



IEGULDĪJUMS TAVĀ NĀKOTNĒ



Projekts Nr. 2009/0216/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/044

«Datorzinātnes pielietojumi un tās saikne ar kvantu fiziku»

**Pārskats par projektā laikā paveikto aktivitātē
«Pētījumi kvantu tehnoloģiju fizikālajos aspektos»**

Sagatavojis: vad. pētn. V. Kaščejevs

2009. gada 1. decembris – 2012. gada 30. novembris

Saturs

1	Pētījumu aktivitātes struktūra	3
1.1	Aktivitātē iesaistītā jauno zinātnieku grupa	3
1.2	Mērķi	3
1.2.1	Jauna fizika datortehnoloģijām: pētāmās problēmas	3
1.2.2	Datorzinātne fizikai: jaunas metodes kvantu parādību modelēšanai un analīzei	4
1.3	Sadarbības partneri	4
2	Rezultāti	5
2.1	Zinātniskās publikācijas	5
2.2	Nozīmīgākie rezultāti	5
2.2.1	Elektronu skaitītāju – kvantu sūkņu – kvantitatīvā teorija	5
2.2.2	Perovskītu nanocauruļu enerģētiski stabilo konfigurāciju paredzēšana	6
2.2.3	Elektrovadošā slāņa veidošanās mehānismi LaAlO ₃ nanofilmu struktūrā uz SrTiO ₃ perovskīta pamatnes	6
2.2.4	Jauns kvantu interferences pielietojums dinamisko kvantu punktu nanoelektronikas ierīcēs	7
3	Zinātnisko publikāciju saraksts	8
3.1	Raksti starptautiski citējamos žurnālos	8
3.2	Iesniegts publicēšanai	10

1 Pētījumu aktivitātes struktūra

1.1 Aktivitātē iesaistītā jauno zinātnieku grupa

Pētījumus īstenoja:

- Vadošais pētnieks Vjačeslavs Kaščejevs, Ph.D., aktivitātes vadītājs
- Pētnieks Sergejs Piskunovs, Dr. rer.nat.
- Zinātniskais asistents Pāvels Nazarovs, doktorants
- Zinātniskais asistents Jānis Timošenko, doktorants
- Zinātniskais asistents Dmitrijs Bočarovs, Dr. fiz. (promocijas darbs aizstāvēts projekta ietvaros)

1.2 Mērķi

Aktivitātes «Pētījumi kvantu tehnoloģiju fizikālajos aspektos» **primārais mērķis** ir tādu fizikālu sistēmu izpēte, kuru īpašības var izmantot kvantu informācijas apstrādē, realizējot kvantu algoritmus un informācijas apstrādes protokolus. Mūsu uzmanība ir veltīta šādu iekārtu pamatelementiem, kas ir realizējami *cietvielu* sistēmās: kvantu punktus, nanovados un nanocaurulēs. Kvantu informācijas nesēji cietvielu kvantu punktus un ar tiem saistītām sistēmās ir atsevišķie *elektroni*, kuru viļņu funkcijas (stāvokļa vektora) izmaiņas laikā nosaka ārēji vadāmais elektriskais lauks kombinācijā ar konkrētās iekārtas mikroskopiskajām īpašībām. Tādējādi lielāka daļā no aktivitātē sasniegtajiem rezultātiem ir teorētiskās atziņas cietvielu nanoelektronikā.

Dator tehnoloģiju un kvantu fizikas saiknes tradicionālais aspekts ir skaitliskās vienādojumu risināšanas un datorsimulācijas metožu pielietošana fizikālo sistēmu analīzei un modelēšanai. Šis metodoloģiskais virziens ir veidojis aktivitātes **sekundāro mērķi**.

