

Dynamic Nuclear Polarization Induced by Laser and Microwave

Kazuyuki Takeda^A, Kiyonori Takegoshi^B, and Takehiko Terao^{AB}

JST-CREST^A, Department of Chemistry, Graduate School of Science, Kyoto University^B

We are investigating a possibility of improving the NMR sensitivity using photo-excited electron spins. For this purpose, we are making fundamental studies on a dynamic nuclear polarization (DNP) technique by cross polarization with electron spins in the photo-excited triplet state on the basis of the Shmidt's work [1]. The proton polarization obtained in a single crystal of either undeuterated or deuterated naphthalene doped with pentacene is essentially the same with the electron polarization of about 63%, indicating that the theoretically maximum polarization has been attained in the present experiment for the first time. The buildup time in deuterated naphthalene (357 s) is much shorter than in normal naphthalene (7890 s). We also succeeded in the DNP experiments in powder samples by limiting the field sweep range to the sharp peak width [2]. Even in the 60 mg powder sample of 99.2% deuterated naphthalene, a spectrum of the residual protons could be observed with high sensitivity in a single scan in the field of 0.3 T. Furthermore, we have created polarization at a low field and observed the spectrum at a high field using a sample shuttle system to improve the resolution. These results may be useful for improving the NMR sensitivity in chemically and biologically interesting systems and initializing the NMR quantum computer.

[1] A. Hensta, T.-S. Lin, J. Schmidt, and W. Th. Wenckebach, *Chem. Phys. Lett.* 165, 6 (1990).

[2] K. Takeda, K. Takegoshi, and T. Terao, *Chem. Phys. Lett.* 345, 166 (2001).

©List of publications and presentations(after last Symposium)

(1) Publications

- 1) 北川勝浩, 量子コンピュータへの挑戦—量子ソロバンから量子コンピュータへ—, 生産と技術 第52巻 第3号 (2000), p.67-69.
- 2) K.Hashi, T.Shimizu, A.Goto, H.Kitazawa, G.Kido, "Experimental aspects of an NMR quantum computer with CeP", Applied Physics A 70 (2000) 359-360
- 3) A.Goto, R.Miyabe, T.Shimizu, H.Kitazawa, T.Abe, G.Kido, K.Hashi, K.Shimamura and T. Fukuda, "NMR study of the Lithium Fluoride, YLiF_4 : A Test for the Possible Crystal Quantum Computing Device", Physica B
- 4) A.Goto, R.Miyabe, T.Shimizu, H.Kitazawa, T.Abe, G.Kido, K Hashi, K.Shimamura and T.Fukuda, "Investigation for the Possible Crystal NMR Quantum Computing Devices with Lithium Fluorides, BaLiF_3 ", Physica B
- 5) A.Goto, T.Shimizu, H.Kitazawa, T.Abe, G.Kido, K Hashi, K.Shimamura and T.Fukuda, "Investigation for nuclear spin couplings in the lithium fluorides as possible candidates for a crystal NMR quantum computing device", Applied Physics A
- 6) G.Kido, K Hashi A.Goto, T.Shimizu, H.Kitazawa, "Progress of solid-state quantum computers at NRIM", Physica B (2001年 Vol.298)
- 7) 北川勝浩, 分子で作る量子コンピュータ, 科学と工業 第54巻 第4号 (2001), p.459-462.
- 8) 北川勝浩, NMR 量子コンピュータの近況, 数理科学 6月号 (2001), p.56-63.
- 9) D.Ulam-Orgikh and M.Kitagawa, SPIN SQUEEZING AND DECOHERENCE LIMIT IN RAMSEY SPECTROSCOPY — Even sub-optimal entanglement can achieve absolute improvement —, QUANTUM COMMUNICATION, COMPUTING, AND MEASUREMENT 3 (2001), p.453-456.
- 10) K. Takeda, K. Takegoshi and T. Terao, Dynamic nuclear polarization by photoexcited-triplet electron spins in polycrystalline samples, Chem.Phys.Lett. (2001) 345,166
- 11) 竹内繁樹, 「量子計算、量子情報通信の未来と展望」, 数理科学 456巻 (2001), p.64-71.
- 12) 竹内繁樹, 「量子計算と量子情報通信—何が可能になるのか—」, 電子情報通信学会誌 84巻 (2001), p.17-25.
- 13) 竹内繁樹, 「量子計算ってなに?」, システム/制御/情報 45巻6号 (2001), p.351-352.
- 14) Shigeki Takeuchi, Beam like twin photon generation using type-II parametric down conversion., OpticsLetters 26巻11号 (2001), p.843-845.
- 15) M. Ozawa and H. Nishimura, "Local transition functions of quantum Turing machines", Theoret. Informatics and Appl. 34 (2000) 379-402.
- 16) M. Ozawa, "Operations, disturbance, and simultaneous measurability", Phys. Rev. A 63 (2001) 032109(1-15).
- 17) M. Ozawa, "Controlling quantum state reduction", Phys. Lett. A, 282 (2001) 336-342.

