

1P050

## 単結晶 ELDOR 法による量子ビットモデル分子の電子-核スピン状態評価

(阪市大院理<sup>1</sup>, 阪大院理<sup>2</sup>, 阪大院基礎工<sup>3</sup>, FIRST<sup>4</sup>)

○田中 彩香<sup>1</sup>, 佐藤 和信<sup>1,4</sup>, 吉野 共広<sup>1</sup>, 西田 辰介<sup>2,4</sup>, 中澤 重顕<sup>1,4</sup>, Robabeh Rahimi<sup>1</sup>,  
豊田 和男<sup>1,4</sup>, 塩見 大輔<sup>1,4</sup>, 森田 靖<sup>2,4</sup>, 北川 勝浩<sup>3,4</sup>, 工位 武治<sup>1,4</sup>

### Electron-nuclear spin state of a molecular spin qubit model as studied by single crystal ELDOR spectroscopy

(<sup>1</sup>Graduate School of Science, Osaka City University, <sup>2</sup>Graduate School of Science, Osaka University, <sup>3</sup>Graduate School of Engineering Science, Osaka University, <sup>4</sup>FIRST-Quantum Information Processing Project) ○Ayaka Tanaka<sup>1</sup>, Kazunobu Sato<sup>1,4</sup>, Tomohiro Yoshino<sup>1</sup>, Shinsuke Nishida<sup>2,4</sup>, Shigeaki Nakazawa<sup>1,4</sup>, Robabeh Rahimi<sup>1</sup>, Kazuo Toyota<sup>1,4</sup>, Daisuke Shiomi<sup>1,4</sup>, Yasushi Morita<sup>2,4</sup>, Masahiro Kitagawa<sup>3,4</sup> and Takeji Takui<sup>1,4</sup>

【序論】我々は、分子スピン量子コンピュータ/量子情報処理技術 (QC/QIP) の開拓を目指し、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。スピン量子ビットを用いる QC/QIP において、操作可能な核種の増加や、それに伴う制御技術の精密化は、開発・改良の余地を多く残している。これまでに、パルス電子-核二重共鳴 (ENDOR) 技術により、安定ラジカルがもつ電子スピン及び核スピンを対象に電子-核スピン系における量子絡み合い状態の生成と検出[1-4]、電子スピン qubit の C-NOT ゲート操作[5]を行ってきた。その中で、核スピンを操作する代わりに電子スピンを 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提案し、実証してきた[3]。分子内の各スピンを量子ビットとして使用するためには、緩和時間内で多くの操作が必要となるため、操作時間の短縮は重要である。高強度の RF パルスを用いたパルス ENDOR 法による核スピンの量子状態制御と比較し、MW パルスを用いた核スピンの状態変換では、高周波数を用いる分だけ変換にかかる時間の大幅な短縮が見込めるため、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、 $g_n$  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、同位体置換ジフェニルニトロキシド 2 種 (図 1. 分子 1、2) 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。

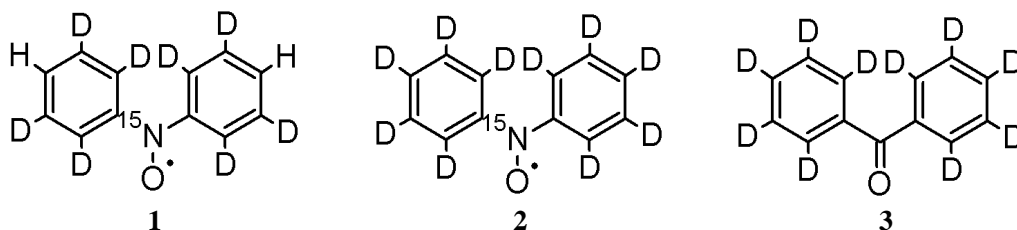


図 1. 同位体標識ジフェニルニトロキシド分子 1, 2 とベンゾフェノン 3

【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ッド(分子 **1**, **2**)を重水素化ベンゾフェノン単結晶(ホスト分子、**3**)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。結晶の角度依存性の測定には 1 軸ゴニオメーターを用いた。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 2 に、静磁場が結晶の **b** 軸方向と平行な場合に観測された分子 **1** のエコー検出磁場掃引スペクトルと、シグナルが観測された磁場における、 $\pi(\nu_2) - \tau_1 - \pi/2 - \tau_2 - \pi - \tau_2 - \text{Echo}$  の 3 パルス系列を用いて測定した第 2 マイクロ波周波数 ( $\nu_2$ ) 掃引 ELDOR スペクトルの

