

Авторы поздравляют
члена-корреспондента РАН В.П. Федина
с 70-летним юбилеем

УДК 544.2+ 543.429.22

МАСШТАБИРУЕМЫЙ СПОСОБ НАНЕСЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ КУБИТОВ НА ПОВЕРХНОСТЬ МОКП МОФ-808

© 2024 г. А. С. Томилов^{1, 2}, А. А. Язикова^{1, 2}, А. Р. Мельников¹,
К. А. Смирнова¹, А. С. Порываев¹, М. В. Федин^{1, 2, *}

¹Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск, Россия

²Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

*e-mail: mfedin@tomo.nsc.ru

Поступила в редакцию 07.03.2024 г.

После доработки 09.04.2024 г.

Принята к публикации 10.04.2024 г.

Для развития квантовых технологий ключевым шагом является разработка квантовых битов (кубитов). Среди различных способов решения данной задачи кубиты на парамагнитных центрах имеют преимущество за счет своего разнообразия и возможности регулярно расположить такие кубиты, например, в структуре металл-органических координационных полимеров (МОКП). В данной работе продемонстрирован простой и масштабируемый подход получения потенциальных кубитов на основе стабильного органического радикала 3-карбоксих-ПРОКСИЛ и МОКП МОФ-808. Исследования полученных веществ с разным содержанием радикала методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) показывают наличие радикала в составе двух фракций в образцах и подтверждаются моделированием. Достаточно большое время фазовой когерентности при комнатной температуре для сорбированных в МОКП радикалов (0.39 мкс), а также наблюдаемые осцилляции Раби позволяют рассматривать данный материал в качестве платформы для создания кубитов. Разработанный подход позволяет получить разное содержание парамагнитных центров в структуре МОКП и может применяться для получения других претендентов на роль спиновых кубитов.

Ключевые слова: металл-органические координационные полимеры, квантовые биты, электронный парамагнитный резонанс, осцилляции Раби

DOI: 10.31857/S0132344X24090039, **EDN:** LXPODV

Квантовые компьютеры (КК) и квантовая обработка информации интенсивно изучаются в последнее время и имеют потенциал внести кардинальные изменения в современные технологии [1–5]. Квантовые биты (кубиты), элементарные единицы КК, необходимы для развития этих технологий, а их свойства определяют возможности КК и области их применения [2, 6]. Кубиты должны удовлетворять строгим условиям, чтобы применяться в КК. В эти условия входят масштабируемость системы кубитов, возможность задавать точное начальное состояние системы кубитов, относительно долгие времена фазовой когерентности и возможность проведения измерений на уровне кубитов [1]. В качестве кандидатов на роль кубитов рассматриваются

фотоны [7], захваченные ионы [8, 9], сверхпроводники [10–12], спины электронов и ядер атомов в квантовых точках [13], азотозамещенных вакансиях в алмазах (NV-центрах) [14, 15], полупроводниках [16, 17], комплексах металлов [18–21] и др. Все варианты имеют свои преимущества и недостатки: так, например, масштабирование систем кубитов на захваченных ионах представляет собой большую технологическую проблему [8]. Кубиты на сверхпроводниках, одни из наиболее изученных типов кубитов, требуют для работы температур порядка 10 мК, что затрудняет их использование [12].

Кубиты на парамагнитных центрах вызывают интерес из-за химического разнообразия пара-

магнитных соединений, а также относительной простоты взаимодействия со спинами с помощью методов электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [5, 22, 23]. При этом время релаксации спинов в этих системах ниже времени когерентности в других кубитах [8, 10, 23], но исследования в этом направлении показывают возможность значительного увеличения времени релаксации [19, 23–25]. Также для систем кубитов на парамагнитных центрах открываются широкие возможности структурированного расположения кубитов в пространстве, чего на данный момент удалось достигнуть лишь для некоторых систем [18, 22].

Иммобилизованные радикалы, в том числе органические, способны давать относительно высокие времена релаксации, с чем связана перспективность их использования для создания кубитов на парамагнитных центрах [5, 24, 26]. Металл-органические координационные полимеры (МОКП) имеют возможность стать ключевыми материалами для регулярного расположения радикалов в пространстве и для возможности регулировать их взаимодействия, а также для масштабирования квантовых систем. В результате это дает возможность использовать МОКП для получения кубитов [18, 21, 27, 28]. Этому способствуют характерная МОКП жесткая полимерная структура и наличие полостей, в которые могут включаться гостевые молекулы-радикалы [5, 21, 27].

ЭПР является ключевым методом для исследования парамагнитных частиц [29]. Он позволяет решать такие задачи, как идентификация и определение содержания радикалов в образце, определение времен релаксации спинов, изучение динамики парамагнитных частиц [30, 31] и др. Поскольку время фазовой когерентности является важным параметром для кубитов, метод ЭПР используется для исследования времен релаксации спинов в кубитах на парамагнитных центрах [32, 33].