1.2.1 Jauna fizika dator tehnoloģijām: pētāmās problēmas

Pēc pētamo fizikālo objektu un to īpašībām aktivitātes pētījumu rezultātus var sakārtot sekojoši:

- Atomārā un elektroniskā *struktūra* — atbildes uz jautājumu «*No kā veidot elektroniku?*».
 - 2D elektronu gāze starp un uz pusvadītāju (perovskītu) virsmām [13, 19]¹
 - 1D nanocaurules no oglekļa, oksīdiem un perovskītiem [2, 3, 7, 11, 15, 21]
 - 0D kvantu punkti & atomi [18]
- Kvantu daļiņu dinamika mākslīgajā sistēmā — atildes uz jautājumu «*Kā darbināt nanoelektronikas elementus?*».

¹Skaitļi kvadrātikavās atbilst publikāciju saraksta pozīcijām 3. sadaļā.

- Dinamisko kvantu punktu uzlādes un izlādes dinamika [1, 10]
- Nanoelektronisko elementu ķēdes [9]
- Atsevišķi elektroni kā klasiskās un kvantu informācijas nesēji [20]

1.2.2 Datorzinātne fizikai: jaunas metodes kvantu parādību modelēšanai un analīzei

Datortehnoloģijas saikne ar fiziku iekļauj arī jauno aprēķinu metožu un algoritmu attīstību. Aktivitātē šī apseksa pētījumi norisinājušies sekojošos virzienos:

- Liela mēroga primo principu aprēķinu metodika (kvantu ķīmijas «receptes»)
 - Blīvuma funkcionāļu izvēle un aprēķinu metodoloģijas optimizācija cietvielu kvantu ķīmijas savienojumu un struktūru klasēm [4, 5, 8, 19]
- Jauni algoritmi kvantu interferences analīzei
 - «Simulētās atkvēlināšanas» algoritmi apgrieztā Monte Carlo uzdevumam EXAFS spektru analīzē [12, 16]
- Kinētisko vienādojumu analītiskie un skaitliskie risinājumi, pētīt kvantu informācijas ietekmi uz vienelektrona digitālām shēmām
 - Pilnas kvantu laika evolūcijas analītiski aprēķini ar kinētiskajiem vienādojumiem, kas balstīt nelīdzsvara Grīna funkciju teorijā [20]

1.3 Sadarbības partneri

Pētījumi tika veikti akadēmiskā sadarbībā ar vairākiem partneriem Latvijā un ārzemēs. Tas sekmēja daudzpusīgu pieeju pētāmām problēmām, pieredzes apmaiņu un sinerģiju.

- Kvantu punktu eksperimentālie pētījumi, kas sekmēja un verificēja projektā izstrādātās teorijas.
 - Federālais metroloģijas institūts (Physikalisch-Technische Bundesanstalt, PTB) Braunšveigā Vācijā, Dr. Bernd Kaestner [1, 9, 10].
- Nanostruktūru elektroniskās teorētiskā modelēšana un pirmo principu aprēķini.
 - LU Cietvielu fizikas institūta Cietvielu elektronisko struktūru datormodelēšanas laboratorija, Dr. Jurijs Žukovskis [6, 8, 13, 21].
 - Sankt-Pēterburgas universitāte Krievijā, Prof. Robert A. Evarestov [2, 3, 7, 11].
 - Duisburg-Essen University Vācijā, Prof. Eckhardt Spohr [4, 15].
- Fizikāli uzdevumi jaunu algoritmu un kvantu mehānikas aprēķinu metožu attīstībai.
 - LU Cietvielu fizikas institūta Teorētiskās fizikas un datormodelēšanas nodaļa, Dr. Jevgēnijs Kotomins [5, 14, 17, 22].
 - LU Cietvielu fizikas institūta EXAFS spektroskopijas laboratorija, Dr. Aleksejs Kuzmins [12, 16].

2 Rezultāti

2.1 Zinātniskās publikācijas

Aktivitātes pētījumu rezultāti ir publicēti 21 rakstā starptautiski citējamos žurnālos [1–21], vienā monogrāfijas nodaļā [22], un vienā promocijas darbā (Dmitrijs Bočarovs). Vēl pieci raksti [23–27] uz projekta beigu datumu ir iesniegti publicēšanai un atrodas recenzēšanas procesā. Detalizētais publikāciju saraksts ir atrodams 3. sadaļā.

