

Projekts „Datorzinātnes pielietojumi un tās saiknes ar kvantu fiziku”

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

Ko un kāpēc mēs pētām?

Pētniecības aktivitātes „Kvantu tehnoloģiju fizikālie aspekti” 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 punktos, nanovados un nanocaurulēs. Mēs pētām ar šīm sistēmām saistīto pasaules zinātnē aktuālos fundamentālo jautājumus. Kvantu informācijas nesēji ciетvielu kvantu punktos 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. Izmēramie lielumi ir elektriski detektējamās īpašība: vadāmība, strāva, strāvas korelācijas funkcijas. Atsevišķi tiek modelēta šādu sistēmu izgatavošanā iesaistīto materiālu, galvenokārt pusvadītāju persovskītu, elektroniskās īpašības netradicionālajās struktūrās – atomistiski plānās kārtiņās un nanocaurulēs.

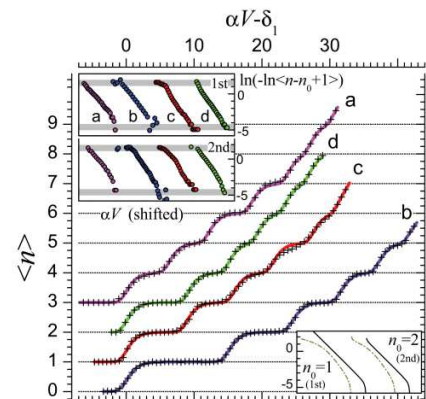
Kā mēs pētām?

Šīs aktivitātes pētījumos tiek pielietotas teorētiskās fizikas un datorzinātņu metodes. Mēs lietojam divas stratēģijas: pirmkārt, fenomenoloģisku kvantu modeļu radīšana, raksturošana un verifikācija, izmantojot analītiskus un skaitliskus aprēķinus un pašu radīto programmatūru, un, otrkārt, lielmēroga kvantu ķīmiskā modelēšana sistēmām ar noteiktu atomāro struktūru, lietojot blīvuma funkcionāla teoriju un specializēto, paralēlai skaitļošanai piemēroto programmatūru. Mūs akadēmiskās sadarbības partneri ārpus projekta ir eksperimentālo pētnieku grupas Vācijā (PTB Institūts) un Lielbritānijā (Kembridžas Universitāte), kā arī skaitlisko kvantu aprēķinu speciālisti LU Cietvielu fizikas institūtā, Vācijā (Duizburgas-Esenas Universitāte) un Krievijā (Sanktpēterburgas Universitāte).

Kas ir sasniegts projekta pirmajā gadā?

Projekta pirmajā gadā nozīmīgākos rezultātus var sagrupēt divās daļās: elektronu kvantu sūkņu un dinamisko kvantu punktu modelēšana un interfeisu un nanocauruļu elektroniskās struktūras aprēķini.

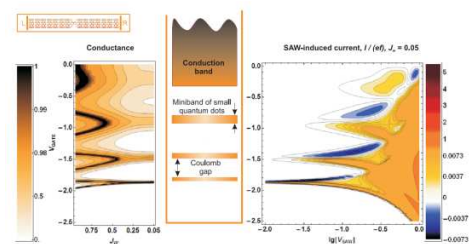
- Ir radīts „sabrūkuma kaskāžu” modelis, kas kvantitatīvi apraksta strāvas uzvedību uz dinamiskajiem kvantu punktiem balstītajos kvantu sūkņos (V.Kaščejevs). Šis iekārtas ļauj precīzi inicializēt kvantu punktus ar noteiktu elektronu skaitu. Jaunais modelis korekti apraksta daudzās laboratorijās iegūtos 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 pārsniegt strāvas mērījumu precizitāti. Šie rezultāti ir publicēti pasaules vadošajā fizikas žurnālā *Physical Review Letters*.



Kvantu sūkņu ģenerētās strāvas atkarība no sprieguma. Kaskāžu modeļa salīdzinājums ar literatūrā publicētajiem mērījumu datiem.

Attēls no V. Kashcheyevs and B. Kaestner, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 186805 (2010).

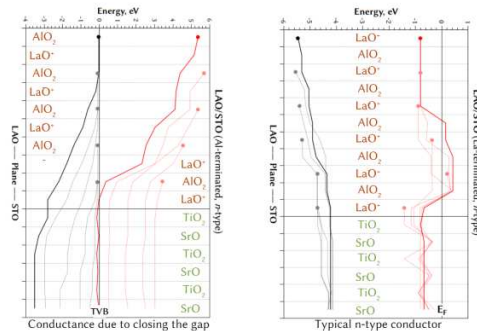
- Veikta detalizēta adiabatiskās kvantu sūkņēšanas mehānisma izpēte zema elektroniskā blīvuma oglekļa nanocaurulēs (J.Timošenko, V.Kaščejevs). Šis darbs balstās uz Kembridžas universitātē iegūtajiem eksperimentālajiem datiem, kas liecina par elektronu kvantu stāvokļu kvalitatīvo maiņu atkarībā no nanocaurulei pieliktā virsmas akustiskā viļņa potenciāla. Ievērojams eksperimentālai situācijai piemērots modelis un veikta tā skaitliskā un analītiskā izpēte. Rezultāti ļauj novērtēt lokalizēto kvantu punktu veidošanās nosacījumus kvazi-viendimensionālajās sistēmās. Uz šo rezultātu pamata tiek gatavota publikācija sadarbībā ar Kembridžas universitātes Kavendiša laboratoriju Lielbritānijā.



