

## 分子スピン量子コンピュータを目指した弱交換相互作用系

## TEMPO ビラジカルの磁氣的希釈単結晶 ESR/ENDOR スペクトル

(阪市大院理<sup>1</sup>, 阪大院理<sup>2</sup>, 阪大院基礎工<sup>3</sup>, JST CREST<sup>4</sup>) ○伊瀬智章<sup>1,4</sup>, 吉野共広<sup>1</sup>, 森 展之<sup>1,4</sup>, 西田辰介<sup>1</sup>, 佐藤和信<sup>1,4</sup>, 豊田和男<sup>1,4</sup>, 塩見大輔<sup>1,4</sup>, 森田 靖<sup>2,4</sup>, 北川勝浩<sup>3,4</sup>, 工位武治<sup>1,4</sup>

【序論】90年代中頃から、量子コンピュータ (QC) の研究は量子物理学や量子情報科学の分野において急速に発展し、その基礎理論やアルゴリズムの進展のみならず、実験的にも量子コンピュータ/量子情報処理(QC/QIP)実現のためのさまざまな量子状態の提案がなされている。ごく最近、我々はマロニルラジカルを用いて、パルスENDORにより電子スピン-核スピンの混合系の量子エンタングルド状態を実験的に実証し、有機ラジカル分子の電子/核スピンの利用はQC/QIPの開発に有用であることを示した<sup>[1]</sup>。本研究では電子-電子スピン系分子スピンQCを目指した最初のモデル系として弱交換相互作用系TEMPOビラジカル誘導体(1~3)を選択し、それぞれを反磁性ホスト化合物(1a~3a)の結晶格子中に希釈した磁氣的希釈単結晶を得ることに成功した。今回、これらのTEMPOビラジカル系について、ホスト単結晶のX線構造解析、磁氣的希釈単結晶のESR/ENDOR測定を行ったので報告する。

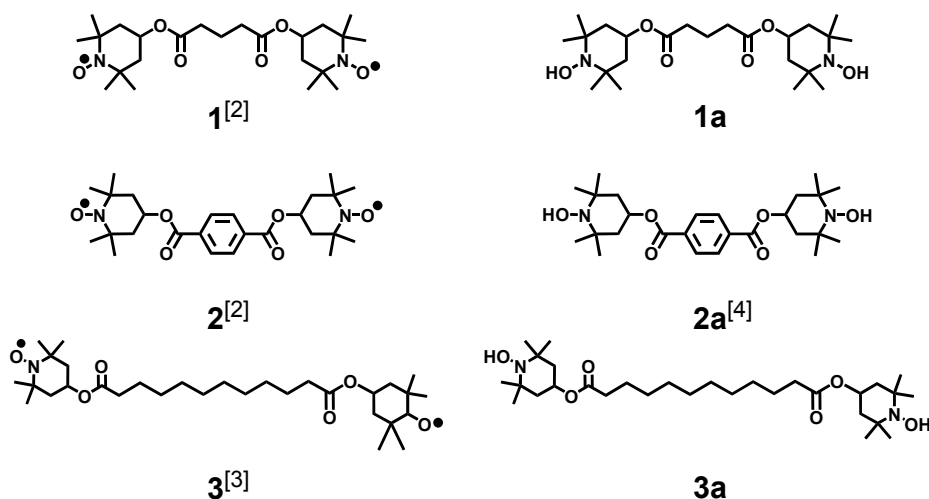


図. 1 弱交換相互作用系 TEMPO ジラジカル (1~3) 及び反磁性ホスト化合物 (1a~3a)

【結果と考察】1の磁氣的希釈単結晶を得るためのホスト分子として1を還元した反磁性化合物1aを選択し、X線結晶構造解析を行った(表1)。構造解析の結果から、ホスト分子は折れ曲がった切妻構造(gable structure)を取り、分子内におけるピペリジン部位のN原子間距離は約6Åであることが分かった。まず、磁氣的希釈単結晶の外形に対して任意の*p, q, r*直交座標系を定義し、角度依存ESR測定を行った。弱交換相互作用に由来するメインピークに加えて、特徴的な遷移強度の小さいサテライトピークが多数出現し、交換相互作用と窒素核

