



UNIVERSITY OF
BUCHAREST
—VIRTUTE ET SAPIENTIA—



TEZA DE DOCTORAT

REZUMAT

Metode computaționale avansate pentru procesarea informației cuantice

Autor:

Amanda Teodora PREDA

Coordonator:

Prof. Univ. Dr. George
Alexandru NEMNEȘ

FACULTATEA DE FIZICĂ

UNIVERSITATEA BUCUREȘTI

Cuprins

I	Noțiuni teoretice relevante	1
1	Introducere	3
2	Introducere în transportul cuantic	5
3	Metode computaționale pentru transport cuantic	7
4	Metode de învățare automată în fizica stării condensate	11
II	Rezultate	15
5	Metoda matricii R pentru probleme de împrăștiere biparticulă	17
6	Modelarea sistemelor cu dimensionalitate redusă	23
6.1	Sisteme cuantice bidimensionale controlate de porți electrostatice . . .	23
6.2	Sisteme bidimensionale periodice	26
6.3	Interconectarea dispozitivelor cuantice	29
6.4	Nanotranzistorul dublu-canal	33
7	Dispozitive penru sortarea stărilor cuantice	39
7.1	Sorter cuantic probabilistic	39
7.2	Sorter cuantic topologic	44
8	Sumar si concluzii	47
	Listă de publicații	53

Partea I

Noțiuni teoretice relevante

1

Introducere

Fizica stării condensate (FSC) este de o importanță remarcabilă atât în fizica teoretică, cât și în tehnologie și industrie. Deși progresul realizat în această arie de cercetare în ultimele decenii este uimitor, domeniul este unul relativ nou. În anii 1950, doar câteva laboratoare desfășurau programe de cercetare în fizica stării condensate, iar cursurile universitare de fizica solidului erau doar recent adăugate în programa [1]. Pe parcursul următoarelor decenii, fizica stării condensate a evoluat într-un ritm alert datorită noilor descoperiri experimentale și a evoluției tehnicilor pentru caracterizarea materialelor. Mai mult, concepte, modele și metode teoretice inovatoare au extins domeniul de aplicare al fizicii stării condensate și au deschis orizonturi de cercetare pentru materiale noi cu aplicații directe în tehnologie. Acest progres remarcabil nu ar fi putut fi posibil fără dezvoltarea unor abordări numerice eficiente, care au condus la realizarea unor programe eficiente de simulare a caracteristicilor materialelor.

Fizica stării condensate se suprapune deja cu diverse alte ramuri ale științei, cum ar fi fizica statistică și teoretică, chimia, știința materialelor, magnetismul și spintronica și, în ultimele decenii, fizica computațională. Componenta computațională a fizicii stării condensate a devenit un domeniu de cercetare în sine, care deschide noi orizonturi pentru progresul tehnologic. Metodele numerice consacrate în fizica stării condensate joacă un rol esențial nu doar în descrierea sistemelor cu mii de atomi, care nu pot fi rezolvate analitic, ci și în modelarea dispozitivelor de dimensiuni reduse care operează la scala cuantică și necesită un control precis al stărilor cuantice. Pe lângă acestea, odată cu progresul rapid în domeniul inteligenței artificiale, există un interes tot mai mare pentru utilizarea schemelor învățare automată pentru rezolvarea problemelor din domeniul fizicii stării condensate [2].

Această teză se concentrează pe un set de metode computaționale bine stabilite, utilizate în combinație cu tehnici de învățare automată (ML) pentru simularea dispozitivelor bidimensionale cuantice, cu aplicații în tehnologia informației. Având în vedere dezvoltarea rapidă a tehnologiilor cuantice, este necesar să dobândim o perspectivă amplă și cuprinzătoare asupra abordărilor numerice utilizate în transportul cuantic și să le aplicăm pentru a simula și ghida proiectarea unor noi dispozitive de dimensiuni reduse.

În Figura 1.1a, am evidențiat principalele programe de simulare utilizate, acoperind un spectru vast, de la abordări atomistice la modele de masă efectivă. Scopul nostru

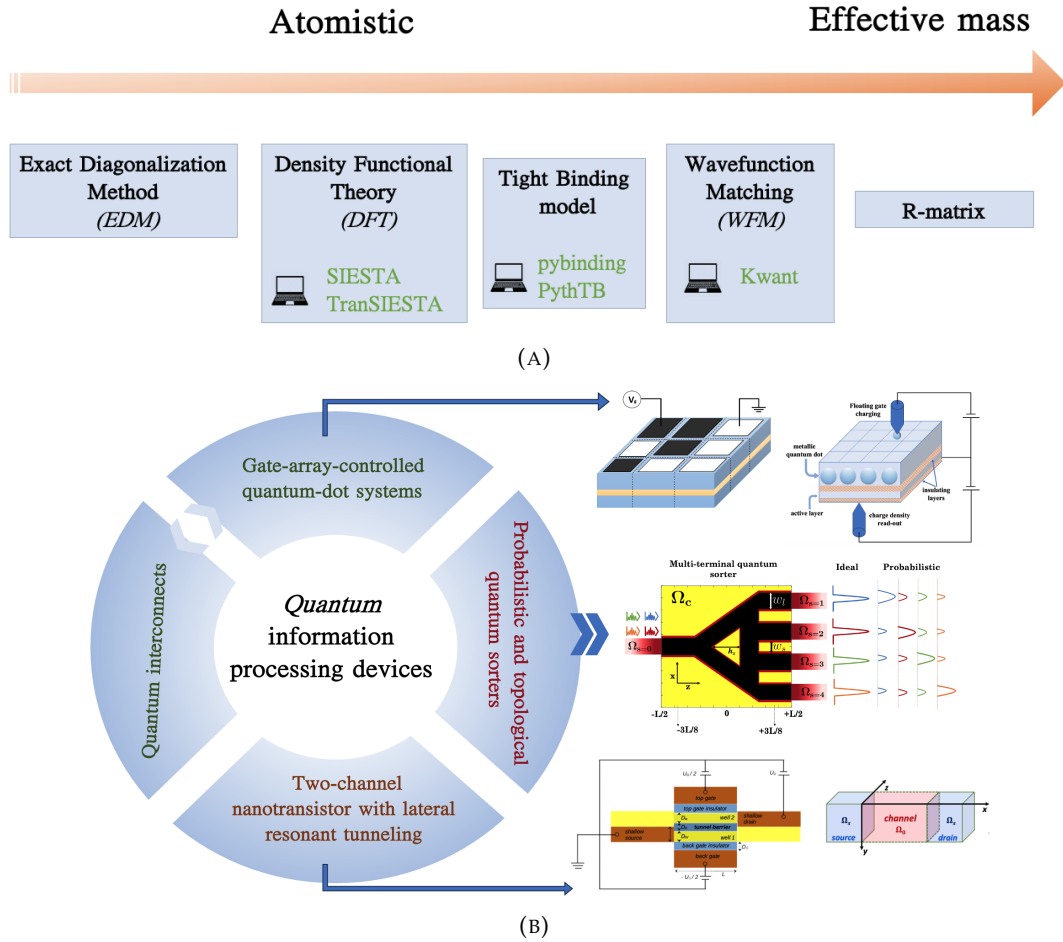


FIGURE 1.1: (A) Metodele de simulare utilizate în teză. (B) Dispozitivele investigate în detaliu în partea a II-a a tezei.

este de a modela și simula sisteme uni-particula și multi-particula, de dimensiuni reduse, cu rol esențial în proiectarea dispozitivelor cuantice. De exemplu, descrierea și controlul exact al stărilor cuantice sunt esențiale pentru proiectarea arhitecturilor de calcul cuantic. În prototipurile noi de nano-tranzistori, transportul cuantic devine prioritar iar modelele clasice de drift-difuzie nu mai sunt viabile, datorită miniaturizării continue impuse de avansul tehnologic. Explorăm aceste direcții de modelare a dispozitivelor în a doua parte a tezei, iar dispozitivele pe care le-am simulat sunt prezentate în Figura 1.1b.

2

Introducere în transportul cuantic

Acest capitol începe cu o recapitulare a formalismul Landauer-Buttiker pentru transport coerent în structuri mezoscopice, care este introdus ca punct de plecare pentru a defini o serie de concepte matematice fundamentale pentru transportul cuantic. Ulterior, în varianta completă a tezei, ne orientăm către o nouă direcție în fizica stării condensate, și anume materialele topologice.

În prima secțiune demonstrăm cunoscuta formula Landauer:

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}(E_F) \quad (2.1)$$

care realizează corelația directă dintre conductanța sistemului și funcția de transmisie.

În continuare, demonstrăm că putem obține coeficienții de transmisie din matricea de împrăștiere S . Să considerăm un sistem cu doua terminale conectate la regiunea de împrăștiere. Funcțiile împrăștiere din regiunea contactelor sunt o combinație liniară a stărilor incidente și reflectate, în timp ce funcția de undă în regiunea zonei de împrăștiere este necunoscută. Putem, așadar, scrie funcția de undă a sistemului astfel:

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \begin{cases} \sum_m a_m^L \phi_{Lm}^+(x, y) + \sum_m b_m^L \phi_{Lm}^-(x, y), & (x, y) \in L \\ \sum_n a_n^R \phi_{Rn}^+(x, y) + \sum_n b_n^R \phi_{Rn}^-(x, y), & (x, y) \in R \\ \psi_{C,E}(x, y), & (x, y) \in C \end{cases} \\ \Rightarrow \psi(x, y) &= \begin{cases} \sum_m a_m^L e^{-ik_m x_L} \chi_m(y) + \sum_m b_m^L e^{ik_m x_L} \chi_m(y), & (x, y) \in L \\ \sum_n a_n^R e^{-ik_n x_R} \chi_n(y) + \sum_n b_n^R e^{ik_n x_R} \chi_n(y), & (x, y) \in R \\ \psi_{C,E}(x, y), & (x, y) \in C \end{cases} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Coeficienții $a_{L,R}$ și $b_{L,R}$ sunt legați prin relația:

$$b_{\alpha m} = \sum_{\beta n} s_{\alpha m, \beta n} a_{\beta n}, \quad (2.3)$$

unde

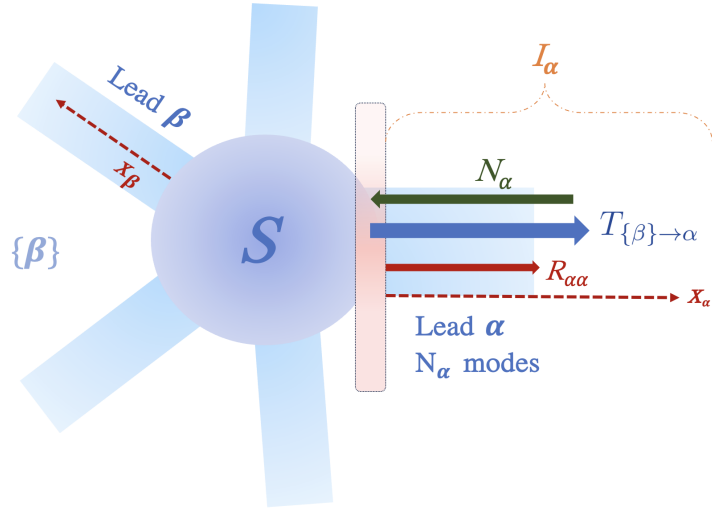


FIGURE 2.1: Reprezentare schematică a unui sistem multi-terminal, unde contactele sunt notate cu α, β , fiecare având un sistem propriu de coordonate. Coordonata x_α este perpendiculară pe secțiunea transversală a contactului. N_α reprezintă numărul total de canale din terminalul α , $T_{\{\beta\} \rightarrow \alpha}$ reprezintă probabilitatea de transmisie de la toate terminalele β către α și $R_{\alpha\alpha}$ reprezintă probabilitățile de reflexie către terminalul α . Acest tip de reprezentare este frecvent utilizată în formalismul Landauer-Büttiker pentru a descrie transportul coerent în dispozitive cuantice multi-terminal.

$$S = \begin{pmatrix} r_{N_L \times N_L} & t'_{N_L \times N_{R'}} \\ t_{N_R \times N_L} & r'_{N_R \times N_{R'}} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

este matricea S .

Secțiune finală este dedicată unei scurte incursiuni în domeniul fenomenelor topologice din fizica stării solide, începând cu efectul Hall cuantic. Este introdus și un model pentru caracterizarea izolatorilor topologici, modelul BHZ, pe care îl folosim ulterior pentru simularea unui dispozitiv de tip sorter cuantic.

3

Metode computaționale pentru transport cuantic

Teoria funcționalei de densitate și formalismul funcțiilor Green de neechilibru pentru calcule de transport

În cadrul acestui capitol începem cu prezentarea teoriei funcționalei de densitate, care stă la baza metodelor de simulare *ab-initio*. Teoria funcționalei de densitate (DFT) a fost dezvoltată în 1964, când Hohenberg și Kohn au publicat lucrarea lor de referință [3], în care au introdus teoremele eponime care rămân, până în prezent, pilonii tuturor abordărilor numerice de tip DFT. Cele două teoreme sunt prezentate în 3. Deși pot părea triviale, teoremele Hohenberg-Kohn oferă o perspectivă remarcabilă asupra fizicii sistemelor multi-particulă.

Pentru a rezolva sistemul multi-particulă, Kohn și Sham au propus înlocuirea Hamiltonianului sistemului cu interacție cu Hamiltonianul unui sistem auxiliar, uni-particulă, în care efectele de interacție sunt incluse într-un termen numit energie de corelație și schimb [4]. Metoda poate fi implementată sub forma unui ciclu self-consistent, iar cu cât aproximația pentru funcționala de corelație și schimb este mai bună, cu atât soluția problemei stării fundamentale este mai precisă (vezi Figura 3.1). Un program de simulări atomistice care implementează această abordare pentru determinarea structurii de benzi a materialelor este SIESTA.

Theorem 1: Hohenberg and Kohn theorems

Teorema I:

Pentru orice sistem de particule care interacționează într-un potențial extern $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, potențialul $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ este determinat în mod unic, cu excepția unei constante, de densitatea de particule în starea fundamentală $n_0(\mathbf{r})$.

Teorema II:

O funcțională universală pentru energia $E[n]$ în funcție de densitatea $n(\mathbf{r})$ poate fi definită, fiind valabilă pentru orice potențial extern $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Pentru un potențial particular $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, energia exactă a stării fundamentale a sistemului este dată de valoarea minimă globală a acestei funcționale, iar densitatea $n(\mathbf{r})$ care minimizează funcționala este densitatea exactă a stării fundamentale $n_0(\mathbf{r})$.

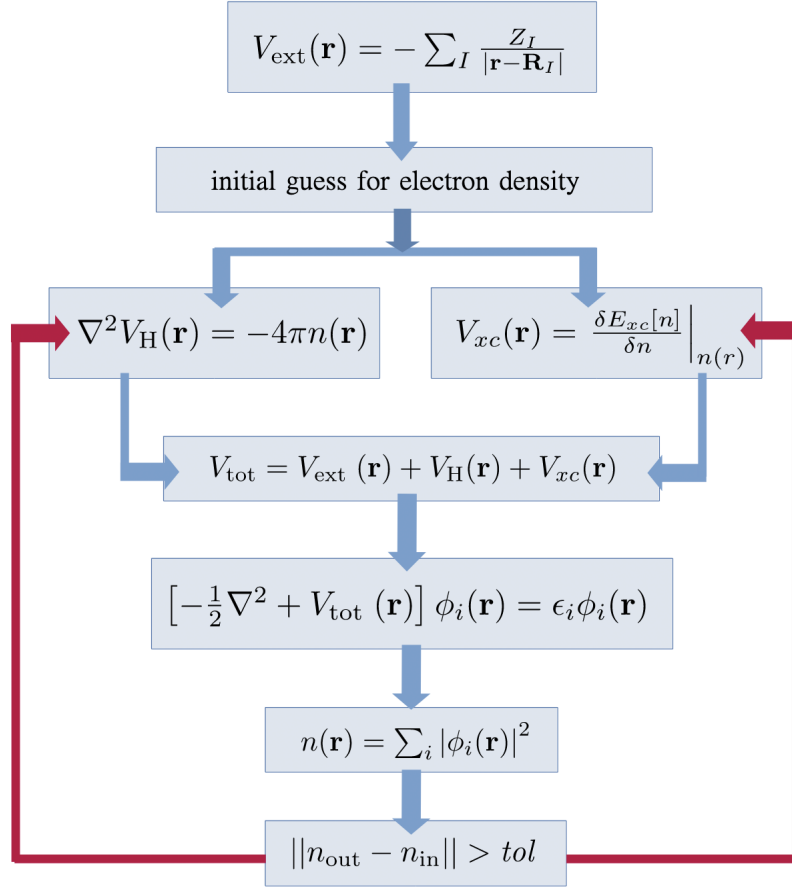


FIGURE 3.1: Bucla de self-consistență a calculelor de tip DFT.

Pentru calcule de transport, se poate utiliza modulul TranSIESTA, care permite determinarea funcției de transmisie într-un sistem mezosopic. În acest caz, densitatea de particule este calculată cu prin formalismul funcțiilor Green de neechilibru, introdus în detaliu în teza. Ciclul self-consistent este prezentat pe scurt astfel:

$$\underbrace{\text{initial } n(x) \Rightarrow \text{SIESTA} \Rightarrow \phi_{\text{KS}}(x) \Rightarrow \text{NEGF} \Rightarrow \text{new } n(x)}_{\text{TRANSIESTA package}}$$

Metoda matricii R

Ecuția Schrödinger pentru sistem este:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m^*} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \cdot \Psi(\mathbf{r}; E) = E \cdot \Psi(\mathbf{r}; E) \quad (3.1)$$

Potențialul din contacte este separabil și poate fi scris ca o sumă dintre un potențial longitudinal și unui transversal:

$$V_s(\mathbf{r}) = V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp,s}) \quad (3.2)$$

În contacte, soluția ecuației Schrodinger este o funcție de undă de împrăștiere care reprezintă superpoziția dintre funcțiile de undă de intrare și cele reflectate:

$$\Psi_s(\mathbf{r} \in \Omega_s; E) = \sum_i \Psi_v^{\text{in}} \cdot e^{-ik_v z_s} \cdot \Phi_v(\mathbf{r}_{\perp,s}) + \sum_i \Psi_v^{\text{out}} \cdot e^{ik_v z_s} \cdot \Phi_v(\mathbf{r}_{\perp,s}), \quad (3.3)$$

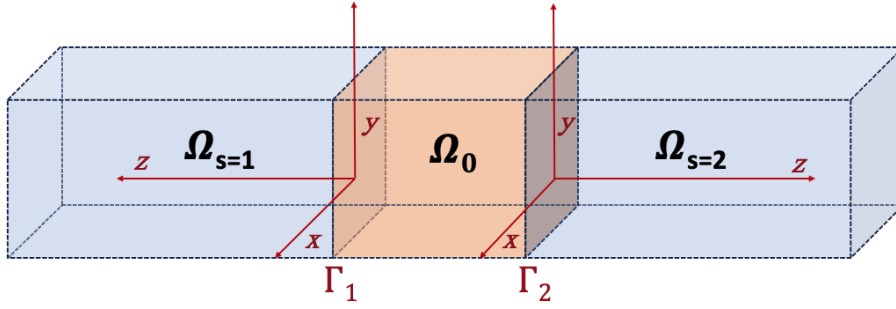


FIGURE 3.2: Reprezentare schematică a sistemului, unde suprafețele Γ_1 și Γ_2 separă regiunea de împrăștiere Ω_0 de terminalele 1 și 2.

