

分子電子スピン 2 量子ビット及び 3 量子ビットによる量子演算とエンタングルメント生成

(¹阪市大院理・²阪大院理・³阪大院基礎工・⁴ブルカーバイオスピン・⁵FIRST)

○中澤重顕^{1,5}、佐藤和信^{1,5}、伊瀬智章¹、西田辰介^{1,5}、吉野共広¹、文部一希¹、森田靖^{2,5}、豊田和男^{1,5}、塩見大輔^{1,5}、北川勝浩^{3,5}、原英之⁴、P. Carl⁴、P. Hofer⁴、工位武治^{1,5}

[序]我々は量子コンピュータの研究開発の過程で大きな課題となっているスケーラビリティを展望して、分子の電子スピンを qubit リソースとすることに着目してきた。電子スピン-核スピン系では、マロニルラジカルを用いて、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]。分子電子スピンを qubit とする系では、パルス磁気共鳴法をもちいて qubit にアクセスするために、molecular g-engineering という分子設計指針を提案してきた。スケーラブルな多 qubit 系を可能とする Lloyd 型の分子スピン系を具体的に設計し、そのプロトタイプを初めて合成した[2]。また、適切な qubit を合成化学的に開発するという意味で新たに「合成 qubit (Synthetic Qubit)」という概念を提唱した[3]。

本研究では、基本的な量子ゲートの 1 つである量子 CNOT ゲートや簡単な量子アルゴリズムを実行するために 2qubit および 3 qubit 系を分子設計・合成した (図 1)。電子スピンを qubit として安定に利用するためにこれらの分子はラジカル部位の NO 基を CO 基に置換した反磁性ホスト分子に磁氣的に希釈した。個々の qubit にアクセスするために分子 1 では、g-engineering を施した。分子 2 では結晶中で対称心をもつので A-engineering によって電子スピン部位を識別できるようにした。量子演算を磁気双極子相互作用を利用して行うために、交換相互作用は小さくし双極子相互作用が 10 から 20 MHz になるように分子設計した。分子 1 については、すでに全てのスピンハミルトニアンパラメータを決定し、量子 CNOT ゲートを実行した。分子 2 は分子 1 よりスピン間距離が短いので双極子相互作用による ESR シグナルの分裂が大きくなることが期待できる。今回、分子 2、3 についてスピンハミルトニアンパラメータを CW/Pulse-ELDOR (PELDOR) 法により決定し、分子 1 との比較等を行うことを目的とした。

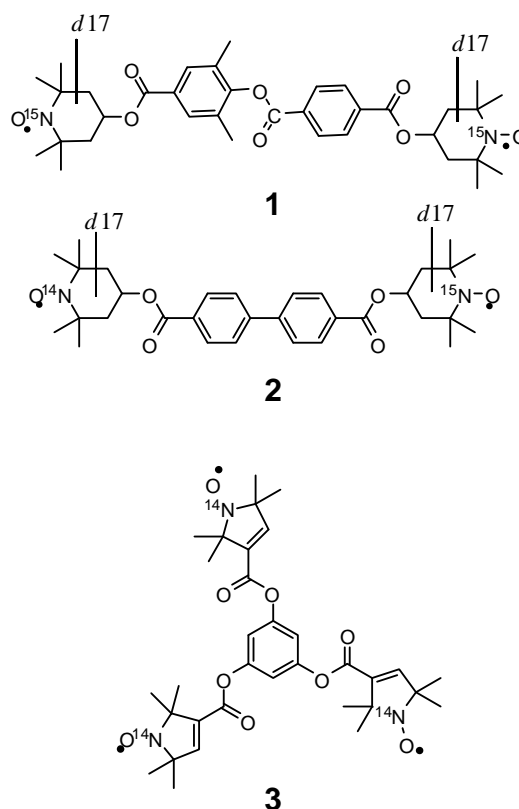


図 1 2 スピン及び 3 スピンの分子電子スピン qubit

[結果]分子 2 のホスト分子の X 線結晶構造解析の結果、分子は対称心をもつことがわかった。また、希釈単結晶系では、外部磁場を単結晶のどの方向に印加しても磁氣的に 1 分子だけが ESR で観測される系になっていることが分かった。

溶液中では双極子相互作用は平均化され交換相互作用も小さいので溶液 ESR スペクトルは ^{14}N と ^{15}N の超微細相互作用による 5 本線が観測された。

ESR 遷移の帰属及び磁氣的テンソルの決定のために単結晶 CW-ESR スペクトルの測定を行った。図 2 に単結晶に固定した pqr 軸の rq 面での ESR スペクトルの角度変化を示す。5 本以上の遷移が観測されており双極子相互作用による分裂が観測されていることから、磁氣的希釈が十分であることがわかる。微細構造テンソルを決定するために 4 パルス系列による PELDOR 測定を行った。現在、 pr , rp , rq の三面について CW ESR と PELDOR の測定をおこない解析を進行中である。

ELDOR 周波数の角度依存性の解析から、微細構造定数 D 、 E 値と交換相互作用 J を精度よく決定できる。スピン双極子相互作用テンソル \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 J として抽出できる。

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

分子 1 に関しては、微細構造定数 $D = -12.3$ MHz, $E = +0.03$ MHz, $J = -0.09$ MHz である。 D の符号は理論的に予想されるものである。分子 2 についても同様の解析をおこない、 D や J について比較を行うことができる。 D 値から点双極子近似によるスピンの平均距離を見積もることができるので X 線構造解析からわかる分子構造との比較をおこなう。当日、この 2 qubit 系を使った量子演算についての議論やトリラジカル 3 の希釈単結晶についての CW-ESR/PELDOR の解析について詳細に議論する。

[参考文献]

- [1](a) R. Rahimi, K. Sato, K. Furukawa, K. Toyota, D. Shiomi, T. Nakamura, M. Kitagawa, 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] Y. Morita, Y. Yakiyama, S. Nakazawa, T. Murata, T. Ise, D. Hashizume, D. Shiomi, K. Sato, M. Kitagawa, K. Nakasuji, T. Takui, *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, 132, 6944-6946.
- [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.

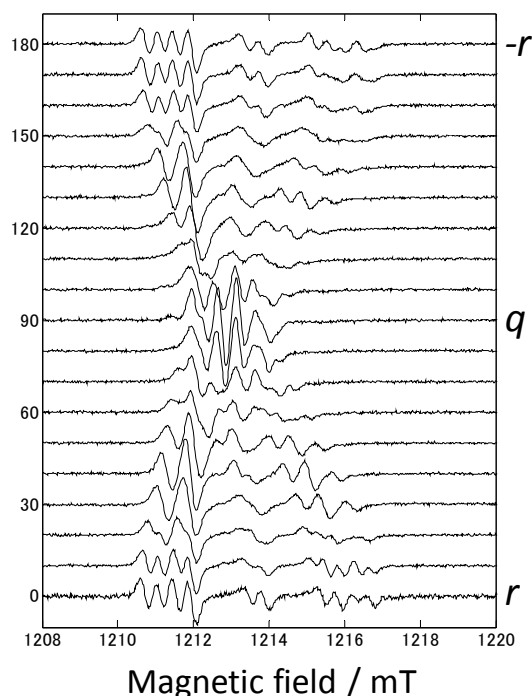


図 2 分子 2 の希釈単結晶に対する CW-ESR スペクトルの角度変化