

同位体置換DPNOにおける電子-2核スピン量子ビットの パルスENDORによる制御

(阪市大院理¹, 阪大院理², 阪大院基礎工³, FIRST⁴)

○吉野共広,¹ 西田辰介,^{1,4} 中澤重顕,^{1,4} 佐藤和信,^{1,4} Rahimi, D. Robabeh,¹
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】量子エンタングルメントを利用した量子コンピュータ・量子情報処理(QC/QIP)は、現在国内外でその実現に向けて開発研究が盛んに行われている。量子エンタングルメントは、「量子もつれあい」とも呼ばれ、量子状態特有の絡み合い状態であり、今日の古典的情報処理に対するQIPにおける利点を享受する上で欠かすことのできない重要な要素と言われている。

我々は、これまで分子内の電子スピンや核スピンを量子ビットとして扱い QIP を行う「分子スピンQC」を目指し、様々な開殻系安定有機分子を中心に電子スピン-核スピン系[1-3]や電子スピン-電子スピン系のモデルとなる分子の探索[4]、基盤技術や装置の開発を行ってきた[5]。本研究では、開殻系安定有機分子、特に電子スピンのバス量子ビットとして働く π 共役系を用い、電子スピンと相互作用し、クライアント量子ビットとして扱える核スピンを増やすことにより、量子ビット数の増大と初歩的な量子状態制御を目標としている。制御可能な量子ビットの数を3個以上に増やすことができれば、量子テレポーテーションなどの基本的な量子情報通信技術の物質量子ビット系での実験的検証が可能となる。

我々は、 π 共役系を有する安定な開殻系有機分子として古くから知られるジフェニルニトロキッド(DPNO)を、1電子-複数核スピン量子ビット系となる分子スピンバスの pilot 分子として研究を行ってきた[5]。これまで液相系では、DPNO フッ素誘導体のクライアント量子ビット数の拡張[6]を試み、固相系においては、窒素核や水素核を部分的に同位体置換した DPNO 誘導体のベンゾフェノン希釈単結晶を用いた ESR/ENDOR の研究を行ってきた。そして、DPNO 系がマイクロ波パルスやラジオ波パルスの照射に対して非常に安定で、分子スピンバス QC のモデル分子として適していることを示してきた。今回、この DPNO 系に対してパルス ENDOR を適用することにより、電子-核スピンの2量子ビットのみならず3量子ビット系(電子と核スピン2つ)のエンタングルメントの生成と評価を行い、初歩的な量子情報制御への応用について考察した。

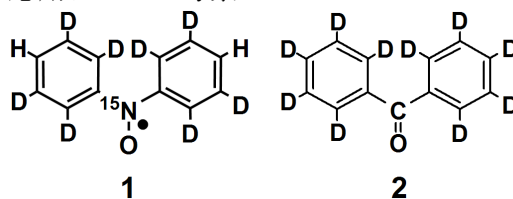


図1 DPNO のパラ位を除く H 核と ^{14}N 核を同位体置換した DPNO 誘導体 **1**
(*para-h*₂-DP¹⁵NO-*d*₈) と希釈単結晶のホスト分子、重水素化ベンゾフェノン **2**
(Benzophenone-*d*₁₀)

【実験】試料には、部分的に同位体置換した *para-h*₂-DP¹⁵NO-*d*₈ (分子 **1**) を重水化ベンゾフェノン(分子 **2**) 単結晶 (P2₁2₁, Z = 4) 中に磁氣的に希釈した希釈単結晶(混晶)を用いた(図1)。パルス ESR/ENDOR スペクトルや量子エンタングルメント検出のための位相干渉スペクトルの測定は、Bruker BioSpin 社と共同開発した Coherent Dual マイクロ波を利用することが可能な E580(Qバンド)分光器を用いた。

【結果と考察】Qバンドパルス ESR/ENDOR 法を用いた量子状態制御の実験は、分子**1**の磁氣的希釈単結晶の *ab* 面内で行った。電子と H 核スピンからなる2量子ビットの量子エンタングルメントの生成と検出は、¹⁵N核と H 核に由来する ESR 遷移の分裂が大きい静磁場配向で行った。エンタングルド状態は、擬純粋状態に対してアダマール変換に相当するラジオ波90°パルスと C-NOT ゲートに相当する

