

## Propiedades basales y magnetotérmicas de cadenas moleculares basadas en trímeros de Níquel

Javier I Norambuena<sup>1</sup>, Emilio A. Cortés<sup>1</sup>, Eric Suarez<sup>1,2</sup>, Juan M. Florez<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Simulaciones, Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, Casilla 110-V, Chile

<sup>2</sup> Departamento de Física Aplicada I, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, Sevilla, E-411, España

\*juanmanuel.florez@usm.cl

### Resumen

La computación cuántica es ahora una realidad que está siendo progresivamente masificada por grandes compañías tecnológicas como IBM [5] y Google [6], con “Quantum labs” que permiten la utilización de computadores y simuladores cuánticos de hasta decenas de qubits para la resolución de variedad de problemas en el mundo civil y de manera parcialmente gratuita [7]. Sin embargo, la tecnología detrás de dichos computadores es aún joven en términos de los alcances de la ciencia de la información/computación cuántica como lo acaba de demostrar el Premio Nobel de Física 2022, y la búsqueda de nuevos sistemas que puedan funcionar como “qubits” es hoy más que nunca indispensable para el progreso de nuestra transición a un mundo híbrido cuántico-digital. En este contexto las llamadas “molecular magnets” hacen parte de los esfuerzos interdisciplinarios físico/químicos para lograr magnetos nanométricos que permitan una alta densidad de almacenamiento, rápido procesamiento y uso de propiedades de “entanglement” de manera controlada. En este trabajo presentamos el estudio de cadenas moleculares formadas por la molécula  $Ni(acac)_2$  [1][2], la cual magnéticamente consiste en un trímero de iones de Níquel acoplados ferro y anti-ferromagnéticamente Figure 1(a). Estudiamos con diagonalización exacta (ED) las propiedades de tres diferentes acoples de dos trímeros Figure 1(b), comparando desde la estructura de los autoestados, el calor específico y la magnetización Figure 1(c), así como la concurrencia. Seguidamente creamos cadenas moleculares a partir de dichos trímeros interactuantes, las cuales son resueltas respecto de su estado basal y primeros excitados con el grupo de renormalización de la matriz de densidad [3]. La magnetización local y total son analizadas bajo la influencia de campos magnéticos y con variedad de acoples de intercambio intermoleculares Figure 1 (d); el diagrama de fase Figure 1(e) es interpretado usando las diferentes configuraciones de la magnetización local, fenómenos de reversión y frustración, así como la correlación entre espines es considerada. Rangos de valores para los diferentes parámetros son propuestos en comparación a los datos experimentales disponibles para un trímero y pensando en los recientes resultados experimentales en los que trímeros  $Ni(acac)_2$  son insertados en nanotubos de carbono, y un cambio de comportamiento de 3D-independientes a 1D correlacionadas es observado en las moléculas cuando el diámetro del tubo es modificado. En este último caso, una reversión local alternada de la magnetización caracteriza el comportamiento del sistema y nuestros resultados evidencian la captura de este comportamiento. Una discusión general sobre la física de este particular tipo de cadenas de espín es presentada.

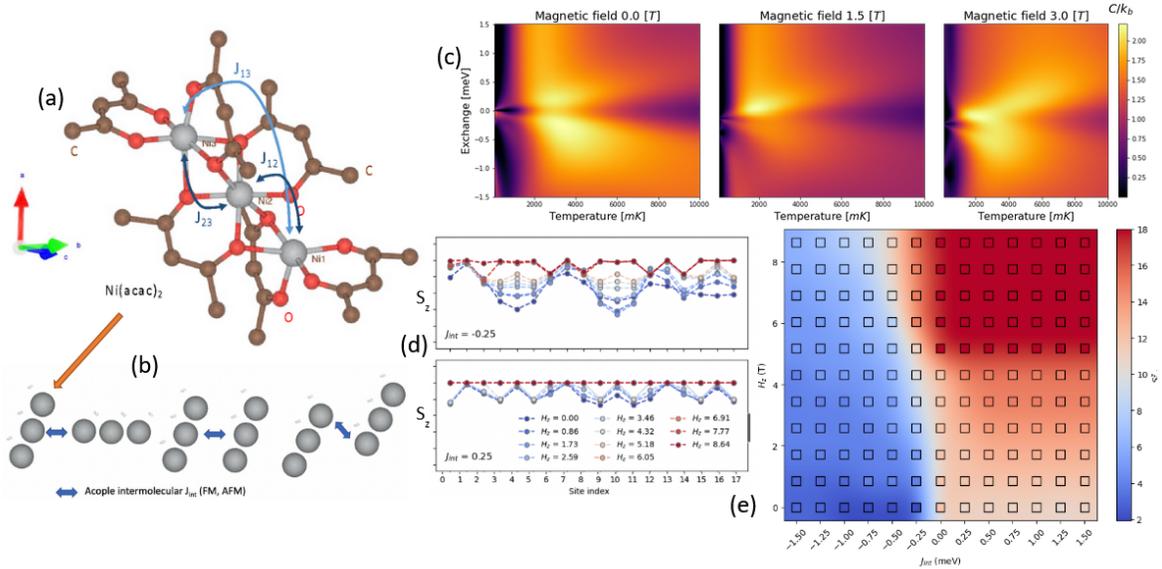


Figura 1: (a) Ni(acac)<sub>2</sub> trímico magnético  $J_{12}=J_{23}\neq J_{13}$  (b) Tres posibles acoplos 1D entre trímeros. (c) Propiedades magnetotérmicas de dos trímeros acoplados (Ni<sub>1</sub>Ni<sub>3</sub>)-Ni<sub>2</sub> (izquierda en b), calculadas con ED. (d) Magnetización en casa sitio de una cadena de 6 trímeros acoplados (18 espines s=1) con la configuración (Ni<sub>1</sub>Ni<sub>3</sub>)-Ni<sub>2</sub>, calculada usando DMRG. (e) Diagrama de fase de la magnetización para cadenas en (d).

Agradecimientos: ECE, ESM and JMF agradecen el soporte financiero del FONDECYT Regular 1221301 (Chile) y del Proyecto Investigación PI-LIR-2021-100 de USM-DGIIIE.

## Referencias

- [1] O. Domanov, E. Weschke, T. Saito, H. Peterlik, T. Pichler, M. Eisterer and H. Shiozawa, *Nanoscale*, **11**, 10615-10621 (2019)
- [2] A. P. Ginsberg, R. L. Martin and R. C. Sherwood, *Inorg. Chem.*, **7**, 932-936 (1968)
- [3] Schollwöck, U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics* 326, 96–192 (2011)
- [4] K. Karl'ová, J. Strečka, T. Madaras, *Phys. B* 488 49–5 (2016)
- [5] <https://qiskit.org/>
- [6] <https://quantumai.google/cirq>
- [7] <https://quantum-computing.ibm.com/services/resources?tab=systems>