В данной работе мы впервые продемонстрировали возможность создания кубитов путем нанесения органических радикалов на поверхность МОКП сорбцией из водного раствора. В качестве МОКП использовался MOF-808, отличающийся большой удельной площадью поверхности и легко модифицирующимися основными центрами в порах [34–36]. 3-Карбокси-2,2,5,5-тетраметилпирролидин 1-оксил (**c-Pr**), близкий аналог ТЕМРО, был взят в качестве радикала из-за своей стабильности и способности связы-

ваться с основными субстратами [37]. Схематическое изображение модификации MOF-808 радикалом **c-Pr** представлено на рис. 1. Связывание радикала с МОКП было проанализировано при помощи стационарной ЭПР спектроскопии. Была измерена зависимость спин-спиновой и спин-решеточной релаксации от температуры в диапазоне 80–300 К. Также мы провели нутационный эксперимент, показывающий возможность манипуляции спинами при комнатной температуре в образце с низкой загрузкой радикала **c-Pr** в MOF-808.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для синтеза MOF-808 использовали следующие реагенты: $ZrOCl_2 \cdot 8H_2O$ (компания "Реахим"), муравьиная кислота ($HCOOH$) (ООО "Компонент-реактив"), HCl (ООО "Сигма Тек"), 1,3,5-бензолтрикарбоновая кислота (H_3BTC) и 3-карбокси-ПРОКСИЛ (Sigma-Aldrich).

Синтез MOF-808. 5.796 г (18 ммоль) $ZrOCl_2 \cdot 8H_2O$, 1.260 г (6.0 ммоль) H_3BTC , 60 мл $HCOOH$, 600 мкл концентрированной HCl и 60 мл H_2O помещали в круглодонную колбу, полученную смесь перемешивали при нагревании на масляной бане при $110^\circ C$ в течение 18 ч. Полученный белый порошок MOF-808 осаждали центрифугированием и промывали водой и спиртом. Далее порошок сушили с использованием азотной ловушки при $165^\circ C$ в течение 4 ч и активировали при вакуумировании и $165^\circ C$ на турбомолекулярном насосе в течение 12 ч. Выход 2.402 г (58.7%).

Синтез **c-Pr@MOF-808_{вз.}** 50 мг MOF-808 (0.037 ммоль) помещали в 70 мл 1.0 mM раствора **c-Pr** (0.07 ммоль), реакционную смесь перемешивали при комнатной температуре в течение суток. Полученный осадок промывали водой и спиртом, далее высушивали на азотной ловушке без нагревания в течение 1.5 ч и активировали при вакуумировании и $120^\circ C$ на турбомолекулярном насосе в течение 4 ч.

Синтез **c-Pr@MOF-808_{сз.}** 60 мг MOF-808 (0.044 ммоль) помещали в 8.8 мл 1.0 mM раствора **c-Pr** (0.0088 ммоль), реакционную смесь перемешивали при комнатной температуре в течение суток. Полученный осадок промывали водой и спиртом, далее высушивали на азотной ловушке без нагревания в течение 65 мин и активировали при вакуумировании и $120^\circ C$ на турбомолекулярном насосе в течение 75 мин.

