

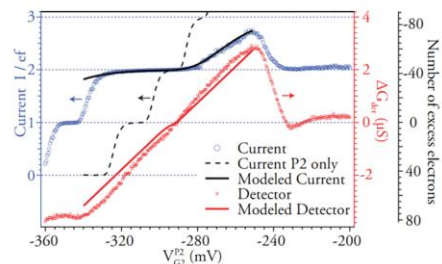
Projekts „Datorzinātnes pielietojumi un tās saiknes ar kvantu fiziku”

Aktivitātes „Kvantu tehnoloģiju fizikālie aspekti” atskaite par projekta otro gadu

Šīs aktivitātes pētījumos tiek pielietotas teorētiskās fizikas un datorzinātņu metodes. Mēs lietojam divas stratēģijas: pirmkārt, fenomenoloģisku kvantu modeļu radīšanu, raksturošanu un verifikāciju, izmantojot analītiskus un skaitliskus aprēķinus un pašu radīto programmatūru, un, otrkārt, lielmēroga kvantu ķīmisko modelēšanu sistēmām ar noteiktu atomāro struktūru, lietojot blīvuma funkcionāla teoriju un specializēto, paralēlai skaitļošanai piemēroto programmatūru.

Svarīgāie rezultāti otrajā projekta gadā (2010. g. decembris - 2011. g. novembris):

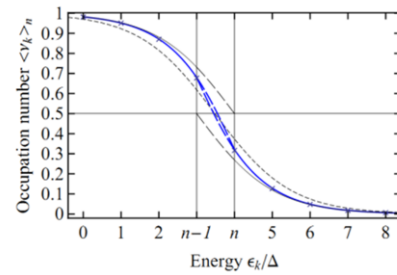
- Turpinot darbu pie **vienielektrona strāvas avotu kvantitatīvas teorijas** izveides, ir radīts virknē slēgtu kvantu sūkņu modelis, kas ņem vērā vairāku kvantu punktu elektrostatisko mijiedarbību. Modelis balstās uz pirmajā projekta gadā radīto sabrukuma kaskāžu modeli. Galvenā priekšrocība, ko sniedz virknes slēgums, ir strāvas trokšņa pazemināšana mazo frekvenču diapazonā. Modeļa atbilstību realitātei ir apstiprinājuši eksperimenti Vācijas metroloģijas institūtā PTB. Kopā ar Vācijas kolēģiem rezultāti ir publicēti žurnālā *Physical Review B*. Izpētot stipras atgriezeniskās saites robežu ir atklāta pāreja no analogā uz diskreto (binomiālu) troksni, par ko tiek gatavota atsevišķa publikācija.



1. attēls. Virknē slēgtu kvantu sūkņu ģenerētā strāvas (zilā līnija) un uzkrātā potenciāla (sarkanā līnija) atkarība no pieliktā sprieguma. Punkti: eksperimentāli dati, līnijas: projektā izstrādā teorija.

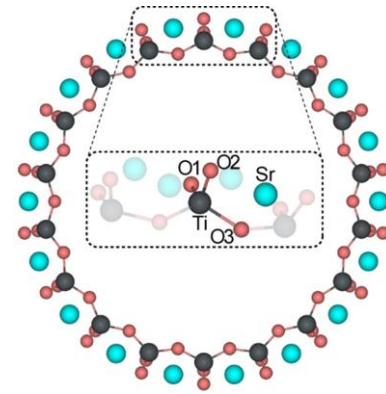
- Mēs esam izveidojuši **dinamisko kvantu punktu** termisko un kvantu **fluktuāciju teoriju** un turpinām darbu pie šīs teorijas lietojumiem kvantu sūkņu volt-ampēra raksturliķņu dizainam. Dinamiskajiem kvantu punktiem, kas veido pamatelementus vienelektrona strāvas avotos un kvantu sūkņos, ir raksturīgas siltuma (termiskās) un kvantu (dinamiskās) fluktuācijas jeb kļūdas elektronu satveršanā. Zinātniskajā literatūrā pieejamās teorijas, kas balstās uz kinētiskajiem vienādojumiem un uz Grīna funkciju kustības vienādojumiem, neņem vērā tunelēšanas amplitūdu eksponenciālo atkarību no enerģijas un laika, kas ir raksturīga tieši jaunākās paaudzes neadiabātiskajiem kvantu sūkņiem. Mēs esam formulējuši vispārīgu teoriju, kas ņem vērā abas minētās atkarības. Ir iegūtas analītiskas sakarības un skaitliskie rezultāti, kas raksturo dinamisko kvantu fluktuāciju ietekmi uz kvantu punkta inicializācijas precizitāti. Šie rezultāti veido tiltu starp literatūrā apskatītajiem robežgadījumiem un ļauj veikt eksperimentāli pārbaudāmus paredzējumus.

