



国立研究開発法人

量子科学技術研究開発機構（量研）

高崎量子応用研究所

第60号



高崎研だより

特集！ 量子機能創製研究センター目黒ラボ

【概要 & 組織】 量子機能創製研究センターと目黒ラボ

【研究紹介】 量子材料理論研究

【研究装置紹介】 ロングレイリー長共焦点顕微鏡



量子機能創製研究センターと目黒ラボ

量子機能創製研究センター長 大島 武

【概要】

量子機能創製研究センターは、「超スマート社会 (Society 5.0)」実現のキーテクノロジーとなる量子科学技術の研究を加速するため、2022年4月1日に高崎量子応用研究所に発足しました。センターでは、産学官の密接な連携のもと量子材料・機能創製などの基礎研究からデバイス応用までを視野に入れた幅広い研究を推進しています。加えて、国の量子技術イノベーション拠点のひとつである「量子機能創製拠点」の中核として、量子科学を広く使える新の技術とするための活動を行っています。

目黒ラボは、センターの分室ということで東京工業大学大岡山キャンパスに設置され、量子センシングプロジェクトの一部と量子材料理論プロジェクトが所属し、理論及び実験の両面から研究を展開しています。



量子機能創製研究センター長
大島武

【組織】

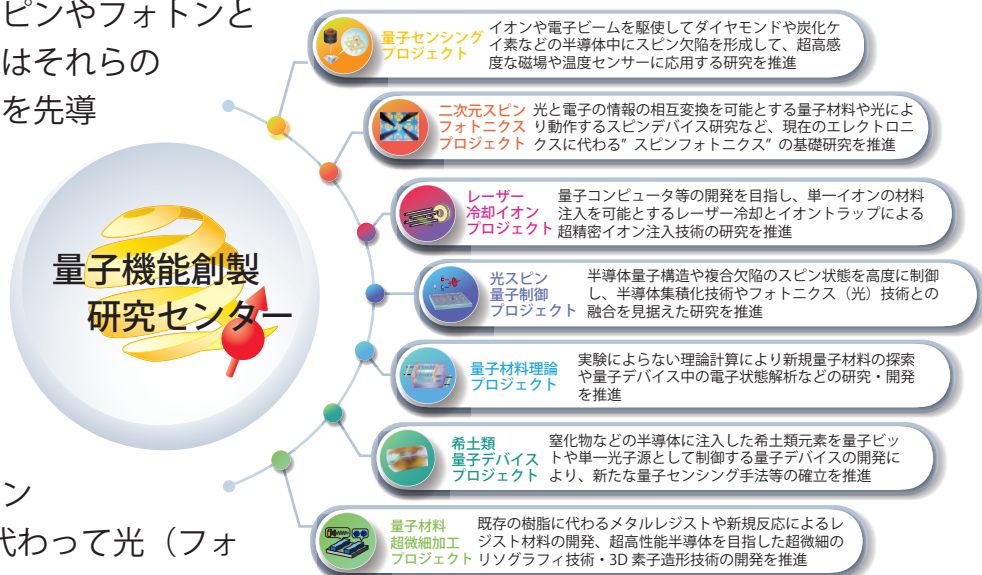
量子機能創製研究センターには「量子センシング」「二次元物質スピンフォトンクス」「レーザー冷却イオン」「光スピン量子制御」「量子材料理論」「希土類量子デバイス」「量子材料超微細加工」の7つのプロジェクトが所属し、スピンやフォトンといった量子を巧みに操り、更にはそれらの相互作用を活用することで世界を先導するユニークな研究を実施しています。

現在の電子機器がエレクトロニクスという電子の持つ電気(電荷)という性質を利用して動作しているのに対し、量子技術では電子の持つもう一つの性質であるスピン(磁石のような性質)や電子に代わって光(フォトン)を利用するため、スピンやフォトンの性質を最大限に引き出すことが重要となります。

量子センシングプロジェクトは、Q-LEAP と呼ばれる国の研究開発プロジェクトに参画しており、目黒ラボでは、Q-LEAP の研究代表者の東京工業大学・波多野陸子教授と共同で、ダイヤモンド中のNV センターと呼ばれる窒素と空孔(ダイヤモンドの構成元素である炭素が抜けた穴)や炭化ケイ素(SiC)中のシリコン空孔(SiC中のSiが抜けた穴)を用いた量子センシングの研究を推進しています。

