

Aktivitātē iesaistītā jauno zinātnieku grupa

- Vad. pētn. **Vjačeslavs Kaščejevs**, Ph. D., aktivitātes vadītājs
- Pētnieks **Sergejs Piskunovs**, Dr. rer. nat.
- Zin. asist. **Dmitrijs Bočarovs**, Dr. fiz.
- Zin. asist. **Pāvels Nazarovs**, doktorants
- Zin. asist. **Jānis Timošenko**, doktorants

Rezultātu kopsavilkums

Aktivitātes pētījumu rezultāti ir publicēti 26 rakstā starptautiski citējamos žurnālos [1-26], ir aizstāvēts viens promocijas darbs (D. Bočarovs, 2012).

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	[9, 4, 19]
Computer Physics Communications	2.81	[16]

Latvijas zinātnes sasniegums 2012. gadā



Att. : (no kreisās puses) V.Kaščejevs, A. Belovs, J. Timošenko un A. Ambainis.

Kopā ar projekta aktivitātē «Pētījumi kvantu skaitļošanā» izstrādāto mācīšanās grafu metodi (Aleksandrs Belovs, Andris Ambainis) šīs grupas zinātnieki V. Kaščejevs un J. Timošenko ir ieguvuši *Latvijas Zinātņu akadēmijas* atzinību par **vienu no pieciem nozīmīgākajiem sasniegumiem** teorētiskajā zinātnē Latvijā 2012. gadā.

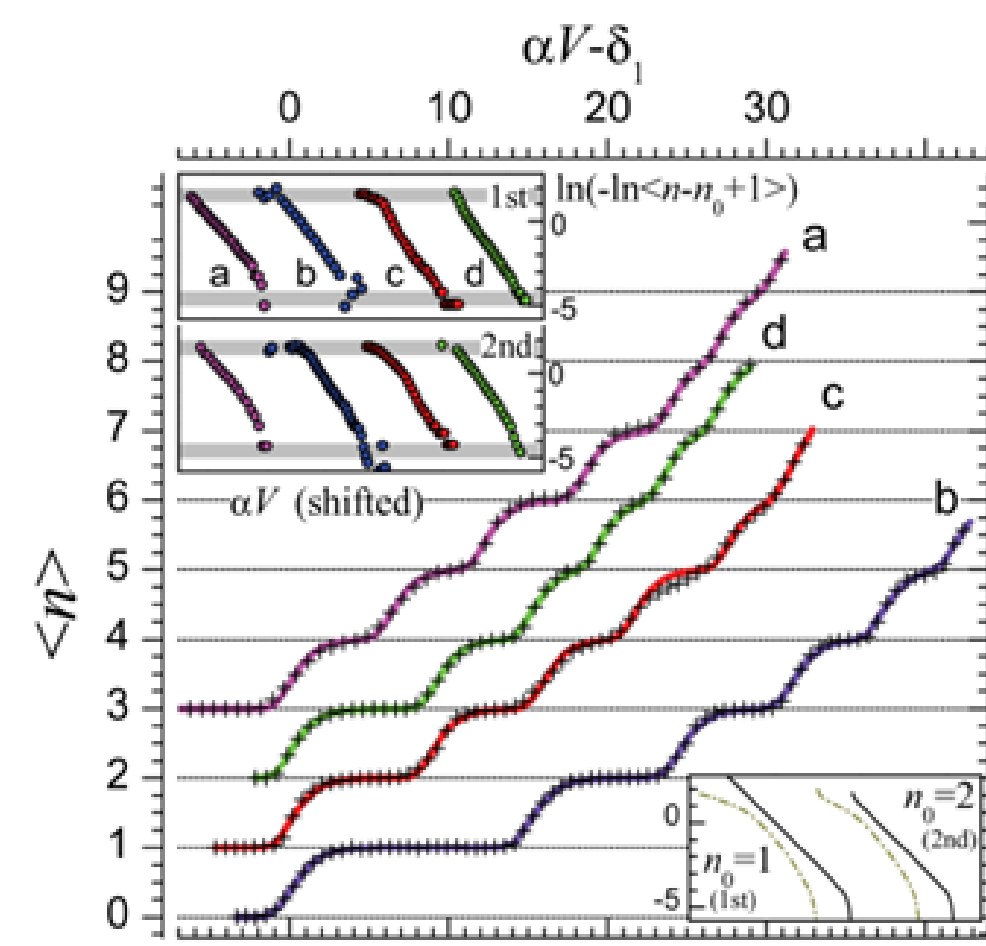
Sadarbības partneri Latvijā un ārzemēs

Pētījumi tika veikti akadēmiskā sadarbībā ar vairākiem partneriem Latvijā un ārzemēs, sekmējot 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, 10, 9].
- 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 [15, 4].
- 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].
 - LU Cietvielu fizikas institūta EXAFS spektroskopijas laboratorija, Dr. Aleksejs Kuzmins [12, 16].