- Attīstot termisko fluktuāciju teoriju daudzlīmeņu kvantu punktam tika analītiski atrisināts **fundamentāls kvantu statistikas jautājums: Fermi-Dīraka funkcijas vispārinājums** sistēmai ar galīgu un fiksētu daļiņu skaitu un diskrētu kvantu līmeņu spektru. Ir atklāta vispārinātās Fermi funkcijas saikne ar q-polinomiem, kas tiek lietoti kombinatorikas uzdevumu risināšanā. Šie vispārīgie rezultāti ir apkopoti atsevišķā rakstā, kas ir iesniegts publikācijai.



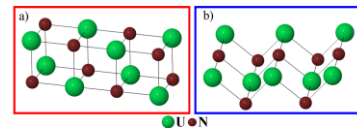
2. attēls. Fermionu (piemēram, elektronu) kvantu līmeņu apdzīvotība: precīzā vispārinātā Fermi-Dīraka sadalījuma (zilā līnijā) salīdzinājums ar dažādiem tuvinājumiem

- Mēs esam veikuši vairāku jauna tipa **nanocauruļu sistemātisku klasifikāciju** lietojot lielmēroga kvantu ķīmijas aprēķinus ar pilno ģeometrijas optimizāciju. Perovskītu tipa materiāliem tika meklētas optimālās konfigurācijas stroncija titanāta (SrTiO_3) nanocaurulēm, kas var veidoties no šī materiāla kubiskās fāzes. Šis 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 nanoslāņa ar taisnstūrveida morfologiju. Pastiprināta Ti-O saites kovalence ārējā čaulā palielina absorbcijas spējas, kas paver iespējas veidot no nanocaurulēm sevišķi jūtīgus ķīmisko vielu sensorus. Ir kvantitatīvi noskaidrota kvantu slazdošanas (quantum confinement) efekta būtiska ietekme uz nanocauruļu aizliegtās zonas platumu. Šie rezultāti atklāj potenciālu fotokatalītiskajiem pielietojumiem, kuru izpēte tiks turpināta projekta trešajā gadā. Perovskītu nanocauruļu lielmēroga kvantu modelēšanas rezultāti ir publicēti rakstā žurnālā *Jorunal of Physical Chemistry Letters*.



3. attēls. Visstabilākās stroncija titanāta nanocaurulēs atomāra konfigurācija.

- Attīstot kvantu ķīmijas metodes, ir veikta **sistemātiskā modeļu kristalogrāfiskās orientācijas ietekmes izpēte** uz smago elementu savienojumu aprēķinu precizitāti un stabilitāti. Uzticamie pirmo principu aprēķini smagajiem elementiem ļauj aizstāt bīstamus vai neiespējamus aprēķinus ar atomu līmeņu aprēķinu. Tika salīdzinātas urāna nitrīda (UN) kubiskās fāzes (001) un (110) orientāciju virsmas. Aprēķinu rezultāti parādīja, ka mainot virsmas orientāciju paliek spēkā



Number of layers	$E_{\text{surf}} (\text{J m}^{-2})$ spin-ordered slab (001)	$E_{\text{surf}} (\text{J m}^{-2})$ spin-relaxed slab (001)	$\mu_{\text{O}} (\text{Jn})$ (001)	$E_{\text{surf}} (\text{J m}^{-2})$ spin-relaxed slab (110)	$\mu_{\text{O}} (\text{Jn})$ (110)
5	1.69	1.44	1.57	1.977	1.645
7	1.70	1.37	1.44	1.928	1.464
9	1.70	1.29	1.37	1.878	1.417
11	1.69	1.22	1.33	1.830	1.385

4. attēls. Dažādu kristalogrāfisko orientāciju modeļu salīdzinājuma piemērs.

defektu veidošanās kvalitatīvie scenāriji. Kvantitatīvajiem efektiem ir iespējamās pretējas tendences: bezdefektu virsmas stabilitāte ir augstāka (001) orientācijas virsmai, savukārt vakanču veidošanās enerģija ir zemāka par apt. 0.7 eV (110) orientācijai. Rezultāti ir prezentēti starptautiskajā konferencē „*Synergy between modelling and experiments for the investigation of nuclear fuels*” Kembridžā, Apvienotajā Karalistē un iekļauti Dmitrija Bočarova promocijas darbā.