Modurile transversale sunt soluția ecuației:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m^*} \Delta + V_{\perp,s}(\mathbf{r}_{\perp,s}) \right) \cdot \Phi_v(\mathbf{r}_{\perp,s}) = E_v^{\perp} \cdot \Phi_v(\mathbf{r}_{\perp,s}) \quad (3.4)$$

În regiunea de împrăștiere, se rezolvă problema Wigner-Eisenbud:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m^*} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \cdot \chi_l(\mathbf{r}) = \epsilon_l \cdot \chi_l(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

cu condiții la frontieră:

$$\left. \frac{\partial \chi_l}{\partial z_s} \right|_{\Gamma_s} = 0 \quad (3.6)$$

După o serie de calcule detaliate în teza, obținem matricea R:

$$R_{vv'} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_l \frac{(\chi_l)_v \cdot (\chi_l)_{v'}^*}{E - \epsilon_l}, \quad (3.7)$$

care poate fi direct legată de matricea de împrăștiere:

$$S_{vv'} = -(\delta_{vv'} - iR_{vv'}k_{v'})^{-1} \cdot (\delta_{vv'} + iR_{vv'}k_{v'}). \quad (3.8)$$

Astfel, prin metoda matricii R se poate determina transmisia într-un sistem mezo-scopic. În varianta integrală a tezei, acest formalism este descris în detaliu și pentru cazul unui sistem cuantic în care spinul este luat în calcul.

4

Metode de învățare automată în fizica stării condensate

Ideea de rețea neuronală a fost inițial inspirată dintr-un model simplu pentru neuronul biologic [5, 6]. Perceptronul, ca unitate de învățare de bază descrisă schematic în Figura 4.1a, a devenit blocul fundamental al rețelelor neuronale artificiale. Totuși, o rețea formată exclusiv din elemente liniare de calcul nu este capabilă să învețe tipare complicate. Al doilea progres semnificativ a avut loc în anii 1980, când mai multe grupuri de cercetători au creat metode eficiente pentru antrenarea rețelelor neuronale artificiale (ANN) prin ceea ce numim astăzi "back-propagation". Prin urmare, când vorbim despre rețele neuronale, ne referim, în esență, la aplicații computaționale care utilizează variații ale metodei de *gradient descent* pentru a rezolva o varietate largă de probleme de regresie și clasificare [7].

În domeniile științifice care lucrează cu seturi extinse de date, cercetătorii folosesc metodele de învățare automată ca instrumente care le permit să facă predicții rapide și precise pentru sisteme complexe, care altfel ar necesita resurse computaționale considerabile.

Elementul de bază al unei rețele neuronale este cunoscut sub numele de neuron, o funcție neliniară care transformă un vector de intrare într-o valoare de ieșire unică. Funcția este parametrizată de un set de ponderi w_{ij} și un termen de prag (bias b_j). Pentru a introduce neliniaritatea necesară abordării unei clase mai mari de probleme realiste, se aplică o funcție de activare. Există diferite funcții de activare ce pot fi utilizate, dar o condiție importantă este ca acestea să fie diferențiabile. Matematic, putem reprezenta un strat j al rețelei neuronale cu m neuroni în următorul mod:

$$y_j = f \left(\sum_{i=1}^m w_{ji} x_i + b_j \right), \quad (4.1)$$

unde

$$\begin{cases} x_i \Rightarrow & \text{intrări} \\ y_j \Rightarrow & \text{ieșiri} \\ b_j \Rightarrow & \text{bias} \\ w_{ji} \Rightarrow & \text{ponderi sinaptice} \\ f \Rightarrow & \text{funcție de activare} \end{cases}$$

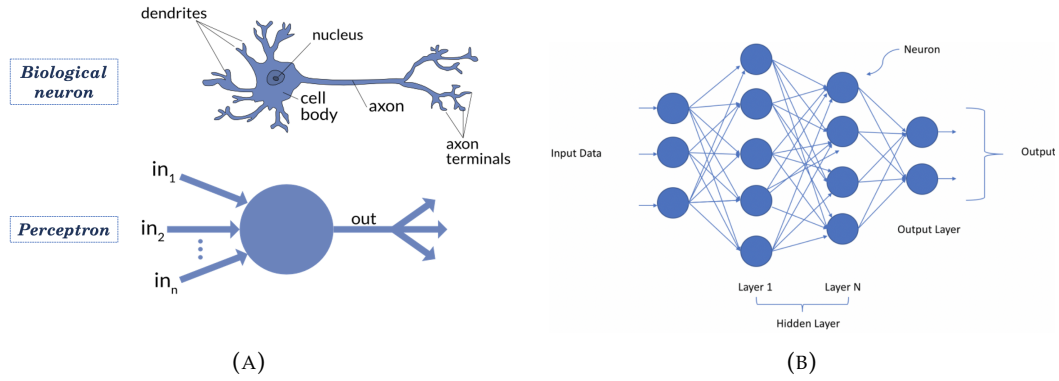


FIGURE 4.1: (A) În partea de sus a figurii este reprezentat un neuron biologic, care a servit drept sursă de inspirație pentru rețelele neuronale artificiale (ANN). n Primul tip de rețea neuronală (NN), perceptronul, este ilustrat mai jos. (B) Arhitectura unei rețele neuronale artificiale, așa cum este utilizată în prezent, evidențiind stratul de intrare și stratul de ieșire, conectate prin multiple straturi ascunse, fiecare cu un număr variabil de neuroni.

În formă matriceală:

$$Y = f(W^T X + B), \quad (4.2)$$

unde

$$\begin{cases} X \Rightarrow & \text{vector coloană de intrare de dimensiune } (m \times 1) \\ Y \Rightarrow & \text{vector coloană de ieșire, după aplicarea funcției de activare, de dimensiune } (n \times 1) \\ B \Rightarrow & \text{prag, vector coloană de dimensiune } (n \times 1) \\ W \Rightarrow & \text{matrice de ponderi, de dimensiune } (m \times n) \\ f \Rightarrow & \text{funcție de activare, aplicată fiecărui element} \end{cases}$$

Generalizarea pentru multiple straturi este naturală:

$$\begin{aligned} Z^l &= W^{lT} Y^{l-1} + B^l \\ Y^l &= f^l(Z^l), \end{aligned} \quad (4.3)$$

unde l denotă stratul l^{th} din rețea. În cadrul tezei, prezentăm și metoda de back-propagation, prin care rețelele neuronale învață în timpul procesului de antrenare. De asemenea, introducem și rețelele neuronale convoluționale, utilizate preponderent pentru analiza de imagini. Discutăm apoi metode bazate pe CNNs, mai exact rețelele generativ-adversative și rețelele generativ-adversative condiționale, pe care le folosim pentru analiza datelor obținute prin diagonalizarea exactă.

Rețele condiționale generativ-adversative

Dacă rețelele generative adversative (GAN) primesc o condiție suplimentară pe care atât generatorul, cât și discriminatorul trebuie să o respecte, acestea sunt cunoscute sub denumirea de GAN-uri condiționale (cGAN). Acestea au fost introduse la scurt timp după GAN-urile tradiționale, în 2014 [8]. De obicei, această informație suplimentară este introdusă sub forma unui *label*. Acum generatorul trebuie să producă date false (generate) care să fie corelate cu acest *label*. Apoi, atât perechile generate, cât și cele reale de imagini de intrare și ieșire sunt furnizate discriminatorului,

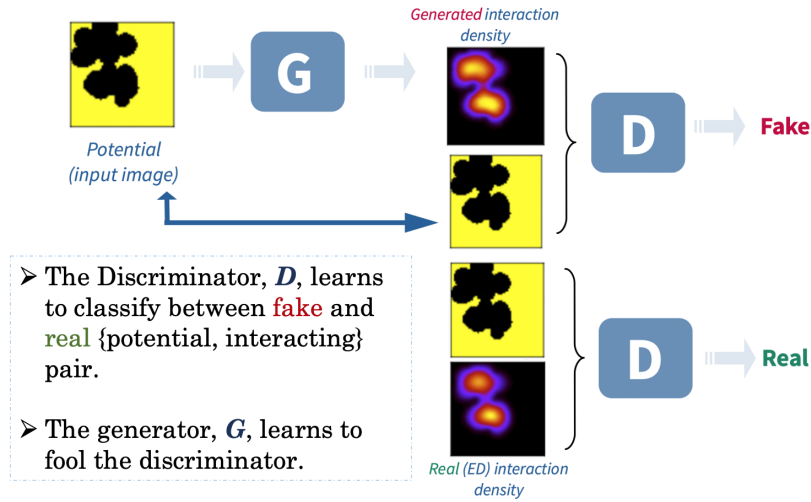


FIGURE 4.2: Schemă simplificată a procesului de antrenare a unei rețele de tip cGAN.

care trebuie să decidă ce pereche este reală și care este falsă (vezi Figura 4.2).

Funcția de eroare în acest caz este scrisă astfel:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{cGAN}(G, D) &= \mathbb{E}_{x,y} [\log D(x, y)] + \mathbb{E}_{x,z} [\log(1 - D(x, G(x, z)))] , \\ \Rightarrow G^* &= \arg \min_G \max_D \mathcal{L}_{cGAN}(G, D) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Această metodă poate fi rafinată prin adăugarea unor funcții de eroare de tip $\mathcal{L}_1$ sau $\mathcal{L}_2$, care îmbunătățesc performanța modelului. Un algoritm popular bazat pe cGANs se numește pix2pix și este folosit pentru translație de imagini [9]. Noi am utilizat acest algoritm de învățare automată pentru prezicerea profilurilor de densitate de sarcină în sisteme multi-particulă cu interacție [10].

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{cGAN}^{p2p}(G, D) &= \mathbb{E}_{x,y} [\log D(x, y)] + \mathbb{E}_{x,z} [\log(1 - D(x, G(x, z)))] \\ &\quad + \mathbb{E}_{x,y,z} [\|y - G(x, z)\|_1] \\ \Rightarrow G^* &= \arg \min_G \max_D \mathcal{L}_{cGAN}(G, D) + \lambda \mathcal{L}_{L1}(G) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Partea II

Rezultate

5

Metoda matricii R pentru probleme de împrăștiere biparticulă

■ >> Rezultatele principale prezentate în acest capitol au fost publicate în [11]

În lucrarea [11], am extins formalismul matricii R pentru a include împrăștierea biparticulă. În acest capitol, vom revizui pe scurt rezultatele prezentate în lucrarea publicată. Sistemul este, din punct de vedere structural, similar cu cel descris în cazul formalismului matricii R pentru o singură particulă, prezentat în detaliu în varianta completă a tezei.

Acesta este compus dintr-un număr s de terminale conectate la o regiune centrală de împrăștiere. Particulele sunt fermioni (identici), iar abordarea noastră conservă antisimetria funcției de undă fermionice în întregul sistem. Prin utilizarea unui Ansatz adecvat pentru funcțiile de undă biparticulă, obținem un sistem de ecuații care furnizează coeficienții funcțiilor de împrăștiere multiparticulă, exprimate fie în termeni de produse antisimetrizate ale funcțiilor de uni-particulă împrăștiere (când cel puțin o particulă se află într-un terminal), fie în termeni de stări proprii biparticulă ale Hamiltonianului (când ambele particule se află în regiunea de împrăștiere).

Facem următoarele presupuneri:

- Particulele interacționează între ele printr-un potențial central de tipul $V^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv V^{(\Omega_c)}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, care depinde de distanța dintre cei doi fermioni. De asemenea, considerăm un potențial de interacție doar dacă ambele particule se află în regiunea de împrăștiere ($\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Omega_c$).
- Când ambele particule se află în terminalele s sau una dintre particule este într-unul dintre terminale, iar cealaltă în regiunea centrală, acestea nu interacționează între ele.
- Potențialul de interacție nu depinde de spin.
- Energia totală E se conservă.

Notation	
s=1,2,3...	index pentru terminal
$\mathbf{r}_p$	vector de poziție
Ω_c	regiunea de împrăștiere
Ω_s	terminalul s
Γ_s	interfața dintre terminalul Ω_s și regiunea centrală

TABLE 5.1: Notățiile folosite în formalismul matricii R pentru împrăștierea biparticulă

Notățiile folosite pe parcursul acestui capitol sunt prezentate în Tabelul 5.1.

Hamiltonianul sistemului

În terminalul s, Hamiltonianul uni-particulă este:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(s)}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m^{(\Omega_s)}}\Delta + V^{(s)}(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

unde m^{Ω_s} este masa efectivă, iar $V^{(s)}$ reprezintă energia potențială pentru o singură particulă. Deoarece presupunem că sistemul prezintă invarianță la translație de-a lungul direcției de transport, atunci $V^{(s)}(\mathbf{r}) \equiv V^{(s)}(x, y) \equiv V^{(s)}(\mathbf{r}_\perp)$. Hamiltonianul biparticulă este:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2, \Omega_s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_s)}(\mathbf{r}_1) + \hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_s)}(\mathbf{r}_2) \quad (5.2)$$

Pentru regiunea centrală de interacție, Ω_c , Hamiltonianul uni-particulă este:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r} \in \Omega_c} = -\frac{\hbar^2}{2m^{(\Omega_c)}}\Delta + V^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}),$$

iar Hamiltonianul biparticulă:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2, \Omega_c)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}_1) + \hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}_2) + V_2^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5.3)$$

unde $V_2^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ a fost introdus mai sus. Astfel, pentru întreg sistemul $\mathcal{T} \equiv \Omega_c \cup \Omega_s$, putem defini un Hamiltonian uniparticulă fără potențial de interacție $\hat{\mathcal{H}}^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r})$, Hamiltonianul biparticulă $\hat{\mathcal{H}}^{(2, \mathcal{T})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ și un Hamiltonian biparticulă ideal $\hat{\mathcal{H}}_0^{(2, \mathcal{T})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$:

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r}) \equiv \hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_s)}(\mathbf{r}) + \hat{\mathcal{H}}^{(\Omega_c)}(\mathbf{r}), \\ \hat{\mathcal{H}}^{(2, \mathcal{T})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \hat{\mathcal{H}}^{(2, \Omega_s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \hat{\mathcal{H}}^{(2, \Omega_c)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ \hat{\mathcal{H}}_0^{(2, \mathcal{T})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv \hat{\mathcal{H}}^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r}_1) + \hat{\mathcal{H}}^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r}_2), \end{cases} \quad (5.4)$$

Componenta orbitală a stării proprii a Hamiltonianului uniparticulă cu energia E, $\Psi_i^{(in, s, E)} = 1$ and $\Psi_j^{(in, s', E)} = 0$, pentru oricare $s' \neq s, j \neq i$ este:

$$\Psi_i^{(1, s, \mathcal{T}, E)}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{s', j} \left[\delta_{ij} \delta_{ss'} e^{-ik_j^{(s', E)} z} + \psi_{j(s, i)}^{(out, s', E)} e^{ik_j^{(s', E)} z} \right] \phi_j^{(s')}(\mathbf{r}) + \sum_l a_{l(s, i)}^{(E)} \chi_l(\mathbf{r}) \quad (5.5)$$

$\mathbf{r}_1 \in \Omega_{s_1}$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_{s_2}$	$\mathbf{r}_1 \in \Omega_c$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_{s_2}$	$\mathbf{r}_1 \in \Omega_{s_2}$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_{s_2}$
$\mathbf{r}_1 \in \Omega_{s_1}$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_c$	$\mathbf{r}_{1,2} \in \Omega_c$ $\chi_l^{(2)}$ scattering region	$\mathbf{r}_1 \in \Omega_{s_2}$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_c$
$\mathbf{r}_1 \in \Omega_{s_1}$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_{s_1}$	$\mathbf{r}_1 \in \Omega_c$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_{s_1}$	$\mathbf{r}_1 \in \Omega_{s_2}$ $\mathbf{r}_2 \in \Omega_{s_1}$

FIGURE 5.1: Reprezentarea schematică 2D a spațiului de coordonate 6D al sistemului cu două terminale, Ω_{s_1} și Ω_{s_2} , atașate la regiunea de împrăștiere Ω_c . Fiecare dintre coordonatele $\mathbf{r}_1$ și $\mathbf{r}_2$ poate fi în oricare dintre regiunile Ω_{s_1} , Ω_{s_2} sau Ω_c , așa cum este reprezentat prin cele nouă pătrate. Denumim *regiunea exterioară* cele opt pătrate exterioare în care cel puțin una dintre coordonatele $\mathbf{r}_1$ sau $\mathbf{r}_2$ nu se află în Ω_c . În regiunea exterioară, particulele sunt independente. Potențialul pentru două particule acționează doar în *regiunea interioară*, care este pătratul din mijlocul figurii, evidențiat cu fundal albastru.

unde $\chi_l(\mathbf{r})$ sunt funcțiile Wigner-Eisenbud, iar coeficienții $\psi_{j(s,i)}^{(out,s',E)}$ și $a_{l(s,i)}^{(E)}$ sunt determinate ca în teoria uniparticulă.

