

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 電子内部自由度制御型ナノデバイス創製原理の構築

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点)

研究代表者

前川 禎通 (東北大学金属材料研究所 教授)

主たる共同研究者

遠山 貴巳 (京都大学基礎物理学研究所 教授(平成16年10月～20年3月))

小椎八重 航 (仙台電波工業高等専門学校 准教授(平成16年10月～20年3月))

石原純夫 (東北大学大学院理学研究科 准教授(平成16年10月～20年3月))

今村裕志 (産業技術総合研究所ナノテクノロジー研究部門 主任研究員(平成16年10月～20年3月))

土浦宏紀 (東北大学大学院工学研究科 助教(平成16年10月～20年3月))

小池洋二 (東北大学大学院工学研究科 教授(平成16年10月～20年3月))

3. 研究内容及び成果

3-1. 研究実施および成果の概要

遷移金属酸化物等の強相関電子系では、強い電子間の相互作用のため、様々な電子の秩序相(強磁性相、超伝導相等)が競合する。本研究では、多体電子系の様々な数値計算法を用いて、強相関電子系における競合する相の関係を明らかにし、その競合から生じる新奇な量子現象を引き出すとともに、それらを用いたナノデバイスの特性を解き明かすことを目的としている。そして、実験的実証を踏まえながら新しいナノデバイスの創製指導原理を構築しようとした研究である。

本研究は、3年間で数値シミュレーションと実証実験研究を両輪とした「電子内部自由度制御型ナノデバイス創製原理の構築」という新しい研究分野を切り開いた。チームとして大きく括ると次の主要成果を得ている。

(1) 低次元モット絶縁体の光励起電子状態の研究

一次元モット絶縁体では電子励起はスピン励起と電荷励起に分離する。これをスピン電荷分離と呼び、強相関電子系の最も重要な概念の1つである。本研究は、このスピン電荷分離が一次元モット絶縁体の巨大な非線型光学応答を与えることを示すとともに、動的密度行列繰り込み群法により、電子格子相互作用を量子力学的に取り入れた光励起状態の研究を可能にした。

(2) ナノ磁性スピンエレクトロニクス素子におけるスピンホール効果

ナノ磁性体では、スピン流と電流(電荷の流れ)が分離できることを示し、実験グループと共同でいくつか非局所スピンホール素子を完成させた。これは新しいスピンエレクトロニクス素子として注目される。

(3) 強磁性体/超伝導体ナノ構造の量子効果

強磁性体/超伝導体ナノ構造では、強磁性と超伝導の競合により、様々な量子現象が期待される。特に強磁性体を2つの超伝導体ではさんだ素子では 接合と呼ぶ、2つの超伝導体間で位相のねじれた状態が出現する。当プロジェクトでは、このようなナノ構造体での様々な量子現象を提案した。この一連の研究は新しい研究分野として進展している。

(4) 巨大熱起電力を持つ低次元遷移金属酸化物の理論構築と物質探索

スピン及び軌道の自由度による巨大な熱起電力の理論を構築し、それを用いて新しい熱電変換材料、 $\text{Cu}(\text{Cr}, \text{Mg})\text{O}_2$ を開発した。また、この材料を用いて、酸化物のみを用いた熱電発電モジュールの試作を行った。酸化物のみによるモジュールは世界的にも大変ユニークなものである。

(5) 量子モンテカルロ法による物質探索

第一原理計算による物質の電子状態の研究が大きな進展を見せている。しかし、そこには電子相関の効果を十分には取り入れることができず、強相関物質については無力である。そこで、本研究は、第一原理計算で得られた電子構造をモデル化し、得られたモデル系を量子モンテカルロ計算を行う計算プログラムを完成させた。この手法により量子モンテカルロ計算を通して電子相関を十分に取り入れることができる。この手法は、現在、磁性半導体の物質探索に適用されている。

3 - 2 . 研究グループの分担

3 - 2 - 1 . 量子デバイス開発グループ (東北大学金属材料研究所)

- a) パイ接合を含む超伝導量子キュービットの理論
- b) 磁性半導体の物質探索シミュレーション

3 - 2 - 2 . 多体電子系シミュレーショングループ (京都大学基礎物理学研究所、仙台電波工業高等専門学校、東北大学大学院理学研究科、日本原子力研究開発機構、東北大学金属材料研究所)

- a) 一次元モット絶縁体の光励起状態における電子格子相互作用の効果
- b) 二次元モット絶縁体の光励起状態の対称性
- c) 高温超伝導物質の不純物効果の研究
- d) 多層系高温超伝導物質の電子状態の研究
- e) 軌道自由度を用いた熱電応答
- f) 軌道自由度特有の新しい希釈効果の解明
- g) 電子型磁性強誘電体の電気磁気効果
- h) スピン・軌道自由度系での光誘起相転移

