

## Plan de Trabajo

# Manipulación del Spín en Dispositivos Nanoestructurados: Aplicaciones a la Información Cuántica.

**Director:**      **Alejandro Ferrón**

*Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (CONICET-UNNE)  
Corrientes, Argentina.  
aferron@conicet.gov.ar*

## 1-Objetivos:

### - Objetivos Generales:

Estudio de diferentes nanodispositivos, técnicas de control y sus posibles aplicaciones tecnológicas relacionadas a la Información cuántica y la Spintrónica. Se espera poder avanzar en el diseño de diversos dispositivos nanoestructurados en los cuales sea posible el control del spin mediante el empleo de pulsos electromagnéticos, campos eléctricos, magnéticos y/o operaciones de compuerta y deformaciones estructurales. Además se espera ser capaces de implementar protocolos eficientes para el control de los procesos mencionados.

### - Objetivos Específicos:

1. Estudio de las propiedades eléctricas y magnéticas de los nanodispositivos mediante el uso de diversos métodos.
2. Desarrollo de modelos efectivos para las distintas nanoestructuras de interés.
3. Estudio, partiendo de los resultados en los puntos 1 y 2, del espectro de bajas energías de dichos sistemas.
4. Desarrollo de técnicas numéricas que permitan el estudio de la interacción de estos nanodispositivos con pulsos electromagnéticos.
5. Estudio de la dinámica cuántica y la posibilidad de controlar el spin.

## 2-Antecedentes:

El avance tecnológico de los últimos años ha posibilitado realizar experimentos que acercan día a día la situación experimental a la de los experimentos pensados por los pioneros de la Mecánica Cuántica. Dichos experimentos son, en principio, cada vez más complicados de realizar, pero sus resultados son también interpretables a partir de la aplicación directa de la Mecánica Cuántica en su forma más simple. De este modo, el control de la dinámica de sistemas microscópicos y

nanoscópicos individuales se ha vuelto una posibilidad concreta, en contraposición a las viejas técnicas espectroscópicas que obtenían sus resultados operando sobre muestras macroscópicas. Al mismo tiempo, la posibilidad de manipular átomos individuales insertándolos dentro de estructuras moleculares o depositándolos en forma controlada (a escala atómica) sobre diversas superficies, o las técnicas litográficas que permiten diseñar superficies nano-estructuradas, han contribuido violentamente al desarrollo de nuevas áreas dentro de la fisico-química. El control de sistemas microscópicos y nanoscópicos es de fundamental importancia para la Información Cuántica. El procesamiento de información almacenada en sistemas físicos microscópicos implica un exquisito grado de precisión, una comprensión profunda de los procesos físicos involucrados y la posibilidad de adecuar el tamaño del sistema al problema a estudiar. Es por estos condicionantes que se estudian sistemas tan disímiles como electrones en puntos cuánticos, átomos o iones atrapados en moléculas o depositados sobre diversas superficies, ya que todos estos sistemas poseen ventajas y desventajas relativas a la hora de implementar los diferentes pasos necesarios para almacenar, inicializar o procesar información. Si bien el objetivo del presente plan está relacionado a la manipulación del spin en nanodispositivos en general, la idea es centrar nuestra atención a un subconjunto de dispositivos que consideramos de un enorme interés tecnológico actual. Por lo tanto el control coherente de espines en átomos aislados, cadenas de átomos magnéticos, y en las vacancias de nitrógeno en diamante, serán los temas puntuales que se pretenden atacar durante el desarrollo del presente doctorado.

