Dottorato di Ricerca in Fisica (XLI Ciclo)

Proposta di Progetto di Ricerca

Modeling Chirality-Induced Spin Selectivity in Electron Transfer for Quantum Applications

The research will focus on the study of Chirality-Induced Spin Selectivity (CISS) effect in molecules undergoing photo-induced electron transfer, within the ERC Synergy project *Chirality and spin selectivity in electron transfer processes: from quantum detection to quantum enabled technologies*. CISS yields large spin polarization when electrons go through a chiral medium, with great interest for quantum technologies [1]. It was recently observed also in isolated molecules [2], but it is still poorly understood. The student will develop microscopic models [3] to explain the large observed polarizations, with simulations performed on available high-performance computing machines. He/she will develop schemes to exploit CISS in quantum technologies (for spin qubit initialization/readout and quantum sensing). Moreover, he/she will contribute to interpret time-resolved magnetic resonance experiments to reveal and explain the phenomenon.

Modellizzazione dell'effetto CISS (Chirality-Induced Spin Selectivity) in Electron Transfer per Applicazioni Quantistiche

La ricerca si concentrerà sullo studio dell'effetto CISS (Chirality-Induced Spin Selectivity) in molecole sottoposte a trasferimento elettronico fotoindotto, nell'ambito del progetto ERC Synergy *Chirality and spin selectivity in electron transfer processes: from quantum detection to quantum enabled technologies*. Il CISS produce un'elevata polarizzazione di spin in elettroni che attraversano un mezzo chirale, con grande interesse per le tecnologie quantistiche [1]. È stato recentemente osservato anche in molecole isolate [2], ma è ancora poco capito. Lo studente svilupperà modelli microscopici [3] per spiegare le grandi polarizzazioni osservate, con simulazioni eseguite su macchine di calcolo ad alte prestazioni. Svilupperà schemi per sfruttare il CISS nelle tecnologie quantistiche (per inizializzazione/lettura di spin qubit e quantum sensing). Inoltre, contribuirà ad interpretare esperimenti di risonanza magnetica per svelare e spiegare il fenomeno.

1) Chiesa, Privitera, Macaluso, Mannini, Bittl, Naaman, Wasielewski, Sessoli, Carretta, *Chirality-induced spin selectivity: an enabling technology for quantum applications*, Adv. Mater. **35**, 2300472 (2023).
2) Eckvahl,* Tcyrulnikov,* Chiesa,* Bradley, Young, Carretta, Krzyaniak, Wasielewski, *Direct Observation of Chirality-Induced Spin Selectivity in Electron Donor-Acceptor Molecules*, Science **382**, 197-201 (2023).
3) Chiesa, Garlatti, Mezzadri, Celada, Sessoli, Wasielewski, Bittl, Santini, Carretta, *Many-Body Models for Chirality-Induced Spin Selectivity in Electron Transfer*, Nano Lett. **24**, 12133-12139 (2024).

Contact: stefano.carretta@unipr.it