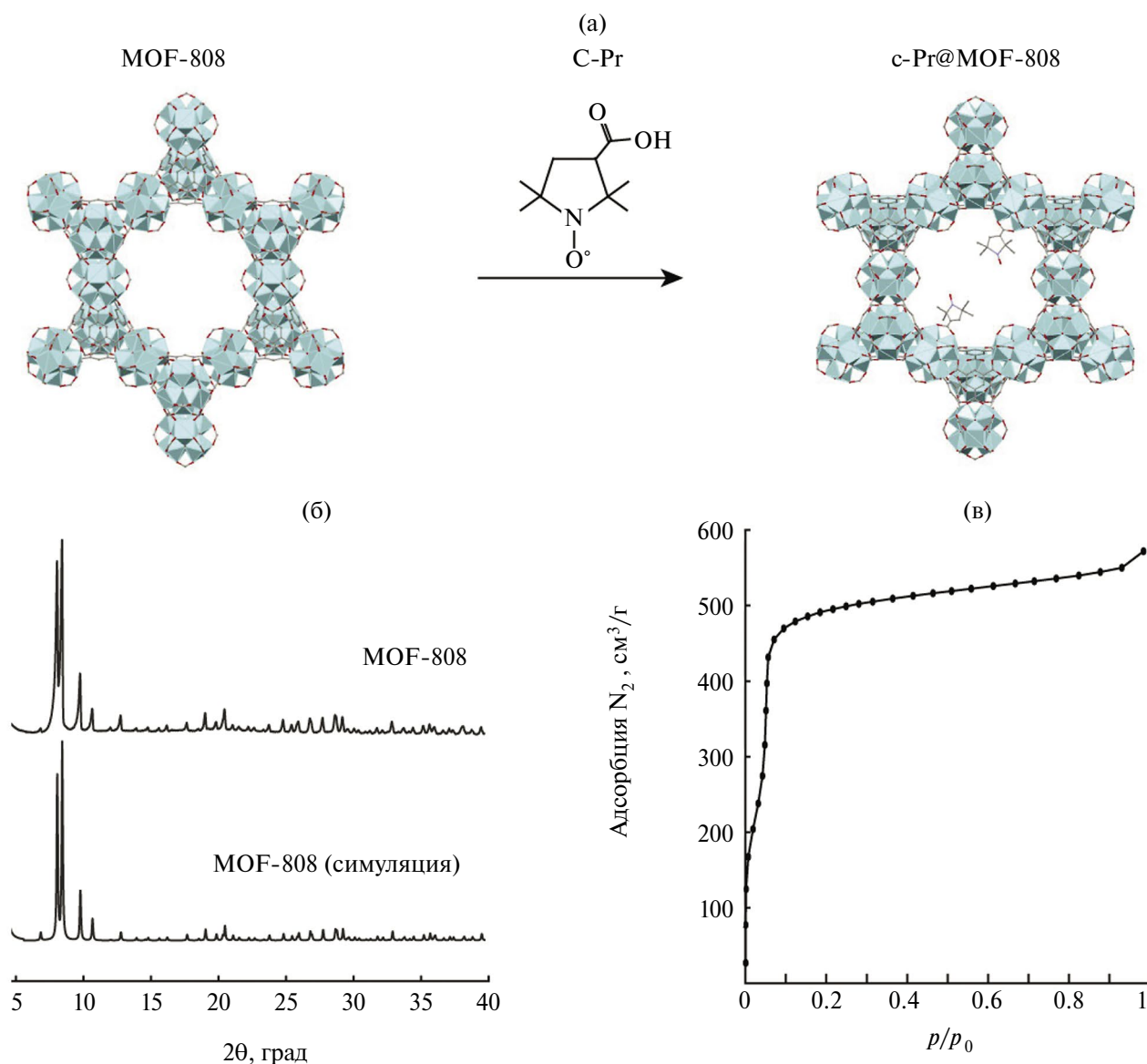


Рис. 1. Схематическое изображение модификации MOF-808 радикалом 3-карбокситетраметилпирролидин 1-оксил (с-Pr). Бирюзовыми полиэдрами показаны циркониевые кластеры, красным цветом — атомы кислорода, серым — атомы углерода и сиреневым — азот (а); данные порошковой рентгеновской дифракции для образца MOF-808 по сравнению с теоретически смоделированной дифрактограммой (CCDC № 1871192) (б); изотерма сорбции N₂ для образца MOF-808 (в).

Синтез с-Pr@MOF-808_{нз}. 50 мг MOF-808 (0.037 ммоль) смешивали с 3.4 мл 0.20 мМ раствора с-Pr (0.68 мкмоль), реакционную смесь перемешивали при комнатной температуре в течение суток. Полученный осадок промывали водой и спиртом, далее высушивали на азотной ловушке при 120°C в течение 2 ч и активировали при вакуумировании и 120°C на турбомолекулярном насосе в течение часа.

Данные порошковой рентгеновской дифракции получены на дифрактометре PowDix 600

(ADANI), оснащенном детектором MYTHEN2 R 1D (Dectris), при комнатной температуре с использованием CuK_α-излучения с шагом 0.01° и временем шага 0.01 с.

ЭПР-исследования (стационарные и импульсные) проводили с использованием ЭПР-спектрометра Bruker Eleksys E580 X/Q-диапазона, оборудованного системой температурного контроля Oxford Instruments ($T = 4–300$ K) в ЦКП "Масс-спектрометрические исследования" МТЦ СО РАН. Спектры ЭПР в стационарном режиме

регистрировали в условиях, исключающих нежелательное модуляционное уширение и микроволновое насыщение. Во всех случаях порошки образцов помещали в кварцевые ампулы (внешний диаметр 3.8 мм), вакуумировали и отпайвали. Для моделирования экспериментальных ЭПР спектров использовали программу Matlab с программным пакетом EasySpin [38].

Для количественного определения встроенных радикалов с-Pr в МОКП MOF-808 записывали стационарные ЭПР спектры при аттенюации 20 дБ с образцом сравнения ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$), положение которого в резонаторе не изменялось в течение экспериментов для исключения влияния разности добротности резонатора для разных образцов. Процедура повторялась для 3 навесок образца различной массы, после чего рассчитывали среднее значение радикальных центров. Для определения количества радикальных центров в образце сравнения готовили раствор нитроксильного радикала ТЕМРО (2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-оксил) в толуоле и записывали стационарный спектр ЭПР с образцом сравнения ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$). Полученные спектры интегрировали и определяли концентрацию радикальных центров.

Для записи спектра ЭПР, детектируемого по спаду свободной индукции, применяли импульс $\pi/2$ длиной 500 нс, далее сигнал интегрировали в течение 160 нс. Измерение времен релаксации T_1 и T_2 проводили в X-диапазоне при температурах 80–300 К. Для записи T_2 использовали эхо-детектирующую последовательность, состоящую из двух импульсов ($\pi/2$ – τ – π – τ -спиновое эхо, детектируемое с инкрементированием τ). При измерении T_1 использовали последовательность "инверсия–восстановление" (π – T – $\pi/2$ – τ – π – τ -спиновое эхо, детектируемое с инкрементированием T). Полученные кривые для T_1 и T_2 аппроксимировали моноэкспоненциальными функциями. Длины $\pi/2$ - и π -импульсов равны 12 и 24 нс соответственно. При проведении нутационного эксперимента варьировалась длина первого импульса (t_{Nut}), затем через 3 мкс применялась эхо-детектирующая последовательность. Отметим, что импульс t_{Nut} и эхо-детектирующую последовательность применяли на отдельных СВЧ-каналах спектрометра для возможности независимой настройки амплитуды нутационного и детектирующих импульсов для получения максимальной интегральной интенсивности сигнала.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В структуре MOF-808 содержатся лабильные формиатные группы, связанные с основными оксоциркониевыми кластерами [34]. В связи с этим MOF-808 легко поддается модификации, что было показано многими исследованиями по замене формиатной группы на остатки серной кислоты [39], этилендиаминтетрауксусной кислоты [40, 41], аминокислот [42] и др. Реакции протекают в водных растворах с избытком встраиваемых кислот при комнатной либо повышенной температуре. Таким образом, обнаруженные в литературе подходы требуют оптимизации количества карбоксилсодержащих органических молекул для применения их для контролируемой иммобилизации радикалов на поверхности металл-органических координационных полимеров (МОКП).