### Átomos Magnéticos sobre Superficies

En los últimos 10 años ha crecido el interés en el estudio de átomos magnéticos aislados depositados sobre superficies aislantes como el CuN y el MgO. Estos sistemas tienen la cualidad de comportarse prácticamente como espines aislados. Las técnicas experimentales actuales (Scanning Tunneling Microscopy) permiten diseñar nanoestructuras depositando átomos magnéticos sobre distintas superficies y en diversas geometrías con precisión a escala atómica. Claramente estos átomos aislados o en diferentes arreglos como cadenas son formidables candidatos para las tareas de almacenamiento y procesamiento de la información [1,2,3]. Durante mucho tiempo estos experimentos han sido descritos con modelos teóricos extremadamente simples. Los modelos de Spin han permitido explicar diversos fenómenos relacionados con excitaciones de spin en átomos magnéticos sobre CuN [1] y algunos fenómenos colectivos en cadenas de Co y Fe [4]. En los últimos tiempos se han encontrado ciertas limitaciones a estos modelos. En primer lugar, muchos de los cálculos recientes muestran que el spin del átomo magnético sobre estas superficies no está cuantizado. Si bien hemos sido capaces de entender por qué los modelos de spin (que suponen que el spin está cuantizado) funcionan [5], nos hemos dado cuenta que la interacción de dichos átomos con la superficie resulta un tema de gran interés actual. En segundo lugar, existen algunos experimentos que no son posibles describir con estos modelos extremadamente simples. Experimentos recientes en cadenas de Co muestran que es posible suprimir el canal inelástico. Esta supresión no era posible de explicar mediante modelos utilizados hasta entonces. Mediante el estudio de la magnetización de los niveles d del Co nosotros hemos logrado explicar el experimento [6]. En este trabajo vimos que existe la posibilidad de suprimir el canal inelástico (posible fuente de decoherencia) en forma controlada mediante el diseño de cadenas (tres o más átomos) y el entorno de las mismas. Además de este experimento existen otros dos experimentos realizados el último año que sugieren la posibilidad de realizar control sobre estos sistemas y hacen pensar que la aplicación de los mismos a tecnologías relacionadas con la Información cuántica es una posibilidad concreta. El primero consiste en un átomo de Fe depositado sobre MgO. Mediante una corriente alterna aplicada con la punta del STM, un grupo de IBM ha sido capaz de realizar transiciones entre los dos primeros estados de energía del dispositivo. Es decir, han utilizado dicho sistema como un qubit [3]. El otro experimento, realizado en un Max Planck, muestra como es posible el control del spin de una cadena mediante la excitación con ondas electromagnéticas de átomos vecinos [7].

## NV-Centers

Si bien estos sistemas se conocen hace años, las nuevas técnicas experimentales (laser pulsado ultra-rápido por ejemplo) han hecho crecer exponencialmente el interés sobre estos dispositivos. A diferencia de los experimentos anteriores, estos son de mucho menor costo y permiten realizar tareas similares en cuanto a la manipulación del Spin.

Los NV-Centers (Nitrogen-Vacancy Centers) son impurezas de Nitrógeno con una vacancia adyacente. Normalmente ocurren en diamante y pueden ser neutras o negativamente cargadas. Estas últimas resultan de gran interés en aplicaciones para el procesamiento de la Información Cuántica y para tecnologías relacionadas con sensores magnéticos. El estado fundamental Spin-triplet/Orbital-singlet está conectado con un estado excitado Spin-triplet/Orbital-doublet por un acoplo dipolar que permite excitaciones ópticas. Este punto, más el hecho de que se ha demostrado que los tiempos de decoherencia y relajación en estos sistemas son mucho más largos que en otros tales como los qubit de flujo (anillo superconductor interrumpido por 3 junturas Josephson) [8], hacen que los NV- sean candidatos formidables para tareas de control coherente [9,10] utilizando pulsos electromagnéticos (laser ultra-rápidos).

## **3-Plan de Trabajo propuesto**

Durante el desarrollo del plan de trabajo, el estudiante de doctorado deberá comenzar a desarrollar habilidades y conocimientos relacionados a la resolución de problemas complejos en mecánica cuántica. Se espera que el estudiante sea capaz de analizar, plantear y resolver problemas de muchos cuerpos utilizando diversas técnicas numéricas. Durante los primeros años el estudiante deberá realizar un mínimo de 6 cursos de posgrados. Se espera que al menos dos de estos cursos sean dictados por integrantes del grupo de Nanofísica y estén íntimamente relacionados con el tema de trabajo propuesto. Los otros cursos pueden ser de temas diversos que ayuden a la formación del doctorando en su futura carrera profesional. Uno de estos cursos podría ser el curso de estado sólido dictado anualmente en el Instituto Balseiro.

Es de esperar que en los primeros dos años de doctorado el postulante dedique gran parte del tiempo a familiarizarse con los nuevos métodos numéricos y a leer bibliografía relacionada al tema. Los principales métodos que el doctorando debe ser capaz de utilizar son Densidad Funcional [12], Wannierización (cambiar de una base delocalizada como lo son los estados de Bloch a la base de funciones de Wannier [13], que resultan ser una base localizada o atomic-like), Diagonalización directa (cálculo de los elementos one-particle a partir del método variacional, DFT-Wannier o modelos más empíricos. Armado de Hamiltoniano CI, Anderson o Hubbard y finalmente la diagonalización exacta para la obtención del espectro de bajas energías), Método Variacional y diversos métodos numéricos para el estudio de problemas dependiente del tiempo. Todos estos métodos son utilizados en la actualidad por los miembros del grupo, con lo cual se espera que no existan dificultades en esta etapa de aprendizaje.

