

# THESE DE DOCTORAT DE

NANTES UNIVERSITE  
LJUBLJANA UNIVERSITY

ECOLE DOCTORALE N° 596

*Matière, Molécules, Matériaux et Géosciences*

Spécialité : Chimie Physique, Chimie Théorique

Par

**Bastien ANÉZO**

## **Simulation and development of azafullerene qubits on diamond substrates**

Simulation et développement de qubits d'azafullerene sur substrat de diamant

Thèse présentée et soutenue à Nantes, le 03 juillet 2026

Unité de recherche : Institut des Matériaux de Nantes – Jean Rouxel  
Institute Jožef Stefan

### **Rapporteurs avant soutenance :**

Maylis ORIO Directrice de Recherche, iSm2, Marseille Université, Marseille  
Fedor JELEZKO Professeur d'université, Institute for Quantum Optics, Ulm University, Ulm

### **Composition du Jury :**

Président : Houria KABBOUR Directrice de Recherche, IMN, Nantes Université, Nantes

Examineurs : Maylis ORIO Directrice de Recherche, iSm2, Marseille Université, Marseille  
Fedor JELEZKO Professeur d'université, Institute for Quantum Optics, Ulm University, Ulm  
Mary DE FEUDIS Maître de conférences, IRCP, CY Cergy Paris Université, Cergy  
Houria KABBOUR Directrice de Recherche, IMN, Nantes Université, Nantes

Dir. de thèse : Chris EWELS Directeur de Recherche, IMN, Nantes Université, Nantes  
Co-dir. de thèse : Denis ARČON Professeur d'université, IJS, Ljubljana University, Ljubljana

### **Invité(s)**

Dean CVETKO Professeur d'université, FMF, Ljubljana University, Ljubljana  
Adam WOJCIECHOWSKI Professeur d'université, JU Department of photonics, Jagiellonian University, Krakow



**Titre :** Simulation et développement de qubits d'azafullerene sur substrat de diamant.

**Mots clés :** ab-initio, théorie fonctionnelle de la densité, complexe supramoléculaire, défaut de couleur, centre NV, résonance magnétique.

**Résumé :** Azafullerene ( $C_{59}N$ ) est une molécule active en spin, espèce radicalaire, de la famille des fullerènes. Le spin  $\frac{1}{2}$  délocalisé sur la cage est un système à deux niveaux manipulable comme un qubit. La stabilité du  $C_{59}N$  est améliorée en utilisant une molécule protectrice, le [10]CPP, par interaction non-covalente supramoléculaire ces deux molécules forment le complexe  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$ . Cette structure possède les mêmes caractéristiques de spin que l'azafullerene, tout en étant stable à température ambiante pendant des années. C'est pourquoi  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$  est prometteur dans le domaine de l'électronique moléculaire, les procédés d'informations quantiques (QIP) et les nano-aimants. Notamment, nous étudions l'implémentation d'un système de mesure du spin moléculaire par fluorescence de défauts colorés dans le diamant.

Dans cette thèse, le calcul des premiers principes par théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) permet de révéler la stabilité électronique (charge et spin) du  $C_{59}N$  et le centre NV dans le diamant. La microscopie par fluorescence de centre NV renseigne sur les caractéristiques du  $C_{59}N$  et révèle une instabilité de charge dépendant de la chimie de surface du diamant. Nous étudions les surfaces tels que Au(111), Ag(111), FeO(001) et le graphène, sur lesquelles des dépôts de [10]CPP puis  $C_{59}N$  sont réalisés pour créer une monocouche de  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$ . Les dépôts sont caractérisés par STM, XPS et NEXAFS, ils révèlent des structures complexes et variables où la structure de  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$  est dépendante des conditions de dépôts et de recuits. Le complexe supramoléculaire conserve son activité de spin dépendant de la surface utilisée.

**Title :** Simulation and development of azafullerene qubits on diamond substrates.

**Keywords :** ab-initio, density functional theory, supramolecular complex, colour centre, NV centre, magnetic resonance.

**Abstract :** Azafullerene ( $C_{59}N$ ) is a spin-active molecule, a radical species, from the fullerene family. The delocalised spin  $\frac{1}{2}$  on the cage is a two-level system manipulable as a qubit. The stability of  $C_{59}N$  is improved by using a protective molecule, [10]CPP; through non-covalent supramolecular interaction, these two molecules form the  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$  complex. This structure retains the same spin characteristics as azafullerene, while being stable at room temperature for years. This is why  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$  is promising in the field of molecular electronics, quantum information processes (QIP), and nanomagnets. In particular, we are studying the implementation of a molecular spin measurement system using fluorescence from colour centres in diamond.

In this thesis, first-principles calculations using density functional theory (DFT) reveal the electronic stability (charge and spin) of  $C_{59}N$  and the NV centre in diamond. Fluorescence microscopy of the NV centre provides information on the characteristics of  $C_{59}N$  and reveals a charge instability depending on the surface chemistry of diamond. We study surfaces such as Au(111), Ag(111), FeO(001), and graphene, on which deposits of [10]CPP and then  $C_{59}N$  are made to create a monolayer of  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$ . The deposits are characterised by STM, XPS, and NEXAFS; they reveal complex and variable phases where the structure of  $C_{59}N\text{c}[10]CPP$  depends on the deposition and annealing conditions. The supramolecular complex retains its spin activity depending on the surface used.