例えば、NV センターの場合、この中にある電子スピンが磁場や温度などに敏感に反応するので、高感度センサーをつくることができます。また、既存の技術では捉えることができない、疾病や細胞の老化・ガン化、放射線に対する細胞応答など生命現象が引き起こす生体内の変化に対しても、ダイヤモンドのNV センターを利用した「量子センサー」によって計測することができます。我々は既に5nmサイズの非常に小さい量子センサーの製作に成功しています。

量子材料理論プロジェクトは、東京工業大学の特任准教授でもあります松下雄一郎先生がプロジェクトを率いて、量子機能を発揮する材料や結晶欠陥に関する理論的な研究を推進しています。詳しくは、次ページで紹介いたします。



量子機能創製研究センターの組織



目黒ラボの様子

Q1. どのような研究をされているのでしょうか？

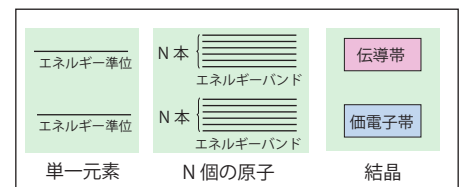
材料中で電子がどのように振る舞うのか理論面から考えています。固体材料の性質は電子が大きな役割を担っていますが、それを知るためには量子力学が必要です。原理的にはシュレーディンガー方程式を解けばよいのですが、大量の電子が関わる場合、方程式は人間にもコンピューターにも厳密には解けません。そこで、量子力学だけでなく、古典物理学、数学、計算科学などを総動員して、現実的な時間で近似シミュレーションする方法を我々は開発しています。

方程式が厳密に解けていませんので、人間は量子力学によってどんな材料の性質が発現するのかを完全に把握できていません。電子のもたらす新現象を探することも我々の研究課題の一つです。

Q2. 実際、シミュレーションはどのようにするのですか？

我々は電子のバンド構造に着目しています。1個の原子は中心に原子核、その周りを回る電子で構成されます。この電子は原子核からの距離に応じていろいろなエネルギーを持ち、決められた軌道しか回ることができません。この軌道が持つエネルギーをエネルギー準位といいます。N個の原子同士が接近した場合は、右図のようにエネルギー準位N本の帯状となります。これをエネルギー帯（エネルギーバンド）と呼びます。エネルギー準位がバンド状になるため、これをバンド構造といいます。

エネルギーバンドにはエネルギーの低い価電子帯とエネルギーの高い伝導帯とがあり、電子はエネルギーの低い価電子帯から埋まり



エネルギーバンド

ます。この価電子帯と伝導帯の間には禁制帯（エネルギーギャップ）と呼ばれる電子が存在できない領域があり、この領域の大きさの違いにより、物質は導体（金属）、半導体、絶縁体に分けることができます。

シミュレーションでバンド構造を解析すると、材料の光応答、伝導特性、磁場応答などが分かります。ある結晶構造をデータとして渡したときに、その物質で発現するバンド構造及び電子物性を書き出してくれる計算手法を我々は研究しています。このような手法は第一原理計算といわれ、実際の物質の実験結果と定量的な比較がしやすいことから近年広く使われています。

Q3. この研究開発はどのようなことに活かされているのでしょうか？

実験結果の解析を補助することができます。理解が難しいシグナルが観測された時、理想状況を仮定したシミュレーションでそれが再現されるかを検証すれば、材料の構造のどの部分はそのシグナルをもたらしているかを解き明かすことができます。例えば、前頁でご紹介したダイヤモンドのNVセンターのような結晶の狙った部分に不純物（窒素）を入れる、といった実験的には難しい操作もボタンひとつで実現できるのがシミュレーションです。

半導体の不純物バンドのシミュレーションは正確な計算がきわめて難しく、これを実行できる組織は世界にもまだ数少ないため、この分野で世界に貢献できればと考えています。

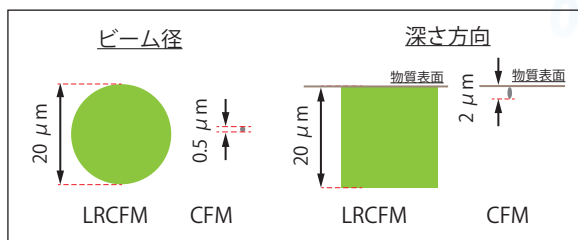
Q4. 今後の研究について教えてください。

現在行っている半導体不純物状態の計算手法整備、実験データの解析をさらに進め、新規材料開発につなげたいと考えています。さらに、第一原理計算の基本理論である密度汎関数理論（電子系のエネルギーなどの物性を電子密度から計算可能とする理論）に機械学習を用いて、さらに精度を高める開発なども進めています。

