

はじめに

スピントロニクスとは、素粒子としての電子や、中性子・陽子などの素粒子集合体である原子核の持つ電荷(電流を伝搬)、質量(運動エネルギーや熱を伝搬)、およびディラックの相対論的量子力学から帰結されるスピン(角運動量や量子情報を伝搬)などの三つの自由度について、これらのナノ量子機能を集積デバイス・システム化し、量子スピン操作や量子情報操作を可能にするためのナノスピントロニクス(スピントロニクス)を総称した新しい学問分野の名称である。

スピントロニクスという新しいクラスのエレクトロニクスを実現するためには、外部から印加した電場(ゲート電圧)によりスピン状態についてナノ超構造による特異な微視的量子状態を制御し、相対論的量子力学に立脚した新しいスピン機能ナノデバイスを実現する必要がある。電荷を制御した従来の半導体エレクトロニクスでは、電子の持つ電荷について、シリコン半導体をベースとしてドーピングによる価電子制御法と印加ゲート電圧によるトランジスタのスイッチング制御法を基礎として、その基盤技術であるシリコン CMOS 半導体技術が開発され、現在のエレクトロニクスの基盤をなしている。

トランジスタ数の集積度は、よく知られているように、ゴードン・ムーアの法則に従って、18 ヶ月で2倍という猛スピードでその集積度が急速に上昇している。その結果、超微細加工サイズが半導体の格子定数極限(物理限界)に達し、同時に、超微細化による高集積化とエネルギーの局所的集中化が大きなエネルギー消費の原因を作り出した。そのため、超微細化されたシリコン材料が局所的にメルトダウンするほどの高温極限に達することから、トランジスタのスイッチング・スピードを支配するそのクロック周波数と集積度(ナノスケールの配線サイズ)も、同時にシリコン半導体材料の物理的限界に到達しつつある。これらを解決するために、マルチ・コアと呼ばれる CPU のコア部分を分散させて配置する創製技術により、発熱・冷却問題を緩和させようとする折衷案で、その場をしのいでいるが、クロック周波数などの抜本的な改善は難しく、新しいアイデアに基づいた本格的なデバイス開発が市場や社会からは待ち

ii はじめに

望まれている。

ここまで述べてきたように、半導体エレクトロニクスの基盤技術であるシリコン CMOS 半導体技術の抱える現代の大きな問題である IT エネルギー問題 (IT 関連の電力使用量が社会の電力使用許容量を大きく逸脱する反社会的問題)、およびその物理的ナノ加工限界問題 (超微細加工技術の物理限界を超える問題) を現代の基礎的な科学技術に立脚して解決するためには、電子や原子核の持つもう一つの自由度である不揮発性の量子スピン情報を相対論的量子力学をベースとして、エレクトロニクス・デバイスに積極的に応用することにより、電荷を制御する現時点でのシリコン CMOS 半導体技術に取って代わる新しいクラスのスピン依存によるエレクトロニクス (スピントロニクス) を構築し、超高集積, 超高速, 不揮発性などの機能を同時に合わせ持つ, スピン情報による超省エネルギーのスピントロニクスデバイスを実現する必要がある。これにより、近未来のわれわれの社会の抱えるエネルギー問題や社会問題に関する技術的課題を、独創的なデザイン主導による研究開発に基づいて一挙に解決しようとするのがスピントロニクス構築の主要目的である。

日・米・欧・中国を中心とする先端科学技術の覇権を目指している諸国において、技術的、および社会的問題となっているシリコン CMOS 半導体技術の技術的・社会的課題をスピントロニクスによって解決することは、スピントロニクスを制するものは、その IP を通してスピンを基盤とした新産業創成と、量子スピン系を積極的に利用したグローバルな情報通信技術 (ICT) を制するという二点において、産業・文化・経済・政治を通して、国際社会をリードできることとなり、新産業創成により国際社会の経済に対して極めて大きなプレゼンスと覇権主義的な影響力を持つことになると予測される。そのため、スピントロニクスのデザイン・実証・事業化と国際標準化は、工業化社会から知識社会へと産業構造が転換した現代社会においては、学術文化をベースとした先進科学技術による新産業創成を目指す覇権主義的な諸国にとって、エネルギー支配と情報支配を両輪とする新産業創成のために不可欠な先端科学技術に関する最重要の研究開発課題である。