Starp starptautiski recenzējamajiem žurnāliem, kuros ir publicēti pētījumu rezultāti, ir nozaru vadošie *Physical Review Letters* un *The Journal of Physical Chemistry Letters*, skat. Tabulu 1.

Žurnāla nosaukums	Impact Factor	Publikācijas
Physical Review Letters	7.37	[1, 20]
The Journal of Physical Chemistry Letters	6.21	[15]
The Journal of Physical Chemistry C	4.81	[3, 11]
Physical Review B	3.69	[4, 9, 19]
Computer Physics Communications	2.81	[16]

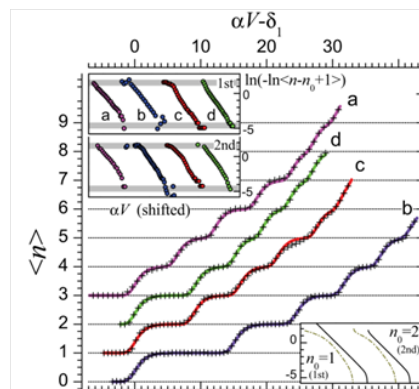
Tabula 1: Aktivitātes publikācijas žurnālos ar vislielāko *Impact Factor* (ietekmes faktoru).

2.2 Nozīmīgākie rezultāti

2.2.1 Elektronu skaitītāju – kvantu sūkņu – kvantitatīvā teorija

Ir radīts «sabrūkuma kaskāžu» (*decay cascade*) modelis, kas kvantitatīti apraksta strāvas uzvedību uz dinamiskajiem kvantu punktiem balstītajos kvantu sūkņos [1]. Šīs iekārtas ļauj precīzi inicializēt kvantu punktus ar noteiktu elektronu skaitu. Jaunais modelis korekti apraksta daudzās laboratorijās iegūtos eksperimentālos datus un ļauj vienotu šī tipa iekārtu klasifikāciju un raksturošanu. Svarīgākā sabrukuma kaskāžu modeļa īpašība ir iespēja no zemas precizitātes mērījumiem novērtēt elektronu satveršanas precizitāti, kura var būt par vairākām lieluma kārtām pārsniegts strāvas mērījumu precizitāti. Šie rezultāti ir publicēti pasaules vadošajā fizikas žurnālā *Physical Review Letters* [1].

Kaskāžu modeļa tālākā attīstība un no tā izrietošās daļiņu satveršanas statistikas eksperimentālā verificācija ir veikta darbā [24].

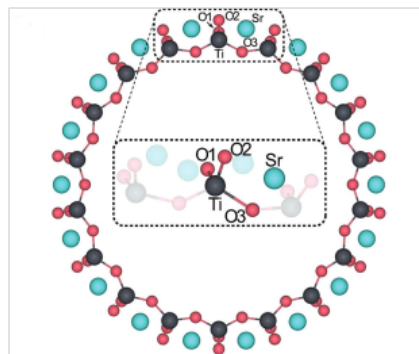


Att. 1: Kvantu sūkņu ģenerētās strāvas atkarība no sprieguma. Kaskāžu modeļa salīdzinājums ar mērījumu datiem.

