

「高度情報処理・通信の実現に向けたナノ構造体材料の制御と利用」
平成16年度採択研究代表者

前川 禎通

(東北大学金属材料研究所 教授)

「電子内部自由度制御型ナノデバイス創製原理の構築」

1. 研究実施の概要

遷移金属酸化物、有機化合物では電子間に働くクーロン相互作用が強いため、電子の内部自由度であるスピン（磁性）や軌道（電子の空間的広がり）の小さな変化が電荷（電気伝導）の巨大な変化に跳ね返ってくる。また逆に電荷の小さな変化が磁性の巨大な変化を引き起こす。さらに、ナノスケールの大きさに微細加工された物質・材料では、電子の微小領域への閉じ込め効果のために電子間のクーロン相互作用が強調され、上記の効果がより顕著になる。これらの系では、電子間の相互作用が局所的多体効果であることから、局所密度近似に基づく第一原理計算や平均場などの近似計算ではその本質が捉えられない。一方、系を記述する微視的モデルに対する近似を挟まない数値シミュレーションがその物性の本質解明に威力を発揮する。

本プロジェクトでは、電子の内部自由度の交互作用によりもたらされる新しい量子現象を開拓する。さらに、磁性と伝導の相関により得られるスピントロニクスや量子キュービット素子の可能性を探る。

2. 研究実施内容

当研究チームは平成16年10月より本プロジェクトを開始した。そのため、平成16年度はすでにそれまでにアイデアを暖めていた「パイ接合を含む超伝導量子ビット」の研究を全研究チームで発展させた。まず、「量子デバイス開発グループ」はフランスの実験グループと最近のパイ接合の実験結果を検討し、「デバイス理論構築グループ」が理論解析を行った。そして、その結果を基に「多体電子系シミュレーショングループ」の開発した数値計算プログラムを用いて超伝導量子ビットをデザインし、シミュレーションを行った。また、「実証実験グループ」は、強磁性を含む超伝導トンネル接合を作製し、超伝導体へのスピン注入効果を調べた。以下では、平成16年度に開発したパイ接合を含む超伝導量子ビットの理論的な研究結果を示す。

・パイ接合を含む超伝導量子ビットの理論

近年、量子計算機における基本素子である量子ビットに関して、ジョセフソン効果を用いたいくつかの提案がなされている。今回我々が提案するものは、図1に示すような絶縁体と強磁性体を含む超伝導体リングから構成される量子ビットである。この超伝導リングにおいて超伝導体/絶縁体/超伝導体接合は、超伝導体間の位相差がゼロの場合に系が安定となる通常のジョセフソン接合（ゼロ接合）であり、ジョセフソン結合エネルギー U_0 の位相差 θ に対する依存性は余弦波 $U_0 = -E_0 \cos \theta$ で表される。ここで、 E_0 はゼロ接合でのジョセフソン結合定数である。一方、超伝導体/強磁性体/超伝導体接合は、位相差がパイの場合に系が安定となるパイ接合である。金属接触的なパイ接合の場合、ジョセフソン結合エネルギー U_π の位相差依存性は、単純な余弦波からずれた関数形 $U_\pi = -E_\pi \left| \cos \left((\theta + \pi) / 2 \right) \right|$ で表される。ここで、 E_π はパイ接合でのジョセフソン結合定数である。この系におけるハミルトニアンは、ゼロ接合及びパイ接合におけるジョセフソン結合エネルギー、ゼロ接合での静電エネルギー K 、そして超伝導リングに蓄えられる磁気エネルギー U_L の和により表される。ここで静電エネルギー K は、位相空間における運動エネルギーに対応し、この系のハミルトニアンはジョセフソン接合エネルギーと磁気エネルギーの和 $U = U_0 + U_\pi + U_L$ で表されるポテンシャル中の粒子の運動に対応する。計算の結果、この系では外部磁場を印加しない状態で、ゼロ接合と金属接触的なパイ接合との競合によって、ポテンシャル U が位相差に対して2つの縮退した最小値をもつことが分かった（図2）。この縮退した2状態 $|\uparrow\rangle$ 及び $|\downarrow\rangle$ 間に存在するポテンシャル障壁の高さは、ゼロ接合及びパイ接合のジョセフソン結合定数の比によって制御することが出来る。またこの2状態においては、互いに反対回りの循環電流が超伝導リング中を流れていることが示された。そして2状態間のトンネル効果により、結合状態 $|0\rangle \propto |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle$ と反結合状態 $|1\rangle \propto |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle$ が形成されるが、本量子ビットではこの2状態をビットとして利用する。外部磁場を印加しない場合には、状態 $|0\rangle$ 及び $|1\rangle$ ではカレントは流れないが、エネルギーギャップに相当する振動数のマイクロ波を照射し、その共鳴を観測することによりビットの形成を確認することが出来る。さらに有限の外部磁場の下では、図2に示されるような2つの状態 $|\uparrow\rangle$ 及び $|\downarrow\rangle$ の縮退がとけるため、状態 $|0\rangle$ 及び $|1\rangle$ において互いに逆周りの有限なカレントが流れる。そのため、この量子ビットの周囲に超伝導量子干渉素子（SQUID）を配置する等によって、状態 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の区別が可能となる。

