

弱交換相互作用系ビラジカル Qubit の磁氣的パラメータと パルス CD-ELDOR 法による電子スピン 2 量子演算

(¹阪市大院理・²近大理工・³阪大院理・⁴阪大院基礎工・⁵福井工大・⁶ブルカーバイオスピン・⁷JST-CREST)

○ 中澤重顕^{1,7}、佐藤和信^{1,7}、吉野共広^{1,7}、伊瀬智章^{1,7}、西田辰介^{1,7}、森展之¹、R. D. Rahimi²、森田靖^{3,7}、豊田和男^{1,7}、塩見大輔^{1,7}、北川勝浩^{4,7}、中筋一弘⁵、原英之⁶、P. Carl⁶、P. Hofer⁶、工位武治^{1,7}

[序]近年、量子コンピュータの実現を目指して様々な物理状態を量子ビットとした研究がなされており、光子、超電導キャビティ、トラップイオン、量子ドット、分子の振動回転状態、核スピンをもちいた研究が進行している。我々は量子コンピュータの現実化にとって大きな課題となっているスケラビリティを展望して分子の電子スピン qubit に着目した。電子スピン-核スピン系では、量子高密度符号化の実験的検証・初等アルゴリズムの実証をはじめて実現した[1]。また、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 4π 周期性が顕に出現することをはじめて実証した[2]。分子電子スピンのみを qubit としてもちいた系としては、パルス磁気共鳴法をもちいて個々の qubit にアクセスするために molecular g-engineering という概念を提案し、スケラブルな多 qubit 系を可能とする Lloyd 型の物質系を設計・合成した[3]。これは、Lloyd モデルに関する最初の物質開発の例である。本研究では、2 電子スピン qubit 系として、量子演算を可能とする安定な弱交換相互作用系ビラジカルに着目し、Qバンド CW およびパルス ESR 法をもちいてこの系の磁氣的パラメータの決定をおこなった。

[結果]ラジカル qubit として化学的に安定な TEMPO ラジカルをもちい、2 量子ビット系として図 1 の弱交換相互作用ビラジカルを分子設計・合成した。これは、量子ビットは $S=1/2$ が良い量子数になり、量子演算に使う磁気双極子相互作用が 10 MHz 程度、結晶中で 2 つのラジカルの g テンソルの主軸が異なるように g-engineering を施すという分子設計指針に基づいた分子である。結晶中で隣のビラジカルとの磁氣的相互作用を小さくしデコヒーレンス時間を長くするために NO 基を CO 基に置換した反磁性分子を宿主分子とした希釈単結晶を初めて得た。宿主分子の X 線結晶構造解析の結果、g-engineering が成功していることが期待された。

ESR 遷移の帰属のために単結晶 ESR スペクトルの角度変化を測定・解析した。宿主分子の結晶構造解析と比較するとビラジカル分子は希釈単結晶中で宿主分子と同様の構造をもち g-engineering は成功していることがわかった。ESR スペクトルの角度依存性からそれぞれの Qubit 部の g テンソルと

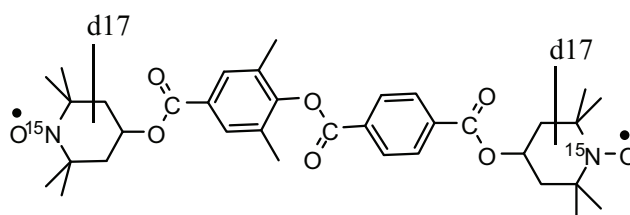


図 1

窒素原子 ^{15}N の超微細構造テンソル \mathbf{A} を決定した。 g テンソルと \mathbf{A} テンソルの主値は $g=(2.0095, 2.0061, 2.0021)$, $\mathbf{A}=(31.97, 21.47, 131.25)$ MHz であった。

Qubit 間の磁氣的相互作用の大きさを決定するために 3 パルス系列による Electron-Electron Double Resonance (ELDOR) 測定をおこなった。図 2 に結晶に貼った pqr 軸の qr 面での ELDOR 信号を示す。 q 軸から 40° の方向はビラジカルの 2 つのスピンを結ぶ方向に対応しているが、その方向に外部磁場を印加したとき最も高い ELDOR 周波数 (11.7 MHz) が得られた。 ELDOR 周波数の角度依存性から微細構造定数 D 、 E 値と交換相互作用 J を決定した。微細構造テンソル \mathbf{D} はトレースレスなので相互作用テンソル \mathbf{W} の等方性項を交換相互作用 \mathbf{J} として抽出した。

$$\mathbf{W} = \mathbf{D} + \mathbf{J} \quad (1)$$

ELDOR 周波数の角度依存性を解析した結果、微細構造定数 $D=-11.31$ MHz, $E = \pm 0.13$ MHz, $J=+0.37$ MHz と決定した。 D の符号は理論からのものである。これらの結果は弱交換相互作用ビラジカルの単結晶 ELDOR の初めての例である。 D 値から点双極子近似によるスピン間の平均距離を見積もると 19.0 \AA であった。この値はホスト分子の二つの CO 基の CC 間距離 19.8 \AA とよく対応している。当日には位相制御型 ELDOR 法による 2 量子演算の試みについて報告する。

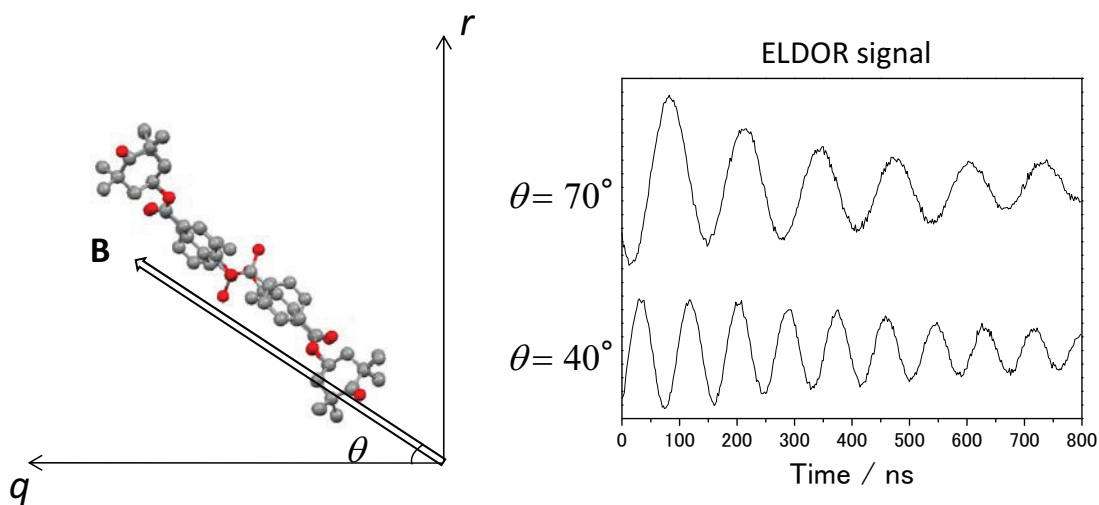


図 2 qr 面内での ELDOR 信号

[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*, **2007**, 40, 363.

[3]. K. Sato, S. Nakazawa, R. Rahimi, T. Ise, S. Nishida, T. Yoshino, N. Mori, K. Toyota, D. Shiomi, Y. Yakiyama, Y. Morita, M. Kitagawa, K. Nakasuji, M. Nakahara, H. Hara, P. Carl, P. Höfer, and T. Takui *J. Matr. Chem.* **2009**, 19, 3739-3754.