

分子性量子ビットの開発

Development of molecular qubits

ユーザー氏名 / User's Name :

楊井 伸浩^{ab} / Nobuhiro Yanai^{ab}, 山内 朗生^a / Akio Yamauchi^a, 井上 魅紅^a / Miku Inoue^a, 折橋 佳奈^a / Kana Orihashi^a
(^a九州大学, ^b東京大学 / ^aKyushu University, ^bThe University of Tokyo)

実施機関担当者 / Person in Charge of ARIM :

浅田 瑞枝 / Mizue Asada, 中村 敏和 / Toshikazu Nakamura (自然科学研究機構 分子科学研究所 / Institute for Molecular Science)

KEY WORDS

分子性量子ビット, 量子センシング, パルスESR, 多孔性金属錯体
Molecular Qubit, Quantum Sensing, Pulse ESR, Metal-Organic Frameworks (MOFs)

概要 / Overview

量子コンピューティングや量子センシングといった量子技術の研究が世界中で盛んに進められている。これらの技術の基本的な構成要素が量子ビットであり、量子センシングはその量子力学的な性質を利用したセンシング手法である。特定の量子状態が外部環境に極めて敏感に反応するという特徴を活かし、従来に比べて高い感度や分解能でのセンシングの実現が期待されている。分子の電子スピンを用いた分子性量子ビットは検出対象の化学種と近接して相互作用でき、構造を厳密に制御可能であるという特徴を有する。

九州大学の楊井准教授(現東京大学教授)らは世界に先駆けて室温で光初期化可能な分子性量子ビットを用いた化学物質の量子センシングを可能にする材料を開発してきたが、その研究プロジェクトをスタートする段階から支援担当者のグループと評価方法について密に議論を重ねてきた。量子ビットの評価に必要なパルスESR及び過渡ESR測定を支援担当者のグループとの共同研究として行い、実験データの取得からデータの解析・解釈、論文執筆、論文査読コメントへの対応までの全ての過程において提案代表者のグループと支援担当者のグループの密な協力により実施された。

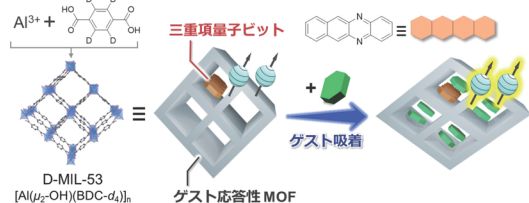
Research into quantum technologies such as quantum computing and quantum sensing is being actively pursued around the world. The basic building block of these technologies is the quantum bit, and quantum sensing is a sensing method that utilizes the quantum mechanical properties of the quantum bit. By making use of the characteristic that specific quantum states respond extremely sensitively to the external environment, it is hoped that sensing with higher sensitivity and resolution than before will be achieved. Molecular quantum bits, which use the electron spin of molecules, have the characteristic that they can interact with the chemical species to be detected in close proximity and that their structure can be strictly controlled.

分子性量子ビットの量子重ね合わせ状態が化学物質に反応

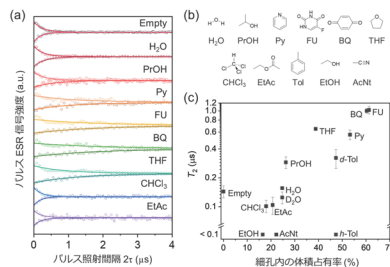
Quantum superposition state of molecular qubits responds to chemical substances

●ケミカル量子センシングの実現への重要な一歩

- ① 分子性量子ビットは量子センシングに有用と期待されているが、その応用は極低温下でほとんどであり、室温で様々な化学物質のセンシングを行える手法は開発されていなかった。
- ② パルスESR測定により多孔性金属錯体(MOF)中の三重項量子ビットの量子重ね合わせ状態を評価し、ゲスト分子選択的に変化することを発見した。
- ③ MOF中における量子ビットの運動性が量子重ね合わせ状態反応の鍵であることを明らかにし、化学物質に対する量子センシングを実現する上で重要な基盤的知見が得られた。



Akio Yamauchi, Saiya Fujiwara, Nobuo Kimizuka, Mizue Asada, Motoyasu Fujiwara, Toshikazu Nakamura, Nobuhiro Yanai
"Quantum chemical sensing using molecular triplet qubits in a flexible metal-organic framework" *Nature Commun.*, 2024, 15, 7622.

