

電子-電子スピン系分子スピン QC を目指した

弱交換相互作用系ジラジカル(1~4)の設計と磁氣的希釈単結晶の開発

(阪市大院理¹・阪大院理²・阪大院基礎工³・JST CREST⁴) ○伊瀬智章^{1,4}・中澤重顕^{1,4}・西田辰介^{1,4}・佐藤和信^{1,4}・塩見大輔^{1,4}・森田 靖^{2,4}・北川勝浩^{3,4}・工位武治^{1,4}

分子スピン系は、電子/核スピン系を扱う量子コンピュータ/量子情報処理技術(QC/QIP)のハードとして注目を集めている。我々は以前、マロニルラジカルを用いた電子スピン1つと核スピン1つからなる単純な系において、量子エンタングルド状態を実験的に実証し、報告した[1]。この結果は有機ラジカル分子の電子及び核スピンの利用が QC/QIP の開発に有効であることを示している。本研究では、新たに電子-電子スピン系分子スピン量子コンピュータ実現を目指している。このアプローチではパルスマイクロ波を用いてそれぞれの電子スピンの位相を制御することで量子演算回路をつくる。最近我々は電子-電子スピン系分子スピン QC/QIP を実現するには、弱交換相互作用系ジラジカル誘導体をゲストとし、反磁性ホスト化合物の結晶格子中に希釈した磁氣的希釈単結晶の利用が有効であることを報告した[2]。また、プロトタイプモデルとして弱交換相互作用系 TEMPO ジラジカル誘導体を反磁性ホスト化合物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初めて成功した[2]。

今回、我々は電子-電子スピン系分子スピン QC/QIP のモデル分子として、量子演算を行うために分子内に非等価な g テンソルあるいは核スピン量子数を持つ新規弱交換相互作用系 TEMPO ジラジカル(1~4)及び、それぞれのニトロキッド部位にケトン構造を導入した新規反磁性ホスト分子(1a~4a)の設計と合成を行い(Fig.1)、磁氣的希釈単結晶を得ることに成功した (g-tensor engineering アプローチ)。本稿では、紙面の都合で 1 についてのみ述べる。

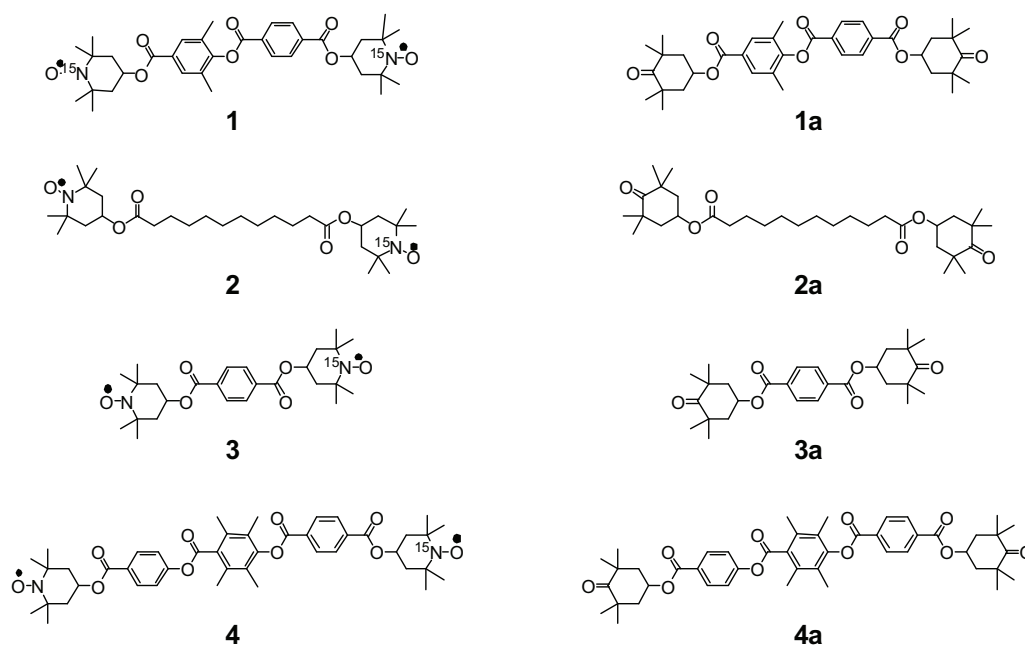


Fig. 1 弱交換相互作用系 TEMPO ジラジカル (1~4)及び反磁性ホスト化合物 (1a~4a)