Finalmente uno espera que durante el segundo año de doctorado el estudiante sea capaz de empezar a obtener resultados originales de los temas específicos, ejes del presente plan de trabajo. Como vimos en la sección anterior, el plan está centrado en un tema principal que es la manipulación del Spin y las posibles aplicaciones de dicha tarea a tecnologías relacionadas con la Información Cuántica. Es evidente que estas tareas pueden ser realizadas en una infinidad de sistemas y/o dispositivos nanoestructurados. Si bien, la mayor parte de las técnicas mencionadas en el párrafo anterior pueden ser utilizadas en muchísimos de estos sistemas, en el presente plan prestaremos especial atención a dos casos particulares. Los Átomos Magnéticos y Cadenas depositados cobre

CuN y MgO y las Nitrogen-Vacancy Centers. Si bien ambos sistemas tienen grandes diferencias, desde el punto de vista del presente plan, las similitudes son importantes. En el primer caso el Spin corresponde al átomo depositado, mientras que en el segundo el Spin es el que se genera al reemplazar un átomo de Carbono por un Nitrógeno en el diamante (la principal diferencia es que este spin no está localizado en la impureza). Es importante destacar que el proceso de control del spin será similar en ambos casos y la metodología numérica que debemos emplear para la descripción de ambos sistemas es esencialmente la misma.

A continuación hacemos un breve resumen de las principales tareas que se pretenden realizar durante los 5 años de doctorado del postulante:

### Átomos Magnéticos sobre Superficies

Los arreglos de átomos magnéticos (TM) adsorbidos en diferentes superficies han demostrado ser un tema de gran interés para el estudio de spines aislados, cadenas de spines [1,2,3] y la posibilidad de construir memorias y bits cuánticos. Durante los últimos tres años nos hemos dedicado al estudio de TM sobre Cu<sub>2</sub>N. Los experimentos en IBM realizados por A. Heinrich han demostrado que el MgO/Ag resulta mucho más adecuado ya que logra un mejor desacople del spin de la superficie. Un experimento reciente realizado en IBM muestra la posibilidad de controlar el spin del Fe utilizando una corriente alterna a través de la punta del STM [3]. En primer lugar pensamos estudiar Fe y Co (en realidad comenzaremos, por razones de dificultades técnicas y pedagógicas por el Titanio, ya que este tiene solo dos electrones en el nivel d y por lo tanto el modelado y los cálculos serán mucho más simples) en MgO/Ag con las técnicas descritas en [11,5] (Cálculo de la estructura electrónica mediante DFT, Wannierización del sistema para obtener una base localizada y construcción del Hamiltoniano CI) para tratar de entender los últimos experimentos y la posibilidad de mejorar dichas experiencias con el objetivo de analizar las posibilidades de aplicar estos resultados a mejorar tecnologías relacionadas a la Información Cuántica. Para continuar con el tema, existen diversas posibilidades, ya que los nuevos experimentos y las aplicaciones relacionadas están en un excelente momento. Se espera poder analizar el efecto de agregar más capas de MgO con el objetivo de mejorar el desacople del TM sin destruir la señal del STM. En un futuro más lejano se espera poder construir un formalismo similar al descrito en [5,11] para el estudio de cadenas, donde se permita fluctuación de carga entre los distintos átomos magnéticos a través de los N (Cu<sub>2</sub>N) o los Mg (MgO) vecinos de los TM. Gran parte de estos trabajos se realizarán en colaboración con el Grupo de Teoría del INL.

### NV-Centers

Cabe destacar que este es un tema nuevo dentro del grupo de Nanofísica que se ha empezado a estudiar en el último año. Las técnicas necesarias para el estudio de las propiedades magnéticas, eléctricas y la dinámica cuántica de los mismos son similares a las técnicas planteadas en la sección anterior.