(2) Presentations

- 1) M.Kitagawa, K.Yamashina, S.Tojyo and D.Ulam-Orgikh, 「In Search for Molecules which Calculate Quantum Mechanically」, The Third SANKEN International Symposium (March 14-15, 2000, Osaka), Proceedings p.96-97.
- 2) 小澤正直 (名古屋大学), 「間接測定における状態変化と不確定性原理」, 日本物理学会 (2000年9月23日, 新潟)

- 3) A.Goto, R.Miyabe, T.Shimizu, H.Kitazawa, T.Abe, G.Kido, K.Hashi, K.Shimamura and T. Fukuda, "NMR study of the Lithium Fluoride, LiF_4 : A Test for the Possible Crystal Quantum Computing Device" The 14th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, くにびきメッセ, 2000年9月24日~29日
- 4) A.Goto, R.Miyabe, T.Shimizu, H.Kitazawa, T.Abe, G.Kido, K.Hashi, K.Shimamura and T. Fukuda, 「Investigation for the Possible Crystal NMR Quantum Computing Device with the Lithium Fluoride, BaLiF_3 」 The 14th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, くにびきメッセ, 2000年9月24日~29日
- 5) G.Kido, K.Hashi, A.Goto, R.Miyabe, T.Shimizu, H.Kitazawa, "Progress of solid-state quantum computers at NRIM" The 14th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics, くにびきメッセ, 2000年9月24日
- 6) 北川勝浩, 「量子計算: その物理的実現-NMR量子コンピュータを中心として-」, 第61回全国大会公開シンポジウム 情報処理学会 (2000年10月3日, 松山), 「新しい計算パラダイム」報告集 p.11-18.
- 7) 武田和行, 竹腰清之理, 寺尾武彦 (京都大学大学院理学研究科化学専攻) 「光・マイクロ波誘導核偏極」第39回NMR討論会 (2000年11月8-10日, 東京), 講演要旨集 p.48.
- 8) 清水 禎, 後藤 敦, 北澤 英明 (金属材料技術研究所・機能特性研究部 現 物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 端 健二郎 (理化学研究所・ミュオン科学研究室) 「核双極子線幅シュミレーターの試作」第39回NMR討論会, こまばエミナース, 2000年11月8日~10日
- 9) 竹内繁樹, 「光子を用いた量子情報処理」, 理研シンポジウム (2000年11月22日, 埼玉)
- 10) 北川勝浩, 「分子を使ったNMR量子計算の多qubit化 (More Qubits for Molecular NMR Quantum Computation)」, 第4回量子情報技術研究会 電子情報通信学会 量子情報技術時限研究専門委員会 (2000年11月30日, 東京), 資料 QIT2000-24~47 p.105-110.
- 11) 北川勝浩, 「量子コンピュータ開発の最前線-核スピン量子コンピュータの多ビット化-」, 新しい計算パラダイムシンポジウム2000 情報処理学会 (2000年12月14日, 東京), 論文集 p.3-10.
- 12) T. Terao, Dynamic nuclear polarization by photo-excited electron spins, PACIFICHEM 2000 (December 15-18, 2000, Honolulu)
- 13) 北川勝浩, 「核スピン量子コンピュータの多ビット化」, 応用物理学会 応用電子物性分科会 (2001年1月18日), 会誌 第7巻 第1号 p.62-69.
- 14) 北川勝浩, 「NMR量子コンピュータの現状と課題」, 応用物理学会 量子エレクトロニクス研究会 (2001年1月26日, 長野), 「量子情報処理」講演資料 p.18-19.
- 15) 竹内繁樹, 「量子コンピュータと光技術」, レーザー学会 (2001年1月30-31日, 東京)
- 16) 竹内繁樹, 「シンポジウム開催にあたって」, (2001年3月27-30日, 東京)
- 17) 辻野賢治, 本山佳典, 竹内繁樹, 笹木敬司, 「光子数検出器を用いた量子テレポーテーション実験の検討」, 日本物理学会 (2001年3月27-30日, 東京)
- 18) 清水 禎, 後藤 敦 (金属材料技術研究所・機能特性研究部 現 物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 端 健二郎 (理化学研究所・ミュオン科学研究室) 宮部 亮 (東京理科大) 「20T 大型磁石によるNMR開発」日本物理学会 2001年春季大会, 中央大学 多摩校舎, 2001年3月27日~30日
- 19) 北澤 英明, 清水 禎, 後藤 敦, 阿部 英樹, 辻井 直人, 木戸 義勇, 鈴木 孝 (金属材料技術研究所・機能特性研究部 現 物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 端 健二郎 (理化学研究所・ミュオン科学研究室) 「1/2核スピン系CePの単結晶育成と核磁気共鳴」日本物理学会 第56回 年次大会, 中央大学 多摩校舎, 2001年3月27日