3 - 2 - 3 . ナノデバイス理論構築グループ (産業技術総合研究所・ナノテクノロジー研究部門、東北大学金属材料研究所、東北大学工学研究科)

- a) 電流狭窄領域を持つ強磁性ナノ構造における磁気抵抗効果の理論解析
- b) スピンポンピングを用いた強磁性金属の横スピン侵入長の決定
- c) 非局所スピン注入とスピンホール効果
- d) 完全分極した強磁性体を用いたジョセフソン電流のポンピング
- e) トネル磁気抵抗素子における電流誘起磁化反転過程の理論解析

3 - 2 - 4 . 実証実験グループ (東北大学大学院工学研究科)

- a) スピン流の生成による非局所磁気メモリの原理実験
- b) 巨大熱起電力をもつ低次元遷移金属酸化物の探索と単結晶育成
- c) n型熱電変換酸化物の探索
- d) 熱電発電モジュールの試作と発電試験
- e) 巨大熱伝導を持つ低次元遷移金属酸化物の試料作製と巨大熱伝導の実証
- f) ソフト化学法を用いた新しい高温超伝導体の開発

4 . 事後評価結果

4 - 1 . 外部発表(論文、口頭発表等)、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況

3年間という短期の研究期間であったが、 原著論文発表 (国内誌10 件、国際誌98 件Nature Physics 1 件、Phys.Rev.Letters13件を含む。)、 その他の著作物 (総説、書籍など) 8件内英文教科書2点、 学会招待講演 (国内会議9件、国際会議34件)、口頭発表 (国内会議105件、国際会議99件)という成果報告は、多くの優れた研究知見が得られていることを示しており、期待以上である。また国内特許出願4件、海外特許出願2件、は理論及び基礎的研究として大変優れている。特に、スピンエレクトロニクス関連デバイスの特許、熱電変

換材料関連のデバイスは世界的にもきわめてユニークである。本プロジェクトは、基礎研究でありつつ具体的な応用を念頭に置いたものであった証左であり、この点も高く評価できる。

研究プロジェクトは数値シミュレーションと実証実験研究を両輪として、以下の から について研究項目を提案した。さらに研究期間中に新たに第5項目を研究項目を加え、これらについて具体的なデバイスの構成まで踏み込み、多くの成果を挙げた。

低次元モット絶縁体の光励起電子状態の研究： 1次元モット絶縁体におけるスピン励起と電荷励起の分離（スピン電荷励起）が、1次元モット絶縁体における巨大非線形光学応答を与えることを示し、また非線形光学応答の超高速緩和を明らかにすることにより、量子フォノン系と相互作用する多電子系光学励起状態の研究基礎を与えた。

- ・1次元モット絶縁体の巨大非線形光学応答および超高速緩和現象を量子フォノンの効果として、動的密度行列繰り込み群法により取り扱い、電子格子相互作用の重要な効果として説明することに成功した。これは量子フォノンの効果を本格的に扱った方法として、今後の研究の方向性を与えるものと評価できる（多体電子系シミュレーショングループ）。

- ・また2次元モット絶縁体のキャリアドープの効果も厳密対角化法により扱い、その束縛状態の対象性を明らかにし、実験で得られているスペクトルの起源に対する知見を得た（多体電子系シミュレーショングループ）。

ナノ磁性スピンエレクトロニクス素子におけるスピンホール効果： ナノ磁性体では、スピン流と電流（電荷の流れ）が分離できることを示し、他の実験グループ（東大物性研、東北大金研）と共同でいくつか非局所スピンホール素子を完成した。

- ・ボルツマン方程式およびLLG方程式を用いた強磁性ナノ構造の数値シミュレーションプログラムを開発し、電流狭窄構造を持つナノ系の理論解析を行うとともに、スピンプンピングを用いた強磁性金属の（横）スピン侵入長の決定、非局所スピン注入による大きなスピンホール効果および非局所スピン流によって磁化反転が起こることを示し、これにより非局所スピン流を用いた磁気メモリの可能性とデザインに発展する可能性がある（ナノデバイス理論構築グループ）。

強磁性体 / 超伝導体ナノ構造の量子効果： 強磁性体 / 超伝導体ナノ構造では、強磁性と超伝導の競合により、位相もつれ（エンタングル）状態及びそれに伴う様々な量子現象が期待される。このようなナノ構造体での様々な量子現象を提案した。

- ・ジョセフソン接合体での 接合が q -ビット素子としての可能性を持つこと、また大きな外部磁場を使用しないことから、デコヒーレンスの問題も少ないことなど、量子コンピューター素子への応用の可能性を示した（量子デバイス開発グループ）。