Para el tratamiento de este problema se ha pensado en dos estrategias. La primera, que será la de implementación a más corto plazo, es modelar los NV- como sistemas de dos niveles (TLS) [14]. Está claro que en el grupo tenemos experiencia en el estudio de la dinámica cuántica en TLS [8], y por lo tanto podemos esperar obtener resultados preliminares en estos sistemas sin demasiado esfuerzo. Se espera poder, mediante esta metodología, estudiar el control de los estados de spin y estados orbitales del NV- operando con pulsos electromagnéticos. El siguiente paso sería describir los NV- en forma más realista. Es posible estudiar las propiedades eléctricas y magnéticas de dichos sistemas empleando DFT. Una vez que se entienda la estructura de bandas y la densidad de estados de las impurezas de N en Diamante ultra puro podemos obtener, de la misma manera que en el caso de los

átomos magnéticos, funciones localizadas (Wannier Functions) en la vacancia. Hasta ahora lo hemos hecho con funciones localizadas en átomos, con lo cual, en este caso estaríamos frente a un problema un poco más complicado. Una vez obtenidas funciones localizadas en la Vacancia próxima al átomo de N podemos construir nuevamente un Hamiltoniano CI para los electrones en la Vacancia y considerar, de distintas formas, la interacción con los átomos vecinos. Esta descripción permitiría analizar el espectro de bajas energías del dispositivo con un gran nivel de detalles. Luego, mediante las técnicas utilizadas en trabajos previos se realizará el estudio de la dinámica cuántica y el control del spin.

## **4-Factibilidad**

El presente plan de trabajo se llevará a cabo en el grupo de Nanofísica del IMIT. En el Instituto se poseen facilidades computacionales adecuadas para la complejidad de los problemas propuestos en este plan. En estos momentos se está terminando de adquirir un cluster comprado recientemente con un PICT-E. Además se cuenta con acceso al cluster del International Iberian Nanotechnology que puede ser utilizado en el caso de cálculos relacionados a átomos magnéticos en superficies. Además, los investigadores del grupo poseen financiación proveniente de un PIP2015 y un PICT2012 en los cuales están incluidos los temas del presente plan.

Es importante destacar que existen colaboraciones activas en muchos de los temas propuestos en el presente plan. Las principales colaboraciones son con el Grupo de Teoría del International Iberian Nanotechnology Laboratory en Braga, Portugal, el grupo de Materia Condensada del IFEG, Córdoba y el Grupo de Estado Sólido del Centro Atómico Bariloche.

## **Bibliografía**

- [1] C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, A. J. Heinrich, *Science* **312**, 1021 (2006); C. Hirjibehedin, C-Y Lin, A.F. Otte, M. Ternes, C. P. Lutz, B. A. Jones, A. J. Heinrich, *Science* **317**, 1199 (2007); A. F. Otte, M. Ternes, K. von Bergmann, S. Loth, H. Brune, C. P. Lutz, C. F. Hirjibehedin, A. J. Heinrich, *Nat. Phys.* **4**, 847 (2008).
- [2] F. E. Kalf, M. P. Rebergen, E. Fahrenfort, J. Girovsky, R. Toskovic, J. L. Lado, J. Fernández-Rossier and A. F. Otte, <http://arxiv.org/pdf/1604.02265v1.pdf>
- [3] S. Baumann, W. Paul, T. Choi, C. P. Lutz, A. Ardavan, A. J. Heinrich, *Science* **350**, 417 (2015).
- [4] A. Spinelli, B. Bryant, F. Delgado, J. Fernández-Rossier, A. F. Otte, *Nature materials* **13**, 782 (2014).
- [5] A. Ferrón, J. L. Lado, and J. Fernández-Rossier, *Phys. Rev. B* **92**, 174407 (2015).
- [6] B. Bryant, R. Toskovic, A. Ferrón, J. L. Lado, A. Spinelli, J. Fernández-Rossier, and A. F. Otte, *Nano Lett.* **15**, 6542 (2015).
- [7] S. Yan, L. Malavolti, J. A. Burgess, S. Loth, arXiv preprint arXiv:1601.02723
- [8] A. Ferrón, D. Domínguez, M. J. Sánchez, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 237005 (2012).
- [9] L. C. Bassett, F. J. Heremans, D. J. Christle, C. G. Yale, G. Burkard, B. B. Buckley, D. D. Awschalom, *Science* **345**, 1333 (2014).
- [10] L. Childress, et al., *Science* **314**, 281 (2006).
- [11] A. Ferrón, F. Delgado, J. Fernández-Rossier, *New J. Phys.* **17**, 033020 (2015).
- [12] Giannozzi P et al, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
- [13] N. Marzari and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, 12847 (1997).
- [14] P. Huang et al, *Phys. Rev. X* **1**, 011003 (2011).