



**LATVIJAS
UNIVERSITĀTE**
ANNO 1919



EIROPAS SAVIENĪBA

IEGULDĪJUMS TAVĀ NĀKOTNĒ

Datortehnoloģiju saikne ar kvantu fiziku

Dr. V. Kaščejevs, Dr. S. Piskunovs,
Dr. D. Bočarovs, P. Nazarovs, J. Timošenko

Projekts „*Datorzinātnes pielietojumi un tās saiknes ar kvantu fiziku*”

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

Pārskats par rezultātiem, kas sasniegti projekta aktivitātes
“*Pētījumi kvantu tehnoloģiju fizikālajos aspektos*” ietvaros

Aktivitātes rezultāti

- Publikācijas starptautiski citējamos zinātniskajos žurnālos un konferenču rakstu krājumos

- [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).

Jauna fizika datortehnoloģijām: pētāmās problēmas

Kvantu nanoelektronika – nākotnes datoru “dzelži”

- ▶ **Stuktūra** (no kā veidot elektroniku?)
 - 2D elektronu gāze starp virsmām [13, 19]
 - 1D nanocaurules [2,3,7,11,15]
 - 0D kvantu punkti & atomi [18]
- ▶ **Dinamika** (kā darbināt elementus?)
 - Kvantu punktu uzlādes/izlādes dinamika [1,10]
 - Nanoelektroniskās ķēdes [9]
 - Atsevišķi elektroni kā klasiskās un kvantu info nesēji [20]

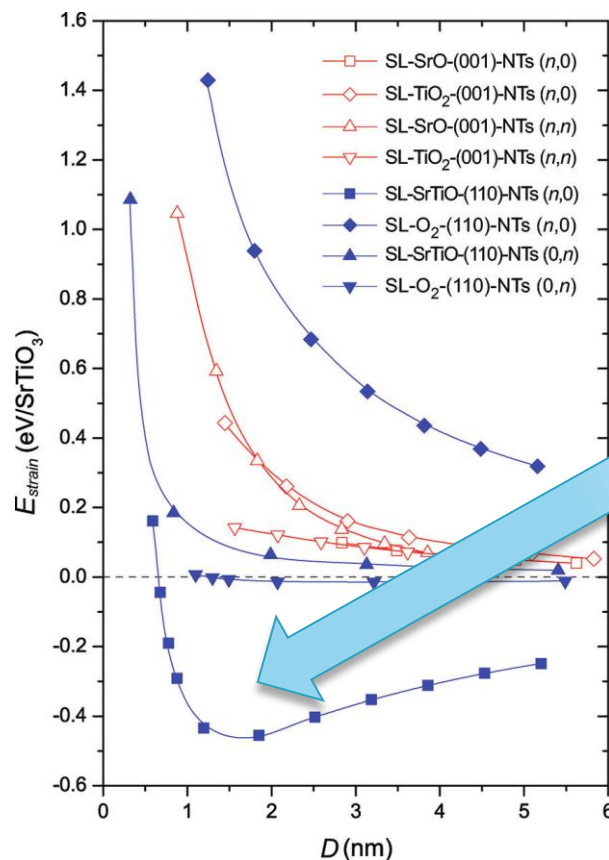
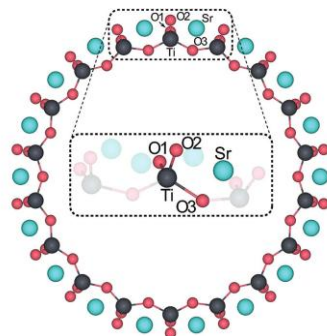
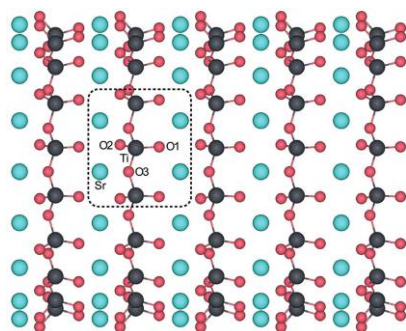
Datorzinātne fizikai: jaunas metodes kvantu parādībām