実際に量子計算を行うためには、1量子ビットの操作と2量子ビットの制御NOTゲートを構築する必要がある。本量子ビットではそれらは以下のように実現可能である。まず、1量子ビットの操作については、状態 $|0\rangle$ 及び $|1\rangle$ のエネルギーギャップに対応するマイク

ロ波を、パルス長を制御して照射することにより、任意の重ね合わせ状態を作り出すことが出来る。また制御NOTゲートに関しては、超伝導リングを貫く磁束によって生じる量子ビット間の磁気的な結合を利用することで、条件付のゲート操作を物理的に実現できる。以上により、本量子ビットを用いて万能論理ゲートが構築可能であることが分かる。本量子ビットは、定常的な外部磁場を必要とする従来のジョセフソン磁束量子ビットに比べ、磁場を印加せずにコヒーレントな2状態 $|0\rangle$ 及び $|1\rangle$ が形成されるという利点を持つ。この利点のために、より小さなサイズの量子ビットの実現が可能となるが、このことは集積化に有利となる上、環境との結合に起因するデコヒーレンスの抑制につながることも期待される。

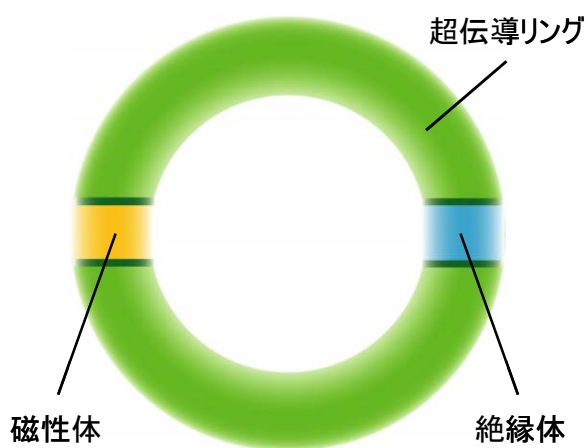


図1：強磁性体と絶縁体を含む超伝導リングの概念図。

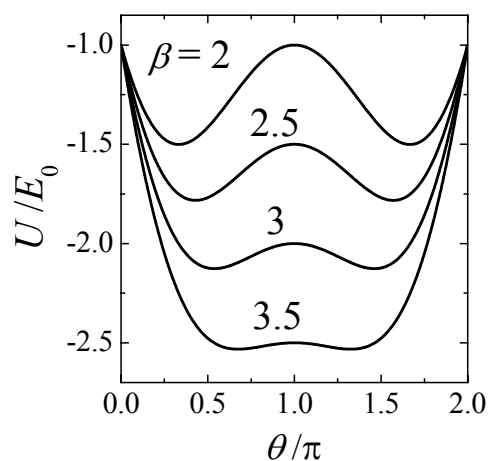


図2：自由エネルギーの位相差依存性。 β はゼロ接合とパイ接合のジョセフソン結合の比を表す。

3. 研究実施体制

量子デバイス開発グループ

- ① 研究分担グループ長：前川 禎通（東北大学金属材料研究所、教授）
- ② 研究項目：
 - ・ナノデバイス理論および実験の統括および新規量子デバイスの基盤開発
 - ・新規計算プログラムの開発

多体電子系シミュレーショングループ

- ① 研究分担グループ長：遠山 貴巳（東北大学金属材料研究所、助教授）
- ② 研究項目：
 - ・シミュレーション設備の導入と既存計算プログラムの整備

- ・モット絶縁体の光励起状態における電子内部自由度の相互作用の解明
- ・軌道の自由度に関わる新しい現象の解明

デバイス理論構築グループ

- ① 研究分担グループ長：今村 裕志（東北大学大学院工学研究科、助教授）
- ② 研究項目：
 - ・低ノイズな微小TMR・GMR素子のデザイン
 - ・強磁性ジョセフソン接合を用いた量子計算素子の提案
 - ・磁性積層膜の界面における磁気構造とスピン流に関する理論的研究

実証実験グループ

- ① 研究分担グループ長：小池 洋二（東北大学大学院工学研究科、教授）
- ② 研究項目：
 - ・スピンドバイス作製装置の製作
 - ・強磁性体/超伝導体/強磁性体二重トンネル接合の作製とスピン蓄積
 - ・オービトンを用いた熱電変換素子用薄膜の作製と熱電特性評価装置の立ち上げ
 - ・巨大熱起電力をもつコバルト酸化物単結晶の育成
 - ・巨大熱伝導をもつ低次元遷移金属酸化物の試料作製

4. 主な研究成果の発表

(1) 論文発表

- 整理番号：160904003