Elektronu skaitītāju – kvantu sūkņu – kvantitatīvā teorija

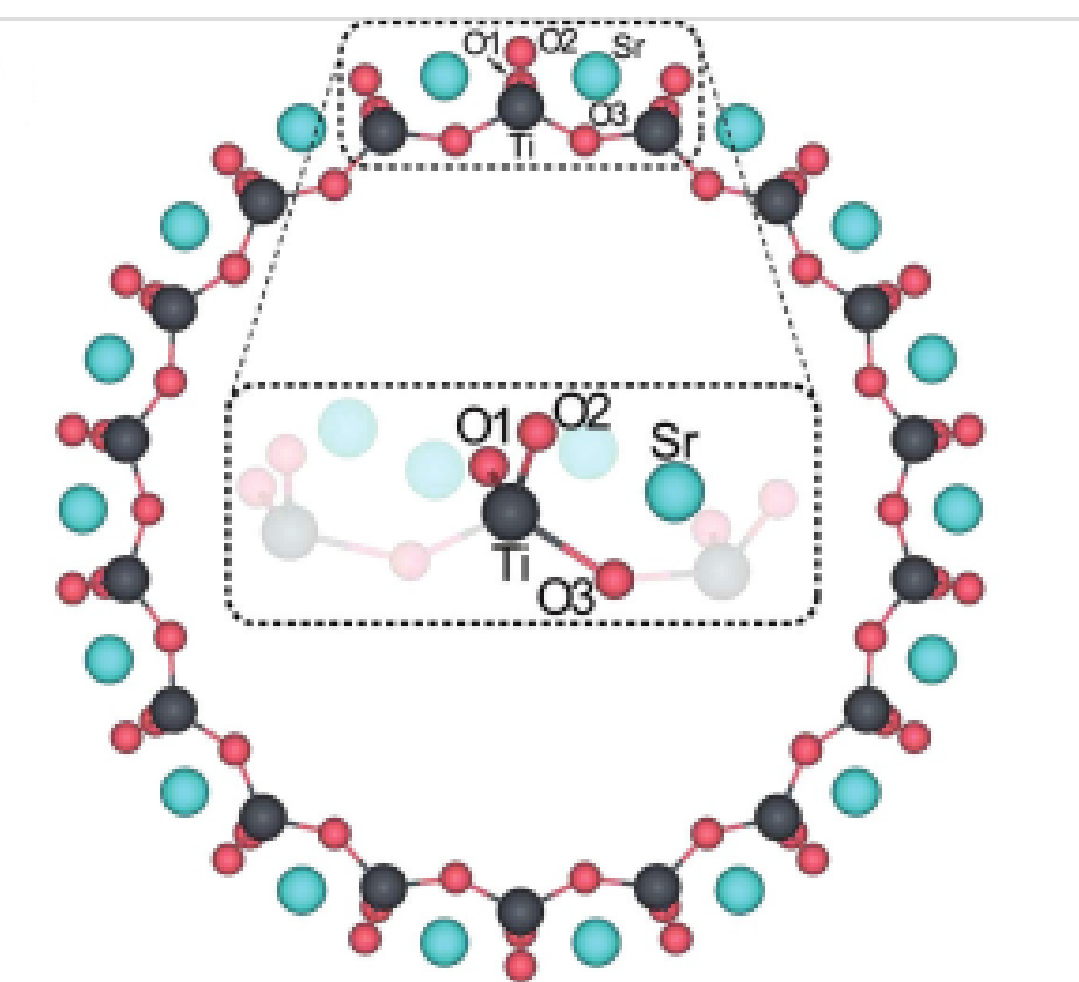
Ir radīts «sabrūkuma kaskāžu» (*dacay cascade*) modelis, kas kvantitatīvi apraksta strāvas uzvedību uz dinamiskajiem kvantu punktiem balstītajos kvantu sūkņos [1]. Šis iekārtas ļauj precīzi inicializēt kvantu punktus ar noteiktu elektronu skaitu. Jaunais modelis korekti apraksta daudzās laboratorijās 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 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 verifikācija ir veikta darbā [23].