Labajā pusē: caur oglekļa nanocauruli pārsūknētā lādiņa atkarība no virsmas akustisko viļņu jaudas un vadības sprieguma. Kreisajā pusē ir parādīta atbilstošā vadāmība, centrā – nesakārtotības radīto kvantu punktu mini-zonu struktūra (J.Timošenko)

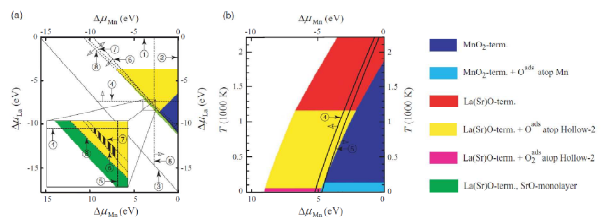
- Ir uzsākta kvantitatīvo modeļu izveide un aprobācija atsevišķo kvantu stāvokļu selektīvajai inicializācijai dinamiskajos kvantu punktos. P.Nazarovs un V.Kaščejevs tika komandēti uz PTB institūtu Vācijā 2010. gada jūlijā, kur sadarbībā ar Dr.B.Kaestner'a grupu tika analizēta kvantu punktu uzlādes raksturliķņu struktūra. Ir piedāvāts kaskāžu modeļa vispārinājums, ka ņem vērā ne tikai izlādes (atpakaļtūnelēšanas) bet arī uzlādes procesa dinamiku. Modeļa detalizēta izpēte un salīdzinājuma ar eksperimentu metodikas izstrāde ir pirmais posms P.Nazarova promocijas darba uzdevumos.

- Mēs esam veikuši detalizētu elektroniskās struktūras izpēti lantāna alumināta plānajās kārtiņās uz stroncija titanāta virsmas (D.Bočarovs,S.Piskunovs,V.Kaščejevs). Šī pervskitu tipa pusvadītāju struktūra tiek aktīvi pētīta, jo tajā ir novērota līdz šim vāji izprasta vadāmības (pie zemām temperatūrām – supravadamības) rašanās bez donoru vai akceptoru centru mākslīgas radīšanas. Tika konstruēti atomistiski modeļi un veikta šo modeļa elektroniskās struktūras aprēķini ar blīvuma funkcionāla teorijas palīdzību. Mēs esam atklājuši, ka lielu ietekmi uz vadāmības rašanos atstāj pēdējās atomārās plaknes tips. Uz AlO_2 -terminētās virsmas stabilitāti norāda termodinamisko potenciālu aprēķini. Rezultāti prezentēti D.Bočarova stenda referātā starptautiskajā konferencē TRNM'2010 Levi, Somijā 2010. gada decembrī; tiek gatavots raksts žurnālam *Physical Review B*.



LaAlO₃ kārtiņas un SrTiO₃ pamatnes zonu struktūras atkarība no kārtas biezuma, no 1 līdz 11 atomārajām plaknēm. (S.Sorokin,B.Bočarovs,S.Piskunovs,V.Kaščejevs).

- 2010. gada februārī un novembrī S.Piskunovs ir viesojies prof. E. Spohr'a grupā Duizburgas-Esenas Universitātgrupā. Šīs sadarbības gaitā ir pilnveidotas perovskita tipa struktūras un termodinamikas aprēķina metodes un izpētīta skābekļa absorbcijas uz $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ virsmas. Rezultāti ir aprakstīti rakstā, kas ir pieņemts publicēšanai žurnālā *Physical Review B*.



Teorētiski aprēķinātā lantāna un stroncija manganātu virsmas termodinamiskās stabilitātes fāzu diagrammas (S. Piskunov, T. Jacob, E. Spohr, Phys.Rev.B).

- Tika izpētīti oglekļa nanocauruļu augšanas mehānismi uz nanostrukturētā katalizatora pamatnes, izmantojot kvantu ķīmijas metodes. Šajā darbā S.Piskunovs ir sadarbojies ar kolēģiem no LU Cietvielu fizikas Institūta (J.Žukovskis,G.Zvejnieks). Ir noskaidroti uz niķeļa virsmas absorbēto oglekļa atomu pāru un trīsatomu mijiedarbības veidi un stiprumi un to loma nanostrukturētā katalizatora virsmas izveidē. Oglekļa nanocaurules augšanas simulācijas liecina par Ni klāsteru pozitīvo lomu nanocaurules iedīgļa stabilizācijā. Šie rezultāti ir apkopoti divās publikācijās.