Ansatz-ul pe care l-am propus $\Psi^{(\pm,2,T,E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ în regiunea exterioară (vezi Figura 5.1), este:

$$\Psi^{(\pm,0,2,T,E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_0^E \frac{dE_1}{E} \sum_{s,s',i,j} C_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1)} \times$$

$$\left[\Psi_i^{(1,s,T,E_1)}(\mathbf{r}_1) \Psi_j^{(1,s',T,E-E_1)}(\mathbf{r}_2) \pm \Psi_i^{(1,s,T,E_1)}(\mathbf{r}_2) \Psi_j^{(1,s',T,E-E_1)}(\mathbf{r}_1) \right]. \quad (5.6)$$

În regiunea interioară, funcția de undă biparticulă este:

$$\Psi^{(\pm,2,\Omega_c,E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum a_l^{(\pm,2,E)} \chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5.7)$$

Funcțiile $\chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ satisfac ecuația Schrodinger:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2,T)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_l^{(\pm,2,\Omega_c)} \chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad \text{for } \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Omega_c,$$

și condițiile de frontieră

$$\left[\hat{\mathbf{n}}_{\Gamma_s}(\mathbf{r}_1) \cdot \nabla_1 \chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right]_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_s} = \left[\hat{\mathbf{n}}_{\Gamma_s}(\mathbf{r}_2) \cdot \nabla_2 \chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right]_{\mathbf{r}_2 \in \Gamma_s} = 0,$$

în timp ce $\chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$ dacă $\mathbf{r}_1$ or $\mathbf{r}_2 \notin \Omega_c$. Funcțiile $\chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ sunt analogul biparticulă a funcțiilor Wigner-Eisenbud uniparticulă $\chi_l(\mathbf{r})$. Obținem astfel următoarea expresie pentru coeficienții a_l :

$$\begin{aligned}
a_l^{(\pm,2,E)} \left(E - E_l^{(2)} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m(\Omega_c)} \cdot \\
&\sum_s \left(\int_{\Omega_c} d\mathbf{r}_2 \int_{\Gamma_s} d\Gamma_s \left\{ \hat{\mathbf{n}}_{\Gamma_s}(\mathbf{r}_1) \cdot \left[\chi_l^{(\pm,2)*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \nabla_1 \Psi^{(\pm,2,\mathcal{T},E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \right\}_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s\Omega_0}} \right. \\
&\left. + \int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_1 \int_{\Gamma_s} d\Gamma_s \left\{ \hat{\mathbf{n}}_{\Gamma_s}(\mathbf{r}_2) \cdot \left[\chi_l^{(\pm,2)*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \nabla_2 \Psi^{(\pm,2,\mathcal{T},E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \right\}_{\mathbf{r}_2 \in \Gamma_{s\Omega_0}} \right). \quad (5.8)
\end{aligned}$$

Continuitatea funcției de undă atunci când o particulă se află în regiunea de împrăștiere și cealaltă pe interfață

Din condiția de continuitate a funcției de undă, obținem o ecuație pentru $a_l^{(\pm,2,E)}$ [11]:

$$\begin{aligned}
&\sum_l a_l^{(\pm,2,E)} \int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_2 \chi_{l_0}^*(\mathbf{r}_2) \int_{\Gamma_{s_1}} d\Gamma_{s_1} \left[\phi_k^{(s_1)*}(\mathbf{r}_{1\perp}) \chi_l^{(\pm,2,E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right]_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s_1\Omega_0}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^E \frac{dE_1}{E} \sum_{s,s',i,j} C_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1)} \mathcal{B}_{i,j,k,l_0}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1,s_1)} \quad (5.9)
\end{aligned}$$

cu

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{i,j,k,l_0}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1,s_1)} &\equiv \left\{ a_{l_0} \left(\Psi_j^{(1,s',\mathcal{T},E-E_1)} \right) \left[\delta_{ik} \delta_{ss_1} + \psi_k^{(\text{out},s_1,E)} \left(\Psi_i^{(1,s,\mathcal{T},E)} \right) \right] \right. \\
&\left. \pm a_{l_0} \left(\Psi_i^{(1,s,\mathcal{T},E)} \right) \left[\delta_{jk} \delta_{s's_1} + \psi_k^{(\text{out},s_1,E-E_1)} \left(\Psi_j^{(1,s',\mathcal{T},E-E_1)} \right) \right] \right\} \quad (5.10)
\end{aligned}$$

Continuitatea fluxului de probabilitate atunci când o particulă se află în regiunea de împrăștiere și cealaltă pe interfață

Considerăm că $\mathbf{r}_2 \in \Omega_c$ și $\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s_1}$. Impunem condiția:

$$\frac{1}{m(\Omega_c)} \frac{\partial \Psi^{(\pm,2,\mathcal{T},E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial z_1} \bigg|_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s_1\Omega_c}, \mathbf{r}_2 \in \Omega_c} = \frac{1}{m(\Omega_s)} \frac{\partial \Psi^{(\pm,0,2,\mathcal{T},E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial z_1} \bigg|_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s_1\Omega_s}, \mathbf{r}_2 \in \Omega_c} \quad (5.11)$$

Astfel, obținem [11]:

$$\frac{\partial \Psi^{(\pm,2,\mathcal{T},E)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial z_2} \bigg|_{\mathbf{r}_1 \in \Omega_0, \mathbf{r}_2 \in \Gamma_{s_2\Omega_0}} = -\frac{m(\Omega_0)}{m(\Omega_s)} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^E \frac{dE_1}{E} \sum_{s,s',i,j} C_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1)} \mathcal{A}_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1,s_2)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad (5.12)$$

unde

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1,s_1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &\equiv \frac{\partial \Psi_i^{(1,s,\mathcal{T},E_1)}(\mathbf{r}_1)}{\partial z_1} \Big|_{\Gamma_{s_1\Omega_s}} \Psi_j^{(1,s',\mathcal{T},E-E_1)}(\mathbf{r}_2) \pm \\
\Psi_i^{(1,s,\mathcal{T},E_1)}(\mathbf{r}_2) \frac{\partial \Psi_j^{(1,s',\mathcal{T},E-E_1)}(\mathbf{r}_1)}{\partial z_1} \Big|_{\Gamma_{s_1\Omega_s}} &= \sum_{i_1} \left(-ik_{i_1}^{(s_1,E_1)} \left[\delta_{ii_1} \delta_{ss_1} - \psi_{i_1}^{(out,s_1,E_1)} \left(\Psi_i^{(1,s,\mathcal{T},E_1)} \right) \right] \phi_{i_1}^{(s_1)}(\mathbf{r}_1) \right) \Psi_j^{(1,s',\mathcal{T},E-E_1)}(\mathbf{r}_2) \pm \Psi_i^{(1,s,\mathcal{T},E_1)}(\mathbf{r}_2) \\
\times \sum_{i_1} \left(-ik_{i_1}^{(s_1,E-E_1)} \left[\delta_{ji_1} \delta_{s's_1} - \psi_{i_1}^{(out,s_1,E-E_1)} \left(\Psi_j^{(1,s',\mathcal{T},E-E_1)} \right) \right] \phi_{i_1}^{(s_1)}(\mathbf{r}_1) \right) &
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Ecuatii finale pentru coeficienții C

Folosind rezultatele din condițiile de continuitate și expresia pentru coeficienții a_l , obținem:

$$\int_0^E \frac{dE_1}{E} \sum_{s,s',i,j} C_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1)} \mathcal{D}_{i,j,s_1,k,l_0}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1)} = 0, \tag{5.14}$$

unde

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{i,j,s_1,k,l_0}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1)} &\equiv -\frac{\hbar^2}{m(\Omega_s)} \sum_l \left\{ \int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_2 \sum_{s_1} \int_{\Gamma_{s_1}} d\Gamma_{s_1} \left[\chi_l^{(\pm,2)*}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \mathcal{A}_{i,j}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1,s_1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right]_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s_1}} \right\} \\
&\times \frac{\int_{\Omega_0} d\mathbf{r}_2 \chi_{l_0}^*(\mathbf{r}_2) \int_{\Gamma_{s_1}} d\Gamma_{s_1} \left[\phi_k^{(s_1)*}(\mathbf{r}_{1\perp}) \chi_l^{(\pm,2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right]_{\mathbf{r}_1 \in \Gamma_{s_1}}}{E - E_l^{(2)}} - \mathcal{B}_{i,j,k,l_0}^{(\pm,s,E_1,s',E-E_1,s_1)}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Prezentăm logica metodei noastre în Figura 5.2, unde se poate urmări modul lucru, pașii principali și ecuațiile care trebuie rezolvate.

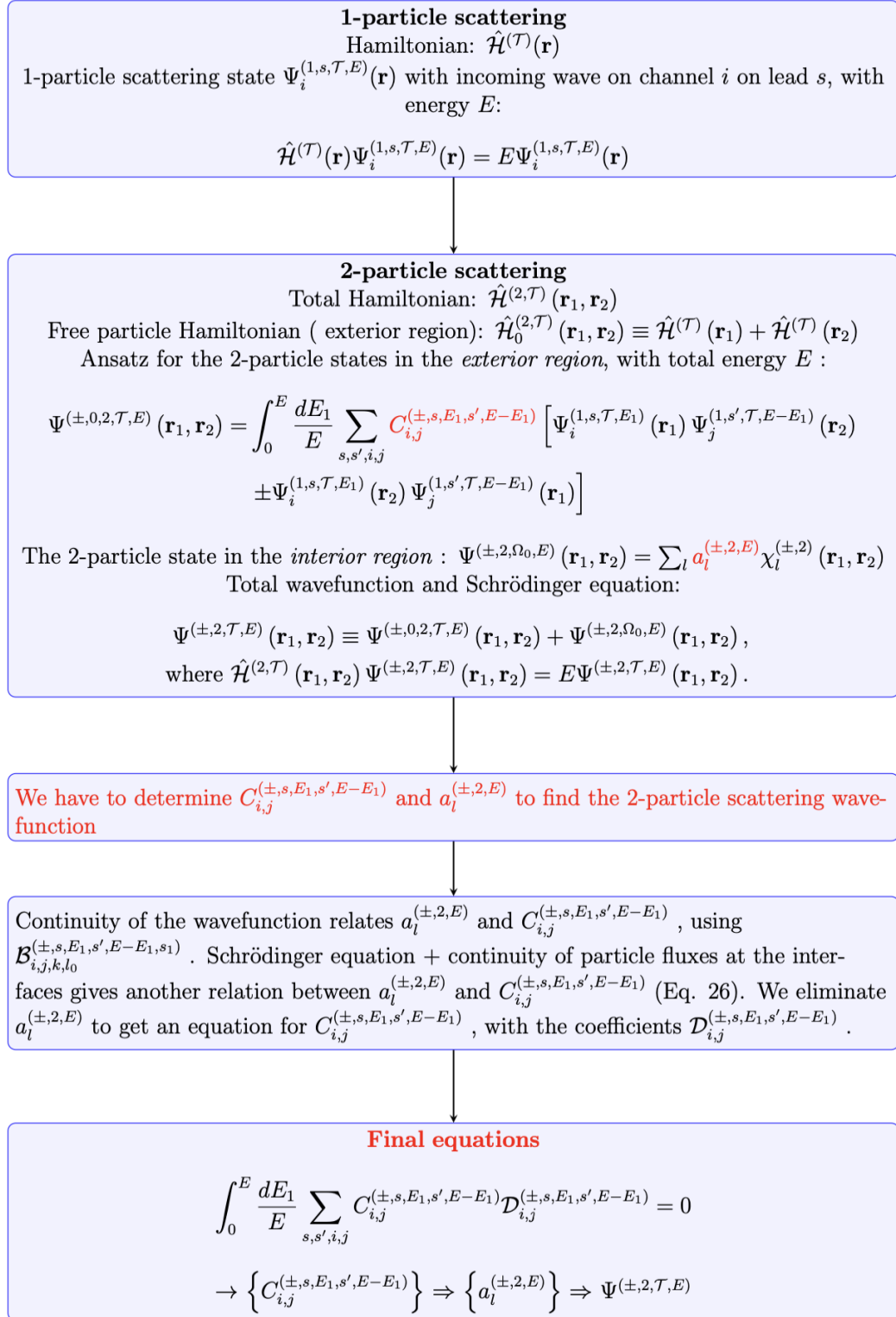


FIGURE 5.2: Logica metodei matricii R pentru împrăștierea biparticulă

6

Modelarea sistemelor cu dimensionalitate redusă

6.1 Sisteme cuantice bidimensionale controlate de porți electrostatice

■ >> Rezultatele principale din această secțiune au fost publicate în [12]

În acest capitol prezentăm un sistem 2D cu mai multe particule care a marcat începutul studiilor noastre computaționale ale sistemelor cuantice bidimensionale cu aplicații în informația cuantică, și anume un sistem de puncte cuantice (*quantum dots*) controlat printr-o rețea de porți electrostatice. Acest tip de sistem reprezintă un prototip viabil pentru arhitecturi de circuite cuantice. În acest context, investigarea spectrelor sistemelor multi-electronice devine un criteriu esențial pentru proiectarea unor astfel de dispozitive, un demers care necesită un efort computațional semnificativ. Scopul nostru a fost nu doar evidențierea proprietăților unui sistem bidimensional cu două particule controlat prin porți electrostatice, ci și utilizarea tehnicilor de învățare automată pentru a prezice valorile proprii și funcțiile proprii pentru sistemele multi-electronice.

Model

Arhitectura propusă este prezentată în Figura 6.1a, unde considerăm un set de sisteme cuantice cu N particule ($N=2$) definite pe o regiune bidimensională de formă pătrată și dimensiune finită. Fiecare potențial electrostatic poate lua două valori (0 sau V_g), definind o configurație care controlează energia potențială în planul de confinare al electronilor. Stările proprii ale sistemului multi-particulă sunt determinate de tensiunile aplicate pe porți, iar interacția Coulombiana dintre electroni este luată în considerare în mod exact. Numărul de configurații depinde de numărul de porți (N_g), fiind 2^{N_g} . Potențialul electrostatic este:

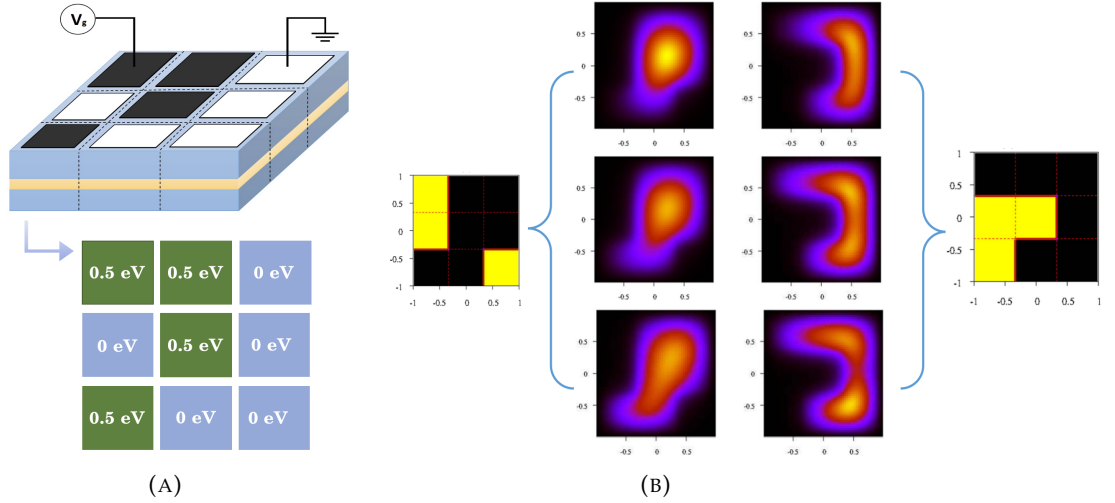


FIGURE 6.1: (A) Reprezentare schematică a sistemului 2D. (B) Două configurații de potențial care corespund unui sistem fără (stânga) și cu (dreapta) tranziție singlet-triplet.

$$V_C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (6.1)$$

de unde rezultă că intensitatea relativă a interacției Coulombiene poate fi ajustată prin modificarea permitivității electrice relative ϵ_r . Interacția Coulombiana de valoare maximă (V_C^0) este obținută pentru $\epsilon_r = 1$, astfel încât $V_C = V_C^0/\epsilon_r$. De asemenea, se pot varia masa efectivă m_{eff} și confinarea, care controlează distanța dintre nivelele energetice uniparticulă. Pentru ca interacția electrostatică să fie semnificativă, tăria interacției Coulombiene trebuie să fie comparabilă cu distanța dintre nivelele energetice ale sistemului fără interacție.

În calculele ulterioare, am considerat că numărul de porți electrostatice este $N_g = 3^2$, potențialele aplicate sunt $V_g = 0$ and 0.5 eV, dimensiunea regiunii de confinare este $L = 30$ nm, iar masa efectivă este $m_{\text{eff}} = 0.0655m_0$, corespunzătoare materialului GaAs.

Metode computaționale

Descrierea stărilor biparticulă prin metoda diagonalizării exacte

Spectrul energetic al sistemului biparticulă este obținut numeric, folosind metoda diagonalizării exacte, care implică diagonalizarea Hamiltonianului multi-particulă este:

$$\mathcal{H}\Psi_n = E_n\Psi_n,$$

unde E_n și $\Psi_n \equiv \Psi_n(\mathbf{r}_1, \sigma_{z1}, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_{zN})$ sunt funcțiile și valorile proprii ale sistemului.

Pentru o înțelegere mai profundă a sistemului fizic, se poate analiza în detaliu un set de configurații particulare de potențial. De exemplu, unul dintre potențialele selectate este prezentat în Figura 6.1b și corespunde valorilor $v_C = V_C/V_C^0 = 0, 0.1, 0.5, 1.0$. Se poate observa că principalul efect al interacției Coulombiene este extinderea distribuției de sarcină a electronului în groapa de potențial. De asemenea, în funcție de geometria potențialului de confinare, starea fundamentală poate evolua într-o stare triplet, așa cum se întâmplă în cazul configurației de potențial ilustrate în Figura 6.1b.

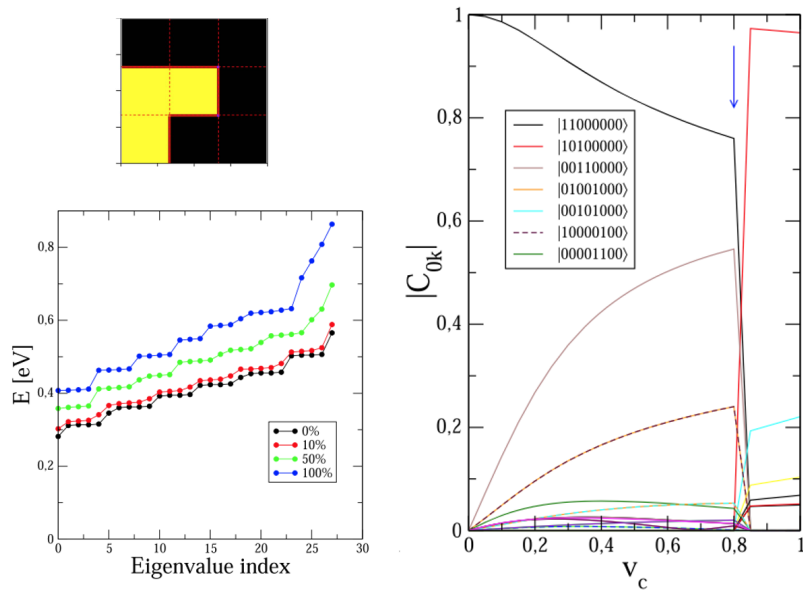


FIGURE 6.2: Stânga: Valorile proprii pentru diferite intensități ale interacțiunii Coulombiene, $v_c = 0, 0.1, 0.5, 1.0$. Modificarea intensității interacției determină o evoluție vizibilă a spectrului energetic, indicând tranziții în stările fundamentale ale sistemului. Dreapta: Coeficienții de dezvoltare $|C_{0k}|$ pentru potențialul selectat. Acești coeficienți reflectă contribuția diferitelor stări în funcția de undă totală a sistemului. Săgețile verticale marchează punctul de tranziție de la o stare de tip singlet la una de tip triplet.

Această tranziție de la starea singlet la starea triplet poate fi urmărită pe graficul (E_n, v_c), din Figura 6.1. Săgeata albastră marchează tranziția singlet-triplet, care are loc la aproximativ $v_c \approx 0.8$.