Att. : Kaskāžu modeļa salīdzinājums ar mērījumu datiem.

Perovskītu nanocauruļu enerģētiski stabilo konfigurāciju paredzēšana

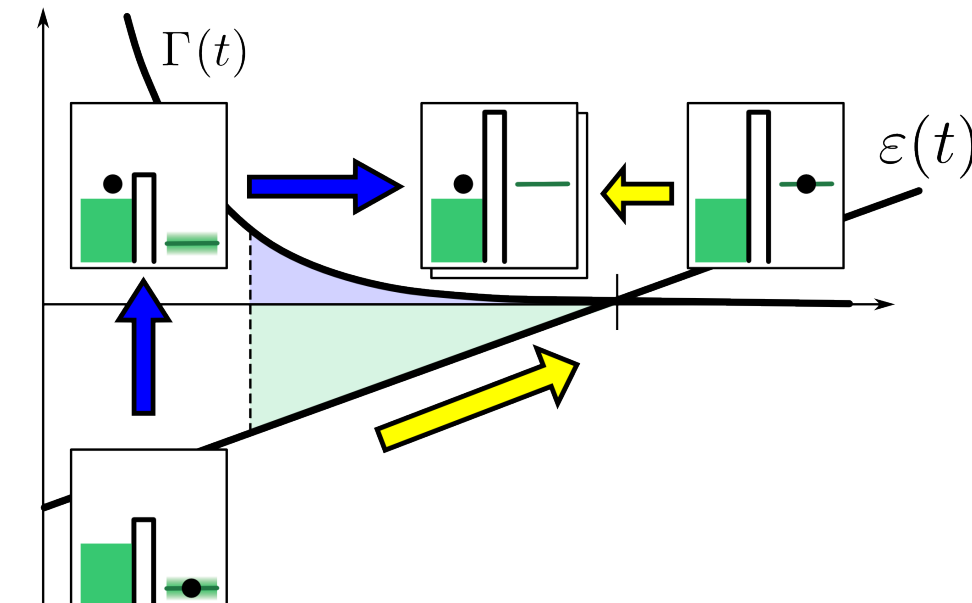
Mēs esam veikuši vairāku jauna tipa nanocauruļu sistemātisku klasifikāciju lietojot lielmēroga kvantu ķīmijas aprēķinus ar pilno ģeometrijas optimizāciju [15]. Perovskītu tipa materiāliem tika meklētas optimālās konfigurācijas stroncija titanāta (SrTiO_3) nanocaurulēm, kas var veidoties no šī materiāla 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 taustnūrveida morfoloģiju. Pastiprināta Ti–O saites kovalence ārējā čaulā palielina absorbcijas spējas, kas paver iespējas veidot no nanocaurulēm sevišķi jutīgus ķīmiskos sensorus. Citu neorganisku nanocauruļu enerģētika un elektroniskie spektri ir pētīti darbos [3, 11, 7, 6, 21, 26].



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

Jauns kvantu interferences pielietojums 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 viennozīmīgi 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.

