

金属錯体磁性体を用いた分子スピキュビットの新展開

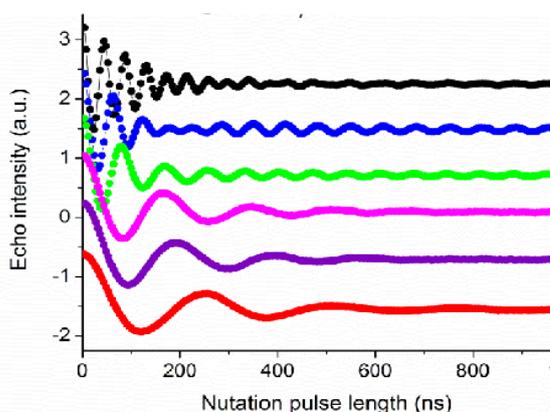
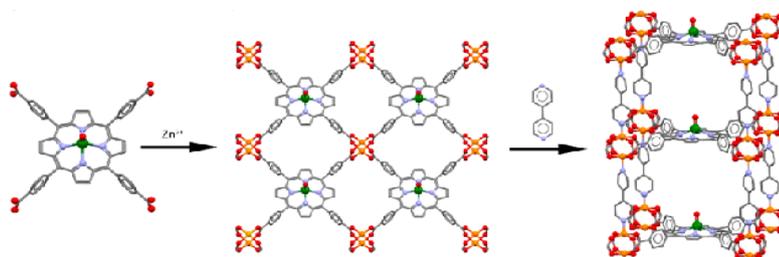
(東北大院理) ○山下 正廣

Perspective in Molecular Spin Qubits in Coordination Compounds-Based Magnets (*Graduate School of Science, Tohoku University*) ○Masahiro Yamashita

Classical bits are composed of 0 and 1, while quantum bits (qubits) are composed of the superposition of 0 and 1. Quantum computer with qubits is very superior to supercomputer with the classical bits. Nowadays the qubits are realized in superconducting loops, photons, quantum dots, trapped atoms, and nitrogen vacancy. More recently, molecular spin qubits have attracting much attention due to the merits such as (1) spin phase control by pulse EPR, (2) high spin-polarization of the electron spin, and (3) high molecular designability. In order to realize the qubits, the longer spin-spin relaxation time (T_2) and spin-lattice relaxation time (T_1) are needed. In my lecture, I will focus on the molecular spin qubits in coordination compounds-based magnets by using the following four strategies; (1) crystal engineering method, (2) orbital engineering method, (3) g-tensor engineering method, and (4) molecular design method.

Keywords : Molecular Spin Qubits; Quantum Computer; Coordination Compounds

古典的なビットは0と1から構成されている。一方、キュービットは0と1の重ね合わせから構成されている。キュービットを用いた量子コンピューターは古典的なビットを使ったスーパーコンピューターに比べて計算速度が飛躍的に速いために、世界的に量子コンピューターの開発研究が盛んに行われている。これまでに、キュービットとして超伝導ループや量子ドットやダイヤモンド欠陥などで研究が行われてきた。一方、最近では分子スピキュビットが高い分子設計性やパルス EPR を用いることができるために、盛んに研究されるようになってきた。しかし、問題点は、スピンスピン



緩和時間(T_2)およびスピン-格子緩和時間(T_1)が短いことである。これを克服するために、我々のグループでは、4種の方法を用いて研究を進めている。本講演では、この4種の方法に関して紹介する。

1. 結晶工学的的手法 (Crystal Engineering Method)

VO(TPP)錯体はかなり優れたキュービット候補として盛んに研究が行われていたが、まだ不十分であった。我々はVO(TPP)を基本素子として、3次元金属-有機構造体(MOF)に組み込むことにした。前ページの上図で示したように逐次合成法で、VO(TPP) (0-D)に Zn^{2+} イオンを加えて2次元錯体を合成し、次にビピリジンを加えて目的とする3次元MOF錯体の合成に成功した。前ページの下図で示したように室温でRabi振動を観測することに成功した。テラヘルツ分光を行ったところ、出発分子のVO(TPP) (0-D)では分子の振動によるピークが約 60m^{-1} に観測されたが、3-D MOF錯体では観測されなかった。つまり、MOFにすることにより格子振動を抑制して、室温でもコヒーレンスが観測できるようになったわけである¹⁾。次にハロゲン架橋Pt(II)-Pt(IV)錯体 $[Pt(\text{chxn})_2][PtX_2(\text{chxn})_2]Y_4$ ($X=\text{Cl, Br, I; Y=X, ClO}_4$)に $[Cu(\text{chxn})_2]Y_2$ を5%ドーピングした $[Pt_{0.95}Cu_{0.05}(\text{chxn})_2][PtX_2(\text{chxn})_2]Y_4$ を合成して、交流磁化率によりドーピングされた Cu^{2+} イオン($S=1/2$)の磁化緩和時間を測定した。結果は、次元性に関しては1次元<2次元であり、架橋ハロゲンに関しては $\text{Cl}<\text{Br}<\text{I}$ であった。これは、いずれも格子振動の大きさからうまく説明できる。

2. 軌道工学的的手法(Orbital Engineering Method)

一般に Ni^{3+} 錯体($S=1/2$)は不安定であるが、 $[Ni(\text{cyclam})X_2]Y$ 及び $R[Ni(\text{mnt})_2]$ 錯体は比較的安定である。前者は八面体型六配位構造を持っており、不対電子は d_z^2 軌道にあるが、後者は平面型四配位構造であり、不対電子は d_{xz} 軌道にある。交流磁化率を用いた磁化緩和時間測定によると、前者の化合物の方が緩い磁化緩和を示す。これは分子振動の違いによるものであることが明らかになった。

3. g-テンソル工学的的手法 (g-Tensor Engineering Method)

VO(TPP)錯体とCrN(TPP)は同型の四角錐型構造を持っている。これらのESRを測定するとg-値の異方性はVO(TPP)の方が等方的である。そのために交流磁化測定により、磁化緩和が遅いことが分かった。

4. 分子設計手法 (Molecular Design Method)

マクロサイクル配位子としてポルフィリンからアニュレン配位子に変えたVO(Annulene)に置換基を誘導した錯体を2種類の錯体を合成した。ヘキシル基を導入した錯体に比べて、プロピル基を導入した錯体はこれまでのVO(TPP)よりも遅い磁化緩和を示した。この置換基効果の原因については現在、検討中である。

1) T. Yamabayashi, M. Atzori, L. Tesi, G. Cosquer, F. Santanni, M. E. Boulon, E. Morra, S. Benci, R. Torre, M. Chiesa, L. Sorace, R. Sessoli, and M. Yamashita, **J. Am. Chem. Soc.**, 140, 12090-12101(2018)