Tehnici de învățare automată

Problema formulată aici are două coordonate generice: lista potențialelor definite de toate configurațiile posibile ale porților electrostatice și intensitatea relativă a interacției Coulombiene. Prin urmare, vectorii care reprezintă datele de intrare pentru codul de învățare automată au dimensiunea $(N_g + 1)$ și conțin o combinație de reprezentări discrete și continue care permit o conexiune directă între informațiile sistemului și mărimile fizice care trebuie deduse. Pentru a prezice setul de valori proprii, am explorat câteva tehnici de învățare automată:

- Metoda celor mai mici pătrate (The method of least squares (MLS))
- Metode de tipul Kernel Ridge Regression (KRR)
- Metode de tipul Gaussian process regression (GPR)
- Rețele neuronale artificiale (Artificial Neural Networks - ANNs)

Rezultatele sunt indicate în Figura 6.3. Un aspect important îl constituie existența unui punct de tranziție între stările singlet și triplet, așa cum se poate observa în Figura 6.2. Dezvoltarea unor metode de predicție capabile să identifice tranziția singlet-triplet în acest tip de sistem mult-particulă ar sprijini proiectarea unor sisteme utile în arhitecturile pentru informație cuantică.

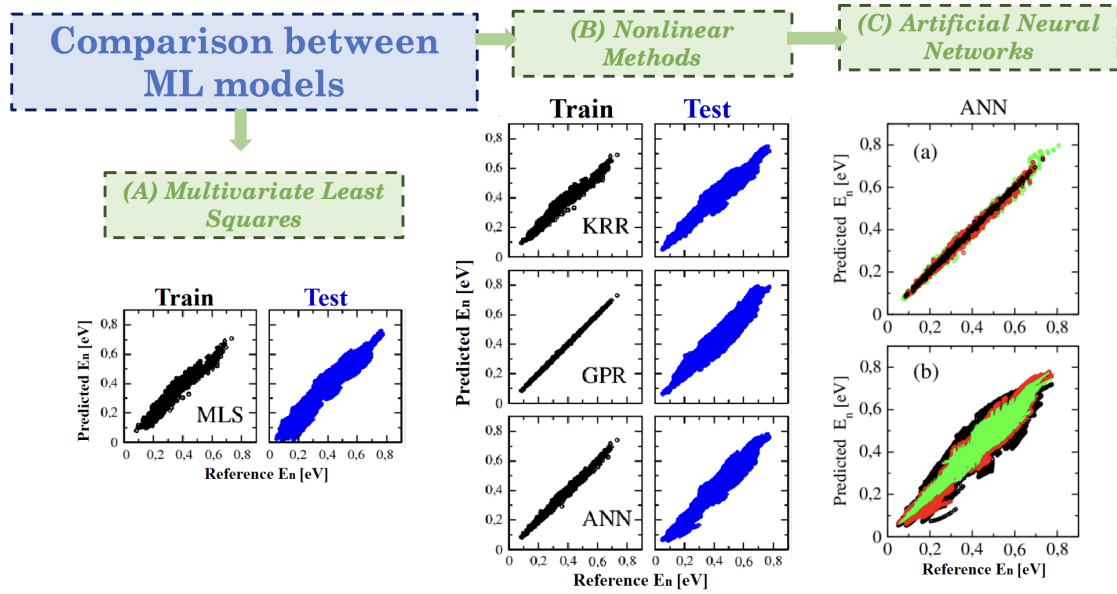


FIGURE 6.3: Comparație între coeficienții de determinare (R^2) obținuți prin mai multe modele de învățare automată.

6.2 Sisteme bidimensionale periodice

De asemenea, am explorat ajustarea structurii de benzi din rețele de tip Lieb utilizând un model continuu, mai realist din perspectiva tehnicilor de litografie. Fiecare atom din rețea corespunde unei gropi de potențial de formă circulară, iar prin impunerea condițiilor de frontieră periodice și ajustarea corespunzătoare a adâncimii gropii de potențial, am reprodus structura de benzi pentru o rețea ideală de tip Lieb. Pentru diferite configurații de potențial, am obținut și structuri de benzi de tip *flat-band* (banda fără dispersie), prezise de modelele de tip *tight-binding*. Prin varierea parametrilor esențiali (potențialul, raza, distanța, forma și poziția gropilor cuantice etc.), putem crea clase de sisteme similare care pot fi explorate eficient prin utilizarea tehnicilor de învățare automată.

În primul caz, am studiat schimbarea structurii de benzi în situația în care potențialul gropii cuantice V_A este variat, în timp ce potențialele V_B și V_C rămân constante. Potențialul de referință este $V_B = V_C = -0.2\text{eV}$ și am distins două situații: (i) $V_A > V_B$: apare o bandă interzisă între banda 2 (flatband) și banda 3 și (ii) $V_A < V_B$: banda interzisă apare între prima banda și banda 2 (flatband). Rezultate similare au fost obținute din modelele *tight-binding* și atomistice.

În al doilea caz, am studiat schimbarea structurii de benzi atunci când gropile cuantice B și C sunt aduse mai aproape de colțul structurii, în timp ce toate potențialele rămân egale cu valoarea de referință de -0.2eV . Banda fără dispersie (a doua bandă) se găsește acum în mijlocul benzii interzise.

În al treilea caz, am investigat influența deplasării gropilor cuantice B și C către centru, în timp ce toate potențialele rămân egale cu valoarea de referință de -0.2eV . Prin comparație cu geometria rețelei Kagome, ne-am aștepta să vedem o bandă fără dispersie în partea superioară. Cu toate acestea, forma gropilor cuantice trebuie ajustată pentru a crește suprapunerea dintre stările localizate B și C. Rezultatele sunt prezentate în Figura 6.4a. De asemenea, rezultatele obținute cu rețele neuronale artificiale folosite pentru prezicerea benzilor fără dispersie într-un sistem ales aleator sunt prezentate în Figura 6.4b.

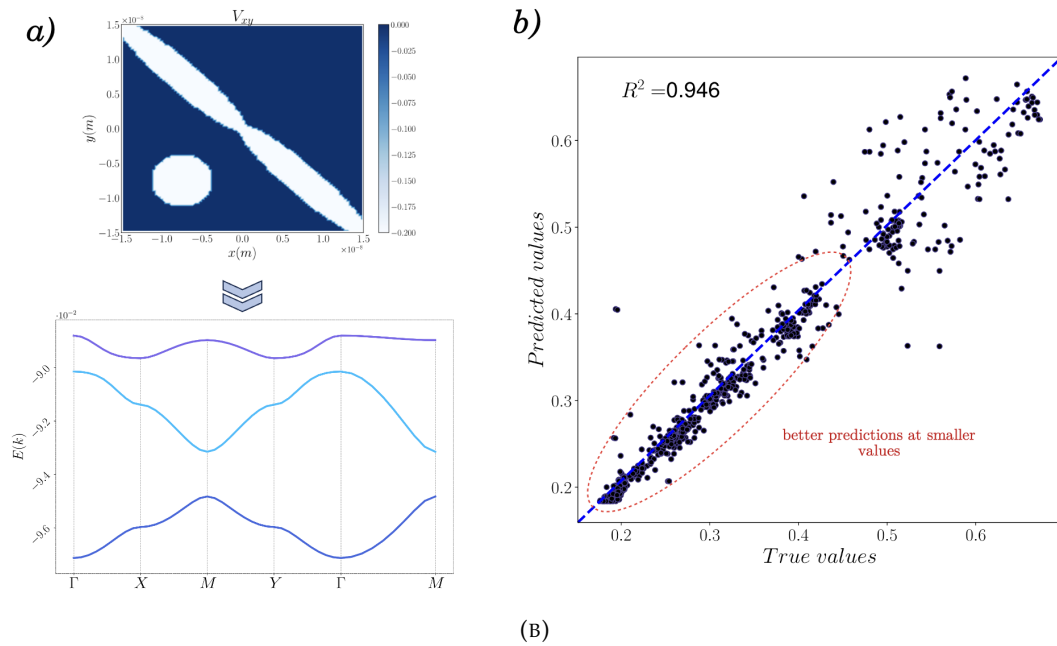
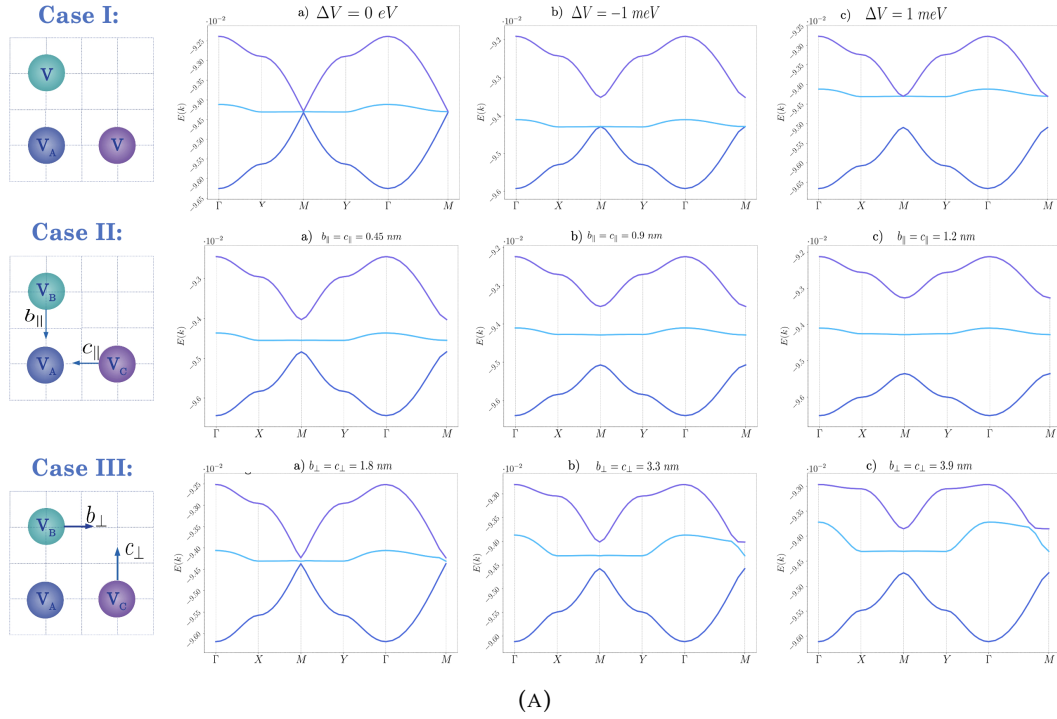


FIGURE 6.4: (A) Structurile de benzi obținute numeric cu un model continuu pentru cele trei configurații *I*, *II*, și *III*. (B) (a) Structura de benzi pentru configurația afișată mai sus, unde am modificat formele gropilor potențial pentru a simula o rețea de tip Kagome. (b) Rezultatele obținute cu ajutorul rețelelor neuronale artificiale (ANN) pentru prezicerea geometriei sistemului care favorizează formarea de benzi fără dispersie.

6.3 Interconectarea dispozitivelor cuantice

► ► Rezultatele principale din această secțiune au fost publicate în [13]

Interconectarea nano-dispozitivelor cu scopul asamblării arhitecturilor pentru calculul cuantic (*quantum computing*) este una dintre provocările actuale în domeniul fizicii stării condensate aplicate. Transferul de informație între diferite componente ale unui circuit cuantic trebuie realizată prin intermediul unor componente adiționale de circuit, denumite generic interconexiuni cuantice ("quantum interconnects"). În funcție de informația transmisă, acestea pot fi implementate sub forma ghidurilor de unda fotonice, electronice sau magnetice. La o scală de ordinul nanometrilor, interconexiunile cuantice trebuie tratate într-o manieră similară cu regiunile active ale dispozitivelor, deoarece din punct de vedere ,cantic prezintă același nivel de complexitate.

În această secțiune, am explorat multiple configurații de ghiduri de undă electronice cu arhitectură de tip neuromorf. Stările multi-electronice din sistemele 2D au fost descrise riguros prin metoda diagonalizării exacte.

Am analizat localizarea spațială a sarcinii în structurile dendritice și am investigat controlul stărilor electronice prin câmpuri externe, aspect relevant din perspectiva comutării densității de sarcină între terminalele de intrare și ghidarea sarcinii către registrul de ieșire. În paralel, a fost implementată o abordare cGAN pentru a realiza hărți potențial-sarcină. Din punct de vedere experimental, distribuția sarcinii poate fi extrasă din curentul de tunelare. Dispozitivul reconfigurabil pe care l-am propus permite un design eficient al interconexiunilor cuantice (QIs), sprijinit de tehnici de translație între imagini bazate pe metode învățare automată.

Sistemul de interconexiuni cuantice este asamblat pe o zonă de formă pătrată $2d \times 2d$, unde d este jumătate din dimensiunea laturii pătratului, similar abordării noastre pentru sistemul 2D din secțiunea anterioară. Diferența crucială apare atunci când definim potențialul de confinare, utilizând $N_{wg} = 4$ ghiduri de undă de intrare cu forme definite de funcția logistică generalizată, cunoscută și sub denumirea de curbă Richards:

$$f(x) = A + \frac{K - A + L}{(C + Qe^{-B(x-M)})^{1/v}}. \quad (6.2)$$

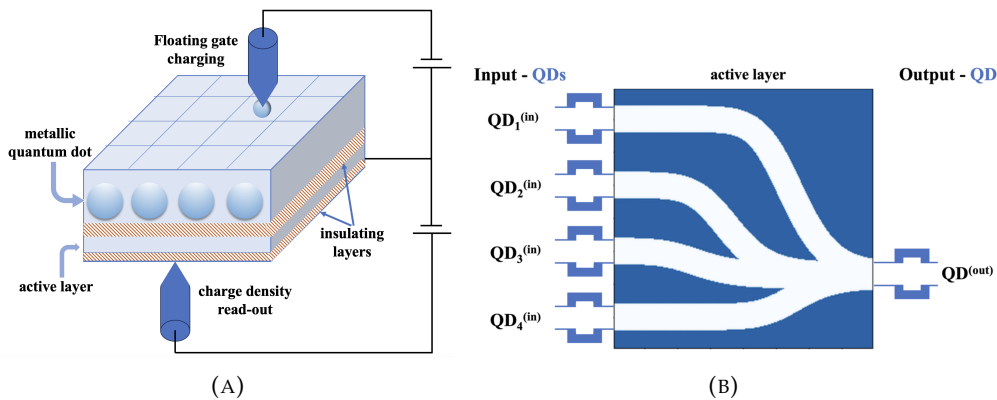


FIGURE 6.5: Reprezentare schematică a sistemului reconfigurabil cu geometrie neuromorfică.

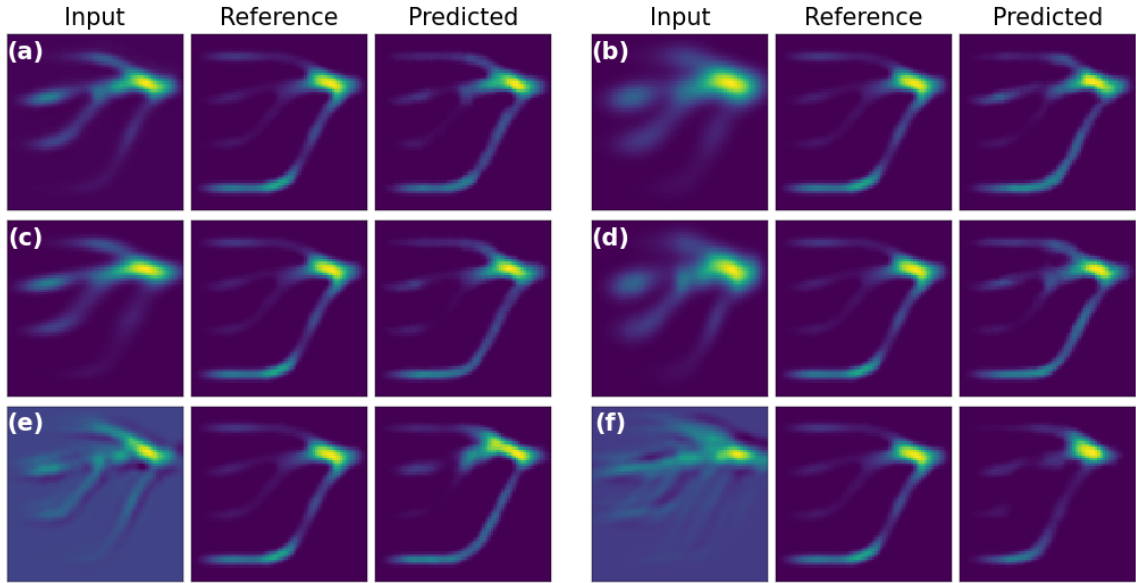


FIGURE 6.6: Deconvoluția unor hărți de curenți de tunelare (tunneling current maps - TCMs) și comparația cu referința (charge density maps): (a) $\sigma_x = \sigma_y = 1, \sigma_n = 0.01$; (b) $\sigma_x = \sigma_y = 3, \sigma_n = 0$; (c) $\sigma_x = 3, \sigma_y = 1, \sigma_n = 0$; (d) $\sigma_x = 1, \sigma_y = 3, \sigma_n = 0$; (e) $\sigma_x = \sigma_y = 1, \sigma_n = 0.1$; (f) $\sigma_x = 3, \sigma_y = 1, \sigma_n = 0.1$

Parametrii $B = 6.0/d, C = 1, K = d/2, Q = 1/2$ sunt fixați, în timp ce $A = -3d/4, -d/4, d/4, 3d/4$ variază la fiecare ghid de undă. Este generat un set extins de sisteme prin alegerea parametrilor L and M . Pentru o anumită configurație, $L = r_1 \cdot d/2$, unde $r_1 \in (-2.5, 0.5)$ este un număr ales aleatoriu. Pentru fiecare ghid de undă, alegem $M = (\delta + r_2/2) \cdot d/2$, unde $r_2 \in (0, 1)$ și $\delta = 0$ pentru electrozii de la margine (in_1, in_4) și $\delta = -1/2$ pentru electrozi centrali (in_2, in_3). Rezultatul este o structura de ghiduri de undă care se unesc într-un singur canal de ieșire. Parametrul L determină poziția electrodului de ieșire, în timp ce parametrul M influențează punctele de inflexiune. Latimea ghidului de undă, Δ_{wg} , este setată la aceeași valoare pentru toate contactele. Pentru a menține constantă latimea ghidurilor de undă, toate au fost generate dintr-un potențial cu înălțimea V_b folosind un cursor în forma circulară cu raza R_0 care se deplasează de-a lungul curbelor definite de ecuația 6.2. Sistemul este reprezentat schematic în Figura 6.5.