- 20) 小澤正直, 「情報理論と量子力学: その融合と今後の課題」日本物理学会 (2001年3月28日, 東京)
- 21) T. Terao, Dynamic nuclear polarization by photo-excited electron spins, Gordon Research Conference on Magnetic Resonance (June 17-21, 2001, Bristol)
- 22) M. Ozawa, Entropy changes in generalized quantum measurements and completely positive map valued measures, The Second ESF QIT Conference: Quantum Information Theory and Quantum Computing (July 10-18, 2001, Gdansk, Poland)
- 23) Shigeki Takeuchi, 「Quantum Information Technology Using Photons」, CLEO Pacific Rim 2001 (July 15-19, 2001, Makuhari)
- 24) T. Terao, K. Takeda, and K. Takegoshi, Dynamic nuclear polarization by photo-excited electron spins, 14th Conference of the International Society of Magnetic Resonance (August 19-23, 2001, Rhodes), Book of Abstracts p. 115.
- 25) M. Kitagawa, 「Challenges in Bulk Ensemble NMR Quantum Computation」, ERATO Mini-Symposium (August 24, 2001, 東京)
- 26) Shigeki Takeuchi, 「Twin photon Beams for Single photon Generation」, The 7th International Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01) (August 26-30, 2001, Tokyo)
- 27) K. Tsujino, S. Takeuchi and K. Sasaki, 「A detailed analysis on the Fidelity of Quantum Teleportation using photons」, The 7th International on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01) (August 26-30, 2001, Tokyo)
- 28) A. Fujiwara, 「Statistical Estimation of a Quantum Channel」, The 7th International on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01) (August 27, 2001, Tokyo)
- 29) D. Ulam-Orgikh and M. Kitagawa, 「One-to-one correspondence of spin-squeezing and concurrence in the maximum multiplicity subspace」, The 7th International on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-Tokyo'01) (August 29, 2001, Tokyo)
- 30) M. Kitagawa, 「Initialization, Entanglement and Scalability in Bulk-Ensemble NMR Quantum Computation」, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 31) K. Nagashima and M. Kitagawa, Quantum Circuit Design for NMR Quantum Computers, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 32) D. Ulam-Orgikh and M. Kitagawa, Exact solution for two-axis twisting Hamiltonian, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 33) Shigeki Takeuchi, 「Quantum information technology using photons」, ERATO workshop on Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 34) H. Nishimura, On quantum computation with some restricted amplitudes, ERATO Workshop on Quantum Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 35) M. Ozawa, Quantum measurements and information theory, ERATO Workshop on Quantum Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 36) A. Fujiwara, 「Statistical Estimation of a Quantum Channel」, ERATO Workshop on Quantum Information Science 2001 (EQIS'01) (September 6-8, 2001, Tokyo)
- 37) T. Terao, Studies on Dynamic Nuclear Polarization Induced by Laser and Microwave, 2nd Alpine Conference on Solid-State NMR (September 8-13, 2001, Shamonix)
- 38) 竹内繁樹, 岡本亮, 笹木敬司, 「蛍光光子対を用いた単一光子源の光子対分布」, 日本物理学会 (2001)

年9月17-20日, 徳島)

- 39) 辻野賢治, 竹内繁樹, 笹木敬司, 「混合状態にある光子体対源を用いた量子テレポーテーションの忠実度解析」, 日本物理学会 (2001年9月17-20日, 徳島)
- 40) 北澤 英明、徐祥明、端 健二郎、清水 禎 (物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 「希土類リン化合物の核磁気共鳴」日本物理学会 2001年秋季大会、徳島文理大学徳島校、2001年9月17日
- 41) 端 健二郎、清水 禎、後藤 敦 (物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 宮部 亮 (東京理科大) 大木 忍 (JST) 「強磁場の技術開発」日本物理学会 2001年秋季大会、徳島文理大学徳島校、2001年9月17日~20日
- 42) 宮部 亮 (東京理科大) 端 健二郎、清水 禎、後藤 敦、木戸 義勇 (物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 大木 忍、町田 進 (JST) 「光ポンピングNMR技術の開発」日本物理学会 2001年秋季大会、徳島文理大学徳島校、2001年9月17日~20日
- 43) 竹内繁樹, 「光子を用いた量子計算」, 東北大学通研研究会「大規模量子コンピュータの実現に向けて」 (2001年9月27-28日, 仙台)
- 44) 清水 禎、端 健二郎、後藤 敦 (物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 宮部 亮 (東京理科大) 大木 忍 (JST) 「Inpによる量子計算機の提案」第40回NMR討論会、京都パークホテル、2001年11月14日~16日
- 45) 端 健二郎、清水 禎、後藤 敦 (物質・材料研究機構 ナノマテリアル研究所) 宮部 亮 (東京理科大) 大木 忍 (JST) 「強磁場NMRの技術開発」第40回NMR討論会、京都パークホテル、2001年11月14日~16日