の超微細結合との競合に由来する複雑なスペクトルを得た(図 3)。測定の結果、ESR/ENDOR スペクトルは反磁性ホスト結晶の対称性を反映して、非等価な二種類の分子に由来していることが明らかになった。TEMPO ジラジカル **3** 系の磁氣的希釈単結晶についても同様の測定を行った。ホスト化合物である反磁性化合物 **3a** の結晶構造解析を行ったところ、晶系は monoclinic であり、分子内に対称芯を有することが明らかになった。分子内に対称芯を有することから **1** 系に比べるとシンプルな ESR/ENDOR スペクトルが得られた。また monoclinic の対称性を反映した非等価な二種類の分子に由来するスペクトルを得た。これらの結果から希釈単結晶中のゲスト分子はホストの結晶対称性を維持していることが明らかになった。今回、詳細なスピン物性の解析を行うために同位体元素でラベル化したピラジカルの合成及び ESR/ENDOR 測定を行ったので合わせて報告する。

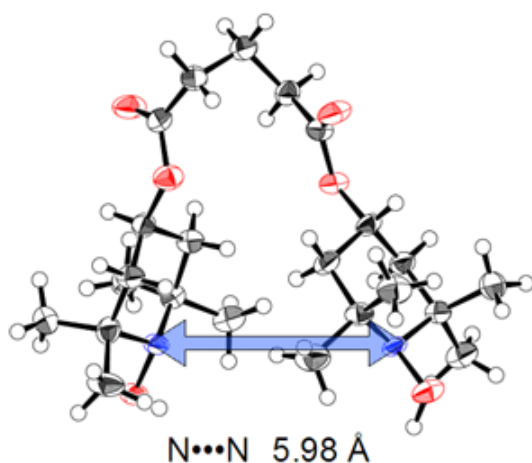


図 2. ホスト分子 **1a** の結晶構造

表 1. ホスト分子の結晶学パラメータ

晶系	monoclinic
空間群	$P2_1/c$
$Z$	4
$a/\text{Å}$	12.899(2)
$b/\text{Å}$	13.123(3)
$c/\text{Å}$	21.650(5)
$\beta/^\circ$	99.523(5)
$R_1$	0.097
$R_w$	0.126

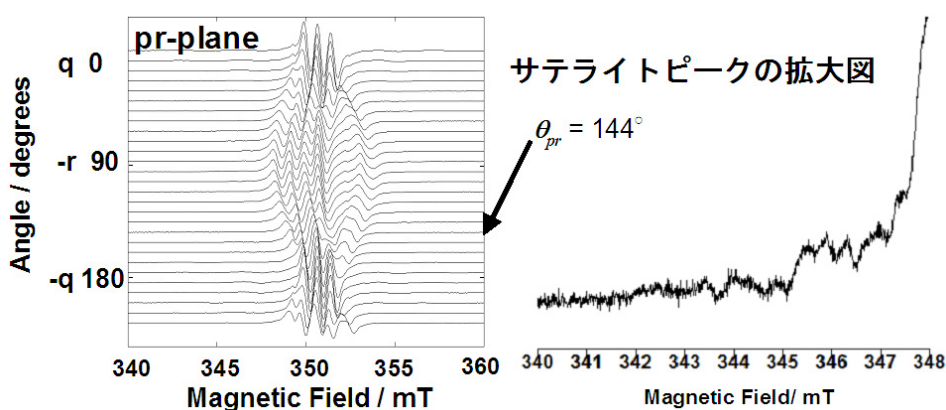


図 3. 磁氣的希釈単結晶 **1+1a** の角度依存 ESR スペクトル及び拡大図

- [1] R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, and T. Takui, *Int. J. Quant. Info.*, **3**, 197(2005).
- [2] H. R. Falle, G. R. Luckhurst, H. Lemaire, Y. Marechal, A. Rassat and P. Rey, *Molecular Physics*, **11**, 49(1966).
- [3] J. C. Williams, R. Mehlhorn, A. D. Keith, *Chemistry and Physics of Lipids.*, **7**, 207(1971).
- [4] E. F. Litvin, A. B. Shapiro, L. M. Kozlova, E. G. Rozantsev, L. Kh. Freidlin, *Zh. Org. Khim.*, **6**, 2365(1970).