

PRESS RELEASE (2024/1/4)

五重項状態の室温量子コヒーレンスの観測に成功
～超高感度な量子センシングへの重要な一歩～**ポイント**

- ① 有機分子を用いてより多くの電子からなる量子ビットを作ることは将来の量子技術に向けて重要であるが、4つの電子スピンを持つ五重項状態の量子コヒーレンスを室温で達成した例はなかった。
- ② 分子性材料の五重項状態の量子コヒーレンスを室温で観測することに初めて成功し、金属錯体骨格(MOF)中で色素部位の運動性を抑制することがその実現の鍵であることを明らかにした。
- ③ 超高感度な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。

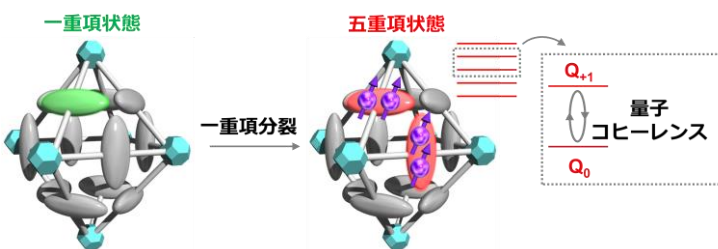
概要

一重項分裂は、光照射により生成された1分子の励起一重項状態が近傍の分子とエネルギーを共有し、2つの励起三重項状態を生成する現象です。この過程で生じる五重項状態と呼ばれる特殊な量子状態は、量子コンピューティングをはじめとする量子技術の最小単位である量子ビット^{*1}に利用できることから近年研究が進んでいます。しかし、量子ビットとして利用するにあたり必要とされる、五重項状態の量子コヒーレンス^{*2}を室温で観測した例はありませんでした。

今回、九州大学大学院工学研究院の山内朗生大学院生、田中健太郎大学院生(当時)、楊井伸浩准教授、同大学大学院理学研究院の宮田潔志准教授、神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの婦木正明特命助手、小堀康博教授らの研究グループは、九州大学大学院工学研究院の君塚信夫教授、同大学大学院理学研究院の恩田健教授、神戸大学人間発達環境学研究科の佐藤春実教授らと共同して、室温における五重項状態の量子コヒーレンス観測に初めて成功しました。

量子コヒーレンスの観測は量子センシング^{*3}への応用上非常に重要です。本研究ではMOF中に色素を高密度に集積化することにより、五重項状態を発生させ、かつ室温下でもその量子コヒーレンスを100ns(ナノ秒)以上維持できることを見出しました。今回の成果により、複数の電子スピンから成る量子ビットを室温で生成するための要件が明らかとなり、今後のMOFの多孔性を活かした超高感度な量子センシングの実現が期待されます。

本研究成果は、2024年1月4日(木)(日本時間)にアメリカ科学振興協会の国際学術誌「Science Advances」にオンライン掲載されます。



(参考図) 一重項分裂により生成された五重項状態の量子コヒーレンスの生成

研究者らからひとこと: 今回の成果は材料の合成、測定、解析を得意とするグループが密に協力することで得られました。精密な構造制御や多孔性の付与ができるという分子性材料の利点を生かすことで、これからの量子の時代における材料化学の活躍の場を見出していきます。

【研究の背景】

近年、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進められています。これらの技術の最も基本的な構成要素となるのが量子ビットであり、分子の電子スピンを利用した分子性量子ビットは化学構造を精密に制御できるという利点から近年盛んに研究が進められています。

有機色素分子に光を照射して生じる励起状態には、2つの電子スピンの向きが逆向きで互いに打ち消しあった励起一重項状態と、打ち消しあっていない励起三重項状態が存在します。一重項分裂は、1分子の励起一重項状態から2つの励起三重項状態が生成される現象であり、この過程で五重項状態という特殊なスピン状態が生成されます（図1）。五重項状態はスピン偏極⁴した4つの電子スピンを持つことから、単一の電子スピンを用いる通常の量子ビットより高度な4量子ビットとしての利用可能性が期待されています。五重項状態の電子スピンを多重量子ビットとして用いるためには、マイクロ波による電子スピンの量子コヒーレンス生成が第一に必要となりますが、これまで五重項状態の量子コヒーレンスを室温で観測した例はなく、どのように分子を設計すればそれを達成できるかという指針もありませんでした。

