3C03

パルスELDOR-NMR法による分子内スピン状態の量子制御

(阪市大院理¹, 阪大院理², 阪大院基礎工³, FIRST⁴) ○田中 彩香¹, 佐藤 和信^{1,4}, 吉野 共広¹, 西田 辰介^{1,4}, 中澤 重顕^{1,4}, Robabeh Rahimi¹, 豊田 和男^{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}

【序】我々は、分子スピン量子コンピュータの実現を目指し、マイクロ波(MW)パルスやラジオ波(RF)パルスによる電子スピン磁気共鳴技術を用いて、分子のスピン 量子状態を人為的に制御する(スピン量子状態制御)研究を進めている。高精度のス ピン制御技術を確立することにより、分子スピンを利用する量子情報科学への展開が 進展するものと思われる。これまで、安定ラジカルがもつ電子スピン及び核スピンを 対象にパルス電子-核二重共鳴(ENDOR)技術を適用することにより電子-核スピン 系における量子絡み合い状態の生成と検出を行ってきた[1-4]。その中で、核スピン 状態の操作の代わりに電子スピン状態をMWパルスで操作しても、電子-核スピン系 の量子状態変換が実現できることを示唆してきた[3]。パルスENDOR法による量子状 態制御では、高強度のRFパルスを用いたとしても核スピンの状態変換には数マイクロ 秒オーダーの時間を要するが、MWパルスではナノ秒オーダーで変換が可能になるた めにメリットが大きい。また、MWパルスは高強度パルスであるため、gn因子の小さ

い核も扱うことができると期待される。今回、2 種のマイクロ波周波数を用いるパルス電子-電 子二重共鳴(ELDOR)法を適用することにより、 電子-核スピン状態のMWパルスによる状態制 御技術の開発と高速制御を目的として、ジフェ ニルニトロキシドの希釈単結晶を用いた単結晶 パルスELDOR法による電子-核スピン量子状態 の評価法を検討した。



同位体置換ジフェニルニトロキシド 1

【実験】実験には、窒 素同位体及び重水素で 部分的に標識化したジ フェニルニトロキシド 1を重水素化ベンゾフ ェノン単結晶(ホスト 分子)中に希釈した混 晶単結晶を育成して用 いた。測定には、Bruker BioSpin 社 製 Elexsys E580に、共同開発した コヒーレントデュアル マイクロ波パルス照射



図1 分子1の単結晶 ESR スペクトル(a)、FID 検出磁場掃引 ESR スペクトル(b)、FID 検出周波数掃引 ESR スペクトル(c)

システムと高出力マイクロ波増幅アンプを組み込んだQバンドパルスELDOR分光器 を使用した。試料の温度は、home-designed のOxford社製Optistat SXMクライオスタッ トを用いて制御した。

【結果と考察】図1(a)~(c)に、静磁場が重水素化ベンゾフェノン単結晶のb軸に平行に 配向させた方向で観測した分子1の単結晶cw及びパルスESRスペクトルを示す。スペ クトルの超微細結合分裂は、窒素同位体(15 N)及び2つの水素核スピンに由来する。図 1(c)は、 $B_0 = 1207.5 \text{ mT}$ の静磁場下で第2マイクロ波周波数を33945.018±40 MHzの範囲 で掃引したものである。このスペクトルは、第2マイクロ波を第1マイクロ波と位相同 期をとることにより初めて実現し

たものである。

図2に、図上部に示す3パルス系 列を用いて測定した第2マイクロ 波周波数掃引スペクトルの磁場依 存性を示した。各色は挿入図に示 すEcho検出磁場掃引スペクトルの 矢印の色に対応しており、矢印で 示す磁場で観測したELDOR-NMR スペクトルである。各磁場におけ る観測する許容遷移のエコー強度 の変化を、第2マイクロ波パルスの 周波数依存性として観測され、近 傍の異なる遷移が誘起されること を示している。赤色と青色で示し たスペクトルの比較より、異なる 磁場で観測したスペクトルは、楕 円〇で示したように異なることを 示している。中央の磁場で観測し た紫色のスペクトルでは赤、青色 で観測される遷移が現れており、 同時に観測されたものと思われる。 現在、ELDOR-NMRスペクトルの 角度依存性の測定を行い、スペク トルの帰属とELDOR効果の定量的 な解析を進めている。これにより、



第2マイクロ波パルスによるELDOR効果と電子-核スピン状態の関係を明らかにし、 マイクロ波による電子-核スピン状態の量子状態制御と評価を目指している。

【文献】

- [1] R. Rahimi, K. Sato, T. Takui et al., Int. J. Quantum Inf., 3, 197-204(2005).
- [2] K. Sato, R. Rahimi, T. Takui et al., *Physica E*, 40, pp.363-366(2007).
- [3] K. Sato, S. Nakazawa, T. Takui et al., J. Mater. Chem., 19, pp.3739-3754(2009).
- [4] T. Yoshino, K. Sato, T. Takui et al., J. Phys. Chem. Lett., 2, pp.449-453(2011).