Înregistrarea profilului densității de sarcină ar putea fi realizat prin măsurarea curentului de tunelare detectat cu ajutorul unui STM. Imaginile STM se bazează pe fenomenul de tunelare între vârful metalic al instrumentului și probă, ceea ce generează un curent electric de tunelare. Curentul depinde de densitatea locală de stări deci putem presupune că harta curentului de tunelare corespunzătoare sistemului de QIs depinde în mod direct de distribuția densității de sarcină a stării fundamentale multi-particulă.

Presupunerea noastră este că harta curentului de tunelare poate fi simulată de o imagine obținută prin convoluția hărții densității de sarcină determinată exact prin metode numerice cu un filtru. Pe scurt, obținem o versiune estompată a densității stării fundamentale și o considerăm ca vector multi-dimensional de intrare pentru un model ML.

Cel mai simplu filtru pe care îl putem utiliza este un filtru Gaussian bidimensional, definit ca:

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp \left[- \left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right) \right]. \quad (6.3)$$

unde σ_x și σ_y sunt deviațiile standard de-a lungul direcțiilor x și y (vezi Figura 6.6).

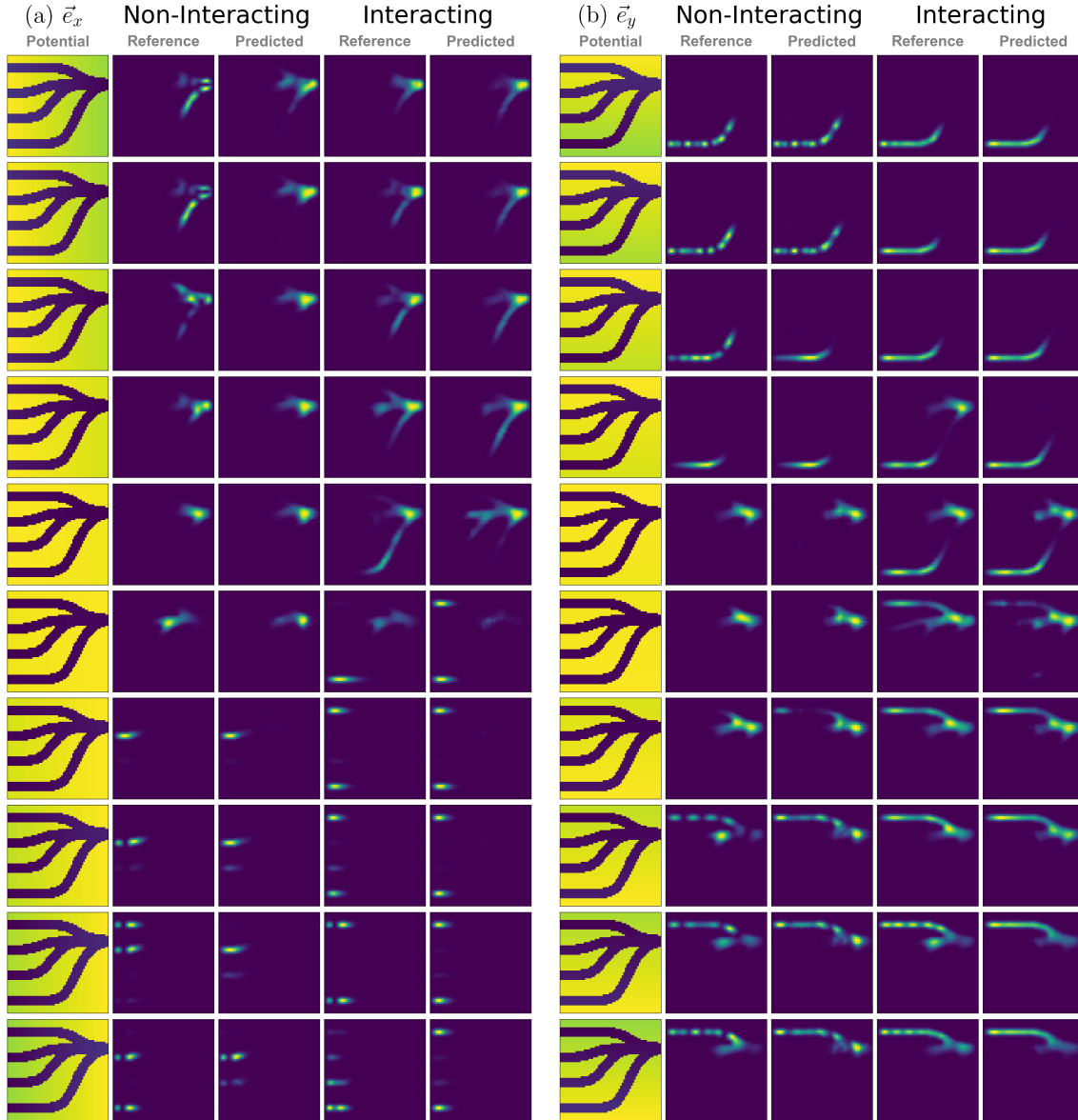


FIGURE 6.7: Comutarea localizării densității de sarcină indusă de câmpul electric în plan orientat de-a lungul direcției: (a) $\vec{e}_x$ și (b) $\vec{e}_y$. Pentru fiecare caz, am reprezentat potențialul de confinare în prima coloană, urmat de densitățile de sarcină pentru cazul uni-particulă fără interacție ($N = 1$) și cazul bi-particulă cu interacție ($N = 2$). A doua și a patra coloană corespund densității de referință (*ground truth*), în timp ce a treia și a cincea coloană reprezintă predicțiile făcute cu pix2pix.

În continuare, potențialul de confinare poate fi modificat prin adăugarea unui câmp electric în plan cu valori între $[-50, 50]$ meV, de-a lungul direcțiilor $\vec{e}_{x,y}$, astfel încât:

$$V_{\text{conf}}(x, y; E) = V_{\text{conf},0}(x, y) + \Delta V(x, y; E), \quad (6.4)$$

unde $V_{\text{conf},0}(x, y)$ este profilul de potențial pentru cazul cu câmp electric nul. Scopul este de a investiga posibilitatea manipulării localizării densității de sarcină fără utilizarea câmpurilor magnetice, doar prin modificarea potențialelor de confinare. În această analiză, am studiat atât cazul uni-particulă, cât și cazul bi-particulă (cu interacție electrostatică).

Când câmpul este orientat de-a lungul direcției $\vec{e}_x$, sarcina este treptat direcționată către terminalele de intrare, așa cum se poate observa în Figura 6.7. Când câmpul în plan este orientat de-a lungul direcției $\vec{e}_y$, comutarea are loc între terminalele exterioare de-a lungul direcției verticale. La valori maxime ale câmpului electric, terminalele exterioare de intrare sunt cele mai populate. Se observă că terminalul de ieșire este de obicei neocupat dacă este plasat în mijlocul regiunii active. Deoarece în Figura 6.7 (b) terminalul de ieșire este plasat în jumătatea superioară, acesta reține o cantitate considerabilă de sarcină.

În concluzie, controlul asupra stărilor multi-electronice se traduce în modificarea potențialului de confinare, care va ghida sarcina către unul dintre terminale. Un câmp electric aplicat în planul structurii va crește localizarea de sarcina într-un terminal anume, astfel încât electronii pot tunela într-un anumit registru de puncte cuantice. În acest context, interconexiunile cuantice pot funcționa și ca un comutator bidirecțional.

6.4 Nanotranzistorul dublu-canal

► ► Rezultatele principale din această secțiune au fost publicate în [14]

Design-ul unor dispozitive de tip nanoFET cu performante sporite din punct de vedere al comutării curentului de drena este de interes major pentru dezvoltarea arhitecturilor de calcul numeric. Dimensiunile reduse la scala nanometrică induc o serie de efecte nedorite, precum tunelarea sursa-drena în cazul dispozitivelor cu canal scurt.

În cadrul acestui capitol este analizată configurația unui nanoFET cu canal dublu, ilustrat în Fig. 6.8. Această configurație permite o bună comutare a curentului de drena, care este controlat de un efect de *matching* între undele quasi-staționare din cele două canale. Funcția de transmisie indicată în Fig. 6.9 prezintă o serie de oscilații corespunzătoare condiției de *matching*, cu maxime corespunzătoare situației *in-phase* și minime pentru situația *out-of-phase*.

Este analizată funcția de transmisie pentru o configurație tipică: dimensiunea laterală a contactelor sursa / drena $D_C = 3$ nm, lărgimea barierei centrale $D_B = 2$ nm, înălțimea barierei $V_B = 2$ eV, lungimea canalului $L = 30$ nm, masa efectivă $m^* = 0.32m_0$. Prin aplicarea potențialelor de drena (V_d) și poarta (V_g) potențialul de împrăștiere se modifică și, odată cu acesta, curentul de drena, $I_d(V_d, V_g)$. Potențialul electrostatic este determinat, într-o primă aproximație, prin rezolvarea ecuației Poisson cu condiții la capete fixate de potențialele asociate contactelor. Pentru rezolvarea eficientă a ecuației Poisson în două dimensiuni, cu un grid destul de fin, am utilizat pachetul Python *scipy*, mai exact rutina de rezolvare a sistemelor liniare de ecuații bazată pe matrici sparse. La acesta se adaugă offsetul de bandă generat de bariera de potențial în regiunea de împrăștiere.

Funcția de transmisie este determinată folosind două coduri diferite, R-matrix și KWANT, care descriu problema de împrăștiere. Kwant este un pachet Python realizat pentru simulări numerice ale proprietăților de transport, cu calcule bazate

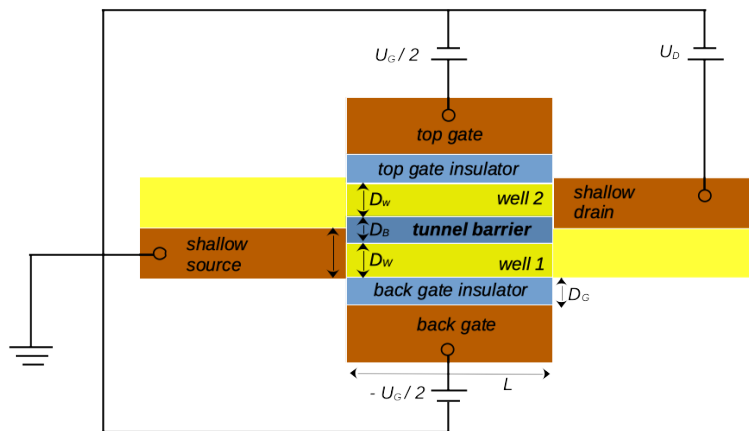


FIGURE 6.8: NanoFET cu canal dublu, în care electronii din canalul inferior (de sursa) tunelează în canalul superior (de drena). Prin acțiunea potențialelor aplicate pe porțile *top-gate* și *bottom-gate*, tranzistorul poate trece din stare ON în stare OFF.

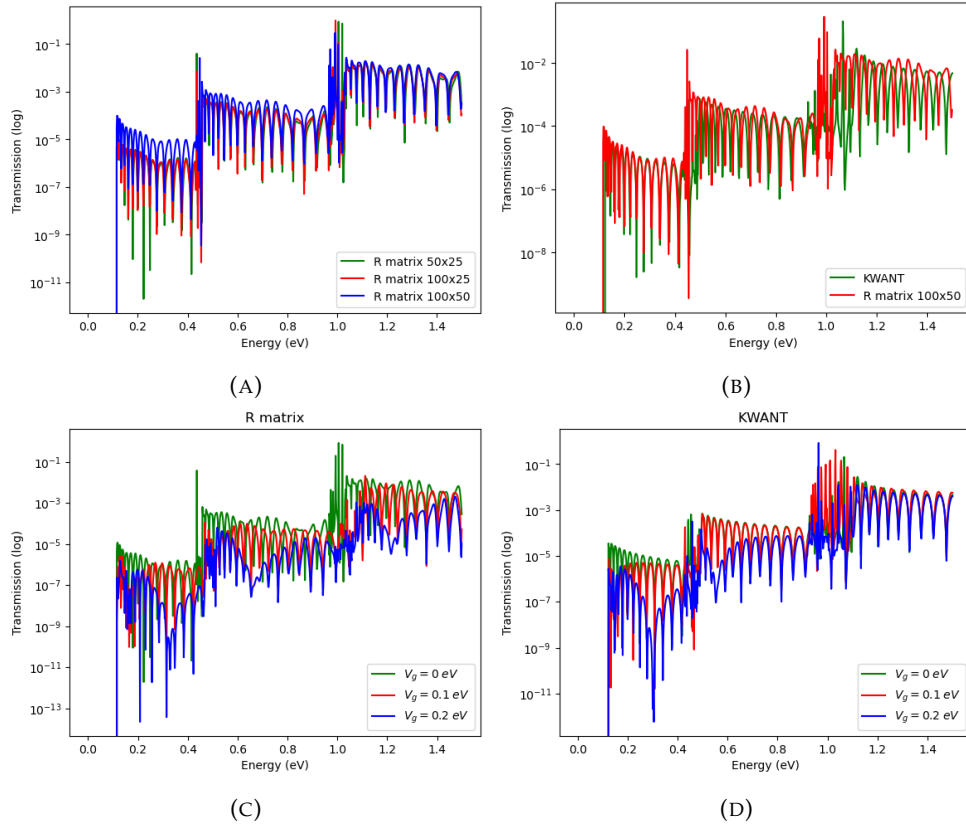


FIGURE 6.9: Funcția de transmisie sursa-drena fără potențiale aplicate, $(V_d, V_g) = (0, 0)$. Este realizată o analiză comparativă între metoda matricii R și pachetul software KWANT. Funcția de transmisie sursa-drena la $V_d = 0$ eV și $V_g = 0, 0.1, 0.2$ eV. Comparare între rezultatele obținute cu Kwant și matricea R.

pe modelul electronilor strâns legați ("tight binding model"). Prin intermediul librăriei se pot calcula funcția de transmisie, conductanța, curentul de spin, funcțiile de unda, matricea de împrăștiere, funcțiile Green, etc. Pachetul Kwant are mai multe avantaje pentru utilizator: gradul de transparență în legătură cu conceptele fundamentale din domeniul transportului cuantic, precum și controlul asupra structurii și simetriei rețelei, tipul de electrod, gradul de libertate de spin, simetria electron-gol. Într-o manieră similară cu matricea R, sistemul cuantic este împărțit în zona de împrăștiere, la care sunt atașați electrozi semi-infiniți descriși de o rețea periodică, semi-infinită. Electrozii sunt ghiduri de unda pentru stările de intrare care se propaga în zona centrală, iar conductanța sistemului este calculată în cadrul formalismului Landauer-Buttiker. Transportul coerent într-un dispozitiv de tip multi-terminal poate fi descris și în cadrul formalismului matricii R. Transportul coerent în sistemele bidimensionale este, de obicei, caracterizat de o funcție de transmisie cu variații bruște, iar metoda matricii R oferă o abordare eficientă din punct de vedere computațional pentru rezolvarea problemei de împrăștiere. Premisa formalismului este ca sistemul cuantic poate fi împărțit într-o regiune de împrăștiere, conectată la electrozi. Primul pas este rezolvarea problemei Wigner-Eisenbud, care corespunde diagonalizării Hamiltonianului din zona de împrăștiere, cu condiții cunoscute la frontieră. Ulterior, este calculată matricea R, din care rezulta direct matricea S și implicit funcția de transmisie a sistemului. Formalismul matricii R a fost aplicat pe

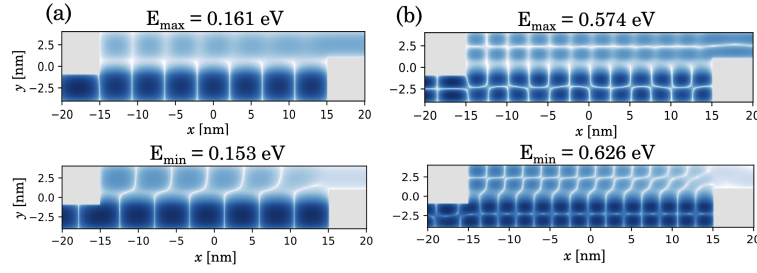


FIGURE 6.10: Funcțiile de undă corespunzătoare situațiilor *in-phase* și *out-of-phase*, care corespund unui maxim și, respectiv, unui minim în funcția de transmisie. Funcțiile de undă au fost calculate în cazul fără potențiale aplicate, $(V_d, V_g) = (0, 0)$, la $V_b = 2 \text{ eV}$ și $m_{eff} = 0.32 m_0$

o multitudine de sisteme, precum nanotranzistorii balistici, firele cuantice, tranzistorii de tip Datta-Das, sau nanofirele de tip core-shell. În regiunea de împrăștiere, potențialul poate fi modificat în funcție de caracteristicile sistemului, poate fi adăugat un câmp magnetic și interacție spin-orbita.

În timp ce acuratețea modelului bazat pe matricea R depinde de numărul de componente din baza Fourier, pachetul KWANT devine comparabil cu un model continuu odată cu micșorarea constantei de rețea. Pentru nanotranzistorul studiat, am evaluat eficiența ambelor abordări computaționale în mai multe cazuri. Funcțiile de transmisie reprezentate în Fig. 6.9 indică rezultate foarte asemănătoare pentru cele două metode, sugerând o bună acuratețe de calcul. De asemenea, se observa o scădere în transmisie odată cu aplicarea unui potențial simetric pe cele două porți, după cum se vede în Figura ??

În continuare, folosind avantajele calcului paralel, este determinat $I_d(V_d, V_g)$ pentru 2000 de perechi (V_d, V_g) . Rezultatul este indicat în Fig. 6.11. Prin mărirea potențialului de drena, se obțin platouri de quasi-saturație în curentul de drena, după cum se poate observa în Fig. 6.11b. Pe de altă parte, creșterea potențialului de poarta V_g conduce la o scădere a funcției de transmisie și, concomitent a curentului de drena. Astfel, transistorul trece din starea ON în stare OFF. Aceasta tranziție este accentuată de prezența barierei centrale în configurația nanoFET-ului cu dublu canal.

Rezolvarea problemelor de împrăștiere necesită resurse importante atunci când numărul de instanțe crește mult, dar și atunci când se dorește o acuratețe mare de calcul, în prezența unor potențiale cu variație rapidă (e.g. bariera de potențial din zona centrală). Prin urmare au fost investigate metode de învățare automată capabile să reproducă dependența curentului de drena de potențialul de împrăștiere și, implicit, de potențialele aplicate pe electrozi.