さらには、基礎学術としてのスピントロニクスは、量子物理学、化学、応用物理学、半導体工学、電気・電子工学、情報科学、情報通信工学、金属工学、材料科学、脳科学、人工知能工学などの広範な先端科学技術分野の関わる学際

領域に位置する新規な研究分野である。そのため、スピントロニクスの実現をめぐる日・米・欧・中国の4極間での熾烈な国際競争に耐え抜き、人的および財政的にも限られた先端科学技術資源を持つわが国が世界をリードし、そのプレゼンスを国際的に認知させるためには、未来を予測・デザインする広い視野と将来のあるべきグローバルな理想社会をデザイン・実現する高い志を持って、多くの学際研究分野との連携とそれらを統合するデザイン主導による効率的な研究開発を行い、大きな成功を収めることが最重要課題となってくる。

このように、スピントロニクスは広範な学術領域の寄与する学際領域の研究分野であり、多くの学術分野が共同研究のためのネットワークとして協働することがその成功には不可欠の要素である。

多くの多様な基礎的研究分野が関わる学際共同研究としての例をあげれば、例えば、現時点でのコンピュータにはないニューロモルフィック計算による人工知能への応用、量子アニーリング方式や量子ゲート方式による量子計算への応用、そして、超省エネルギーの極みであるIOT(Internet of Things)への応用などに幅広く利用できる新しいタイプの学際的なエレクトロニクス分野であることが理解できる。

このような学際領域的な研究分野であるスピントロニクスの開発と基盤技術構築のためには、半導体、酸化物、金属、有機物、環境調和無機物などをベースとする多様な磁性体の中からどのような物質・材料を選択し、結晶成長技術としての自己組織化ナノ超構造創製法(ボトムアップ・ナノテクノロジー)や超格子創製法とナノ・リソグラフィー(トップダウン・ナノテクノロジー)によるナノ超構造を舞台としたネットワーク型の研究開発が不可欠である。それらを舞台として、その中で生み出されるスピンと電子に関する量子効果を積極的に利用して、ゲート電圧による印加電場により、そのコヒーレントな量子力学的電子状態の創成と相対論的量子力学によるスピン・軌道相互作用の制御をベースとしたスピンのナノスケールでの電場制御により、微視的サイズから巨視的サイズを横断するコヒーレントなスピンとその伝導を自由自在に制御する必要がある。そのためには、**マテリアル→デバイス→システム・ソフトウェア**という三つの階層を連結し、それらをシームレスに超越・連結する多階層連結量子コンピューティングによる新規なスピントロニクス機能をデザイン主導により

実証し、システム集積化とネットワーク化により、これらを社会の隅々まで普及させ、世界標準化することがグローバルな産業応用において不可欠となるべく。

本書では、多様な磁性体物質・材料である金属磁性体、磁性半導体、無機物・酸化物磁性体、および有機分子磁性体などの現実物質をベースとして、それらの電子スピンや核スピンに関する量子操作の舞台となるナノ超構造物質の個別性の起源に立脚して、微視的な世界の基本法則である量子力学に基づいて、その量子機能と量子情報を伝搬しているスピンの持つコヒーレントなスピン物性機能に着目した新機能ナノ材料や新機能スピndeバイスを実現するための計算機ナノマテリアルデザイン手法とその応用について詳しく記述する。

産業応用上、必要不可欠な量子スピndeバイスの実証目的に合わせて、効率よくマテリアルやデバイスを計算機ナノマテリアルデザインに基づいて、デザイン・実証する。これにより、実験的および理論的デザイン手法を駆使して、目的とするスピndeバイスを実現し、現代の半導体デバイスの直面するシリコン CMOS 半導体技術におけるゴードン・ムーアの法則に関する現在のエレクトロニクスの持つ技術的な壁(超微細加工限界, 超高速スイッチング限界, 超省エネルギー限界)について、固体物質をベースとして、コヒーレントでロバストなスピンという量子力学的な自由度の電場による物性制御を積極的に利用することによって、その古典限界を飛躍・超越し、相対論的量子力学に立脚したスピンの電場制御を積極的に利用した新しいクラスのエレクトロニクスであるスピントロニクスを計算機ナノマテリアルデザインによりデザインし、デザイン主導によりこれらを実証する。

計算機ナノマテリアルデザインを確立するためのデザイン手法(基礎編)と、そのスピントロニクスへの応用(応用編)について初学者に詳しくこれらを伝授するため、各章において簡潔・詳細にその内容が記述されている。