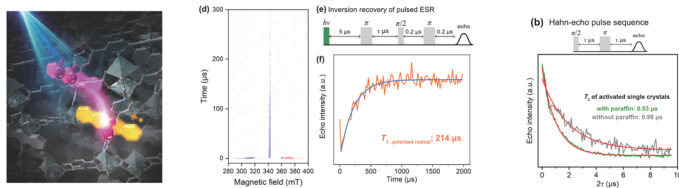


MOF中での超長寿命スピン偏極の生成

Super long-lived spin-polarization generation in a MOF

●極めて長い緩和時間を有するラジカルの発生に成功

光励起によって偏極した三重項状態を生成する5, 12-ジシアザテトラセン(DAT)を含む配位子を密に集積したMOFの光励起過渡ESR測定を行ったところ、MOF中において光励起されたDATは電子スピン偏極した三重項状態を生成し、その後の電荷分離によりDAT三重項からDATラジカルへと電子スピン偏極が移行することを明らかにした。MOF中におけるDATラジカルの形成は、光照射前後のESRシグナル強度の比較ならびにパルスESRシグナルのNutation周波数より確認された。またMOF中のDATラジカルが室温において $T_1=186\mu\text{s}$, $T_2=0.49\mu\text{s}$ という極めて長い緩和時間を示すことを明らかにした。



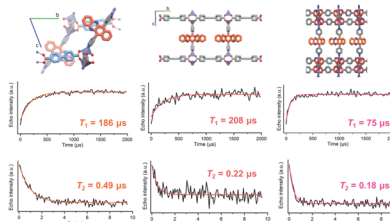
Kana Orihashi, Akio Yamauchi, Saiya Fujiwara, Mizue Asada, Toshikazu Nakamura, Joseph Ka-Ho Hui, Nobuo Kimizuka, Kenichiro Tateishi, Tomohiro Uesaka, Nobuhiro Yanai
"Spin-Polarized Radicals with Extremely Long Spin-Lattice Relaxation Time at Room Temperature in a Metal-Organic Framework" *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, 145, 27650-27656.

スピン偏極寿命とMOF構造の相関を解明

Elucidating the correlation between spin polarization lifetime and MOF structure

●超長寿命スピン偏極材料の設計指針の確立

DAT含有配位子と3種類の異なる補助配位子を組み合わせて、DATの配列が異なる3種類のMOFを合成して評価を行った。いずれのMOF中においても光励起後の電荷分離によってDATカチオンラジカルを生成し、このラジカルが150 μs 以上の T_1 と0.2 μs 以上の T_2 を示すことを観測したことから、MOF中の色素ラジカルが室温で比較長い T_1 及び T_2 を持つことの一般性を確認した。3種類のMOFの T_2 の値を比較することにより、 $\pi-\pi$ 相互作用によりDATの運動性を抑制することが長い T_2 を得るために有用であることを明らかにした。



Kana Orihashi, Akio Yamauchi, Miku Inoue, Bhavesh Parmar, Saiya Fujiwara, Nobuo Kimizuka, Mizue Asada, Toshikazu Nakamura, Nobuhiro Yanai
"Radical qubits photo-generated in acene-based metal-organic frameworks" *Dalton Trans.*, 2024, 53, 872-876.

CONTACT

東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻
Department of Chemistry, Graduate School of Science, The University of Tokyo
教授 楊井 伸浩 Professor Nobuhiro Yanai



@NobuhiroYanai
@Yanai_Lab

HP of the Yanai Lab:

