

分子スピン量子コンピュータモデル系弱交換相互作用  
 ビラジカル位相制御型コヒーレントデュアル  
 パルス ELDOR による研究

(阪市大院・理、阪大院・理、近大・理工、兵庫県大院・物質理、ブルカー・バイオスピン、JST-CREST) 中澤重顕、佐藤和信、森展之、吉野共広、伊瀬智章、西田辰介、Robabeh Rahimi、塩見大輔、豊田和男、森田靖、中辻慎一、中筋一弘、原英之、Patrick Carl、Peter Hoefler、北川勝浩、○工位武治

**[要旨]**分子スピン（開殻系分子の電子スピンと核スピンを含む系）による量子コンピュータ／量子情報処理は、不対電子をスピン量子ビット(Spin qubit)として扱い、その量子機能・位相を直接制御する新しい分子科学であり、いわば量子位相

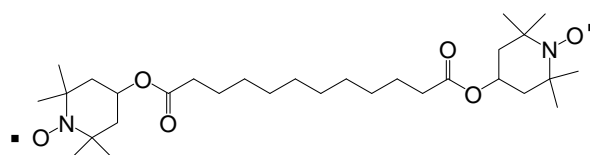


図1. 分子1

化学といってもよい。分子スピン量子コンピュータ(分子スピン QC)を実現する要素技術のうち、(1) スピンテクノロジーの開発面から、核スピン qubit を含む spin qubit の Bloch 空間における位相制御の確立が最大の課題であり、また (2) アンサンブル系分子スピン QC のハードウェアとしての分子スピン系の開発には、デコヒーレンス時間の抑制など可能とする新しい化学的アプローチが不可欠である。真の分子スピン QC を実現するには、spin qubit の scalability の問題を解決する必要がある、これは第 2 段階の重要課題であるが、本研究では、(1)、(2) の課題に関連して、新しい位相制御型電子スピン-電子スピン 2 重共鳴装置の開発、及びアンサンブル系分子スピンの物質開発とスピン物性の特定を行った。分子スピン QC のための物質開発では、今日のパルスマイクロ波技術の制約から、多電子スピン開殻分子系として、まず弱交換相互作用 2 電子スピン系を設計・合成した (図 1 参照)。

**[序論]**量子コンピュータ (QC) は現代の古典的コンピュータが苦手とする指数関数的爆発問題に対しては、効率よく計算できることがショアにより理論的に示されて以来、QC を中核とする量子情報科学はすでに、量子物理、数学、情報学の新しい境界領域を形成し始めており、今後、化学と物質科学をも横断する新しい学際領域に発展し次世代の科学技術において重要な役割を果たすと考えられる。QC の最も基本的な要素は量子ビット (qubit) であり、様々な物理系を qubit に利用する開発が行われている。例えば、レーザー光の偏向、量子ドット、超伝導クーパー対、イオントラップ、核スピン、分子の振動回転構造等があり、分子性電子スピンも最新の物理系である。QC 実現の必要条件として次の 5 つが挙げられている。(1) qubit を初期化できる。(2) qubit の情報を読み出せる。(3) 基本論理ゲートを構成できる。(4) 規模や動作回数が、qubit が増えた場合に急速に増大しないような物理システム (scalability)。(5) デコヒーレンス時間 (系外からの擾乱による緩和時間) がユニタリー変換などの操作時間に比べて十分長い。上に挙げた物理系はそれぞれ初期化や scalability 等の固有の問題を抱えているが、分子スピンはこれまで qubit として提案されてきたどの物理系よりも、QC に不可欠な量子エンタングルメント状態の生成や分子設計によって scalability も含め有利な点が多い。

qubit を用いた研究状況としては、アンサンブル核スピン系による 7 量子ビットを用いた演算 (素因数分解  $15=5 \times 3$ ) が実現して以来、真のエンタングルメント状態の達成を別にして核ス

ピン系 NMR が QC のシミュレーションに適した物理系として、様々な実験的及び理論的研究が報告されている。また、最新の qubit としての電子スピン系では最近、電子スピン 1 つと核スピン 1 つとの量子エンタングルメント状態の生成、及びエンタングルド状態間の相互転換が pulsed ENDOR (Electron-Nuclear Double Resonance)法で実現している。我々は、これらの系を用いて、量子高密度符号化 (SDC) の実験的検証・初等量子アルゴリズムの実証をはじめて実現した[1]。電子スピン系の QC の実験報告はまだなく、焦眉の課題となっているが、電子スピンをもちいた量子情報処理の過程では電子スピンのスピノール性が顕に出現することを予測しはじめて実証した[2]。