現実の磁性体物質・材料を舞台としたスピントロニクスの実現のためには、物質の個別性の起源であるナノ超構造を含む微視的なスピンの量子力学的な電子状態やナノ超構造によりその波動関数をエンジニアリングし、新しいスピン材料やナノスピン超構造による新機能を創成する必要がある。そのためには、計算機(場合によっては量子計算機)を用いてその電子状態を定量的に予測し、分光学的実験データとその微視的電子状態を定量的に比較しつつ、それらの物

理機構を解明し、デザインのための一般則を導出する。スピン機能についても、実験的にデザイン的一般則とデザイン結果を検証しつつ、デザイン主導により見通しよく、デバイス化や事業化などを見すえる広い視野に立脚し、実験データとの定量的な比較とマテリアル・デバイス評価をベースに学際的な研究開発を推進する必要があるが、本書では、これらを初学者が最低限修得している量子力学や量子化学などの基礎科学に立脚して、実際の具体例と共に学習することにより、容易にこれらを習得することができる。

本書は、大学院生、社会人、異分野や学際領域の研究者を対象として、すでに39回にわたり実施し、長い歴史と伝統(実績)を有している計算機ナノマテリアルデザイン(コンピューテーショナル・マテリアルデザイン)ワークショップのチュートリアル(1年当たり春夏2回、1回5日間の集中講義と集中実習)におけるスピントロニクスデザインコースの集中講義部分に対応する講義を実際に担当している各講師が担当の章において、基礎から学ぶべき必須事項を厳選し、平易な言葉でわかりやすくまとめたものである。本書はこれらのチュートリアルの長年にわたる講義をベースとしていることから、そのテキストとしても利用できる。一方で、量子力学の基礎を修得した学部後期学生が独習により、デザイン主導によりスピントロニクスを構築するための計算機ナノマテリアルデザインを独学でき、しかも、それらをスピントロニクス・マテリアル開発研究、スピントロニクス・デバイス開発研究、スピントロニクスの分光学的研究、解析的なスピントロニクスの理論研究、および、スピントロニクスに関する実験研究を主たる業務とする異分野や学際領域に位置する新しい研究をチャレンジングに開始しようとする新参の研究者や初学者を対象としており、デザイン主導による実証を通して、見通しよくスピントロニクスの研究開発に参画でき、その結果として、初学者や新規参入者を大きな成功へといざなうための最良の指南書を目指して編集されている。

したがって、本書は量子力学の基礎を修得した学部後期学生(3, 4年生)、大学院修士課程の学生、企業研究者、および異分野や学際領域で活躍されている研究者の方々が新規にスピントロニクス分野に参入し、それまでに修得している各人の専門分野を活かしつつ、短期間で見通しよく独自のスピントロニクス研究開発を実現するために、スピントロニクスのための計算機ナノマテリアルデザイン分野の入口に位置する初学者を対象として、スピントロニクスの研

究開発に不可欠な計算機ナノマテリアルデザインを短期間に修得し、新たな学際研究分野であるスピントロニクスをそれぞれの研究者のオリジナルなアイデアと独自の研究分野とを融合し、他の追従をゆるさないようなオリジナルなスピントロニクス開発研究を成し遂げていただくための「**スピントロニクスのための計算機ナノマテリアルデザインへのいざない**」を修得していただくことを目的としている。

本書を修得することにより、読者が計算機ナノマテリアルデザインを指南書としてそれぞれの専門的研究分野と計算機ナノマテリアルデザイン分野との交差と融合を通して、量子力学に立脚した独自の学際領域としての各研究者のオリジナルなスピントロニクスを確立していただけることが、本書の執筆者らの切なる希望であり、その実現と新分野創成を通して新しい学術文化の創成に貢献できることこそが究極の目標である。本著作を通して、近い将来、読者らがそのような喜ばしい出来事に遭遇した経験や、読者らによって得られた独創的な研究成果についての報告を見聞できることこそが、執筆者らの最も大きな喜びとするところである。それにより、計算機ナノマテリアルデザインに関する迂遠なる計画とそのチャレンジングな目的は果たされたことになる。

最後に、内田老鶴圃の内田学社長には、忍耐強く原稿の完成を待っていただきました。本出版に関する、関係者の皆様の寛容の美徳と優れた教育的助言に深く感謝いたします。

2022年1月

執筆者一同