- ▶ Liela mēroga *ab initio* aprēķinu “receptes”
 - Blīvuma funkcionāļu izvēle un aprēķinu metodoloģijas optimizācija cietvielu kvantu ķīmijas savienojumu un struktūru klasēm [4,5,19]
- ▶ Jauni algoritmi kvantu interferences analīzei
 - “Simulētās atvēlināšanas” algoritmi apgrieztā Monte Carlo uzdevumam EXAFS spektru analīzē [12,16]
- ▶ Kvantu informācijas ietekme uz vienelektrona digitālām shēmām
 - Pilnas kvantu laika evolūcijas analītiski aprēķini ar nelīdzsvara Grīna funkciju metodēm [20]

Sadarbība

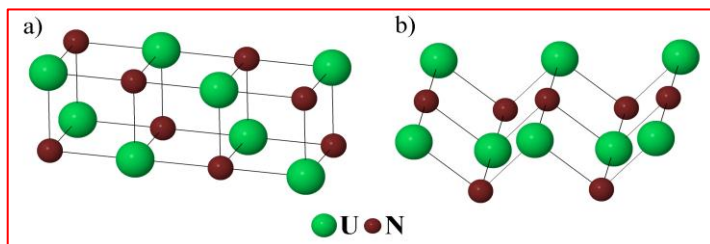
- ▶ Nanostruktūru teorētiskie pētījumi
 - LU Cietvielu fizikas inistūts (J. Žukovskis)
 - Sankt-Pēterburgas universitāte, Krievija (R.A.Evarestov)
 - Duisburg-Essen Univirsity, Vācija (E.Spohr)
- ▶ Fizikāli uzdevumi algoritmu un metožu attīstībai
 - LU Cietvielu fizikas inistūts (J. Kotomins, A. Kuzmins)
 - ESF projekts 2009/0202/1DP/1.1.1.2.0/09/APIA/VIAA/141
- ▶ Eksperimenti nanoelektronikā
 - Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Vācija (B. Kaestner)

SrTiO₃ nanocaurules

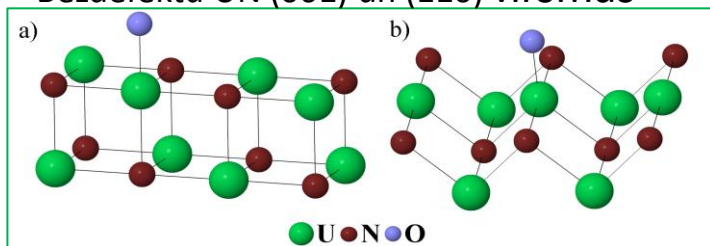


Nanocaurules viedošanās
ir enerģētiski izdevīga
tikai (110)
kristalogrāfiskajā virzienā