著者氏名：G. Khaliullin, W. Koshibae and S. Maekawa

論文題目：Low Energy Electronic States and Triplet Pairing in Layered Cobaltate

書誌事項：Physical Review Letters **93**, 176401 (2004).

公表日付：20041018

- 整理番号：160904005

著者氏名：Y. Utsumi, J. Martinek, P. Bruno, J. Barnas and S. Maekawa

論文題目：Many-body effects in nanospintronics devices

書誌事項：Journal of The Magnetics Society of Japan 28 (11) , 1081-1088 (2004).

公表日付：20041101

- 整理番号：160902001

著者氏名：T. Kajita, M. Kato, T. Suzuki, T. Itoh, T. Noji and Y. Koike

論文題目：New Electron-Doped Superconducting Cuprate $\text{Li}_x\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Br}_2$

書誌事項：Japanese Journal of Applied Physics **43**, No.11B, L1480-L1481 (2004).

公表日付：20041115

○ 整理番号：160904006

著者氏名：K. Yakushiji, F. Ernult, H. Imamura, K. Yamane, S. Mitani, K. Takanashi, S. Takahashi, S. Maekawa and H. Fujimori

論文題目：Enhanced spin accumulation and novel magnetotransport in nanoparticles

書誌事項：Nature Materials **4**, 57-61 (2005).

公表日付：20041205

○ 整理番号：160904004

著者氏名：K. Ishii, T. Inami, K. Ohwada, K. Kuzushita, J. Mizuki, Y. Murakami, S. Ishihara, Y. Endoh, S. Maekawa, K. Hirota, and Y. Moritomo

論文題目：Resonant inelastic x-ray scattering study of the hole-doped manganites $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.2, 0.4$)

書誌事項：Physical Review B **70**, 224437 (2004).

公表日付：20041230