2.2.2 Perovskītu nanocauruļu enerģētiski stabilo konfigurāciju paredzēšana

Mēs esam veikuši vairāku jauna tipa nanocauruļu sistemātisku klasifikāciju lietojot lielmēroga kvantu ķīmijas aprēķinus ar pilno ģeometrijas optimizāciju [15]. Perovskītu tipa materiāliem tika meklētas optimālās konfigurācijas stroncija titanāta (SrTiO_3) nanocaurulēm, kas var veidoties no šī materiāla kubiskās fāzes. Šī ir jauns un būtisks solis kubisko perovskītu nanostruktūru izpētē, kas paver ceļu to elektroniskās struktūras dizainam. Aprēķinu rezultāti rāda, ka enerģētiski stabilākā struktūra ir sagaidāma SrTiO_3 nanocaurulei no (110) orientācijas nanoslāņā ar taisnstūrveida morfoloģiju. Pastiprināta Ti–O saites kovalence ārējā čaulā palielina absorbcijas spējas, kas paver iespējas veidot no nanocaurulēm sevišķi jutīgus ķīmiskos sensorus. Ir kvantitatīvi noskaidrota kvantu slazdošanas (*quantum confinement*) efekta būtiska ietekme uz nanocauruļu aizliegtās zonas platumu. Šie rezultāti atklāj potenciālu fotokatalītiskajiem pielietojumiem, kuru tālākie pētījumi ir uzsākti darbā [26].

Citu neorganisku nanocauruļu enerģētika un elektroniskie spektri ir pētīti darbos [3, 6, 7, 11, 21, 27].

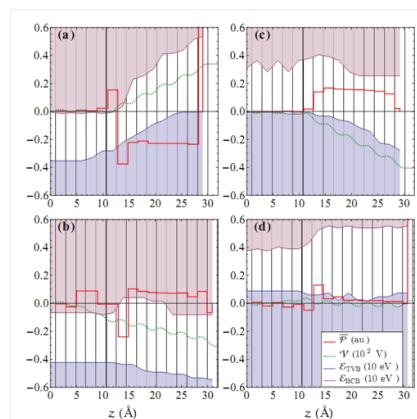


Att. 2: SrTiO_3 nanocaurules konfigurācija ar izdevīgāko enerģiju [15].

2.2.3 Elektrovadošā slāņa veidošanās mehānismi LaAlO_3 nanofilmiņu struktūrā uz SrTiO_3 perovskīta pamatnes

Mēs esam veikuši detalizētu elektroniskās struktūras izpēti lantāna alumināta plānajās kārtiņās uz stroncija titanāta virsmas [19]. Šī perovskītu tipa pusvadītāju struktūra tie aktīvi pētīta, jo tajā ir novērota līdz šim vāji izprasta vadāmības (pie zemām temperatūrām – supravadāmības) rašanās bez donoru vai akceptoru centru mākslīgas radīšanas. Tika konstruēti atomistiski modeļi un veikti šo modeļu elektroniskās struktūras aprēķini ar blīvuma funkcionaļa teorijas palīdzību, izmantojot projektā uzkrāto pieredzi [13, 15] perovskītu struktūru kvantu mehāniskajos aprēķinos. Mēs esam atklājuši, ka lielu ietekmi uz vadāmības rašanos atstāj pēdējās atomārās plaknes tips, kuru nosaka struktūras atkāpe no stehiometriskuma. Savukārt stehiometriskajai n -tipa struktūrai kritisko LaAlO_3 biezumu nosaka elektrostatisks un semikovalento spēku līdzsvars.

Sasniegtie rezultāti norāda uz jaunu iespēju elek-



Att. 3: [(a) un (b) n -tipa, (c) un (d) p -tipa $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ plāno kārtiņu lokālā zonu struktūra. Sasniedzot kritisko LaAlO_3 slāņa biezumu elektrostatisks spēki rada zonu pārklāšanos (a)-(c), kas nestehiometriskā gadījumā (b) ir ar dubultslāņa raksturu.

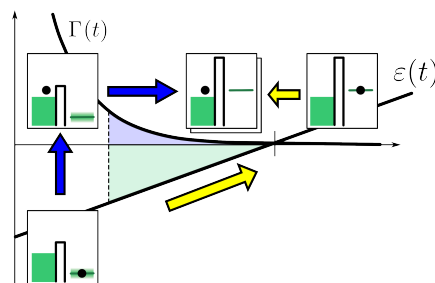
troniskās vadāmības stabilizācijai uz divu polāro dielektriķu kontaktvirsmas, kas ir principiāli jauns ceļš elektronikas komponentu (piemēram, lauka efekta tranzistoru) radīšanai.