Были выполнены синтезы модифицированных радикалом МОКП с использованием разбавленных водных растворов радикала 3-карбокси-2,2,5,5-тетраметилпирролидин 1-оксил (10^{-3} – 10^{-4} М), имеющего в своем составе карбоксильную группу. По результатам синтеза в двукратном избытке радикала к Zr-кластерам ($\text{Zr}_6\text{O}_5(\text{OH})_3(\text{BTC})_2(\text{HCOO})_5(\text{H}_2\text{O})_2$) был получен образец с-Pr@MOF-808_вз (высокая загрузка), имеющий соотношение радикал : Zr-кластер = 1 : 1.4. Также были проведены синтезы с меньшей исходной загрузкой радикал : Zr-кластер. При теоретическом соотношении в реакционной смеси радикал : Zr-кластер = 1 : 5 и 1 : 54 произошло встраивание радикалов в МОКП в соотношении 1 : 5 и 1 : 62 (рис. 2б, 2в — средняя и низкая загрузка соответственно). Химическое связывание радикала с МОКП подтверждается стационарным спектром ЭПР, характерным для иммобилизованного нитроксильного радикала (рис. 2).

По рис. 2в отчетливо видно присутствие двух фракций радикала, отличающихся значениями компонент А-тензора. В более концентрированных образцах, спектры которых показаны на рис. 2а и 2б, наличие двух фракций менее заметно вследствие диполь-дипольного уширения. Однако моделирование подтверждает наличие обеих фракций радикала во всех спектрах. Соотношение концентраций первой и второй фракций составило 1 : 3, 1 : 1.1 и 1 : 5 в образцах с низкой, средней и высокой загрузкой соответственно. Незначительные различия экспериментальных спектров и моделирования могут быть связаны с присутствием либраций

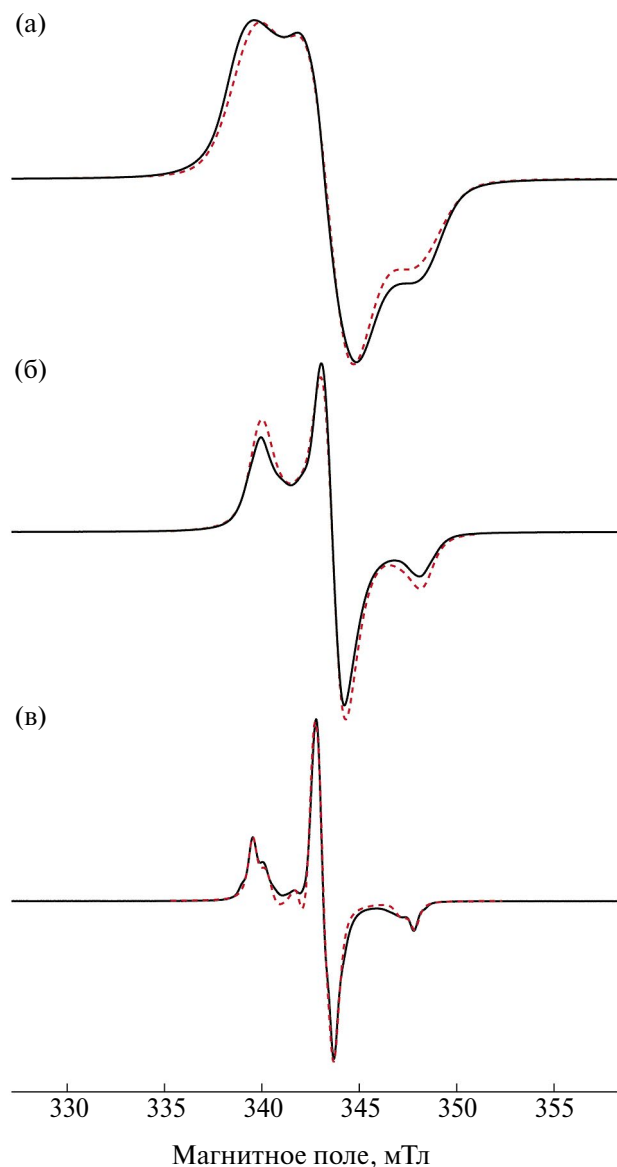


Рис. 2. Стационарные ЭПР-спектры, записанные при комнатной температуре, для вакуумированных образцов c-Pr@MOF-808_vz (а); c-Pr@MOF-808_cz (б); c-Pr@MOF-808_nz (в); моделирование для всех образцов показано красным пунктиром. Параметры моделирования: 1) $g_1 = [2.0082, 2.0054, 2.0020]$; $A_1 = [4, 4, 34.8]$ мТл; 2) $g_2 = [2.0082, 2.0054, 2.0020]$; $A_2 = [7, 7, 41.550]$ мТл.

радикала в МОКП [43]. Было предположено, что одна из фракций находится в менее иммобилизованном состоянии и в большей степени вносит вклад в либрационные движения, поскольку связана при помощи водородных связей (параметры моделирования g_1 и A_1), что подтверждается меньшим значением компоненты A_{zz} [44]. Вторая фракция, в свою очередь, замещает формиатные остатки в структуре МОКП (параметры моделирования g_2 и A_2).

Поскольку большая концентрация радикальных центров может приводить к уменьшению времен релаксации, то для дальнейших исследований был выбран образец c-Pr@MOF-808_nz. Для него был записан спектр ЭПР, детектируемый по спаду свободной индукции, при комнатной температуре. Параметры моделирования согласуются со стационарным спектром ЭПР образца. Величина времени фазовой когерентности (T_2), измеренная в магнитном поле, соответствующем центральной компоненте спектра (рис. 3), составила 0.39 мкс.