**[実験結果と考察]**分子 1 (図 1)は本研究で採用した弱交換相互作用系分子スピン系の一つであり、化学的に安定な TEMPO ラジカルを 10 個のメチレン鎖を介して結合させたビラジカルで、ラジカル間距離約 2.3 Å の弱交換相互作用系 2 電子系である。ラジカル部を還元した反磁性分子を宿主分子とし分子 1 を希釈させた単結晶を育成したところ、良好な希釈単結晶を初めて得た。X 線結晶構造解析の結果、宿主分子の単結晶は単斜晶系の  $Z=4$  であり、分子 1 は対称芯をもつことがわかった。従って、ESR スペクトルでは、静磁場が結晶

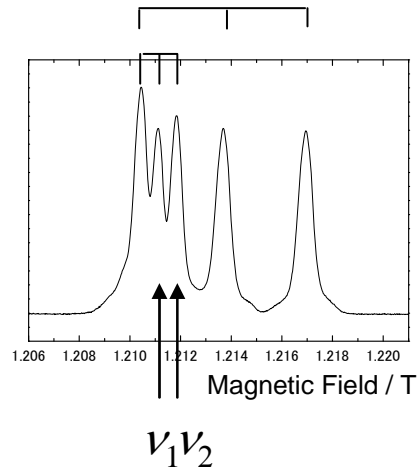


図 2. エコー検出磁場掃引スペクトル

軸、あるいは  $ca$  面内に配向する以外では、磁氣的に不等価な 2 つの分子 1 が観測される。詳細は紙面の関係で省くが、位相制御型 coherent dual ELDOR(Q-band)装置は、ブルカー社と共同で開発し、2 つのマイクロ波の相対的な位相を自由に制御できる。マイクロ波の位相制御は、一般的な多次元法の一つである Time Proportional Phase Incrementation (TPPI)法を適用し、マイクロ波の位相制御を実験的に初めて実現した。

図 2 に、分子 1 が磁氣的に不等価に観測される方向に静磁場を印加したときのエコー検出磁場掃引スペクトルを示す。2 組の三本線は、分子 1 が対称芯をもつので両端の TEMPO ラジカルの窒素由来の超微細構造であり、ESR 遷移の分解能では縮重している。分子 1 は、室温においても窒素核及び水素核由来の CW-ENDOR 信号を与えるので、ESR スペクトルの静磁場角度依存性と併せて、交換相互作用、磁氣的双極子相互作用テンソルなどの磁氣的テンソルを解析中である。また、図 3 に示すパルス系列を用いた実験 (DEER) では、分子 1 希釈単結晶系の DEER 信号が静磁場の配向に対して周波数変化を示すことが初めて観測された。詳細は、2 つのマイクロ波の位相を固定したコヒーレント ELDOR の結果も併せて当日報告する。

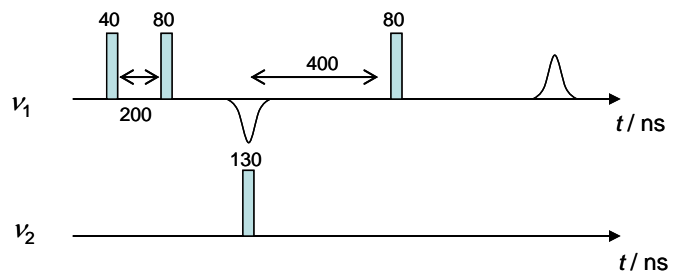


図 3. DEER のパルスシーケンス ( $V_1, V_2$ は図 2 参照)

**[文献]**

- (1) a. R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, and T. Takui, *Int. J. Quantum Information* **3**, 197-204 (2005). b. R. Rahimi, K. Sato, D. Shiomi, and T. Takui, in *Handbook of Modern Magnetic Resonance*, ed. by Graham A. Webb, Springer, 643-650 (2006).
- (2) K. Sato, R. Rahimi, N. Mori, S. Nishida, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Morita, A. Ueda, S. Suzuki, K. Furukawa, T. Nakamura, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Höfer, and T. Takui, *Physica E*, in press (2007).