2.2.4 Jauns kvantu interferences pielietojums dinamisko kvantu punktu nanoelektronikas ierīcēs

Kvantu fizikas likumi elementārdaļiņu līmenī izpaužas nanoelektronikā kā duālisms starp elektronu daļiņu un viļņu īpašībām. Pretstatā klasiskajiem objektiem, šī īpašības neļauj galīgā laikā vienzīmīgi izolēt vienu elektronu nanoizmēru tranzistorā (kvantu punktā). Teorētiskajā darbā [20] mēs esam atklājuši jaunu interferences efektu, kas ļauj optimizēt daļiņas satveršanas laiku un tās enerģijas nenoteiktības līdzsvaru, tādējādi panākot maksimāli iespējamo elektronu skaitīšanas precizitāti. Šis darbs ir atklājis jaunu veidu kā kvantu informācija (lādiņnesēju kvantu fāze) var ietekmēt nanoelektronikas ierīču darbību, turklāt ar būtisku praktiskā pielietojuma potenciālu: iegūtās atziņas nākotnē palīdzēs radīt strāvas etalonu, kura precizitāti ierobežo tika fundamentālie fizikas likumi.

Šajā darbā tika izmantota analogija ar dinamisko elektronu kvantu interferences efektu, kas ir EXAFS spektroskopijas pamatā, un kura jauni analīzes algoritmi arī ir izstrādāti projekta laikā [16]. Savukārt enerģija-laika nenoteiktības mehānisms papildina iepriekš izstrādāto un plašu atzinību guvušo sabrukuma kaskāžu modeli [1] (skat. sadaļu 2.2.1).

Kopā ar aktivitātē «Pētījumi kvantu skaitļošanā» izstrādāto mācīšanās grafu metodi šo rezultātu Latvijas Zinātņu akadēmija ir atzinusi par **vienu no pieciem nozīmīgākajiem sasniegumiem** teorētiskajā zinātnē Latvijā 2012. gadā.



Att. 4: Paaugstinot potenciālo barjeru starp kontaktu un kvantu punktu, eksponenciāli samazinās elektrona diskrētā stāvokļa enerģijas ε nenoteiktība Γ . Zilas un dzeltenas bultas attēlo divus dažādus ceļus, kā elektrons var izbēgt no slazda.

3 Zinātnisko publikāciju saraksts

3.1 Raksti starptautiski citējamos žurnālos

Ar projekta atbalstu tapušās publikācijas, kas ir iekļautas *Thomson Reuters Web of Science*[®] un *Scopus*[®] datubāzēs.