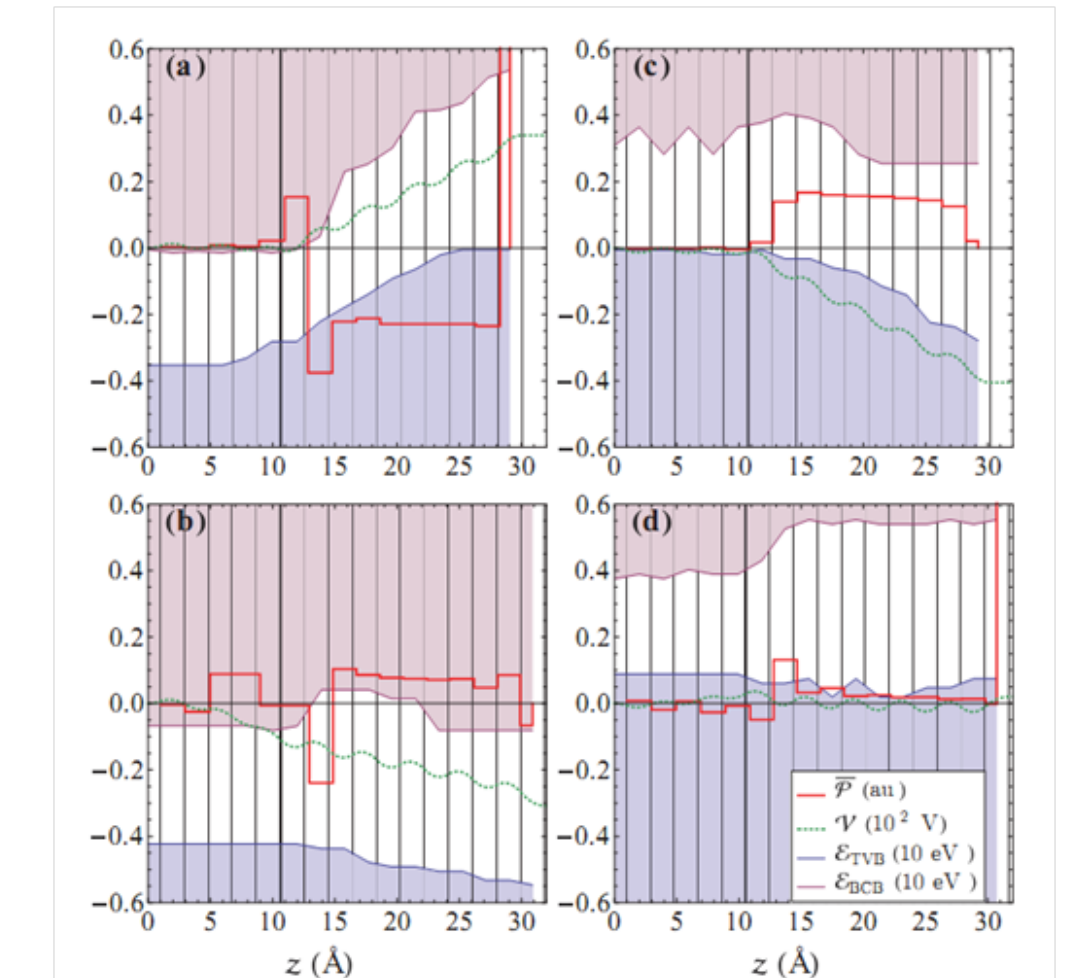


Att. : Paaugstinot potenciālo barjeru starp kontaktu un kvantu punktu, eksponenciāli samazinās elektrona diskretā stāvokļa enerģijas ϵ nenoteiktība Γ . Zilas un dzeltenas bultas attēlo divus dažādus ceļus, kā elektrons var izbēgt no slazda.

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].

Elektroniskā struktūra LaAlO_3 nanofilma uz SrTiO_3 pamatnes

Mēs esam veikuši detalizētu elektroniskās struktūras izpēti lantāna alumīnāta 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 radišanas. Tika konstruēti atomistiski modeļi un veikti šo modeļu elektroniskās struktūras aprēķini ar blīvuma funkcionāla 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. Nestehiometriskajā gadījumā vadāmība ir sagaidāma pat pie viena monoslāņa biezuma, turklāt n -tipa kontaktvirsmas mūsu aprēķini paredz vadošā dubultslāņa raksturu. Sasniegtie rezultāti norāda uz jaunu iespēju elektroniskās vadāmības stabilizācijai uz divu polāro dielektrisku kontaktvirsmas, kas ir principiāli jauns ceļš elektronikas komponentu (piemēram, lauka efekta tranzistoru) radīšanai.



Att. : [(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 pārkļāšanos (a)-(c).

Pētījumu aktivitātes zinātniskās publikācijas

Ar projekta atbalstu tapušās publikācijas zinātniskajos žurnālos, kas ir iekļauti Thomson Reuters Web of Science® un Scopus® starptautiski citējamo izdevumu datubāzēs.

