

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht die Eigenschaften von Stickstoff- und Phosphoratomen im Buckminsterfulleren C_{60} für die Anwendung als Qubits in einem Quantencomputer.

Vorangegangene Arbeiten haben die Existenz der endohedralen Fullerene $N@C_{60}$ und $P@C_{60}$ bewiesen. Die (cw) ESR Spektren zeigten scharfe Resonanzlinien - sogar für chemische Modifikationen von $N@C_{60}$. Erste Messungen der Relaxation von $N@C_{60}$ deuteten an, dass diese endohedralen Fullerene gute Kandidaten für Qubits in einem Quantencomputer sein könnten. Diese Idee wurde in dieser Dissertation systematisch entwickelt.

Zum ersten Mal wird in dieser Arbeit die Trennung und Anreicherung von $P@C_{60}$ mittels HPLC gezeigt. Nach einer eingehenden Untersuchung der spektroskopischen Eigenschaften von $P@C_{60}$ werden Konsequenzen im Hinblick auf die Anwendung der endohedralen Fullerene als Bausteine in einem Quantencomputer diskutiert.

Experimente zur Relaxation von $P@C_{60}$ zeigten, dass die Ursachen dieselben wie bei $N@C_{60}$ sind. Das bisher für die Relaxation verwendete Modell des Harmonischen Oszillators wurde überarbeitet und erweitert. Auch bei steigender Spinkonzentration ändern sich die Relaxationseigenschaften vom Prinzip her nicht. Das bedeutet, dass ein Quantencomputer mit endohedralen Fullerenen auf viele Qubits skalierbar sein könnte. Die Voraussetzung dafür ist jedoch, dass die Dipolkopplung der Qubits kontrolliert wird.

Weitere spektroskopische Eigenschaften von $P@C_{60}$, insbesondere die bisher nicht auflösbare Nullfeld-Aufspaltung, wurden mit Experimenten zur transienten Nutation untersucht. Diese Methode, die auch dem Verhalten des Spinsystems bei Ein-Qubit Operationen entspricht, wurde zum ersten Mal auf endohedrale Fullerene angewendet. Für $P@C_{60}$ und $N@C_{60}$ wurde gezeigt, dass eine Vielzahl von Operationen, sogar bei Raumtemperatur, ausgeführt werden kann.

Messungen bei tiefer Temperatur zeigten, dass das komplizierte Nutationsverhalten des $S = 3/2$ Spinsystems genau der Vorhersage der Theorie folgt. Es scheint damit möglich zu sein, zwei Qubits in einem $S = 3/2$ Spin zu implementieren. In diesem Fall wäre jedoch eine Ausrichtung der Fullerene notwendig. Diese würde zur gleichen auch die Kontrolle über die Dipolkopplung bieten.

Im letzten Teil dieser Dissertation wurde daher die Ausrichtung von endohedralen Fullerenen in einer Flüssigkristallmatrix untersucht. Es wurde gezeigt, dass die Ausrichtung der endohedralen Monomere $N@C_{60}$ und $N@C_{70}$ möglich ist. Es ist jedoch schwieriger, größere Moleküle, z.B. Dimere, auszurichten, obwohl auch hier erste Schritte demonstriert werden konnten.

Quantencomputing mit $P@C_{60}$ und $N@C_{60}$ scheint unter der Voraussetzung möglich zu sein, dass eine vollständige Ausrichtung bei gleichmäßigem Abstand zwischen den Fullerenen erreicht wird.