- [1] V. Kashcheyevs and B. Kaestner. «Universal Decay Cascade Model for Dynamic Quantum Dot Initialization». In: *Physical Review Letters* 104.18 (May 2010), p. 186805. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.186805.
- [2] R. Evarestov, A. Bandura, M. Losev, S. Piskunov, and Y. Zhukovskii. «Titania nanotubes modeled from 3- and 6-layered (101) anatase sheets: Line group symmetry and comparative ab initio LCAO calculations». In: *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 43.1 (Nov. 2010), pp. 266–278. DOI: 10.1016/j.physe.2010.07.068.
- [3] R. A. Evarestov, Y. F. Zhukovskii, A. V. Bandura, and S. Piskunov. «Symmetry and Models of Single-Wall BN and TiO₂ Nanotubes with Hexagonal Morphology». In: *The Journal of Physical Chemistry C* 114.49 (Dec. 2010), pp. 21061–21069. DOI: 10.1021/jp106929f.
- [4] S. Piskunov, T. Jacob, and E. Spohr. «Oxygen adsorption at La_{1-x}Sr_xMnO₃(001) surfaces: Predictions from first principles». In: *Physical Review B* 83.7 (Feb. 2011), p. 073402. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.073402.
- [5] D. Bocharov, D. Gryaznov, Y. Zhukovskii, and E. Kotomin. «DFT calculations of point defects on UN(001) surface». In: *Surface Science* 605.3-4 (Feb. 2011), pp. 396–400. DOI: 10.1016/j.susc.2010.11.007.
- [6] S. Piskunov, G. Zvejnieks, Y. F. Zhukovskii, and S. Bellucci. «Atomic and electronic structure of both perfect and nanostructured Ni(111) surfaces: First-principles calculations». In: *Thin Solid Films* 519.11 (Mar. 2011), pp. 3745–3751. DOI: 10.1016/j.tsf.2011.01.357.
- [7] R. A. Evarestov, Y. F. Zhukovskii, A. V. Bandura, and S. Piskunov. «Symmetry and models of single-walled TiO₂ nanotubes with rectangular morphology». In: *Central European Journal of Physics* 9.2 (Apr. 2011), pp. 492–501. DOI: 10.2478/s11534-010-0095-8.
- [8] Y. F. Zhukovskii, S. Piskunov, E. A. Kotomin, and S. Bellucci. «Simulations on the mechanism of CNT bundle growth upon smooth and nanostructured Ni as well as θ -Al₂O₃ catalysts». In: *Central European Journal of Physics* 9.2 (Apr. 2011), pp. 530–541. DOI: 10.2478/s11534-010-0079-8.
- [9] L. Fricke, F. Hohls, N. Ubbelohde, B. Kaestner, V. Kashcheyevs, C. Leicht, P. Mirovsky, K. Pierz, H. Schumacher, and R. Haug. «Quantized current source with mesoscopic feedback». In: *Physical Review B* 83.19 (May 2011), p. 193306. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.193306. arXiv: 1105.5501.

- [10] C. Leicht, P. Mirovsky, B. Kaestner, F. Hohls, V. Kashcheyevs, E. V. Kurganova, U. Zeitler, T. Weimann, K. Pierz, and H. W. Schumacher. «Generation of energy selective excitations in quantum Hall edge states». In: *Semiconductor Science and Technology* 26.5 (May 2011), p. 55010. DOI: 10.1088/0268-1242/26/5/055010. arXiv: 1009.5897.
- [11] R. A. Evarestov, Y. F. Zhukovskii, A. V. Bandura, S. Piskunov, and M. V. Losev. «Symmetry and Models of Double-Wall BN and TiO₂ Nanotubes with Hexagonal Morphology». In: *The Journal of Physical Chemistry C* 115.29 (June 2011), pp. 14067–14076. DOI: 10.1021/jp2027737.
- [12] J. Timoshenko, A. Kuzmin, and J. Purans. «Molecular dynamics simulations of EXAFS in germanium». In: *Central European Journal of Physics* 9.3 (June 2011), pp. 710–715. DOI: 10.2478/s11534-010-0074-0.
- [13] V. Alexandrov, S. Piskunov, Y. F. Zhukovskii, E. A. Kotomin, and J. Maier. «First-Principles Modeling of Oxygen Interaction with SrTiO₃ (001) Surface: Comparative Density-Functional LCAO and Plane-Wave Study». In: *Integrated Ferroelectrics* 123.1 (June 2011), pp. 10–17. DOI: 10.1080/10584587.2011.570586.
- [14] D. Bocharov, D. Gryaznov, Y. Zhukovskii, and E. Kotomin. «Ab initio modeling of oxygen impurity atom incorporation into uranium mononitride surface and sub-surface vacancies». In: *Journal of Nuclear Materials* 416.1-2 (Sept. 2011), pp. 200–204. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.11.090.
- [15] S. Piskunov and E. Spohr. «SrTiO₃ Nanotubes with Negative Strain Energy Predicted from First Principles». In: *The Journal of Physical Chemistry Letters* 2.20 (Oct. 2011), pp. 2566–2570. DOI: 10.1021/jz201050e.
- [16] J. Timoshenko, A. Kuzmin, and J. Purans. «Reverse Monte Carlo modeling of thermal disorder in crystalline materials from EXAFS spectra». In: *Computer Physics Communications* 183.6 (June 2012), pp. 1237–1245. DOI: 10.1016/j.cpc.2012.02.002.
- [17] E. A. Kotomin, Y. F. Zhukovskii, D. Bocharov, and D. Gryaznov. «Ab initio modelling of UN grain boundary interfaces». In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 38.1 (Aug. 2012), p. 012058. DOI: 10.1088/1757-899X/38/1/012058.
- [18] O. Lisovski, S. Piskunov, Y. F. Zhukovskii, and J. Ozolins. «Ab initio modeling of sulphur doped TiO₂ nanotubular photocatalyst for water-splitting hydrogen generation». In: *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 38.1 (Aug. 2012), p. 012057. DOI: 10.1088/1757-899X/38/1/012057.
- [19] A. Sorokine, D. Bocharov, S. Piskunov, and V. Kashcheyevs. «Electronic charge redistribution in LaAlO₃(001) thin films deposited at SrTiO₃(001) substrate: First-principles analysis and the role of stoichiometry». In: *Physical Review B* 86.15 (Oct. 2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.86.155410. arXiv: 1205.4175.
- [20] V. Kashcheyevs and J. Timoshenko. «Quantum Fluctuations and Coherence in High-Precision Single-Electron Capture». In: *Physical Review Letters* 109.21 (Nov. 2012), p. 216801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.216801. arXiv: 1205.3497.