巨大熱起電力を持つ低次元遷移金属酸化物の理論構築と物質探索： スピン及び軌道の自由度による巨大な熱起電力の理論を構築し、軌道自由度を用いた熱電応答素子研究の新しい多くの可能性を示唆した（多体電子系シミュレーショングループ）。

- ・シミュレーショングループの提案を用いて新しい熱電変換材料 $\text{Cu}(\text{Cr}, \text{Mg})\text{O}_2$ を開発した。また、この材料を用いて、酸化物のみを用いた熱電発電モジュールの試作を行った。これらは結果的には既存の材料に比べて特段の性能向上は見られていないが、それらは結晶の大きさが十分でないなどの制約によるところも大きく、実験上の課題克服により大きな成果に結びつく可能性もある。また n 型熱電変換酸化物 $\text{La}-\text{Ca}-\text{Mn}-\text{O}$ の優れたゼーベック係数の絶対値、熱伝導率を明らかにし、これらの将来の有効性を示唆している（実証実験グループ）。

量子モンテカルロ法による物質探索： 第一原理計算で得られた電子構造をモデル化し量子モンテカルロ法でそれを取り扱う計算プログラムを完成させた。それは、第一原理電子構造計算の結果をアンダーソンモ

デルに焼きなおし、その量子モンテカルロ計算を行う。この手法により量子モンテカルロ計算を通して電子相関を十分に取り入れることができ、磁性半導体の物質探索に有効に適用された。多体電子論シミュレーションプログラムとしては、ランチョス法による厳密対角化、量子モンテカルロ法、変分モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、有限要素法による非局所スピンダイナミクス、など多くのプログラムが整備されている(量子デバイス開発グループ)。

4 - 2 . 成果の戦略目標・科学技術への貢献

熱電材料に関しては、理論的に大胆な発想に基づき、実験研究を指導するなど大きなガイドラインを示すことができた。強相関電子系の非線形光学応答、スピン・軌道自由度や、磁性体 / 超伝導体接合効果、およびスピン流に基づくデバイス原理提案が精力的になされ、当該分野(強相関エレクトロニクス、スピンエレクトロニクス)の研究動向に影響を与え、この分野の発展大きく貢献した。本プロジェクトは、基礎研究であると同時に(熱電変換や、スピン流デバイスなどにおいて、)具体的な形状に基づいた理論と実験をリードするなどの点で出口もよく意識されている。電子の持つスピンを軌道自由度による電子状態制御の実現とそれに基づく新たな熱電材料開発指針が示され、新たな物質群での熱電材料開発と探索の可能性をもたらすものである。さらに複数の具体的なデバイスも実現され、あるいは提案されており、その意味でもナノ材料に基づく革新エレクトロニクスへの道程を明確に意識した研究プロジェクトであり、今後も理論主導でデバイス設計を行うなどの展開を期待させる。また、理論と実験の共同において新しいスタイルを提示しているという点でも、大きく評価できる。

特許も国内4件、国外2件が出願されている。外部磁界を用いない磁気メモリ、磁性細線を用いたエネルギー増幅、などスピンエレクトロニクス関係の特許、熱電変換材料に関するものは、今後の産業応用に強いインパクトを与えるものである。

本プロジェクトで完成された多体電子系の数値シミュレーションプログラムは世界最高性能と有し、次世代スーパーコンピュータ国家プロジェクトにも導入を検討されている。これらの観点からも、さらに今後十分活用されることが期待できる。本プロジェクトの成果はすでに高く評価されている。

4 - 3 . その他の特記事項(受賞歴など)

スピントロニクスの理論の世界のリーダーによる、デバイス創製原理の提案とモデル系の創製への挑戦的な研究として高く評価できるプロジェクトである。強相関電子系のスピン・軌道自由度や、磁性体 / 超伝導体接合効果、およびスピン流に基づくデバイス原理の実証的提案等が行われており、強相関エレクトロニクス、スピンエレクトロニクス分野の発展に大きく貢献している。研究計画および実際の過程は、ナノ材料の設計と実験の実現に基づき、新しいエレクトロニクス実現への道程も明確に維持されて降り、研究過程および成果は大変高く評価できる。本プロジェクト期間内に終わりきれていないが、さらに研究の継続を期待したい。

グループの受賞は多くはないが、若手の研究奨励賞、新聞報道(日刊工業新聞、日経産業新聞)がある。またチームミーティングや合同シンポジウム共催などを頻繁に行っている。特に国際ワークショップSpin Currentを主催し、参加者80名によりスピンエレクトロニクスに関する成果発表と同分野研究者との研究交流を行っている。また東北大学助教授から京都大学教授に1名、東北大学助教授より教授に1名が昇任しており、そのほか本プロジェクトグループから巣立った若手も多い。全体として、直接的間接的に人材育成に大きな貢献をなしている。