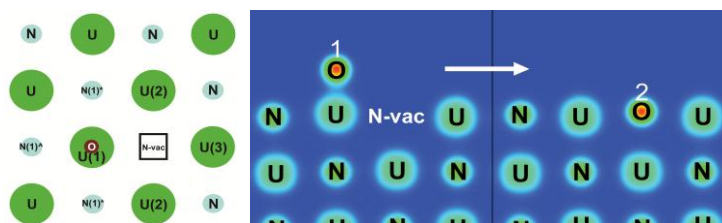
Urāna nitrīda korozija O_2 ietekmē



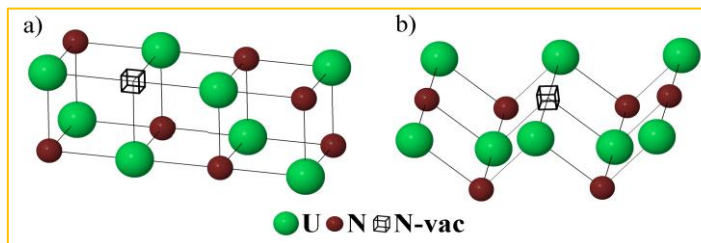
Bezdefektu UN (001) un (110) virsmas



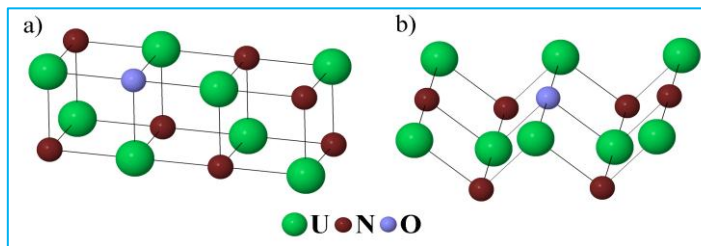
Skābekļa adsorbcija



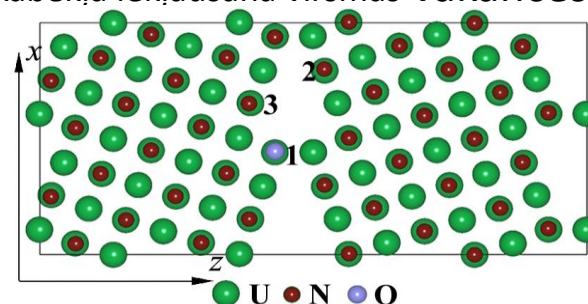
O zemo barjeru iekļaušana no pozīcijas
virs U atoma uz N vakanci