- [21] Y. F. Zhukovskii, S. Piskunov, and S. Bellucci. «Double-Wall Carbon Nanotubes of Different Morphology: Electronic Structure Simulations». In: *Nanoscience and Nanotechnology Letters* 4.11 (Nov. 2012), pp. 1074–1081. DOI: 10.1166/nnl.2012.1460.
- [22] Y. Zhukovskii, D. Bocharov, D. Gryaznov, and E. Kotomin. «First Principles Simulations on Surface Properties and Oxidation of Nitride Nuclear Fuels». In: *Advances in Nuclear Fuel*. Ed. by S. T. Revankar. InTech Open Access Publishers, 2012, pp. 95–122. DOI: 10.5772/34144.

3.2 Iesniegts publicēšanai

Publikācijas, kas ir iesniegtas publicēšanai, bet kuras līdz projekta beigām vēl turpinājies recenzēšanas process.

- [23] D. Bocharov, D. Gryaznov, Y. F. Zhukovskii, and E. A. Kotomin. «Ab initio simulations of oxygen interaction with surfaces and interfaces in uranium mononitride». In: *Journal of Nuclear Physics* (Nov. 2012). arXiv: 1211.5695.
- [24] L. Fricke, M. Wulf, B. Kaestner, V. Kashcheyevs, J. Timoshenko, P. Nazarov, F. Hohls, P. Mirovsky, B. Mackrodt, R. Dolata, T. Weimann, K. Pierz, and H. W. Schumacher. «Counting statistics for electron capture in a dynamic quantum dot». In: *Physical Review Letters* (Nov. 2012), p. 7. arXiv: 1211.1781.
- [25] P. Zhgun, D. Bocharov, S. Piskunov, A. Kuzmin, and J. Purans. «Electronic structure of cubic ScF₃ from first-principles calculations». In: *Journal of Physics: Conference Series* (Nov. 2012). arXiv: 1211.5697.
- [26] Y. F. Zhukovskii and S. Piskunov. «Ab initio simulations of 1D inorganic nanostructures». In: *Journal of Physics: Conference Series* (2012).
- [27] Y. F. Zhukovskii, S. Piskunov, J. Begens, J. Kazerovskis, and L. O. «First principles calculations of point defects in inorganic nanotubes». In: *Physica Status Solidi* (2012).