

2C06

金属フタロシアニンを経盤とする正方対称テトラニトロキシド ラジカルの多電子間交換相互作用：電子スピン量子ビットによる 量子シミュレータの構築を目指して

(阪市大院理,¹ クイーンズランド大 AIBN,² クイーンズランド大 CAI,³
阪大院理,⁴ 阪大院基礎工,⁵ JST CREST⁶) ○野崎 幹人,^{1,6} 中澤 重頭,^{1,6}
西田 辰介,^{1,6} 杉崎 研司,^{1,6} 佐藤 和信,^{1,6} 塩見 大輔,^{1,6} 豊田 和男,^{1,6}
Aaron S. Micallef,² Graeme R. Hanson,³ 森田 靖,^{4,6} 北川 勝浩,^{5,6} 工位 武治^{1,6}

【序】物質の量子状態そのものを、異なる量子系を用いてシミュレートする量子シミュレータは実用的な量子コンピュータ実装の中間地点として位置づけられ、NMR を用いた量子シミュレーションの可能性などが既に報告されている[1]。本研究では、核スピンに加え電子スピンの量子ビット化を目指し、金属配位フタロシアニンを骨格とするテトラニトロキシドラジカル ($\text{MPc}(\text{NO})_4$) [2]の多電子スピン系における交換相互作用及び超微細結合相互作用に注目した(図1参照)。4つのニトロキシドラジカルの局在性の強い電子スピンは弱交換相互作用系を構成し、量子情報処理・量子コンピュータのプロトタイプとして分子スピン量子ビット系[3]を形成する。我々は、テトララジカル $\text{MPc}(\text{NO})_4$ の ESR スペクトルを測定し、スペクトルシミュレーションと量子化学計算の結果をもとに、その電子構造・磁氣的性質を量子ビットリソースの観点から解析を試みた。また、多電子スピン間の複数相互作用をもつ電子スピンの量子ビット系としての活用とその量子情報処理への応用について検討した。

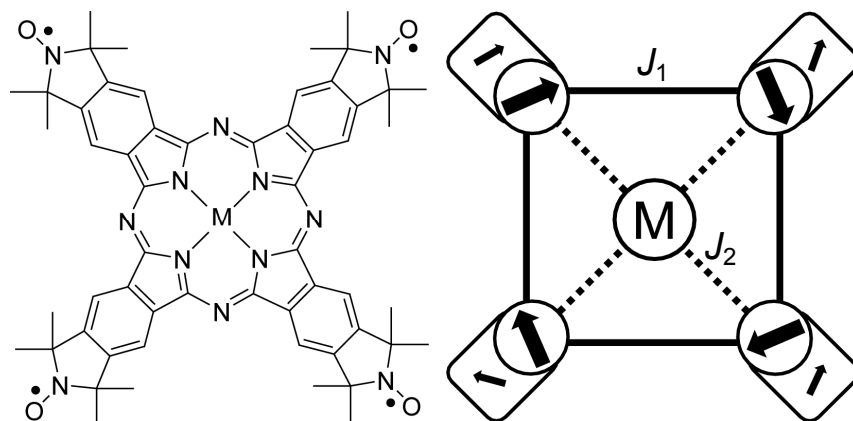


図1. $\text{MPc}(\text{NO})_4$ の分子構造と系内に働く主な相互作用の模式図。模式図中の M はフタロシアニン中に内包された金属イオンを表す。図中の大きな矢印と小さな矢印はそれぞれ電子スピンと窒素核スピンを表わす。電子スピン間は模式図中の直線 (J_1) および点線 (J_2) で表される交換相互作用で結ばれている。各ニトロキシドラジカル部位の電子-核スピン間は超微細結合相互作用で結ばれている。

【実験】溶液の CW-ESR スペクトルは Bruker Biospin 社製の E500 を用いて測定した。また同社製 E580 を用い Pulsed ELDOR (Q バンド) スペクトルを測定することで、剛体溶媒中での

ラジカル間の距離情報を直接的に得た。ラジカル間の交換相互作用を見積もるためには、EasySpin [4]及び自作のシミュレーションプログラムを用いてスペクトルシミュレーションを行った。