Vakances



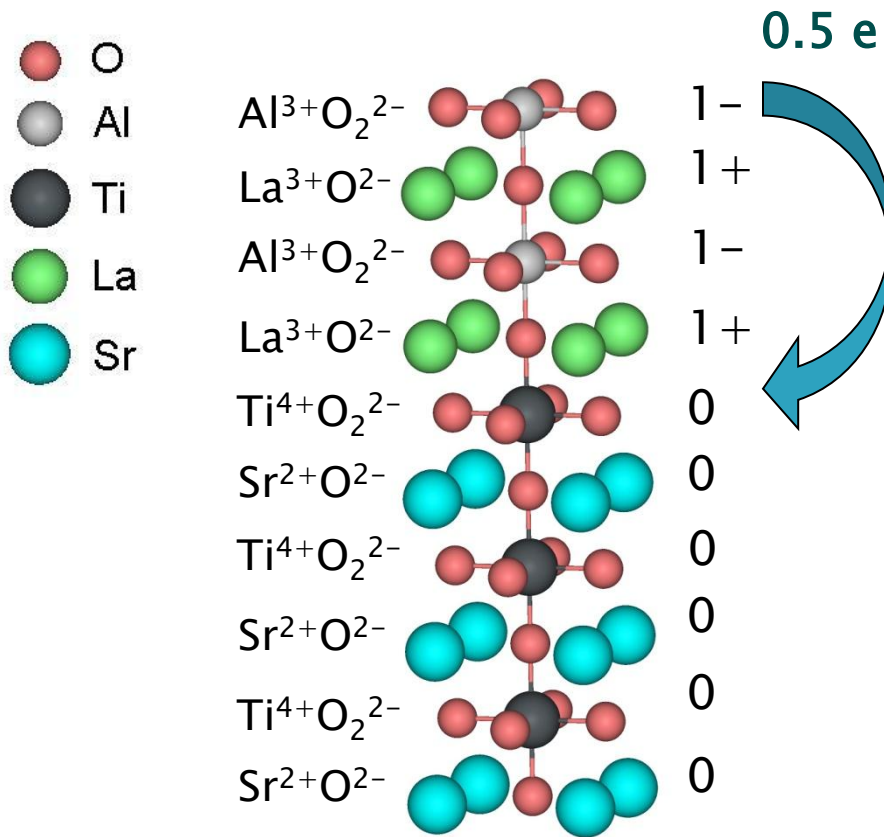
Skābekļa iekļaušana virsmas vakancēs



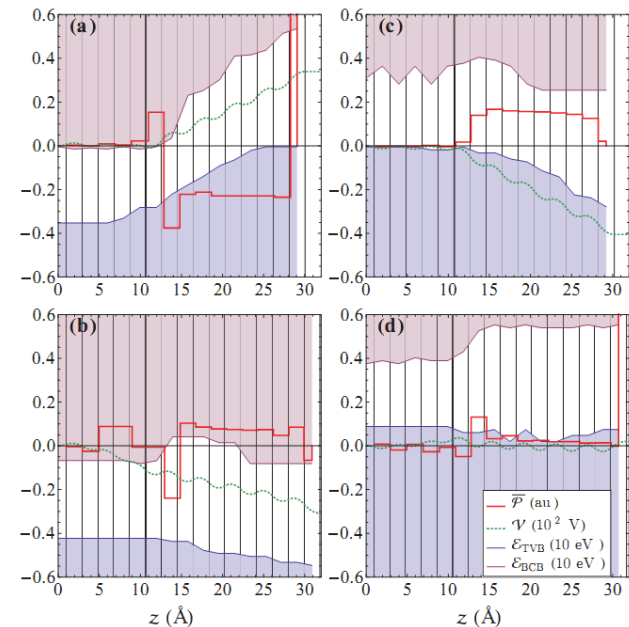
Graudu robežas

LaAlO₃ / SrTiO₃ heterostruktūra

[19] Sorokine, A., Bocharov, D., Piskunov, S., and Kashcheyevs, V. *Physical Review B* 86(15) October (2012)



Diviem dielektriķiem
nonākot kontaktā var
izvesties vadošais slānis.
Kad un kāpēc?



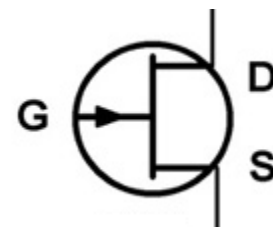
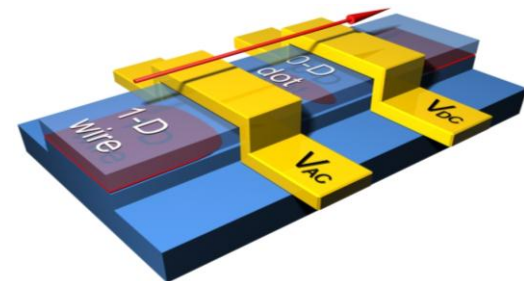
Physical Review B

condensed matter and materials physics

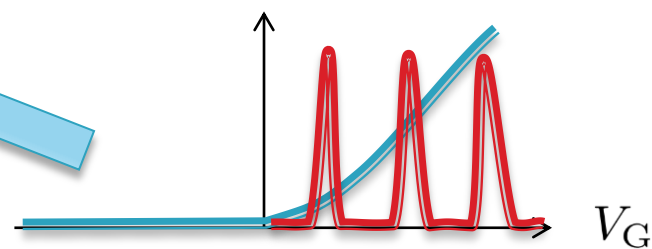
Impact Factor 3.69

Kvantu “skaitītāji”

- ▶ Lādiņnesēju šķidrums:
 - kvantu lauks ar **daļiņu** (diskrētie e)
 - un **viļņu** (interference) īpašībām
- ▶ Kvantu punkts (1990–ie gadi)
 - pietiekami mazs & auksts **lauka efekta tranzistors**
- ▶ “Neadibātiskie kvantu sūkņi”
 - Kvantu punkta tuneļbarjeru eksponenciāla modulācija
 - iespēja precīzi slazdot **atsevišķus elektronus**