- [1] Kashcheyevs, V. and Kaestner, B. *Physical Review Letters* **104**(18), 186805 May (2010).
- [2] Evarestov, R., Bandura, A., Losev, M., Piskunov, S., and Zhukovskii, Y. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **43**(1), 266–278 November (2010).
- [3] Evarestov, R. A., Zhukovskii, Y. F., Bandura, A. V., and Piskunov, S. *The Journal of Physical Chemistry C* **114**(49), 21061–21069 December (2010).
- [4] Piskunov, S., Jacob, T., and Spohr, E. *Physical Review B* **83**(7), 073402 February (2011).
- [5] Bocharov, D., Gryaznov, D., Zhukovskii, Y., and Kotomin, E. *Surface Science* **605**(3-4), 396–400 February (2011).
- [6] Piskunov, S., Zvejnieks, G., Zhukovskii, Y. F., and Bellucci, S. *Thin Solid Films* **519**(11), 3745–3751 March (2011).
- [7] Evarestov, R. A., Zhukovskii, Y. F., Bandura, A. V., and Piskunov, S. *Central European Journal of Physics* **9**(2), 492–501 April (2011).
- [8] Zhukovskii, Y. F., Piskunov, S., Kotomin, E. A., and Bellucci, S. *Central European Journal of Physics* **9**(2), 530–541 April (2011).
- [9] Fricke, L., Hohls, F., Ubbelohde, N., Kaestner, B., Kashcheyevs, V., Leicht, C., Mirovsky, P., Pierz, K., Schumacher, H., and Haug, R. *Physical Review B* **83**(19), 193306 May (2011).
- [10] Leicht, C., Mirovsky, P., Kaestner, B., Hohls, F., Kashcheyevs, V., Kurganova, E. V., Zeitler, U., Weimann, T., Pierz, K., and Schumacher, H. W. *Semiconductor Science and Technology* **26**(5), 55010 May (2011).
- [11] Evarestov, R. A., Zhukovskii, Y. F., Bandura, A. V., Piskunov, S., and Losev, M. V. *The Journal of Physical Chemistry C* **115**(29), 14067–14076 June (2011).
- [12] Timoshenko, J., Kuzmin, A., and Purans, J. *Central European Journal of Physics* **9**(3), 710–715 June (2011).
- [13] Alexandrov, V., Piskunov, S., Zhukovskii, Y. F., Kotomin, E. A., and Maier, J. *Integrated Ferroelectrics* **123**(1), 10–17 June (2011).
- [14] Bocharov, D., Gryaznov, D., Zhukovskii, Y., and Kotomin, E. *Journal of Nuclear Materials* **416**(1-2), 200–204 September (2011).
- [15] Piskunov, S. and Spohr, E. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2**(20), 2566–2570 October (2011).
- [16] Timoshenko, J., Kuzmin, A., and Purans, J. *Computer Physics Communications* **183**(6), 1237–1245 June (2012).
- [17] Kotomin, E. A., Zhukovskii, Y. F., Bocharov, D., and Gryaznov, D. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **38**(1), 012058 August (2012).
- [18] Lisovski, O., Piskunov, S., Zhukovskii, Y. F., and Ozolins, J. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **38**(1), 012057 August (2012).
- [19] Sorokine, A., Bocharov, D., Piskunov, S., and Kashcheyevs, V. *Physical Review B* **86**(15) October (2012).
- [20] Kashcheyevs, V. and Timoshenko, J. *Physical Review Letters* **109**(21), 216801 November (2012).
- [21] Zhukovskii, Y. F., Piskunov, S., and Bellucci, S. *Nanoscience and Nanotechnology Letters* **4**(11), 1074–1081 November (2012).
- [22] Bocharov, D., Gryaznov, D., Zhukovskii, Y. F., and Kotomin, E. A. submitted to *Journal of Nuclear Physics* November (2012).
- [23] Fricke, L., Wulf, M., Kaestner, B., Kashcheyevs, V., Timoshenko, J., Nazarov, P., Hohls, F., Mirovsky, P., Mackrodt, B., Dolata, R., Weimann, T., Pierz, K., and Schumacher, H. W. submitted to *Physical Review Letters*, 7 November (2012).
- [24] Zhgun, P., Bocharov, D., Piskunov, S., Kuzmin, A., and Purans, J. submitted to *Journal of Physics: Conference Series* November (2012).
- [25] Zhukovskii, Y. F. and Piskunov, S. submitted to *Journal of Physics: Conference Series* (2012).
- [26] Zhukovskii, Y. F., Piskunov, S., Begens, J., Kazerovskis, J., and Lisovski, O. submitted to *Physica Status Solidi* (2012).