【結果と考察】図2に Mg^{2+} を含む $MgPc(NO)_4$ の溶液 ESR スペクトル (実線) とシミュレーションスペクトル (点線) を示す。実測スペクトルにはモノラジカル様の不純物由来の信号が重なっている (図2中の矢印部位)。見かけ上のスピン濃度で4%程度)。紙面の関係で、ここでは複雑なスペクトル解析の詳細は省略するが、 $J_1/k_B = \pm 10.8$ MHz, $J_2/k_B = \pm 20.0$ MHz (複号同順) としたとき、

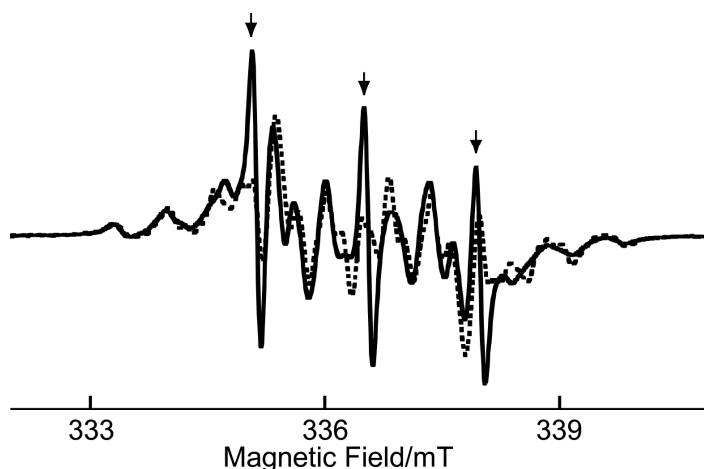


図2. 分子1 (金属:Mg) の溶液 ESR スペクトル ($T=300$ K, $\nu_{MW} = 9.449204$ GHz, エタノール:トルエン=1:9 混合溶媒)。点線は EasySpin によるシミュレーションスペクトル ($g_{iso} = 2.0058$, $|A_N|/g\mu_B = 40.23$ MHz, $J_1/k_B = 10.8$ MHz, $J_2/k_B = 20.0$ MHz)。

実測をよく再現するシミュレーションスペクトルが得られた。その量子状態の変化に着目して観測された等方的なスペクトル中の ESR 遷移を解析した結果、 $MPc(NO)_4$ の分子構造の高い対称性のために、各スピンサイトは単独で遷移を与えることは無く、かならず複数の電子スピンを励起する。電子スピンを量子ビットとして個別に操作するためには、異方的な相互作用の導入が不可欠である。3 つ以上の複数電子スピンの位相を現在のマイクロ波技術で制御することは技術的に容易ではないが[3]、一方、溶液状態の $MPcNO_4$ 中の電子スピンを量子ビットリソースとして活用するためには、合成スピン角運動量を基礎とする量子制御の考察、部分的な多量子ビット系量子エンタングルメントの生成の評価が不可欠であることがわかった。 $MPc(NO)_4$ は交換相互作用系としては最も複雑な実験分子スピン系であるので、目下 $MPc(NO)_4$ を骨格ともつ3電子-3N系について、解析を進めている。

一方で、中心金属の置換などにより実験的に磁氣的相互作用の制御が可能であることから、 $MPc(NO)_4$ は量子多体系などの量子系をシミュレートするための量子シミュレータとしての利用が期待される系といえる。現在、窒素核を ^{15}N に標識化した $MPcNO_4$ 系の ESR 測定や、 $MPc(NO)_4$ を磁氣的に希釈した単結晶系を合成し、磁氣的な相互作用を制御することを検討している。窒素の核スピン量子数を小さくすることにより、 $MPc(NO)_4$ の非常に複雑な ESR 遷移の数を極端に減らし、単純化できる。発表では、 $MPc(NO)_4$ 分子の電子構造・磁氣的性質の詳細を報告するとともに、 $MPcNO_4$ 分子の電子スピンおよび核スピンを量子ビットとする量子情報処理への応用について議論する。

【文献】

- [1] S. Somaroo, C. H. Tseng, T.F. Havel, R. Laflamme, D.G. Cory, *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **82**, 5381-5384.
- [2] G. M. Barrett, G. R. Hanson, A. J. P. White, D. J. Williams, A. S. Micallef, *Tetrahedron*, 2007, **63**, 5244-5250.
- [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, T. Takui, *J. Mater. Chem.*, 2009, **19**, 3739-3754.
- [4] S. Stoll, A. Schweiger, *J. Magn. Reson.*, 2006, **178**, 42-55.