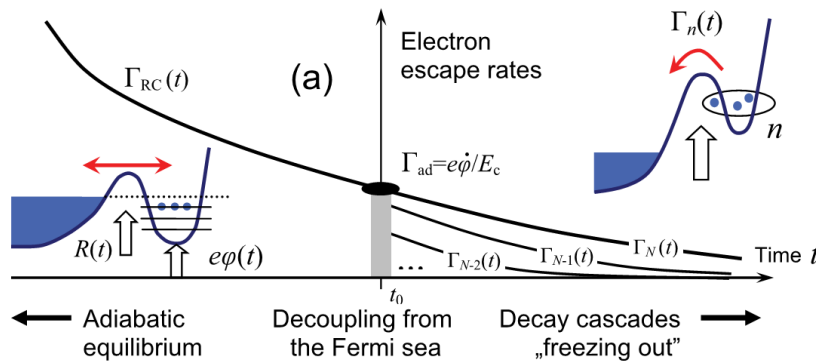


$$\partial I / \partial V_{SD}$$



Sabrukuma kaskāžu modelis

[1] Kashcheyevs, V. and Kaestner, B. *Physical Review Letters* **104**(18), 186805 May (2010)

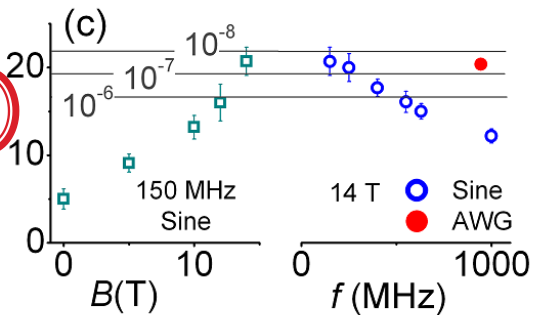
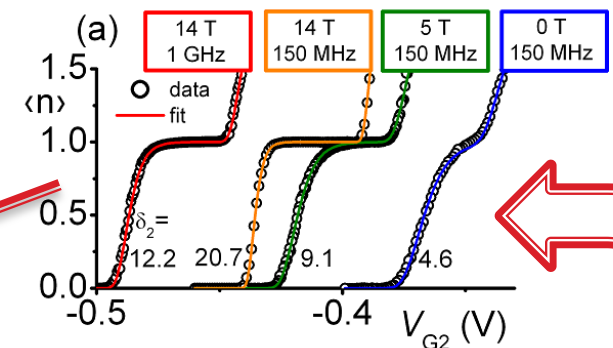


Varbūtību sadalījums n elektronu satveršanai kvantu punktā

$$P_n(\infty) = e^{-X_n} \prod_{m=n+1}^N (1 - e^{-X_m}).$$

$$\ln X_n = -\alpha_n V + \sum_{i=1}^n \delta_i$$

Teorijas ļauj salīdzināt & optimizēt elektronu sūkņus



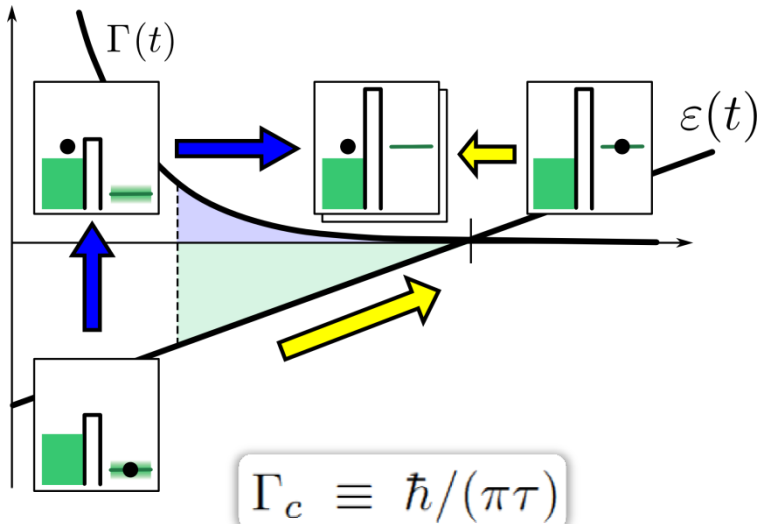
Towards a quantum representation of the ampere using single electron pumps