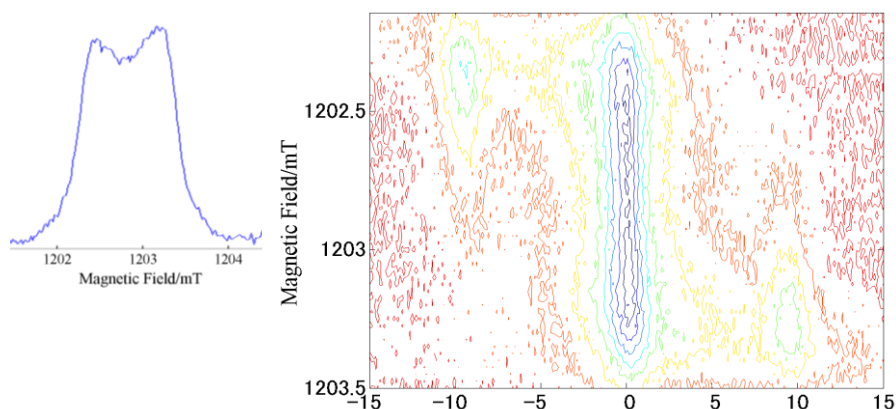


図 2.  $B_0 \parallel b$  軸における分子 **1** のエコー検出磁場掃引スペクトル(左)と 2D-ELDOR-NMR スペクトル(右)

磁場依存性を示した。低磁場側では低周波数側に、高磁場側では高周波数側にシグナルが現れている。これは、各磁場で観測している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しているものであり、近傍の異なる遷移が誘起されることを示している。モニターする遷移、及び第 2 マイクロ波によって誘起され得る遷移を、図 3 に示す。 $^{15}\text{N}$  核スピンの焦点をあてて観測を行ったが、図 2 の ELDOR 効果の帰属から、H 核スピンの分裂も観測されたことがわかった。一般に、H 核スピンについては超微細禁制遷移の遷移確率が小さく ELDOR 効果の観測が困難であるため、RF と MW による ENDOR 効果と ELDOR 効果を併用することにより、核スピン選択的なスピン制御が期待される。現在、角度依存性を含めて ELDOR 効果の定量的解析を進めている。発表では、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について報告する。

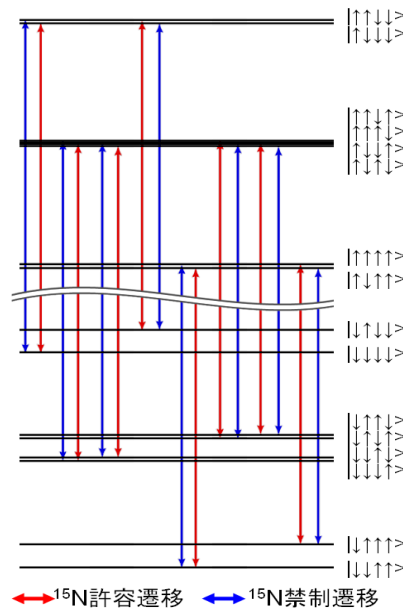


図 3.  $B_0 \parallel b$  軸における分子 **1** のエネルギーダイアグラム  
 $|m_S, m_N, m_H, m_H\rangle$

#### 【文献】

- [1] R. Rahimi, K. Sato, T. Takui et al., *Int. J. Quantum Inf.*, **3**, pp.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).
- [5] S. Nakazawa, S. Nishida, K. Sato, Y. Morita et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **51**, pp.9860-9864(2013).