得られたゲストジラジカル **1** の溶液 ESR 測定の結果、 ^{15}N の核スピン ($I = 1/2$) に由来する一見モノラジカルに由来するような 2 本線が得られた (Fig.2)。この結果はジラジカル分子内の交換相互作用 (J) が窒素のハイパーファイン (A_N) に比べ十分小さいことを示している。**1** 及び **1a** の X 線結晶構造解析の結果から、分子内に対称心を有していないため固体状態において分子内 2 か所のラジカル部位の g テンソルは非等価であることを明らかにした (Fig.3)。また、分子内のラジカル部位間距離は 20\AA であった。**1** の TEMPO 部位と **1a** のシクロヘキサノン部位の結合長及び結合角を比較するとほぼ等しいことから **1a** は **1** のよいホスト分子となりうるということが分かった。

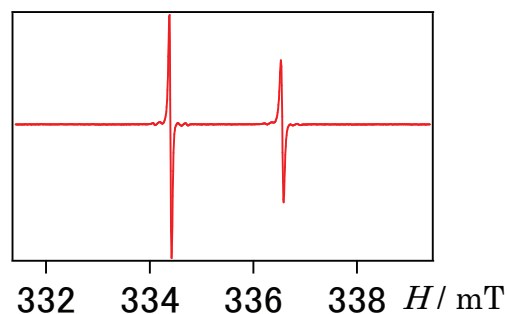


Fig.2 ジラジカル **1** の溶液 ESR スペクトル (r.t, toluene, 2×10^{-4} M, $\nu = 9.420235$ GHz)

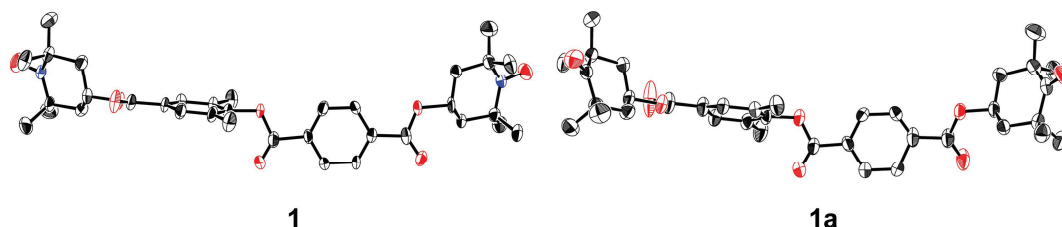


Fig. 3 ゲストジラジカル(**1**)及び反磁性ホスト化合物 (**1a**)の X 線結晶構造解析結果

1a をホスト分子とし、**1** と共結晶化を行うことで磁氣的希釈単結晶を得ることに成功した。得られた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、 Q バンド角度依存 ESR 測定を行った。その結果、実験で得られたスペクトルが **1a** の結晶構造解析結果をもとに計算したシミュレーションスペクトルと一致したことから、希釈単結晶中のゲストジラジカル分子はホスト分子と同じ *crystal symmetry* を持ち、また、*g-tensor engineering* に成功していることが分かった。これらの結果はこのジラジカル **1** 系の磁氣的希釈単結晶に対して、パルスマイクロ波を用いた選択的なスピン位相制御が可能であることを示している。最近、電子スピン qubit を制御できる Q バンドパルス CD-ELDOR (Coherent-Dual EElectron-electron DOuble Resonance) 技術の開発に成功し、現在この技術を用いて初歩的な量子演算を試みている。発表では分子スピン QC のモデル分子の分子設計と合成、及び Q バンド ESR によるスピン物性解析、磁気希釈単結晶系の結晶構造について報告する。

- [1] a) R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, and T. Takui, *Int. J. Quant. Info.*, **3**, 197(2005). b) K. Sato, R. Rahimi, 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, T. Takui, *Physica E*, 363-366 (2007). [2] 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, T. Takui, *J. Mater. Chem.*, **19**, 3739-3754(2009).