S.P. Giblin, M. Kataoka, J.D. Fletcher, P. See, T.J.B.M. Janssen, J.P. Griffiths, G.A.C. Jones, I. Farrer & D.A. Ritchie

Nature Communications **3**, Article number: 930 | doi:10.1038/ncomms1935

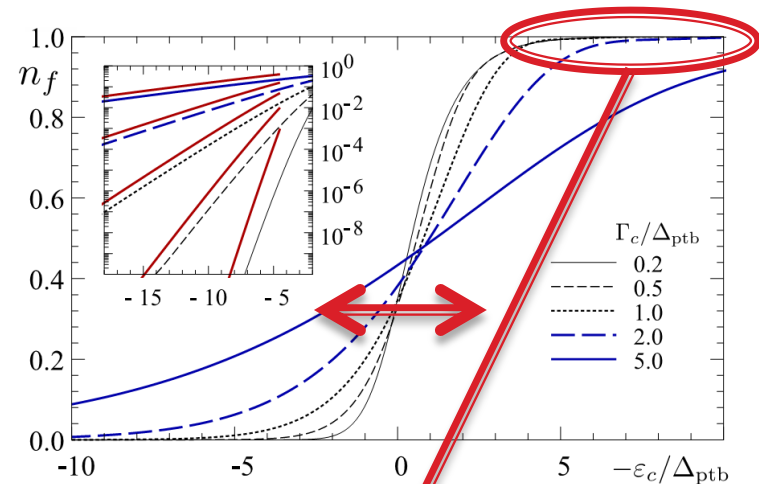
Kvantu interference e⁻ satveršanā

[20] Kashcheyevs, V. and Timoshenko, J. *Physical Review Letters* **109**(21), 216801 November (2012).

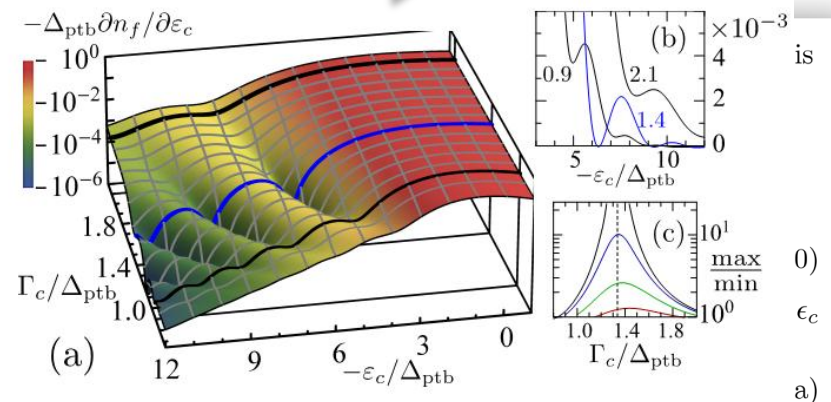


$$\Gamma(t) = \pi\Gamma_c e^{-(t-t_c)/\tau}$$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_c + \Delta_{\text{ptb}}(t - t_c)/\tau.$$



Divi nenoteiktības mehānismi



$$n_f = \left\{ \begin{array}{l} (2/\pi) \tan^{-1} e^{-\varepsilon_c/\Gamma_c}, \quad kT, \Delta_{\text{ptb}} \rightarrow 0 \quad (11b) \\ e^{-\varepsilon_c/\Delta_{\text{ptb}}} \quad \text{if } \Gamma_c \rightarrow 0 \quad (11c) \end{array} \right.$$

Divu “kļūdas ceļu” interference!

Physical Review Letters

moving physics forward

Impact Factor 7.37

Paldies!