На рис. 4 показана зависимость времен релаксации T_1 и T_2 от температуры в диапазоне 80–300 К, записанная в положении поля, соответствующего центральной компоненте спектра (показана звездочкой на рис. 3). Можно отметить уменьшение T_2 при 150–200 К. Данный эффект уже был ранее описан для нитроксильных радикалов в литературе и связан с разморозкой вращения CH_3 -групп в структуре зонда [45, 46]. Наблюдается значительное увеличение T_1 при 80 К, в то время как значения T_2 при 80 К и при комнатной температуре различаются несущественно. Из полученных времен релаксации следует, что система с встроенным в структуру МОКП нитроксильным радикалом является перспективной для дальнейших модификаций, например путем использования других радикалов.

Отметим, что характерного времени фазовой когерентности, измеренного при комнатной температуре для c-Pr@MOF-808_nz и равного 0.39 мкс, достаточно, чтобы показать возможность использования радикала c-Pr как кандидата на роль кубита. Поэтому далее был прове-

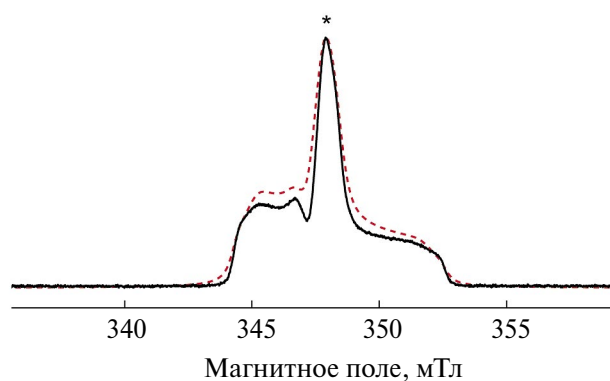


Рис. 3. ЭПР-спектр, детектируемый по спаду свободной индукции, для образца c-Pr@MOF-808_nz, измеренный при комнатной температуре; звездочкой отмечено положение поля, в котором было измерено T_2 . Моделирование показано красным пунктиром.

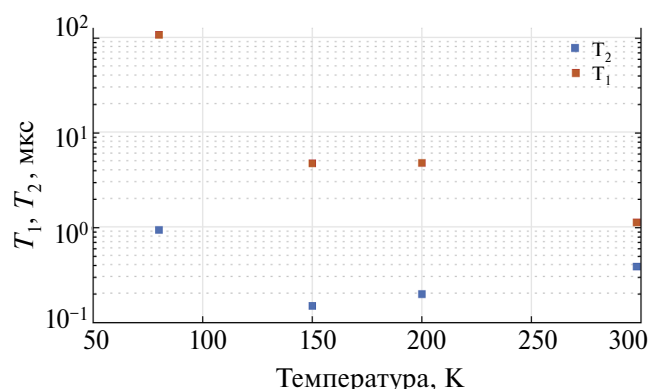


Рис. 4. Зависимость времен релаксации T_1 и T_2 от температуры для образца c-Pr@MOF-808_{нз}.

