列化されることによって、環状となり、量子干渉によって伝導性が増幅されたりあるいは打ち消しあったりする現象を、その環状分子の芳香族性と関連付けて理解することが可能であることをフロンティア軌道論に基づいて示した。

#### (5) スタック系における量子干渉

これは本研究課題の最終目的である。我々は(1)~(4)の研究で得た知見をもとにスタック系における量子干渉現象を解析・予測する手法を提案し、それに基づいてスタック系での量子干渉現象をコントロールすることが可能であるということを明らかにした。また、スタック系におけるこのような量子干渉の変化はそのほかの物性とも密接に関係していることが示唆され、今後の研究展開がさらに期待される。

#### 【参考文献】

- [1] Jia, Chuancheng, et al. "Covalently bonded single-molecule junctions with stable and reversible photoswitched conductivity." *Science* 352.6292 (2016): 1443-1445.
- [2] Schwarz, Florian, et al. "Charge Transport and Conductance Switching of Redox Active Azulene Derivatives." *Angewandte Chemie International Edition* 55.39 (2016): 11781-11786.
- [3] Frisenda, Riccardo, et al. "Mechanically controlled quantum interference in individual  $\pi$ -stacked dimers." *Nature chemistry* 8.12 (2016): 1099.
- [4] Datta, Supriyo. *Lessons from nanoelectronics: a new perspective on transport*. Vol. 1. World Scientific publishing company, 2012.
- [5] Tsuji, Yuta, et al. "Quantum interference in polyenes." *The Journal of chemical physics* 141.22 (2014): 224311.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件／うち国際共著 9件／うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Okazawa Kazuki, Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 124
2. 論文標題 Understanding Single-Molecule Parallel Circuits on the Basis of Frontier Orbital Theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3322 ~ 3331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b08595">https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b08595</a>	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 Tsuji Yuta, Hori Mikiya, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 59
2. 論文標題 Theoretical Study on the Electronic Structure of Heavy Alkali-Metal Suboxides	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1340 ~ 1354
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b03046">https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b03046</a>	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 Tsuji Yuta, Hashimoto Wataru, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 92
2. 論文標題 Lithium-Richest Phase of Lithium Tetrelides Li <sub>7</sub> Tt <sub>4</sub> (Tt = Si, Ge, Sn, and Pb) as an Electride	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1154 ~ 1169
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1246/bcsj.20190040">https://doi.org/10.1246/bcsj.20190040</a>	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 Tsuji Yuta, Estrada Ernesto	4. 巻 150
2. 論文標題 Influence of long-range interactions on quantum interference in molecular conduction. A tight-binding (H <sub>2</sub> ckel) approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204123 ~ 204123
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1063/1.5097330">https://doi.org/10.1063/1.5097330</a>	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 Singha Rajib Kumar, Tsuji Yuta, Mahyuddin Muhammad Haris, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 123
2. 論文標題 Methane Activation at the Metal-Support Interface of Ni <sub>2</sub> CeO <sub>2</sub> (111) Catalyst: A Theoretical Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 9788 ~ 9798
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b11973">https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b11973</a>	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 Gu Junjing, Wu Wei, Stuyver Thijs, Danovich David, Hoffmann Roald, Tsuji Yuta, Shaik Sason	4. 巻 141
2. 論文標題 Cross Conjugation in Polyenes and Related Hydrocarbons: What Can Be Learned from Valence Bond Theory about Single-Molecule Conductance?	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 6030 ~ 6047
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1021/jacs.9b01420">https://doi.org/10.1021/jacs.9b01420</a>	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 Tsuji Yuta, Kitamura Yasuhiro, Someya Masao, Takano Toshihiko, Yaginuma Michio, Nakanishi Kohei, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 4
2. 論文標題 Adhesion of Epoxy Resin with Hexagonal Boron Nitride and Graphite	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 4491 ~ 4504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00129">https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00129</a>	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 OKAZAWA Kazuki, TSUJI Yuta, YOSHIZAWA Kazunari	4. 巻 18
2. 論文標題 Theoretical Study on the Relation between the Frontier Orbital and the Conductance in Aromatic Single-Molecular Parallel Circuits	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 227 ~ 229
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.2477/jccj.2019-0038">https://doi.org/10.2477/jccj.2019-0038</a>	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 Tsuji Yuta, Estrada Ernesto, Movassagh Ramis, Hoffmann Roald	4. 巻 118
2. 論文標題 Quantum Interference, Graphs, Walks, and Polynomials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Reviews	6. 最初と最後の頁 4887 ~ 4911
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemrev.7b00733	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 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 149
2. 論文標題 Effects of electron-phonon coupling on quantum interference in polyenes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 134115 ~ 134115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1063/1.5048955">https://doi.org/10.1063/1.5048955</a>	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 Stuyver Thijs, Zeng Tao, Tsuji Yuta, Geerlings Paul, De Proft Frank	4. 巻 18
2. 論文標題 Diradical Character as a Guiding Principle for the Insightful Design of Molecular Nanowires with an Increasing Conductance with Length	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 7298 ~ 7304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.8b03503	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 Stuyver Thijs, Zeng Tao, Tsuji Yuta, Fias Stijn, Geerlings Paul, De Proft Frank	4. 巻 122
2. 論文標題 Captodative Substitution: A Strategy for Enhancing the Conductivity of Molecular Electronic Devices	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 3194 ~ 3200
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b10877	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 Gu Junjing, Wu Wei, Danovich David, Hoffmann Roald, Tsuji Yuta, Shaik Sason	4. 巻 139
2. 論文標題 Valence Bond Theory Reveals Hidden Delocalized Diradical Character of Polyenes	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 9302 ~ 9316
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b04410	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 Tsuji Yuta, Stuyver Thijs, Gunasekaran Suman, Venkataraman Latha	4. 巻 121
2. 論文標題 The Influence of Linkers on Quantum Interference: A Linker Theorem	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14451 ~ 14462
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b03493	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 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 121
2. 論文標題 Frontier Orbital Perspective for Quantum Interference in Alternant and Nonalternant Hydrocarbons	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 9621 ~ 9626
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b02274	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