În primă fază, am testat aplicabilitatea rețelelor neuronale artificiale ("artificial neural networks") pentru determinarea curentului de drena din valoarea potențialelor de poarta și drena, iar pentru implementarea arhitecturii rețelei am folosit pachetul Tensorflow. În urma realizării simulărilor numerice bazate pe formalismul matricii R , am avut la dispoziție un set de 2600 de date pentru (V_d, V_g, I_d) , pe care l-am împărțit în 2080 de date de antrenare (80% din setul complet de date) și 520 de date de test (20%). Dintre datele pentru antrenare, un procent de 20% au fost utilizate de rețea pentru validare, un proces prin care modelul își evaluează performanța în timp real în timpul procesului de "backpropagation" și scade probabilitatea de "overfitting". Potențialul de poarta aplicat a fost variat între 0 eV și 0.25 eV, cu un pas de 0.005 eV, iar potențialul de drena a avut valori cuprinse între 0 eV și 0.1 eV, cu

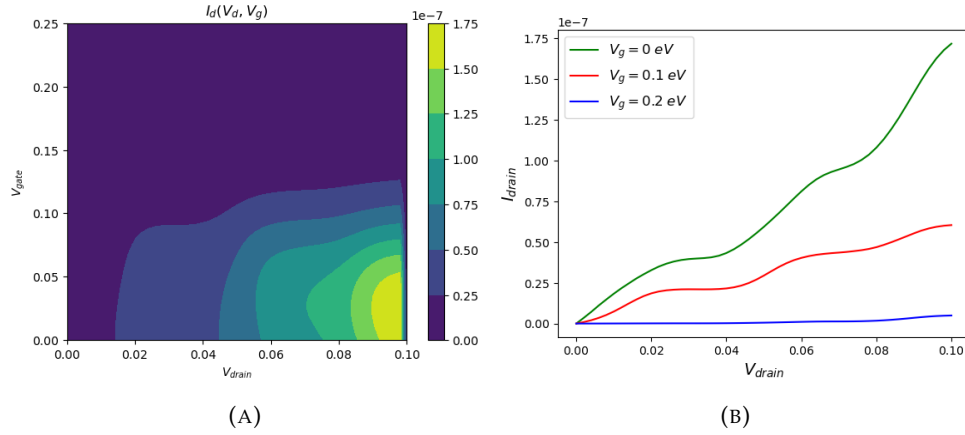


FIGURE 6.11: Dependenta curentului de drena I_d ca funcție de potențialele aplicate pe drena (V_d) și porțile *top-gate* ($V_g/2$) și *bottom-gate* ($-V_g/2$).

un pas de 0.002 eV. Pentru optimizarea procesului de învățare al rețelei neuronale, atât datele de intrare cât și datele de ieșire, care trebuie prezise, sunt preprocesate. Preprocesarea datelor presupune scalarea acestora, verificarea distribuției statistice și eliminarea posibilelor date eronate. De asemenea, sistemele analizate de modelul de învățare automată trebuie să fie similare, deci în cazul studiat am păstrat constante valorile pentru potențialul de bariera, masa efectivă și dimensiunea canalului nanotranzistorului.

Procesul de antrenare a fost realizat pentru 1200 de epoci, cu un *batch size* de 16, iar optimizatorul folosit a fost ADAM. Acuratețea modelului este măsurată folosind coeficientul de determinare R^2 , care a fost calculat atât pe datele de test cât și pe cele utilizate pentru antrenare. Urmărind variația coeficientului de determinare în timpul antrenării rețelei, se poate evita cazurile în care modelul ajunge într-un stadiu de *overfitting*. Deși pentru multe dintre configurațiile sistemului curentul de drena este nul, rețeaua neuronală are o performanță foarte bună și coeficientul de determinare ajunge la 99%, după cum se observa în Figura 6.12. Am testat aceeași arhitectura și pentru seturi de date de antrenare de dimensiuni reduse, cu $N_{train} = 1560, 1300, 780$, iar coeficientul de determinare a rămas la valori de peste 90%, deși se observa o scădere evidentă a performanței modelului odată cu micșorarea setului de date utilizat.

Prin antrenarea unui model de învățare automată, problema prezicerii curentului de drena într-un nanotranzistor similar cu cel descris în simulări este simplificată în mod semnificativ. Principalul avantaj este reducerea timpului de calcul, dar modelul de învățare automată poate fi folosit și pentru modelarea acestui tip de nanodispozitive.

Predicția funcției de transmisie cu rețele neuronale convoluționale

Oscilațiile în funcția de transmisie care se observă în figurile 6.9 și ?? sunt o caracteristică definitorie a nanotranzistorului dublu canal descris mai sus. Din acest motiv, ne-am îndreptat atenția și către metode de învățare automată care ar avea capacitatea să prezică funcția de transmisie pe un interval ales. Rețelele neuronale convoluționale au ieșit în evidență, deoarece sunt folosite în mod activ în procesarea de imagini și stau la baza tuturor algoritmilor de clasificare de imagini sau de translație între o imagine de input și de output. Pentru sistemul bidimensional prin care am descris tranzistorul, datele de intrare sunt hărțile de energie potențială obținute prin rezolvarea ecuației Poisson. Am considerat întregul profil de potențial electrostatic

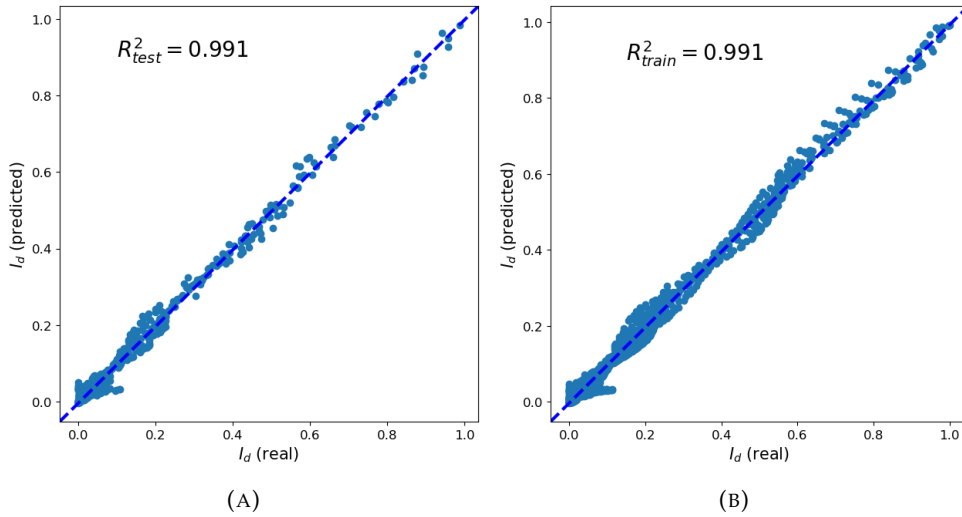


FIGURE 6.12: Analiza grafica a performantei rețelelor neuronale artificiale pentru prezicerea curentului de drena. Pe abscisa sunt reprezentate datele reale, obținute din simulări, iar pe ordonata sunt datele prezise de model.

al nanostructurii, inclusiv regiunile izolatoare ("top gate insulator" și "bottom gate insulator"). În comparație, în simulările realizate cu matricea R și KWANT, a fost luată în calcul doar zona de împrăștiere, compusă din cele două canale separate de bariera de potențial. Ecuația Poisson a fost rezolvată cu un grid de 0.1, pentru a scădea timpul de calcul, iar ulterior imaginile au fost reduse la un grid de $60/cross60$, în scopul simplificării procesului de antrenare al modelului. Datele de ieșire au fost funcțiile de transmisie în intervalul $[0.2, 0.4]$ eV. Deoarece valorile transmisiei sunt într-un interval de $[10^{-4}, 10^{-8}]$ pentru nanotranzistorul cu bariera de 1 eV, am luat logaritmul în baza 10 al valorilor, înmulțit cu (-1) pentru a avea un set de valori pozitive de prezis. De asemenea, transmisia a fost mediata pe intervale de 10^{-3} eV. Structura arhitecturii modelului bazat pe CNNs este prezentată în tabelul ??, unde sunt specificate și dimensiunile vectorilor de input și output, structura straturilor convoluționale și a numărului de neuroni din straturile intermediare ale rețelei neuronale clasice, precum și funcțiile de activare. Rețeaua a fost antrenată pentru 6000 de epoci, cu un batch size de 32, iar optimizatorul ales a fost ADAM, cu o rată de învățare de 10^{-4} . Am avut în total un set de 5000 de date, dintre care 10% au fost folosite pentru test și 20% pentru validare. Pentru a evalua performanța modelului, am folosit coeficientul de determinare R^2 și am obținut o valoare de 92% (Figura ??). Câteva dintre rezultatele obținute pentru setul de date de test pot fi vizualizate în Figura 6.13.

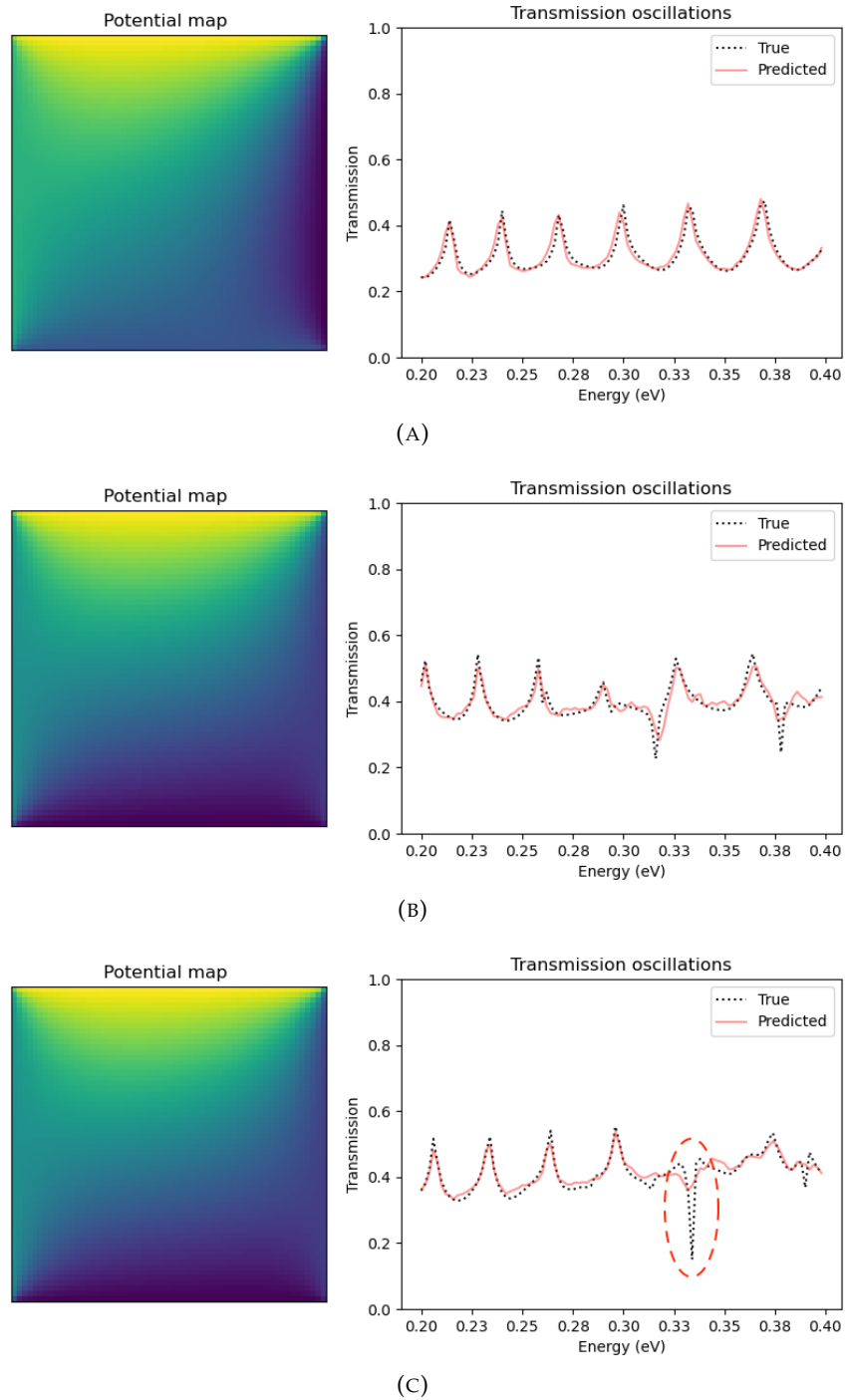


FIGURE 6.13: Serie de rezultate reprezentative în urma antrenării modelului CNN. Pe coloana din stânga figurează harta de potențial electrostatic, iar în dreapta sunt funcțiile de transmisie reale și prezise. Se observă că erorile în predicție apar în regiunile de energie în care transmisia prezintă variații bruște sub forma de *peak*-uri înguste (figura c)).

7

Dispozitive penru sortarea stărilor cuantice

7.1 Sorter cuantic probabilistic

Sistemul pe care îl propunem aici ca o versiune concretă a sorterului cuantic este definit ca un sistem mezosopic 2D multi-terminal, având un singur terminal de intrare și patru terminale de ieșire. Particula incidentă este descrisă, din punct de vedere cuantic, prin două numere cuantice: spinul și impulsul transversal. Astfel, starea incidentă poate fi descrisă ca o superpoziție de $|k_\nu \sigma_z\rangle$, unde $\nu = 1, 2$ și $\sigma_z = \uparrow, \downarrow$.

În referințele [15, 16], sorterul cuantic selectează particulele caracterizate de proprietatea $|s\rangle$ a sistemului cuantic și le direcționează către același port de ieșire, denumit $|s\rangle$. În cazul dispozitivului de tip quantum sorter propus de noi, lucrăm exclusiv în cadrul uni-particulă și presupunem că, într-un context experimental, se injectează secvențial mai mulți electroni cu aceeași energie, dar cu valori diferite pentru modurile transversale și spin. După repetarea acestui proces, fiecare dintre cele patru stări posibile de intrare ale particulei incidente este transmisă către un terminal de ieșire diferit. Obiectivul nostru în acest studiu este să definim un sistem care funcționează ca un sorter cuantic probabilistic într-un mod concret, prin alegerea unui Hamiltonian în zona de împrăștiere care permite dispozitivului să separe stările proprii în mai multe porturi de ieșire. În acest scop, identificarea unei stări cuantice nu implică măsurarea unei observabile, ci detectarea unei particule într-un anumit terminal de ieșire. Deși dispozitivul propus de noi nu este reversibil, menținem denumirea de „sorter cuantic”, deoarece descrie cel mai bine scopul dispozitivului propus.

Dispozitivul pe care îl propunem este definit pe o regiune de formă pătrată cu dimensiunile $L_x = L_y = L = 2d = 1\mu\text{m}$, care este împărțită în trei regiuni: continuarea celor două contacte (stânga, $x < -3d/4$ și dreapta, $x > 3d/4$), și regiunea activă din centru. Zonele de contact din regiunea de împrăștiere au caracteristicile contactelor ideale semi-infinite. Contactele sunt definite prin gropi cuantice cu potențial constant de lățime $w_l = 3d/10 = 150\text{ nm}$, obținute prin excluderea unor domenii dintr-o dintr-o barieră de potențial de înălțime $V_b = 100\text{ meV}$, iar distanța dintre două contacte consecutive este $w_s = d/5 = 100\text{ nm}$. Realizăm simulările pe un material cu masă efectivă mică (anume InSb, cu $m^* = 0.023m_0$) pentru a crește separarea dintre nivelele cuantice.

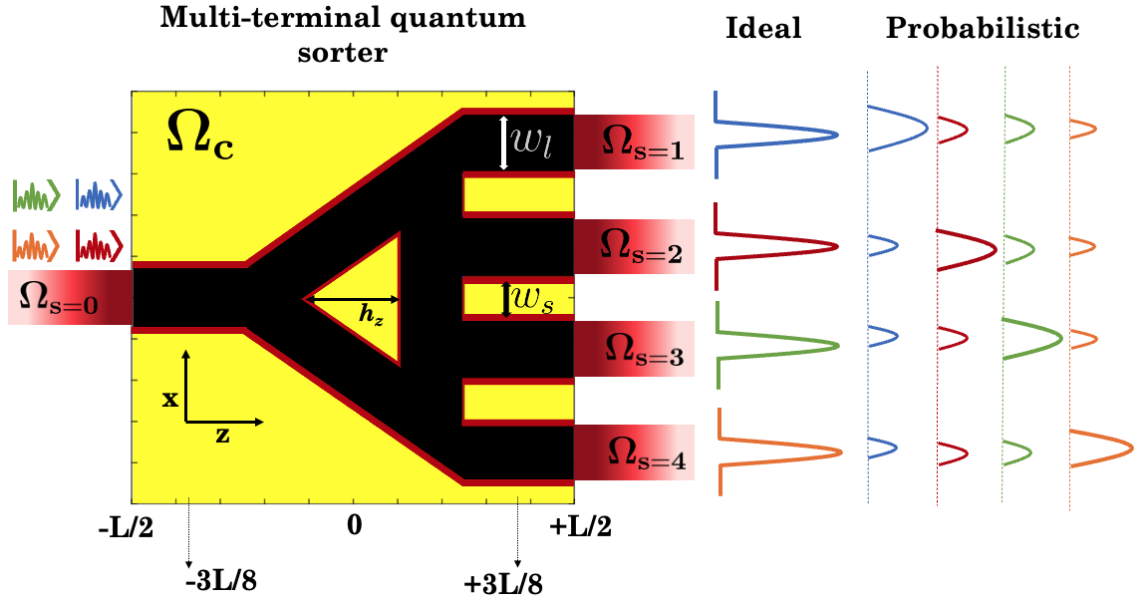


FIGURE 7.1: Modelul de sorter cuantic multi-terminal și o reprezentare calitativă a probabilităților de transmisie în cazurile ideal și probabilistic. Ideal, fiecare mod de intrare este transmis într-un terminal de ieșire separat.

În regiunea activă, o barieră de potențial de formă triunghiulară acționează ca un centru de împrăștiere care ghidează electronii către contactele de ieșire. Dimensiunile triunghiului central și înălțimea barierei sunt parametri pe care îi reglăm pentru a găsi configurația ideală a sorterului cuantic. Forma acestui centru de împrăștiere poate fi, de asemenea, modificată cu ajutorul tensiunilor aplicate pe contactele superioare într-un setup experimental. Pentru o separare clară între componentele spinului "up" și "down", considerăm o barieră magnetică deasupra contactelor de ieșire, care induce o despicare Zeeman de $V_Z = \pm 100$ meV. Se compensează ulterior cu un potențial electrostatic egal cu jumătate din despicarea Zeeman. Astfel, nivelurile de energie corespunzătoare uneia dintre componentele de spin vor rămâne neschimbate, în timp ce pentru cealaltă componentă de spin, nivelurile de energie se vor deplasa către energii mai mari, conducând esențialmente la o limitare a componentei respective de spin.

Transportul de sarcină și spin în sistem este descris în cadrul metodei R-matrix, care a fost detaliată în teză. Acest formalism are ca scop un calcul eficient al funcției de transmisie pentru o gamă largă de energii, iar implementarea sa numerică permite și paralelizarea codului (folosind biblioteca MPI), astfel încât putem studia multiple configurații ale sistemului. Metoda permite ușor includerea interacției spin-orbită de tip Rashba, a câmpurilor magnetice și modificarea potențialului în regiunea de împrăștiere. În pasul final, sunt calculate matricele R și S, care conduc la funcția de transmisie prin sistem la orice energie aleasă.