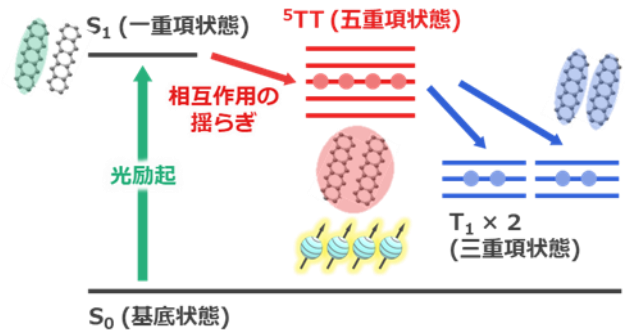


図1 一重項分裂の模式図。1分子の色素を励起すると近傍の2分子間でエネルギーが共有されて2つの三重項状態を生成するが、その途中過程で五重項状態が生成する。

【研究の内容と成果】

今回の研究では、一重項分裂により生成された五重項状態の量子コヒーレンスを室温下で初めて観測することに成功しました。さらに、五重項状態の量子コヒーレンスを観測可能なほど長時間維持するためには分子の運動を抑制的にすることが重要であることを明らかにし、五重項状態を量子ビットとして用いるための設計指針を示しました。

一重項分裂により五重項状態が生成されるためには、分子運動に伴う電子軌道同士間の相互作用の揺らぎが必要となります。しかしながら、量子コヒーレンス自身は分子運動により色素同士の配向が乱雑に変化すると失われてしまいます。結果として、分子運動が激しい室温下においては観測するまでの数十ナノ秒の間には量子コヒーレンスが失われてしまい、観測は困難でした。

そこで本研究では、一重項分裂を起こす代表的な色素であるペンタセンの誘導体を、多孔性金属錯体（MOF）と呼ばれる剛直な構造を持つナノ多孔性材料中に配位子として高密度に導入しました。これにより色素の運動を最小限に留め、パルス電子スピン共鳴（ESR）⁵測定により室温で初めて五重項状態の量子コヒーレンスを観測しました。また、スピンの運動について分子配向変化も考慮した量子シミュレーションにより測定結果を再現したところ、色素部位の運動性が抑制され、色素同士の配向の変化が小さいMOFの骨格格子振動が五重項状態の生成と量子コヒーレンスの保持に寄与していることが示唆されました（図2）。

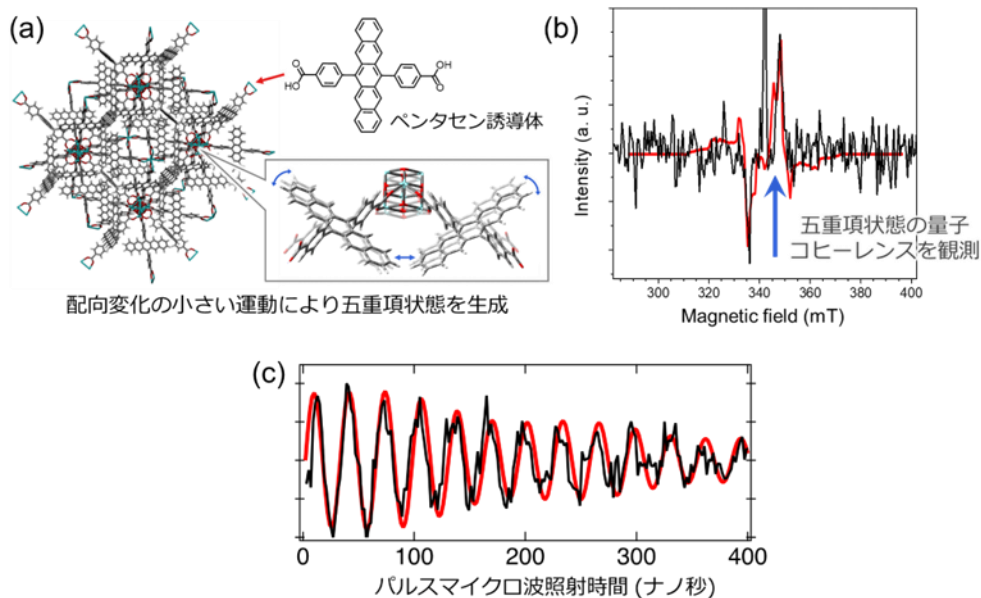


図 2 (a) 本研究で用いた MOF の概略図。ペンタセン誘導体を高密度に組み込むことにより、分子運動を配向変化の小さいものだけに抑え、量子コヒーレンスを維持可能な五重項状態を生成した。(b) パルス ESR 測定により得られた五重項状態のスペクトル（黒線）とそのシミュレーション（赤線）。(c) 外部磁場を(b)の矢印位置に固定しマイクロ波パルス照射によって観測された量子コヒーレンス（黒線）とそのシミュレーション（赤線）。

【今後の展開】

本研究により、五重項状態の量子コヒーレンスを利用するには、どのような材料設計が重要なのが明らかとなりました。複数の電子スピンからなる多重量子ビットの生成指針は、今後の量子コンピュータを含む広範な量子技術において重要な一歩になると考えられます。本研究で用いた多孔性の材料はその内側に他の分子を取り込むことが可能であり、超高感度な量子センシングにつながることを期待されます。