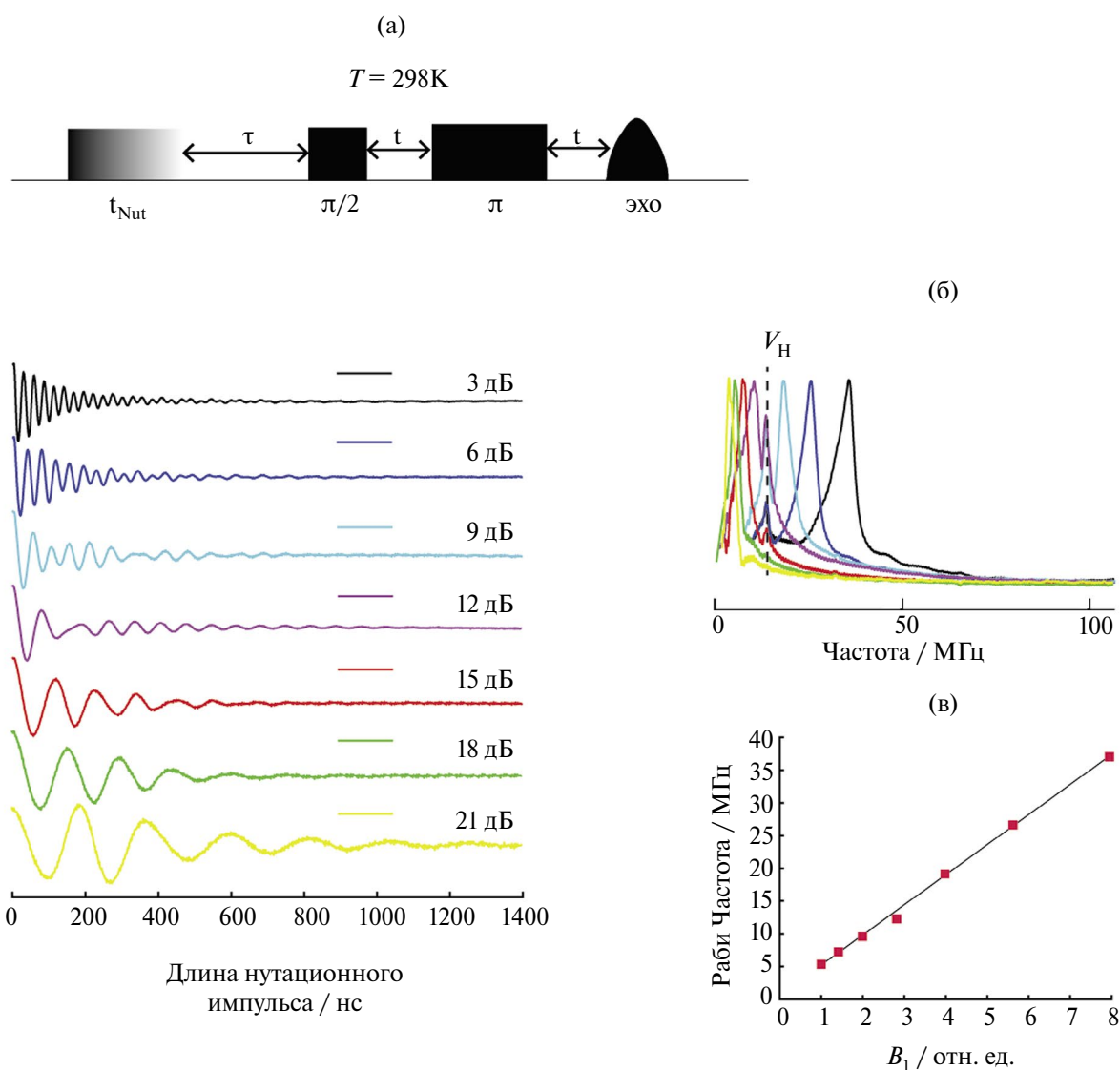


Рис. 5. Осцилляции Раби, измеренные для c-Pr@MOF-808_{нз} при комнатной температуре и мощности нутационного импульса в диапазоне 3–21 дБ (даны величины аттенюации); сверху приведена использованная импульсная последовательность (а); преобразование Фурье для спектров из а (б); зависимость Раби частоты от B_1 в относительных единицах (нормировка на наименьшее значение) (в).

ден нутационный эксперимент, показывающий возможность манипуляции спинами. Нутационный эксперимент проводился при комнатной температуре в X-диапазоне путем варьирования мощности нутационного импульса. Сначала электронная намагниченность переворачивается микроволновым импульсом, длина которого меняется в ходе эксперимента, и далее происходит детектирование сигнала стандартной эхо-детектирующей последовательностью. На рис. 5а показаны полученные осцилляции Раби при комнатной температуре. При величинах аттенюации 9 дБ и 12 дБ (т.е. при высокой мощности СВЧ)

наблюдаются протонные модуляции сигнала, что связано с близостью Раби частоты и Ларморовской частоты прецессии протонов (14.902 МГц). Также на рис. 5в показана линейная зависимость частоты осцилляций Раби от микроволновой мощности, что подтверждает возможность манипулирования спинами.

Таким образом, в данной работе был предложен протокол нанесения нитроксильного радикала с-Pr на MOF-808 из водного раствора при комнатной температуре и получены три вещества с разным содержанием радикала. Моделирование ЭПР-спектров показало наличие двух фракций радикала, отличающихся значениями А-тензора. Для образца с-Pr@MOF-808 с низкой загрузкой радикала было измерено время релаксации T_2 при разной температуре. Значение T_2 при комнатной температуре составляет ~0.4 мкс и позволяет рассматривать полученное вещество как потенциальный кубит. Для него также был проведен нутационный эксперимент, который подтвердил возможность манипулирования спинами в образце. Таким образом, мы показали, что нитроксильные радикалы, сорбированные на МОКП, могут быть кандидатами на роль кубитов. Нами также был предложен простой способ получения данных веществ, что дает возможность легко разрабатывать и исследовать другие аналогичные спиновые кубиты.

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22–73–10239).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. DiVincenzo D.P. // Fortschritte Der Phys. 2000, V. 48. № 9–11. P. 771.
2. Ladd T. D., Jelezko F., Laflamme R. et al. // Nature. 2010. V. 464. № 7285. P. 45.
3. Nakazawa S., Nishida S., Ise T. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. 2012. V. 51. № 39. P. 9860.
4. Dolde F., Fedder H., Doherty M.W. et al. // Nat. Phys. 2011. V. 7. № 6. P. 459.
5. Atzori M., Sessoli R. // J. Am. Chem. Soc. 2019. V. 141. № 29. P. 11339.
6. Nielsen M.A., Chuang I.L. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary. Cambridge Univ. Press, 2010.