〔学会発表〕 計31件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 共役系の導電経路と伝導度の関係に関する理論的研究
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 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 単一分子スケールにおける電気伝導と導電経路の関係性
3. 学会等名 九重分子科学セミナー2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 馬場太基、村田裕幸、辻雄太、鶴見直明、眞砂紀之、吉澤一成
2. 発表標題 金とエポキシ樹脂の界面における接着相互作用の理論的研究
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 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 フロンティア軌道論に基づいた 共役系の伝導度と導電経路の関係性の解明
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 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 単分子並列回路におけるフロンティア軌道と伝導度の関係
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019 秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 フロンティア軌道論に基づく単分子並列回路の電気伝導の理論的研究
3. 学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻雄太、橋本航、吉澤一成
2. 発表標題 リチウムテトラライドの電子状態に関する理論的研究
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 辻雄太、橋本航、吉澤一成
2. 発表標題 リチウムテトラライドの電子状態
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019 秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀幹矢、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 ルビジウム亜酸化物の電子状態に関する理論的研究
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 堀幹矢、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 ルビジウム亜酸化物の理論的研究
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 吉田 将隆、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 5d 遷移金属表面による触媒的窒素固定の理論的研究
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 吉田 将隆、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 遷移金属表面における触媒的窒素固定の反応機構解析
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 吉田 将隆、斎藤 雅史、蒲池高志、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 2成分合金表面によるメタン活性化制御の触媒インフォマティクス
3. 学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻 雄太、橋本航、吉澤一成
2. 発表標題 リチウムテトラライドの電子状態
3. 学会等名 統合物質機構 第5回国内シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻 雄太、橋本航、吉澤一成
2. 発表標題 新規エレクトライド物質の探索
3. 学会等名 第13回 物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻 雄太、吉澤一成
2. 発表標題 Mathematical Approach for Molecular Conduction
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻 雄太、吉澤一成
2. 発表標題 Adsorption and Activation of Methane on the (110) Surface of IrO <sub>2</sub>
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻 雄太
2. 発表標題 新規エレクトライド物質の探索
3. 学会等名 2019年度DV-X 研究協会特別講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻 雄太、橋本航、堀幹矢、吉澤一成
2. 発表標題 How to discover new electrides
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 堀幹矢、辻雄太、吉澤一成
2. 発表標題 重アルカリ金属亜酸化物の電子状態に関する理論的研究
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 将隆、斎藤 雅史、蒲池高志、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 2成分合金表面によるメタン活性化の触媒インフォマティクス
3. 学会等名 ESICB触媒・電子論合同検討会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 将隆、斎藤 雅史、蒲池高志、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 Informatics study on Methane Activation on binary alloy
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 栗野 啓太、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 -プラチナ酸化物表面上でのメタン活性化に関する理論的研究
3. 学会等名 日本化学会第100回春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 Effects of Electron-Phonon Coupling on Quantum Interference in Polyenes
3. 学会等名 IRCCS The 2nd International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 辻雄太
2. 発表標題 "Activation of Methane on the Surface of Rutile-Type Metal Dioxides"
3. 学会等名 A Satellite Symposium to celebrate Prof. Kenichi Fukui's 100th birthday (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 辻雄太、Roald Hoffmann、Joel Miller
2. 発表標題 Ir錯体の電子物性に関する理論的研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2017春季年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 辻雄太、Roald Hoffmann、Joel Miller
2. 発表標題 Ir(CO)3Clの伝導性に関する理論的研究
3. 学会等名 第11回 分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 辻雄太、Roald Hoffmann
2. 発表標題 らせん状ポリエンの構造と物性に関する理論的研究
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2017秋季年会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa
2. 発表標題 Frontier Orbital Perspective for Quantum Interference in Alternant and Nonalternant Hydrocarbons
3. 学会等名 IRCCS-JST CREST Joint Symposium “Chemical sciences facing difficult challenges” (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa
2. 発表標題 Quantum Interference in Molecular Conductance through Alternant and Non-Alternant Hydrocarbons
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuta Tsuji, Kazunari Yoshizawa
2. 発表標題 Frontier Orbital Perspective for Electron Transport in Alternant and Nonalternant Hydrocarbons
3. 学会等名 ICPAC2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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