【原理と特徴】

ロングレイリー長共焦点顕微鏡（LRCFM：Long Rayleigh Length Confocal Microscope）は、結晶中の欠陥を含む測定対象の深さ方向を均一に光励起して、測定対象全体において量子特性の空間分布を評価できる装置です。レイリー長（Rayleigh Length）とは、対象物に照射するレーザービームの集光点から A 点までの距離で、A 点はビーム径が集光点におけるビーム径の $\sqrt{2}$ 倍となる位置です。レイリー長が長いほど集光点前後の位置でレーザービーム直径が変わらないということになります。

量子特性は、具体的には NV センター（本誌 2 ページ参照）の量子状態をどのくらい時間保持できるかを指標としています。代表的な量子状態は「重ね合わせ状態」です。従来のコンピュータは 0 または 1 の状態だけをとりま（この情報量の単位をビット（bit）といいます）。それに対して、0 と 1 とは別に、「0 でもあり 1 でもある状態」＝「重ね合わせの状態」も実現できる素子は「量子ビット」と呼ばれ、量子コンピュータなどで利用されます。



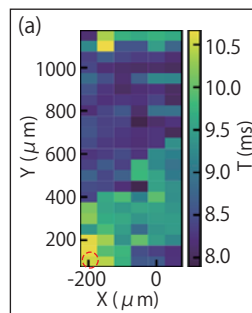
LRCFM の特長

左図は LRCFM と共焦点顕微鏡（CFM）のレーザービームを比較したものです。CFM は一般的に高倍率の対物レンズが用いられますが、LRCFM では低倍率対物レンズでレーザースポット径が 20 μm 程度と比較的大きく、結晶中の欠陥を深さ方向に均一に励起できます。励起光は基本的に可視光で、現システムでは 532 nm レーザーで励起し、ス

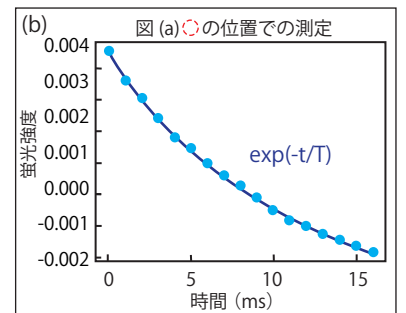
ポットからの蛍光を測定しています。LRCFM は、試料の励起体積を大きくしてノイズとなる非偏極蛍光の量を減らしながら、検出できる蛍光量を増やしています。このため、材料表面の迷光や背景光の影響をあまり受けず、高い検出信号が得られます。従来の CFM の理想的な蛍光検出条件と比較して、検出される有効な信号は約 10,000 倍です。また、測定する励起光量が大きいので、この高い信号雑音比（S/N 比）により、高速にミリメートル程度の範囲の量子特性空間分布マッピングが可能です。

【実際の測定】

右図 (a) は、ダイヤモンド中の NV センターの量子特性の空間分布をエネルギー緩和時間を指標に 50 μm \times 50 μm サイズで色分けしたものです。エネルギー緩和時間とは、欠陥が励起状態から基底状態に緩和するまでの時間です。測定方法ですが、欠陥にマイクロ波の π パルス照射して励起状態にした後、時間 τ 後に 532 nm のレーザー照射を行い、 π パルスによる励起状態をどの程度保持しているのかを蛍光強度として読み出します。例えば、グラフ (a) の $(x, y) = (-200 \mu\text{m}, 100 \mu\text{m})$ における測定では、グラフ (b) のような結果が得られ、フィッティングカーブより緩和時間は 10.5 ms であることが分かります。



量子特性の空間分布



エネルギー緩和時間の測定

Q メッセージ

新年度を迎え、QST として第二期となる中長期目標期間が始まります。量子ビームを活用して量子センサーや量子コンピュータなどの量子技術の基盤研究を強力に推進してまいります。それに伴い、高崎研の英語名称も量子技術の応用研究を表す「Takasaki Institute of Advanced Quantum Science」に変わりました。TIAQ（ティアック）との略称で、高崎研の国際的認知度がより高まるよう、所員一丸となって量子技術に関する基盤研究・開発に取り組んでまいります。（高崎量子応用研究所長 前川 康成）



「西暦 2023 年」は間違えることがないのですが、和暦はすぐに忘れてしまいます。先日も全く疑うことなく「令和 4 年」と何度も記入していました。今後は、「和暦 = (西暦の下 2 桁) - 18」と覚えようかと思います。来年は 2024 年なので 24-18=6、令和 6 年です。「18」大丈夫かな？