7. Knill E., Laflamme R., Milburn G.J. // Nature. 2001. V. 409. № 6816. P. 46.
8. Bruzewicz C.D., Chiaverini J., McConnell R. et al. // Appl. Phys. Rev. 2019. V. 6. № 2. P. 021314.
9. Benhelm J., Kirchmair G., Roos C. F. et al. // Nat. Phys. 2008. V. 4. № 6. P. 463.
10. Devoret M.H., Schoelkopf R.J. // Science. 2013. V. 339. № 6124. P. 1169.
11. Siddiqi I. // Nat. Rev. Mater. 2021. V. 6. № 10. P. 875.
12. Kjaergaard M., Schwartz M. E., Braumüller J. et al. // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2020. V. 11. № 1. P. 369.
13. Trauzettel B., Bulaev D. V., Loss D. et al. // Nat. Phys. 2007. V. 3. № 3. P. 192.
14. Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P. et al. // Phys. Rep. 2013. V. 528. № 1. P. 1.
15. Togan E., Chu Y., Trifonov A.S. et al. // Nature. 2010. V. 466. № 7307. P. 730.
16. Hanson R., Awschalom D.D. // Nature. 2008. V. 453. № 7198. P. 1043.
17. Chatterjee A., Stevenson P., De Franceschi S. et al. // Nature Rev. Phys. 2021. V. 3. № 3. P. 157.
18. Yamabayashi T., Atzori M., Tesi L., et al. // J. Am. Chem. Soc. 2018. V. 140. № 38. P. 12090.
19. Fataftah M.S., Bayliss S.L., Laorenza D.W. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2020. V. 142. № 48. P. 20400.
20. Starikova A.A., Starikov A.G., Minkin V.I. // Russ. J. Coord. Chem. 2017. V. 43. № 4. P. 197.
21. Zadrozny J.M., Gallagher A.T., Harris T.D. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2017. V. 139. № 20. P. 7089.
22. Stamp P.C.E., Gaita-Ariño A. // J. Mater. Chem. 2009. V. 19. № 12. P. 1718.
23. Gaita-Ariño A., Luis F., Hill S. et al. // Nat. Chem. 2019. V. 11. № 4. P. 301.
24. Poryvaev A.S., Gjuzi E., Polyukhov D.M. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. 2021. V. 60. № 16. P. 8683.
25. Oanta A.K., Collins K.A., Evans A.M. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2023. V. 145. № 1. P. 689.
26. Wakizaka M., Gupta S., Wan Q. et al. // Chem. Eur. J. 2023. V. 30. № 12. Art. e202304202.
27. Yu C.J., Krzyaniak M.D., Fataftah M.S., et al. // Chem. Sci. 2019. V. 10. № 6. P. 1702.
28. Sun L. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2022. V. 144. № 41. P. 19008.
29. Альтшулер С.А., Козырев Б.М. // Успехи физ. наук. 1957. V. 63. № 11. P. 533.
30. Weil J.A., Bolton J.R. Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications. Wiley, 2007.
31. Schweiger A., Jeschke G. Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance. Oxford University Press, 2001.
32. Zadrozny J.M., Niklas J., Poluektov O.G. et al. // ACS Cent Sci. 2015. V. 1. № 9. P. 488.

33. Schäfter D., Wischnat J., Tesi L. et al. // Adv. Mater. 2023. V. 35. № 38. P. 2302114.
34. Liu X. et al. // Chem. Mater. 2021. V. 33. № 4. P. 1444.
35. Yan X., Wang K., Xu X. et al. // Inorg. Chem. 2018. V. 57. № 14. P. 8033.
36. Furukawa H., Gándara F., Zhang Y.-B. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2014. V. 136. № 11. P. 4369.
37. Paletta J.T., Pink M., Foley B. et al. // Org. Lett. 2012. V. 14. № 20. P. 5322.
38. Stoll S., Schweiger A. // J. Magn. Res. 2006. V. 178. № 1. P. 42.
39. Jiang J., Gándara F., Zhang Y.-B. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2014. V. 136. № 37. P. 12844.
40. Peng Y., Huang H., Zhang Y. et al. // Nat. Commun. 2018. V. 9. № 1. P. 187.
41. Li J., Huang H., Xue W. et al. // Nat. Catal. 2021. V. 4. № 8. P. 719.
42. Lyu H., Chen O.I.-F., Hanikel N. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2022. V. 144. № 5. P. 2387.
43. Kuzhelev A.A., Strizhakov R. K., Krumkacheva O. A. et al. // J. Magn. Res. 2016. V. 266. P. 1.
44. Chernova D.A., Vorobiev A.K. // J. Polym. Sci. B. 2009. V. 47. № 1. P. 107.
45. Rajca A., Kathirvelu V., Roy S.K. et al. // Chem. Eur. J. 2010. V. 16. № 19. P. 5778.
46. Ivanov M.Yu., Prikhod'ko S.A., Bakulina O.D. et al. // Molecules. 2021. V. 26. № 19.

SCALABLE APPROACH FOR GRAFTING QUBIT CANDIDATES ONTO THE SURFACE OF MOF-808 FRAMEWORK

A. S. Tomilov^{a, b}, A. A. Yazikova^{a, b}, A. R. Melnikov^a, K. A. Smirnova^a,
A. S. Poryvaev^a, and M. V. Fedin^{a, b, *}

^a International Tomography Center, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

^b Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

*e-mail: mfedin@tomo.nsc.ru

The development of quantum bits (qubits) is crucial for the progress of quantum technologies. Among various approaches, the qubits based on paramagnetic centers have decent advantages, including their diversity and possibilities of regular ordering, for example, within the structure of metal-organic frameworks (MOFs). In the present work a simple and scalable approach to obtain qubit candidates based on stable organic radical 3-carboxy-proxyl and MOF-808 framework has been demonstrated. Investigation of the obtained compounds with different radical amounts using electron paramagnetic resonance (EPR) demonstrates the presence of two fractions of radicals, which is supported by simulations. Sufficiently long phase memory time at room temperature for the radicals adsorbed into MOF (0.39 μ s), as well as the observed Rabi nutations, allow considering this material as a platform for qubits design. The developed approach is capable of incorporating various amounts of paramagnetic centers into the MOF structure and can be employed to obtain other spin qubit candidates.