【用語解説】

(※1) 量子ビット

0 と 1 で表される古典的なビットの概念をエネルギーの異なる 2 準位の量子系へと拡張したものであり、その例として電子スピンの該当します。

(※2) 量子コヒーレンス

量子力学に特有の性質の 1 つであり、複数の状態が混ざり合った重ね合わせ状態のことを指します。電子スピンの場合、エネルギー分裂に対応した周波数の強いマイクロ波を適切な時間照射することによって、2 つの状態の重ね合わせ状態、すなわち 2 状態間の量子コヒーレンスを生み出すことができます。

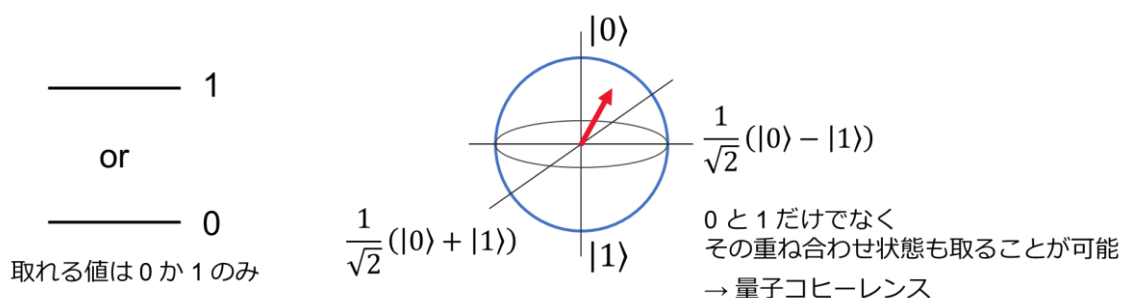


図 3 古典ビットと量子ビットの概略図。量子ビットは 2 状態の重ね合わせ状態も取ることができ、ここに生じる量子コヒーレンス特有の性質を利用することにより、様々な応用が可能となる。

(※3) 量子センシング

量子ビットの量子力学的な性質を利用してセンシングを行う技術で、従来に比べて高感度・高分解能なセンシングが可能になると期待されています。

(※4) スピン偏極

分裂したエネルギー準位のうち1つの準位にスピンの向きが多く占有している状態（スピンの向きが揃った状態）のことをスピン偏極した状態と言います。量子コヒーレンスの生成効率はスピンの偏極度合いに比例するため、量子技術への応用には大きなスピン偏極が求められます。

(※5) パルス電子スピン共鳴 (ESR)

ESR は磁場中でスピンの向きに応じてエネルギー分裂した電子スピンに対しマイクロ波を照射することにより、電子スピンに関する情報を得る手法です。パルス ESR 法では、マイクロ波パルスをサンプルに対し照射することにより、量子コヒーレンスの生成や操作・観測を行うことができます。

【謝辞】

本研究の一部は、JST CREST (JPMJCR23I6、研究課題名：スピン超偏極分子材料の創出に基づく量子医療診断)、JST 創発的研究支援事業 (JPMJFR201Y、研究課題名：MRI・NMR の未来を担う「トリプレット超核偏極の材料化学」)、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム (JPMJSP2136)、JST 科学技術イノベーション創出に向けた大学フェロシップ創設事業 (JPMJFS2132)、日本学術振興会 科学研究費 (JP20H02713、JP22K19051、JP20K21174、JP20KK0120、JP22K19008、JP20H05676、JP23KJ1694)、日本学術振興会 学術変革領域研究「動的エキシトンの学理構築と機能開拓」(JP20H05832)、公益財団法人 住友財団、公益財団法人 村田学術振興財団、公益財団法人 光科学技術研究振興財団、九州大学エネルギー研究教育機構 (Q-PIT) のモジュール研究プログラムからの支援により行われました。

【論文情報】

掲載誌：Science Advances

タイトル：Room-temperature quantum coherence of entangled multiexcitons in a metal-organic framework

(多孔性金属錯体中における量子もつれ多重励起子の室温量子コヒーレンス観測)

著者名：山内朗生・田中健太郎・婦木正明・藤原才也・君塚信夫・笠僚宏・西郷将生・恩田健・楠本遼太・上野那美・佐藤春実・小堀康博・宮田潔志・楊井伸浩

DOI：10.1126/sciadv.adi3147

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学 大学院工学研究院 応用化学部門 准教授 楊井 伸浩 (ヤナイ ノブヒロ)

TEL：092-802-2836

Mail：yanai[at]mail.cstm.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL : 092-802-2130 FAX : 092-802-2139

Mail : koho[at]jimu.kyushu-u.ac.jp

神戸大学 総務部広報課

TEL : 078-803-5106 FAX : 078-803-5088

Mail : ppr-kouhoushitsu[at]office.kobe-u.ac.jp

科学技術振興機構 広報課

TEL : 03-5214-8404 FAX : 03-5214-8432

Mail : jstkoho[at]jst.go.jp

<JST 事業に関すること>

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ

安藤 裕輔 (アンドウ ユウスケ)

TEL : 03-3512-3531 FAX : 03-3222-2066

Mail : crest[at]jst.go.jp