Ecuția Schrödinger independentă de timp care definește problema de împrăștiere în întregul sistem este:

$$\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_0 \cup \Omega_s$$

cu condiții de frontieră asimptotice pentru canalele de intrare/ieșire. Hamiltonianul în regiunea de împrăștiere include potențialul de împrăștiere și termenul de cuplaj spin-orbită (Rashba SOI):

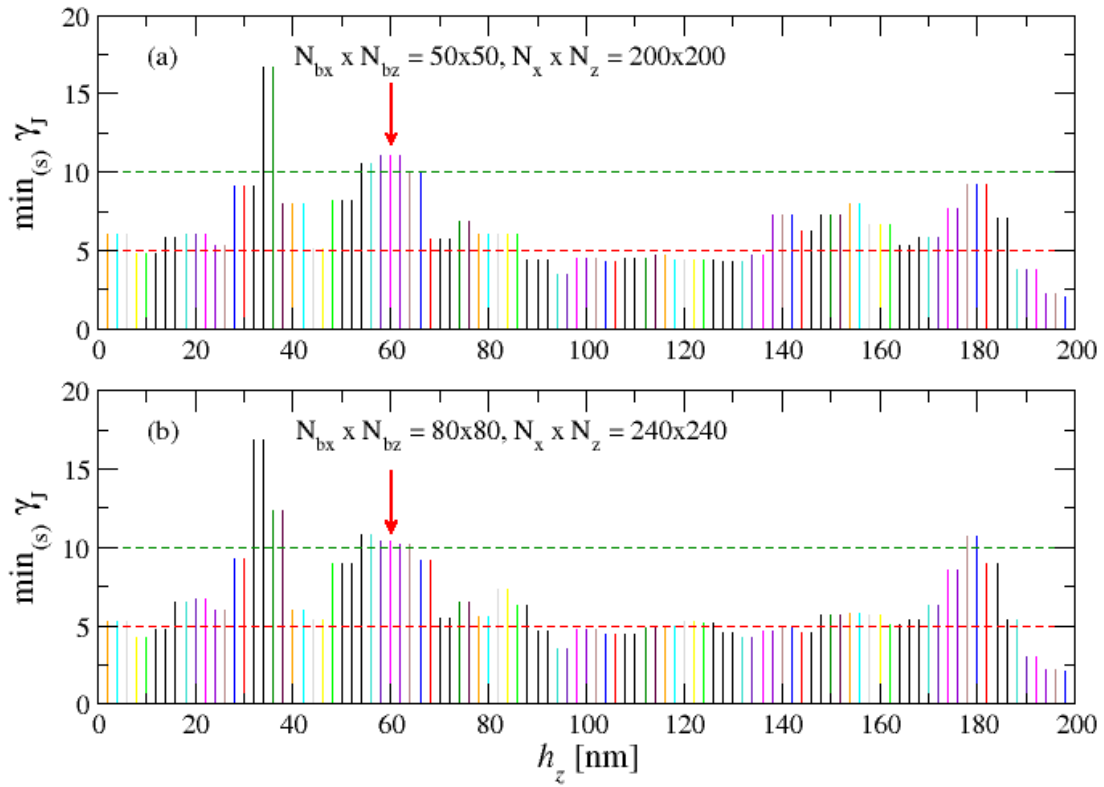


FIGURE 7.2: Raporturile minime pentru serie de $N_{\text{scat}} = 100$ de configurații, diferențiate prin parametrul h_z . Rezultatele sunt date pentru două seturi diferite de dimensiuni ale bazei: (a) $N_{bx} \times N_{bz} = 50 \times 50$, $N_x \times N_z = 200 \times 200$. Rezultatele sunt similare, prin urmare calculele converg. Săgeata roșie marchează sistemul de referință, care duce la un sorter cuantic probabilistic foarte eficient (obținut pentru $h_z = 60$ nm).

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r} \in \Omega_0; \mathcal{P})$$

unde $\mathcal{P}$ reprezintă un set de parametri ajustabili legați de geometria potențialului de împrăștiere și de înălțimea barierei centrale pe care o induce. Prin varierea acestor parametri, căutăm o configurație ideală de sorter cuantic.

Hamiltonianul pentru contactul de intrare este:

$$\mathcal{H}_{s=0} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{s=0}(\mathbf{r} \in \Omega_s), \quad (7.1)$$

unde $V_s(\mathbf{r} \in \Omega_s)$ este potențialul de confinare în contacte, având o componentă longitudinală translational invariantă în direcția transportului și o componentă transversală care dă naștere modurilor transversale în contacte.

În contactele de ieșire, am adăugat termenul Zeeman pentru a facilita separarea diferitelor stări de spin:

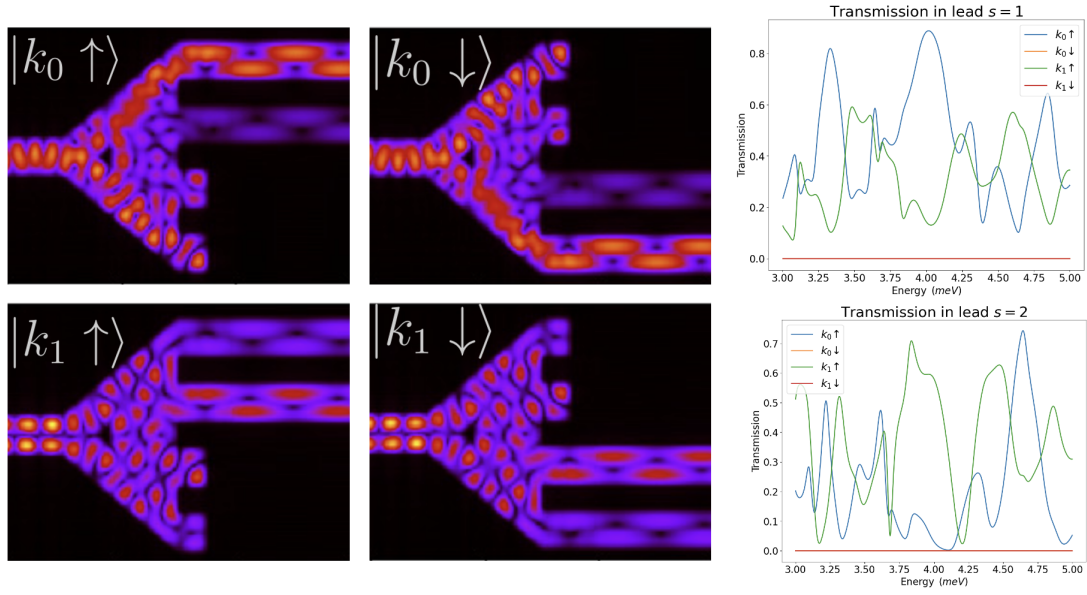


FIGURE 7.3: Stânga: Funcțiile de împrăștiere. Dreapta: Funcțiile de transmisie in terminalele 1 si 2.

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{s=1,2} &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \mathbb{I}_2 + V_{s=1,2}(\mathbf{r} \in \Omega_s) \mathbb{I}_2 + \frac{E_z \sigma_z}{2} + \frac{E_z \sigma_0}{2} \\ \mathcal{H}_{s=3,4} &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \mathbb{I}_2 + V_{s=3,4}(\mathbf{r} \in \Omega_s) \mathbb{I}_2 - \frac{E_z \sigma_z}{2} + \frac{E_z \sigma_0}{2},\end{aligned}\quad (7.2)$$

unde $E_z = 50 \cdot 10^{-3}$ eV.

Sistemul de tip sorter cuantic poate fi analizat si prin modele bazate pe formalismul electronilor stransi legati. Hamiltonianul de tip tight binding poate fi scris astfel:

$$\mathbf{H} = \sum_{\langle ij \rangle, \sigma \sigma'} t^{\sigma \sigma'} \sigma_0 |i, \sigma\rangle \langle j, \sigma'| + \sum_{i \in S, \sigma \sigma'} V_i \sigma_0 |i, \sigma\rangle \langle i, \sigma'| + \sum_{i \in Z, \sigma \sigma'} \frac{g \mu_B}{2} \mathbf{B} \sigma |i, \sigma\rangle \langle i', \sigma'|, \quad (7.3)$$

unde suma peste $\langle ij \rangle$ este pentru vecinii de ordinul I, (σ_0, σ) denota matricea identitate si vectorul Pauli ($\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$) si $\mathbf{B}$ este campul magnetic extern aplicat in plan. S denota intreaga regiune de imprastiere iar Z acopera doar regiunea in care efectul Zeeman este luat in considerare.

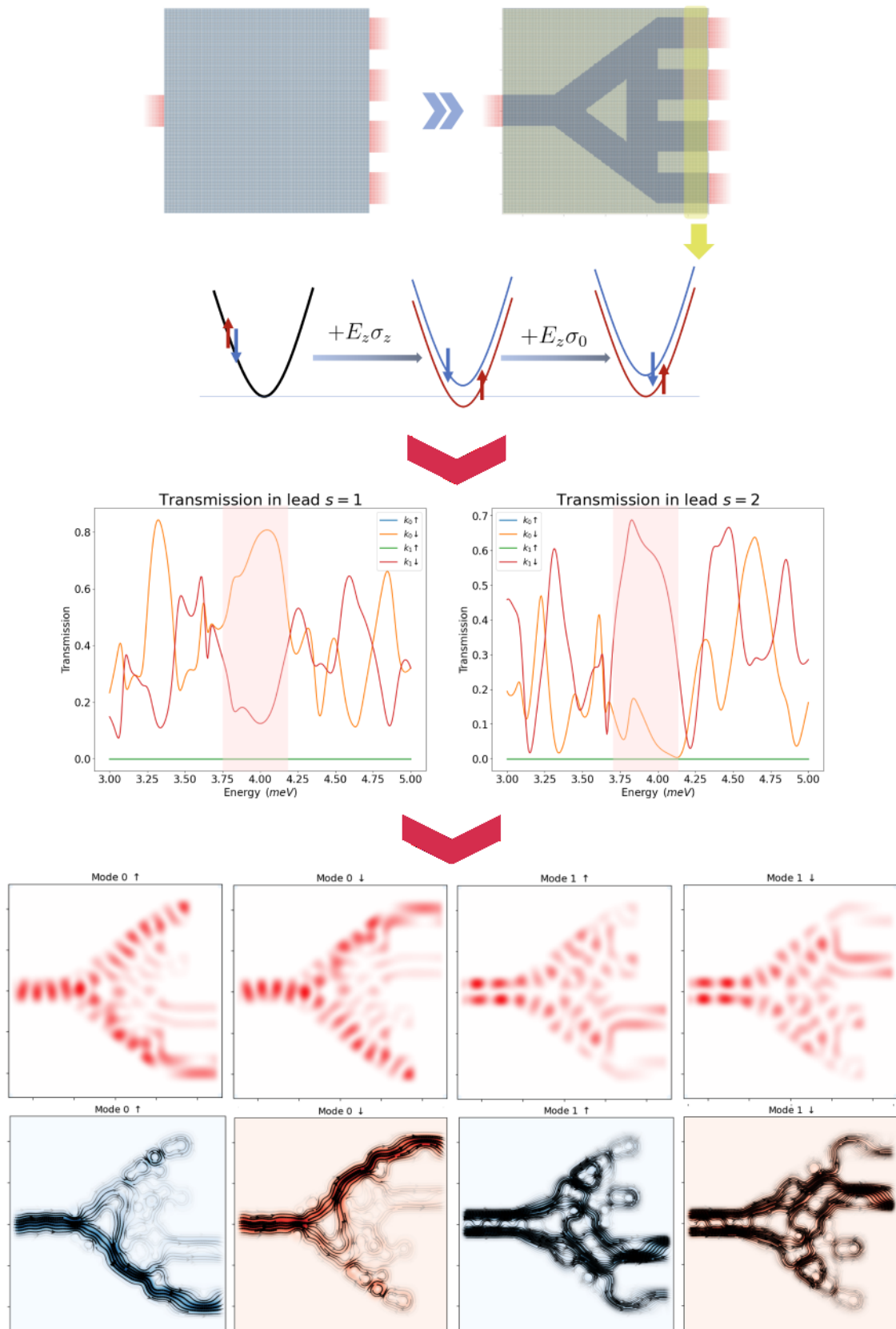


FIGURE 7.4: Abstract grafic al rezultatelor simulărilor cu modelul tight binding pentru sorter-ul cuantic probabilistic.

7.2 Sorter cuantic topologic

Procesarea informației în dispozitivele electronice se realizează utilizând arhitectura CMOS (complementary metal oxide semiconductor), însă provocările asociate scalării ar putea deveni insurmontabile din cauza constrângerilor fizice. Atât cercetătorii, cât și inginerii caută implementări de dispozitive care să stabilească un nou standard pentru calculul eficient și cu consum redus de energie, iar interesul pentru noi categorii de materiale a crescut exponențial în ultimii ani. Din această perspectivă, materialele topologice sunt promițătoare datorită proprietăților fizice discutate în detaliu în teza. Aceste proprietăți care fac izolatorii topologici (TIs) potrivite pentru tranzistori cu consum energetic redus, dispozitive care funcționează ca filtru de spin și arhitecturi pentru calcul cuantic deschid calea către o revoluție tehnologică „post-CMOS” [17].

În secțiunea anterioară, am simulat o gamă largă de sisteme candidate și am valorificat pe deplin resursele computaționale disponibile pentru a identifica o configurație ideală pentru prototipul dispozitivului de sortare a stărilor cuantice. Aceasta secțiune este dedicată exclusiv simulărilor sistemelor hibride triviale și topologice, modelate prin intermediul Hamiltonianului BHZ.

Simulările de transport cuantic au fost realizate utilizând pachetul Python Kwant. Sistemul bidimensional a fost creat într-un mod similar cu sorterul cuantic probabilistic prezentat în secțiunea precedentă, dar folosind o bibliotecă cunoscută sub denumirea de *kwant.continuum*, care facilitează discretizarea hamiltonianului. Această bibliotecă permite utilizatorului să scrie hamiltonianul sub forma unei expresii simbolice, să specifice simetria rețelei și constanta rețelei care definește gridul, iar discretizarea este efectuată automat. În cazul nostru, am utilizat un hamiltonian BHZ dependent de poziție pentru a descrie atât regiunile triviale, cât și cele topologice ale dispozitivului.

Hamiltonianul BHZ este implementat în codul Python după cum urmează:

```
# BHZ hamiltonian

bhz_continuum = '''
    + mu * kron(sigma_0, sigma_0)
    + M * kron(sigma_0, sigma_z)
    - B * (k_x**2 + k_y**2) * kron(sigma_0, sigma_z)
    - D * (k_x**2 + k_y**2) * kron(sigma_0, sigma_0)
    + A * k_x * kron(sigma_z, sigma_x)
    - A * k_y * kron(sigma_0, sigma_y)
    ,''
```

În forma matriceală:

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\hat{k}} + M(\hat{k}) & A\hat{k}_- & 0 & 0 \\ A\hat{k}_+ & \varepsilon_{\hat{k}} - M(\hat{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\hat{k}} + M(\hat{k}) & -A\hat{k}_+ \\ 0 & 0 & -A\hat{k}_- & \varepsilon_{\hat{k}} - M(\hat{k}) \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

unde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = C - D(k_x^2 + k_y^2)$, $M(\mathbf{k}) = M(x, y) - B(k_x^2 + k_y^2)$, $\mathbf{k}_{\pm} = k_x \pm ik_y$, și A, B, D , și M sunt parametrii care descriu structura e benzi a heterostructurii de HgTe/CdTe. Considerăm următoarele valori: $A = 364.5 \text{ meV} \cdot \text{nm}$, $B = -686 \text{ meV} \cdot \text{nm}^2$, $D = 0$, $C = 0$ and $M = +10 \text{ meV}$. Fazele topologică se diferențiază de cea triviale prin semnul parametrului M , care, în cazul structurilor de HgTe/CdTe, este determinat de lățimea heterostructurii. De obicei, parametrul D este $-512 \text{ meV} \cdot \text{nm}^2$,

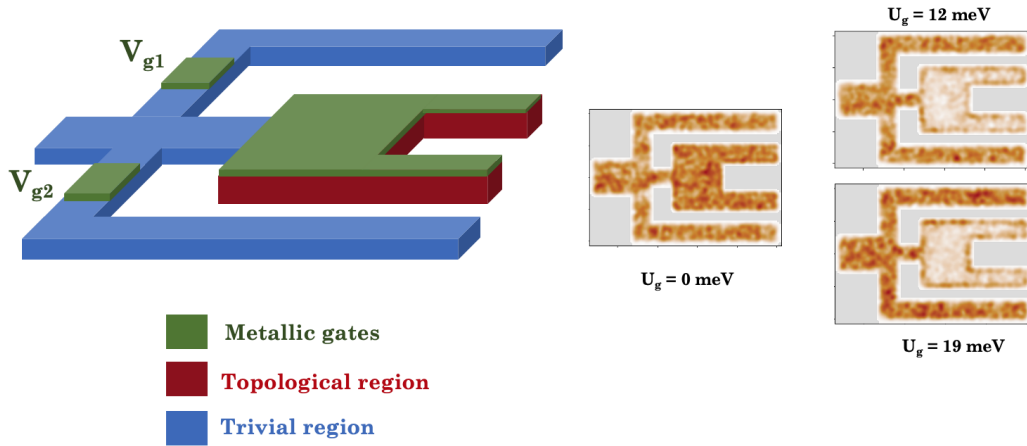


FIGURE 7.5: Dreapta: O schemă 3D a sorter-ului cuantic topologic. Stânga: Densitatea locală de stări în trei cazuri: (a) $U_g = 0$ meV, (b) $U_g = 12$, meV, (c) $U_g = 19$ meV, cu densitatea locală de stări în regiunea centrală. Se observă că pentru $U_g \in [12, 19]$ meV transportul se realizează prin stări de margine, caracteristice izolatorilor topologici.

dar considerăm $D = 0$ pentru a obține o structură de benzi simetrică în jurul valorii $E_F = 0$. Pentru a lua în considerare efectul porții electrostatice, trebuie adăugat un termen diagonal în matricea Hamiltonianului:

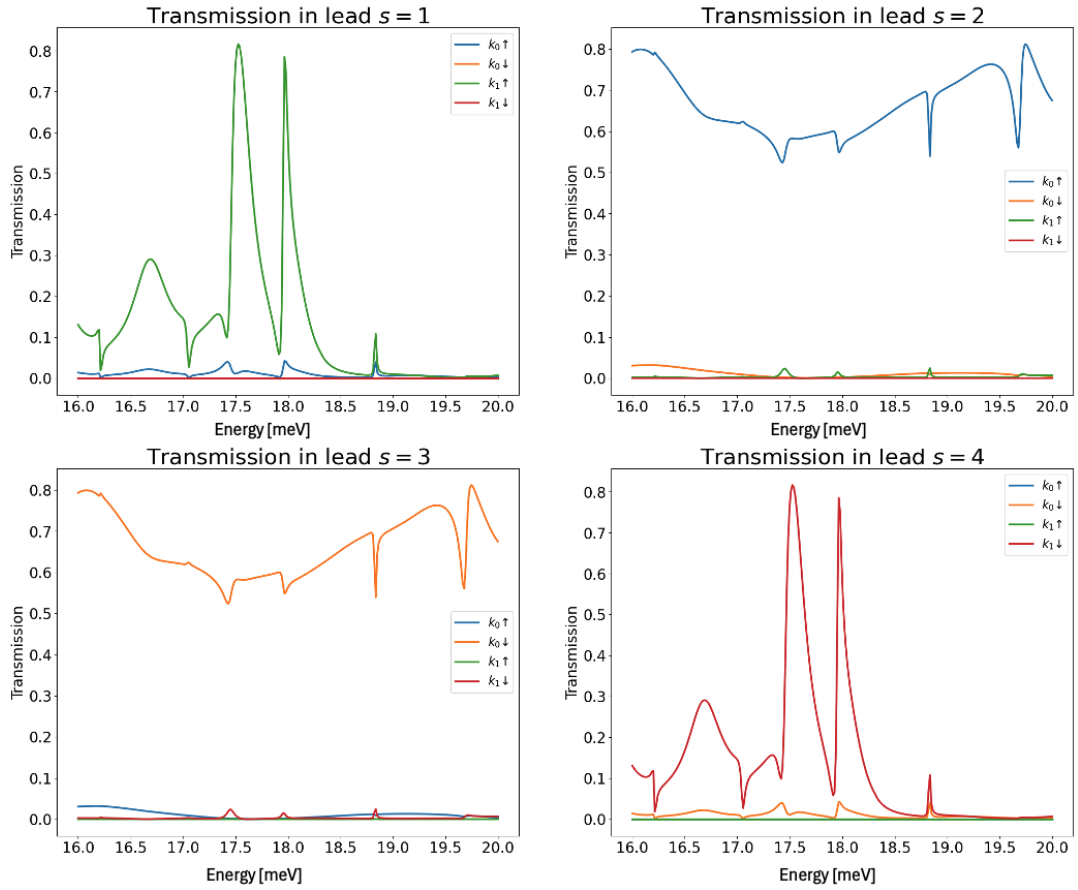
$$H = H_{\text{BHZ}} + eV_g I_{4 \times 4}$$

$$\text{where } eV_g I_{4 \times 4} = \begin{pmatrix} eV_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & eV_g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & eV_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & eV_g \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

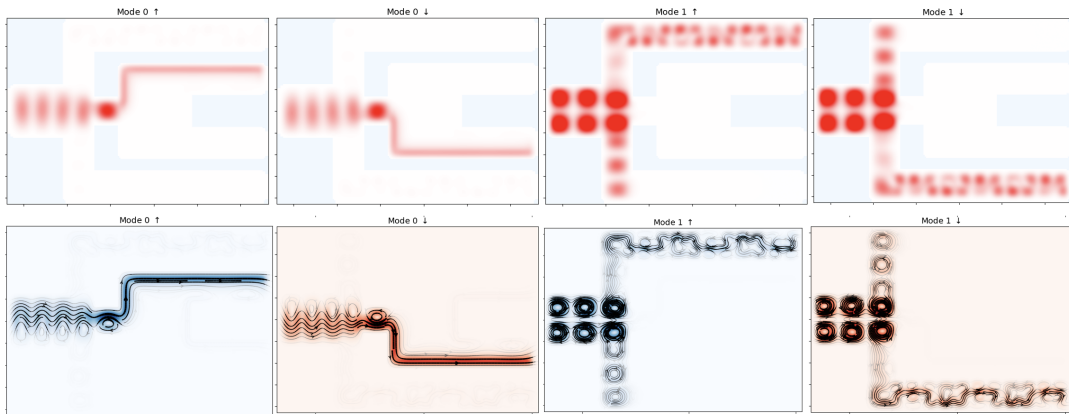
Funcția de undă într-un sistem TI descris de modelul BHZ cu patru benzi este un spinor cu patru componente $\Psi(x, y)$. Problema de valori proprii este discretizată pe o rețea pătrată cu o constantă a , care definește distanța dintre nodurile gridului în direcțiile x și y . Alegerea constantei rețelei reprezintă un compromis între costul computațional al unui grid mai fin și acuratețea pe care aceasta o oferă. Hamiltonianul discret poate fi scris astfel:

$$\begin{aligned} H_{n,n}^{m,m} &= \left[M\sigma_z - 4\frac{B\sigma_z}{a^2} \right], \\ H_{n,n+1}^{m,m} &= \left[\frac{B\sigma_z}{a^2} + \frac{iA\sigma_x}{2a} \right], \\ H_{n,n}^{m,m+1} &= \left[\frac{B\sigma_z}{a^2} - \frac{iA\sigma_y}{2a} \right], \\ H_{n,n-1}^{m,m} &= \left(H_{n,n+1}^{m,m} \right)^\dagger, \\ H_{n,n}^{m,m-1} &= \left(H_{n,n}^{m,m+1} \right)^\dagger. \end{aligned} \quad (7.6)$$

unde $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ reprezintă matricile Pauli. Procedura de discretizare utilizată de biblioteca Kwant a fost detaliată în cadrul tezei.



(A)



(B)

FIGURE 7.6: (A) Funcțiile de transmisie pentru sortorul propus în 7.5. (B) Modulul pătrat al funcțiilor de undă și densitățile de curent pentru sortorul propus în Figura 7.5

8

Sumar si concluzii

Prima parte a tezei s-a concentrat pe introducerea conceptelor teoretice fundamentale utilizate în transportul cuantic și a evidențiat principalele metode și programe de simulare pe care le-am utilizat. Metodele computaționale utilizate în această teză au fost prezentate în detaliu în primele capitole, de la teoria funcționalei de densitate, până la metoda matricii R . Având în vedere că în această lucrare am combinat instrumentele convenționale de simulare cu tehnici de învățare automată, am introdus și metodele ML utilizate frecvent, bazate pe rețele neuronale artificiale. Pe parcursul părții teoretice a tezei, au fost prezentate și aplicații ale metodelor discutate. Pentru a exemplifica utilizarea unor astfel de instrumente de simulare și tehnici ML, am prezentat rezultate originale obținute prin colaborarea cu grupul de fizică computațională de la IFIN-HH.

A doua parte a tezei introduce în detaliu cercetările realizate privind transportul coerent în sisteme cuantice de dimensionalitate redusă, concentrându-se pe dispozitive cu potențial în domeniul procesării informației cuantice. Rezultatele sunt structurate astfel încât să evidențieze procesul de cercetare, începând cu sisteme multi-particula simple până la configurații multi-terminal cu potențial ridicat de integrare în dispozitive spintronice și o nouă clasă de nanotranzistori cu consum energetic redus.

În primul rând, am revizuit succint rezultatele originale din [11], unde am prezentat o extindere a formalismului matricii R către probleme de împrăștiere bi-particula. Apoi, ne-am concentrat pe cercetări orientate către partea computațională care vizează sisteme bidimensionale. Am început studiul dispozitivelor de dimensionalitate redusă rezolvând o clasă largă de probleme cu doi electroni [12]. Utilizând tehnica diagonalizării exacte, am rezolvat problema bi-particula cu precizie ridicată și am obținut densitățile de sarcină și spin, alături de spectrele de energie. Cuplate cu algoritmi ML bazați pe rețele neuronale artificiale, abordarea explorată în [12] poate asista procesul de proiectare a unor dispozitive cuantice de dimensionalitate redusă. Metodele pot fi extinse la sisteme unde calculul exhaustiv al stărilor multi-particula este numeric imposibil. În plus, am investigat sisteme periodice și am reprodus structura de benzi a rețelelor Lieb. Aceasta indică o direcție către dispozitive reconfigurabile. Am arătat că, modificând forma gropilor de potențial, structura de benzi poate fi ajustată într-o rețea de tip Kagome.

De asemenea, am explorat dispozitive 2D cu forme neuromorfe, descrise în cadrul formalismului multi-particula, cuplate cu abordări de învățare automata bazate pe cGANs [13]. Am propus un dispozitiv bidimensional reconfigurabil, potrivit pentru optimizarea procesului de proiectare al sistemelor neuromorfe și care funcționează ca un sistem multi-terminal reprogramabil pentru transferul de sarcină între regiștri de puncte cuantice.

În continuare, am studiat proprietățile de transport ale nanotranzistorilor cu efect de câmp, cu tunelare rezonantă laterală între două canale de conducție paralele. Au fost puse în evidență peak-uri de tunelare rezonantă înguste în jurul tensiunii de control zero, care permit comutarea curentului de drena cu tensiuni de control mici și deschid calea către aplicații cu consum redus de energie. Rezultatele simulărilor, realizate în cadrul formalismelor matriciei R și modelului de tip *tight-binding* s-au aliniat cu rezultatele teoretice prezentate în detaliu în [14].

În ultimul capitol al secțiunii de rezultate, am discutat un sistem mezosopic bidimensional care funcționează ca un sorter cuantic probabilistic. Prin alegerea unui Hamiltonian de împrăștiere adecvat, dispozitivul separă stările proprii în multiple porturi de ieșire. Pentru a calcula funcțiile de transmisie per mod și spin, am utilizat formalismul matriciei R și am comparat rezultatele cu simulările Kwant. Stările de intrare sunt qudiți cu patru grade de libertate, definite de impulsul transversal și componenta spinului. Un parametru geometric ajustabil definește potențialul de împrăștiere, iar QS a fost optimizat în funcție de acest parametru. Considerăm că această abordare poate fi utilizată pentru realizarea practică a unui astfel de dispozitiv. Am extins această propunere la sisteme exotice, bazate pe izolatori topologici bidimensionali descriși în cadrul modelului BHZ. Un astfel de sorter cuantic topologic oferă o separare și mai bună între mod și spin și poate funcționa ca un filtru de spin aproape ideal.

Subiectele de cercetare introduse în această teză își propun să ofere perspective noi asupra unui paradigme eficiente de modelare a dispozitivelor bidimensionale, care exploatează metode numerice complementare de transport cuantic în tandem cu tehnici de învățare automată. Manipularea spinului și sarcinii, controlul funcției de undă electronice și o înțelegere profundă a fenomenelor cuantice care guvernează transportul în sisteme de dimensionalitate redusă sunt esențiale pentru proiectarea inversă eficientă a dispozitivelor. Considerăm că abordarea pe care am evidențiat-o în această teză, care integrează metode computaționale avansate cu tehnici de învățare automată pentru a obține noi perspective fizice, ar putea conduce la proiectarea sistemelor mezosopice cu multiple aplicații în tehnologia informației cuantice.

Bibliography

- [1] Walter Kohn. “An essay on condensed matter physics in the twentieth century”. *Reviews of Modern Physics* 71.2 (1999), S59.
- [2] Edwin Bedolla, Luis Carlos Padierna, and Ramón Castaneda-Priego. “Machine learning for condensed matter physics”. *Journal of Physics: Condensed Matter* 33.5 (2020), 053001.
- [3] P. Hohenberg and W. Kohn. “Inhomogeneous Electron Gas”. *Phys. Rev.* 136 (3B Nov. 1964), B864–B871. DOI: [10.1103/PhysRev.136.B864](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>.
- [4] W. Kohn and L. J. Sham. “Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects”. *Phys. Rev.* 140 (4A Nov. 1965), A1133–A1138. DOI: [10.1103/PhysRev.140.A1133](https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>.
- [5] McCulloch W.S. and Pitts W. “A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity”. *The bulletin of mathematical biophysics* 5 (1943), 115–133. DOI: [10.1007/BF02478259](https://doi.org/10.1007/BF02478259).
- [6] ROSENBLATT F. “The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain”. *Psychol Rev.* 65 (1958), 386–408. DOI: [doi: 10.1037/h0042519](https://doi.org/10.1037/h0042519).
- [7] MIT. *Introduction to Machine Learning*. 2024. URL: https://introml.mit.edu/_static/spring24/LectureNotes/6_390_lecture_notes_spring24.pdf.
- [8] Mehdi Mirza and Simon Osindero. *Conditional Generative Adversarial Nets*. 2014. arXiv: [1411.1784](https://arxiv.org/abs/1411.1784) [cs.LG]. URL: <https://arxiv.org/abs/1411.1784>.
- [9] Phillip Isola, Jun-Yan Zhu, Tinghui Zhou, and Alexei A. Efros. *Image-to-Image Translation with Conditional Adversarial Networks*. 2018. arXiv: [1611.07004](https://arxiv.org/abs/1611.07004) [cs.CV]. URL: <https://arxiv.org/abs/1611.07004>.
- [10] Calin-Andrei Pantis-Simut, Amanda Teodora Preda, Lucian Ion, Andrei Manolescu, and George Alexandru Nemnes. “Mapping confinement potentials and charge densities of interacting quantum systems using conditional generative adversarial networks”. *Machine Learning: Science and Technology* 4.2 (May 2023), 025023. DOI: [10.1088/2632-2153/acd6d8](https://doi.org/10.1088/2632-2153/acd6d8). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/2632-2153/acd6d8>.
- [11] Dragoş-Victor Anghel, Amanda Teodora Preda, and George Alexandru Nemnes. “The R-matrix formalism for two-particle scattering problems”. *Physics Letters A* 425 (2022), 127865. ISSN: 0375-9601. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127865>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960121007295>.

- [12] George Alexandru Nemnes, Tudor Luca Mitran, Amanda Teodora Preda, Iulia Ghiu, Mihai Marcu, and Andrei Manolescu. "Investigation of bi-particle states in gate-array-controlled quantum-dot systems aided by machine learning techniques". *Physica Scripta* 97 (2022), 055813. DOI: [10.1088/1402-4896/ac5ff6](https://doi.org/10.1088/1402-4896/ac5ff6). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/ac5ff6>.
- [13] Amanda Teodora Preda, Calin-Andrei Pantis-Simut, Mihai Marcu, Dragos-Victor Anghel, Alaa Allosh, Lucian Ion, Andrei Manolescu, and George Alexandru Nemnes. "Design of Nanoscale Quantum Interconnects Aided by Conditional Generative Adversarial Networks". *Applied Sciences* 14.3 (2024). ISSN: 2076-3417. URL: <https://www.mdpi.com/2076-3417/14/3/1111>.
- [14] Ulrich Wulf, Amanda Teodora Preda, and George Alexandru Nemnes. "Transport in a Two-Channel Nanotransistor Device with Lateral Resonant Tunneling". *Micromachines* 15.10 (2024). ISSN: 2072-666X. DOI: [10.3390/mi15101270](https://doi.org/10.3390/mi15101270). URL: <https://www.mdpi.com/2072-666X/15/10/1270>.
- [15] Iulia Ghiu. "Simultaneous sorting many quDits using different input ports". *Quantum Information Processing* 18.9 (2019), 285. DOI: [10.1007/s11128-019-2395-2](https://doi.org/10.1007/s11128-019-2395-2). URL: <https://doi.org/10.1007/s11128-019-2395-2>.
- [16] Radu Ionicioiu. "Sorting quantum systems efficiently". *Scientific Reports* 6.1 (2016), 25356. DOI: [10.1038/srep25356](https://doi.org/10.1038/srep25356). URL: <https://doi.org/10.1038/srep25356>.
- [17] Matthew J Gilbert. "Topological electronics". *Communications Physics* 4.1 (2021), 70.

Listă de abrevieri

2D	Two-dimensional
3D	Three-dimensional
2DEG	Two-dimensional electron gas
AIMD	<i>Ab initio</i> molecular dynamics
ANN	Artificial Neural Networks
BHZ	Bernevig-Hughes-Zhang
CNN	Convolutional Neural Networks
DFT	Density functional theory
ED	Exact Diagonalization
GAN	Generative Adversarial Networks
cGAN	Conditional Generative Adversarial Networks
HF	Hartree-Fock
HK	Hoheberg-Kohn
KS	Kohn-Sham
LB	Landauer-Buttiker
ML	Machine Learning
NEGF	Nonequilibrium Green's functions formalism
NN	Nearest Neighbors
NNN	Next Nearest Neighbors
QD	Quantum Dot
QHE	Quantum Hall Effect
QI	Quantum Interconnect
STM	Scanning Tunneling Microscope
SQHE	Spin Quantum Hall Effect
TB	Tight binding
TCM	Tunneling Current Map
TI	Topological Insulator
WFM	Wavefunction matching

Listă de publicații

1. D.V. Anghel, [A. T. Preda](#), G. A. Nemnes. "The R-matrix formalism for two-particle scattering problems". *Physics Letters A* 425 , 127865 (2022). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127865>. **AIS:0.469 IF: 2.6**
2. G. A. Nemnes and T. L. Mitran and [A. T. Preda](#) and I. Ghiu and M. Marcu and A. Manolescu. "Investigation of bi-particle states in gate-array-controlled quantum-dot systems aided by machine learning techniques". *Physica Scripta* 055813, 055813 (2022). DOI: <https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/ac5ff6>. **AIS:0.465 IF: 2.9**
3. C. A. Pantis-Simut and [A. T. Preda](#) and N. Filipoiu and A. Allosh, and G. A. Nemnes. "Electric-Field Control in Phosphorene-Based Heterostructures". *Nanomaterials* 12, 3650(2022) <https://www.mdpi.com/2079-4991/12/20/3650>. **AIS:0.712 IF: 5.3**
4. C. A. Pantis-Simut and [A. T. Preda](#) and L. Ion and A. Manolescu and G. A. Nemnes. "Mapping confinement potentials and charge densities of interacting quantum systems using conditional generative adversarial networks". *Machine Learning: Science and Technology* 4, 025023 (2023) <https://dx.doi.org/10.1088/2632-2153/acd6d8> **AIS: 2.148 IF: 6.8**
5. [A. T. Preda](#) and C. A. Pantis-Simut and M. Marcu and D. V. Anghel and A. Allosh and L. Ion and A. Manolescu and G. A. Nemnes. "Design of Nanoscale Quantum Interconnects Aided by Conditional Generative Adversarial Networks". *Applied Sciences* 14, 1111 (2024). <https://www.mdpi.com/2076-3417/14/3/1111>. **AIS: 0.428 IF: 2.5**
6. M. Cosinschi and [A. T. Preda](#) and C. A. Pantis-Simut and N. Filipoiu and I. Ghiu, and M. Dulea, and L. Ion and A. Manolescu and G. A. Nemnes. "Collective dynamics of Ca atoms encapsulated in C60 endohedral fullerenes". *Phys. Chem. Chem. Phys.* 26, 22090-22098 (2024). <http://dx.doi.org/10.1039/D4CP01048E>. **AIS: 0.624 IF: 2.9**
7. U. Wulf and [A. T. Preda](#) and G. A. Nemnes. "Transport in a Two-Channel Nanotransistor Device with Lateral Resonant Tunneling". *Micromachines* 15, 1270 (2024). <https://www.mdpi.com/2072-666X/15/10/1270>. **AIS:0.490 IF:3.0**

Total AIS: **5.336**