Keywords: metal-organic frameworks, quantum bits, electron paramagnetic resonance, Rabi nutations

REFERENCES

1. DiVincenzo D.P. // Fortschritte Der Phys. 2000. V. 48. № 9-11. P. 771.
2. Ladd T. D., Jelezko F., Laflamme R. et al. // Nature. 2010. V. 464. № 7285. P. 45.
3. Nakazawa S., Nishida S., Ise T. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. 2012. V. 51. № 39. P. 9860.
4. Dolde F., Fedder H., Doherty M.W. et al. // Nat. Phys. 2011. V. 7. № 6. P. 459.
5. Atzori M., Sessoli R. // J. Am. Chem. Soc. 2019. V. 141. № 29. P. 11339.
6. Nielsen M.A., Chuang I.L. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary. Cambridge Univ. Press, 2010.
7. Knill E., Laflamme R., Milburn G.J. // Nature. 2001. V. 409. № 6816. P. 46.
8. Bruzewicz C.D., Chiaverini J., McConnell R. et al. // Appl. Phys. Rev. 2019. V. 6. № 2. P. 021314.
9. Benhelm J., Kirchmair G., Roos C.F. et al. // Nat. Phys. 2008. V. 4. № 6. P. 463.
10. Devoret M.H., Schoelkopf R.J. // Science. 2013. V. 339. № 6124. P. 1169.
11. Siddiqi I. // Nat. Rev. Mater. 2021. V. 6. № 10. P. 875.
12. Kjaergaard M., Schwartz M.E., Braumüller J. et al. // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2020. V. 11. № 1. P. 369.
13. Trauzettel B., Bulaev D.V., Loss D. et al. // Nat. Phys. 2007. V. 3. № 3. P. 192.

14. *Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P. et al.* // *Phys. Rep.* 2013. V. 528. № 1. P. 1.
15. *Togan E., Chu Y., Trifonov A. S. et al.* // *Nature*. 2010. V. 466. № 7307. P. 730.
16. *Hanson R., Awschalom D.D.* // *Nature*. 2008. V. 453. № 7198. P. 1043.
17. *Chatterjee A., Stevenson P., De Franceschi S. et al.* // *Nature Rev. Phys.* 2021. V. 3. № 3. P. 157.
18. *Yamabayashi T., Atzori M., Tesi L., et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2018. V. 140. № 38. P. 12090.
19. *Fataftah M.S., Bayliss S.L., Laorenza D.W. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2020. V. 142. № 48. P. 20400.
20. *Starikova A.A., Starikov A.G., Minkin V.I.* // *Russ. J. Coord. Chem.* 2017. V. 43. № 4. P. 197.
21. *Zadrozny J.M., Gallagher A.T., Harris T.D. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2017. V. 139. № 20. P. 7089.
22. *Stamp P.C.E., Gaita-Ariño A.* // *J. Mater. Chem.* 2009. V. 19. № 12. P. 1718.
23. *Gaita-Ariño A., Luis F., Hill S. et al.* // *Nat. Chem.* 2019. V. 11. № 4. P. 301.
24. *Poryvaev A.S., Gjuzi E., Polyukhov D.M. et al.* // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021. V. 60. № 16. P. 8683.
25. *Oanta A.K., Collins K.A., Evans A.M. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2023. V. 145. № 1. P. 689.
26. *Wakizaka M., Gupta S., Wan Q. et al.* // *Chem. Eur. J.* 2023. V. 30. № 12. Art. e202304202.
27. *Yu C.J., Krzyaniak M.D., Fataftah M.S., et al.* // *Chem. Sci.* 2019. V. 10. № 6. P. 1702.
28. *Sun L. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2022. V. 144. № 41. P. 19008.
29. *Альтшулер С.А., Козырев Б.М.* // *Успехи физ. наук.* 1957. V. 63. № 11. P. 533.
30. *Weil J.A., Bolton J.R.* *Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications.* Wiley, 2007.
31. *Schweiger A., Jeschke G.* *Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance.* Oxford University Press, 2001.
32. *Zadrozny J.M., Niklas J., Poluektov O.G. et al.* // *ACS Cent Sci.* 2015. V. 1. № 9. P. 488.
33. *Schäfter D., Wischnat J., Tesi L. et al.* // *Adv. Mater.* 2023. V. 35. № 38. P. 2302114.
34. *Liu X. et al.* // *Chem. Mater.* 2021. V. 33. № 4. P. 1444.
35. *Yan X., Wang K., Xu X. et al.* // *Inorg. Chem.* 2018. V. 57. № 14. P. 8033.
36. *Furukawa H., Gándara F., Zhang Y.-B. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2014. V. 136. № 11. P. 4369.
37. *Paletta J.T., Pink M., Foley B. et al.* // *Org. Lett.* 2012. V. 14. № 20. P. 5322.
38. *Stoll S., Schweiger A.* // *J. Magn. Res.* 2006. V. 178. № 1. P. 42.
39. *Jiang J., Gándara F., Zhang Y.-B. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2014. V. 136. № 37. P. 12844.
40. *Peng Y., Huang H., Zhang Y. et al.* // *Nat. Commun.* 2018. V. 9. № 1. P. 187.
41. *Li J., Huang H., Xue W. et al.* // *Nat. Catal.* 2021. V. 4. № 8. P. 719.
42. *Lyu H., Chen O.I.-F., Hanikel N. et al.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2022. V. 144. № 5. P. 2387.
43. *Kuzhelev A.A., Strizhakov R.K., Krumkacheva O.A. et al.* // *J. Magn. Res.* 2016. V. 266. P. 1.
44. *Chernova D.A., Vorobiev A.K.* // *J. Polym. Sci. B.* 2009. V. 47. № 1. P. 107.
45. *Rajca A., Kathirvelu V., Roy S.K. et al.* // *Chem. Eur. J.* 2010. V. 16. № 19. P. 5778.
46. *Ivanov M.Yu., Prikhod'ko S.A., Bakulina O.D. et al.* // *Molecules.* 2021. V. 26. № 19.