マイクロ波 180° パルス照射することにより、ESRとNMR遷移を選択的に操作して生成した。エンタングルド状態の評価は、時間比例位相増加 (Time Proportional Phase Increment : TPPI) 法[7]を用いてマイクロ波パルスとラジオ波パルスによる複数の輻射場間の位相干渉効果を観測して行った。図2に、ESR及びNMR共鳴遷移の選択的励起によって観測された分子1の位相干渉スペクトルの例を示す。マイクロ波パルスとラジオ波パルスの位相を異なる周波数で回転させることにより干渉効果として観測された6.2 MHzの周波数成分は、電子-核スピン間のエンタングルド状態が生成していることを示している。ラジオ波パルスとマイクロ波パルスの組み合わせを変えることにより、異なるエンタングルド状態を任意に生成することも明らかにした。

図3に、量子エンタングルメントの模式図を示す。電子スピン量子ビットを赤矢印で示し、それと超微細相互作用する三種類の核スピン量子ビット ($I=1/2$) を黒丸で表している。大きい超微細相互作用をもつ水素核をH1, 小さい方をH2とすると、図2で観測された量子エンタングルメントは、図3 a) に示す

ように電子スピンとH1核スピンとの間で生成したものであり、2量子ビットの量子エンタングルメントとして波線で示している。図3 b)は、電子スピンと水素核スピン(H1とH2)からなる3量子ビットの系において、量子状態制御に関わるスピン副準位を直方体の各頂点で図式化したものである。直方体の鉛直・縦方向、水平方向の各稜は、ESR及びNMR許容遷移を表し、面内の対角線が2量子ビット系のエンタングルメントに相当する。図2で観測した2量子ビットのエンタングルメントは、赤色の対角線で表される。3量子ビットの状態操作は、2つの水素核スピンが磁氣的に等価となる配向で行った。一つのラジオ波パルスで2つの核スピンを同時に操作することができるため、3つ(電子スピンと2つの核スピン)の量子ビットの制御が可能となる。その結果として、位相干渉効果に2量子ビットでは出現しない付加的な周波数成分が観測された。当日は、3量子ビットが関与する量子状態の評価を含めて議論を行う。

【文献】

- [1] M. Mehring, J. Mende, and W. Scherer, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 153001 (2003).
- [2] R. Rahimi, K. Sato, T. Takui et al., *Int. J. Quantum Inf.*, **3**, 197(2005).
- [3] K. Sato, R. Rahimi, T. Takui et al., *Physica E*, **40**, 363 (2007).
- [4] Y. Morita, Y. Yakiyama, T. Takui et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 6944 (2010).
- [5] K. Sato, S. Nakazawa, R. Rahimi, T. Takui et al., *J. Mater. Chem.*, **19**, 3793 (2009).
- [6] T. Yoshino, S. Nishida, K. Sato, Y. Morita, T. Takui et al., *Phys. Chem. Lett.*, **2**, 449 (2011).
- [7] Peter Höfer, *Appl. Magn. Reson.*, **11**, 375 (1996).

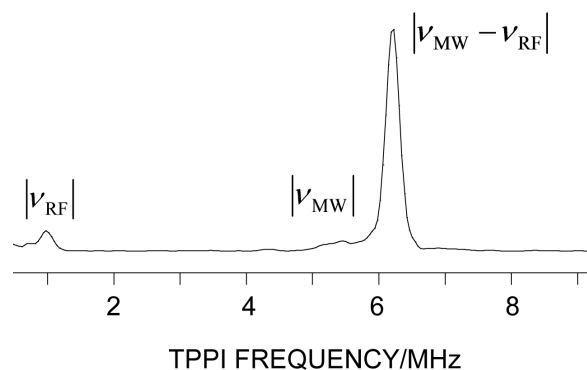


図2 分子1のTPPI検出により観測された位相干渉スペクトル。静磁場 B_0 が分子2の結晶座標系の ab 面内の a 軸から 52.0 度の方向において、磁場 1.21477 T, マイクロ波周波数 34.1302 GHz を用いて観測された。測定温度は、 20 K である。

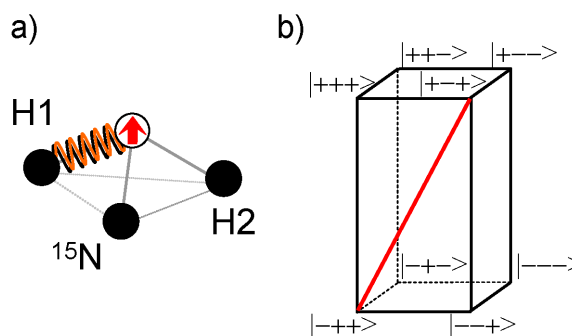


図3 量子エンタングルメントの模式図。(a)分子1の量子ビット模式図。(b) ESR 及び NMR 許容遷移を稜で表す直方体表示。赤の実線(面の対角線)は、2量子エンタングルメントの関係を表わす。