

## パルス EPR 法によるスピン相関三重項対のスピン量子コヒーレンス観測

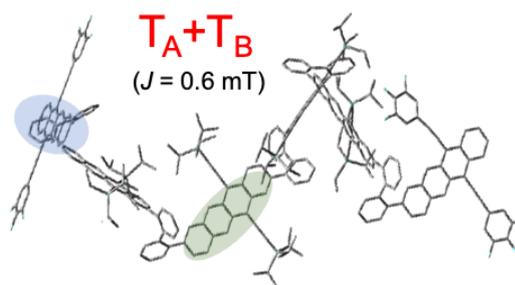
(神戸大分子フォト<sup>1</sup>・CREST, JST<sup>2</sup>・慶応大理工<sup>3</sup>) ○小堀 康博<sup>1,2</sup>・婦木 正明<sup>1,2</sup>・羽曾部 卓<sup>3</sup>

Spin coherence in a spin correlated triplet pair observed by pulsed EPR (<sup>1</sup>Molecular Photoscience Research Center, Kobe University, <sup>2</sup>CREST, JST, <sup>3</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Keio University) ○Yasuhiro Kobori,<sup>1,2</sup> Masaaki Fuki,<sup>1,2</sup> Taku Hasobe<sup>3</sup>

Singlet fission (SF) is a phenomenon that produces multiple triplet excitons (triplet pairs) from a single photon. The multiple excitons produced in this process are expected not only to improve the efficiency of organic solar cells, but also to be applied to extended molecular quantum computing by using four qubits composed of unpaired electrons that make up a triplet pair. We have observed the electron spin polarization of multiple excitons by time-resolved EPR and characterized the spin quantum states of strongly correlated quintet multiple excitons and spin correlated triplet pairs (SCTP) due to exciton dissociation.

*Keywords* : Singlet Fission; Qbit; Spin Correlated Triplet Pair; Pulsed EPR; Coherence

一重項励起子分裂(SF)は、単一の光子から複数の三重項励起子(三重項ペア)を生む現象として知られている。この過程で生成する多重励起子は、有機太陽電池の超高効率化にとどまらず、三重項ペアを構成する不対電子による四量子ビットを基本単位とした分子量子コンピューティングへの応用が期待される。我々は三重項ペアの電子スピン分極を時間分解 EPR 法で観測し、強相関五重項多重励起子や、励起子解離によるスピン相関三重項対のスピン量子状態を特徴づけ、1)遠隔地に互いに離れた三重項ペアによる一重項、三重項、五重項の量子重ね合わせとしてスピン波動関数が表現されること、2)スピン量子状態分布は、この量子重ね合わせによる基底関数組み換えに伴うユニタリ変換を用いた量子演算として得られることを実証した[1-4]。これらは、光照射によって遠隔地に励起子が離れた三重項ペアのスピン量子もつれ状態を準備できることを示している。本研究では、パルス電子スピン共鳴法を用い、多量体で構成される連結系分子(図)の励起子分裂による三重項ペア[2]を観測した。SF後のスピン変換ならびに解離に対する振電的機構を明らかにするとともに、パルスマイクロ波によるスピン量子コヒーレンス制御を行った。



- 1) A. Yamauchi, M. Fuki, Y. Kobori, K. Miyata, N. Yanai, *et. al.*, *Sci. Adv.* **2024**, *10*, eadi3147.
- 2) S. Nakamura, M. Fuki, Y. Kobori, T. Hasobe, *et. al.* *ACIE* **2023**, *62*, e202217704.
- 3) Y. Kobori, *et. al.* *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 2934. 4) Y. Kobori, *et. al.* *J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 9411.