

Współczesna rewolucja technologiczna napędzana jest przez miniaturowe struktury półprzewodnikowe działające w skali pojedynczych atomów. Kropki kwantowe, sztucznie wytwarzane nanostruktury zdolne do „uwięzienia” nośników ładunku, należą do najbardziej obiecujących elementów tej rewolucji. Omawiany projekt koncentruje się na nowej klasie kropek kwantowych: kropkach definiowanych fazą krystaliczną (crystal phase quantum dots, CPQDs), które powstają poprzez „przełączanie” pomiędzy dwiema strukturami krystalicznymi (tzw. blendy cynkowej oraz wurcytu) podczas wzrostu nanodrutów półprzewodnikowych. Tego rodzaju kropki powinny pozwolić na precyzyjne, z dokładnością do pojedynczych warstw atomowych, kontrolowanie (bądź też „sterowanie”) ich właściwościami oraz pozwalają na znacznie lepszą powtarzalność niż konwencjonalne kropki kwantowe, wytwarzane z materiałów o różnym składzie chemicznym.

Celem projektu jest stworzenie teoretycznych podstaw do zrozumienia zachowania tych CPQDs, szczególnie w obecności zewnętrznych pól elektrycznych i magnetycznych. Będziemy badać, w jaki sposób pola te wpływają na właściwości elektroniczne i optyczne CPQDs. W tym celu opracujemy zaawansowane narzędzia numeryczne, łączące symulacje atomistyczne, metody obliczeniowe fizyki wielu ciał oraz metody uczenia maszynowego. Jednym z kluczowych wyzwań będzie modelowanie systemów wielokropkowych, tzw. stosów kropek kwantowych, a więc struktur składających się z kilku wzajemnie sprzężonych kropek kwantowych oraz ocena ich potencjału jako podstawowych elementów przyszłych komputerów kwantowych.

Pomimo postępu w badaniach, wciąż brakuje modeli teoretycznych zdolnych do przewidywania zachowania CPQDs w obecności zewnętrznych pól. W szczególności nie wiadomo, jak skutecznie można manipulować stanami kwantowymi w tych strukturach za pomocą pola elektrycznego i magnetycznego. Nasze badania mają na celu odpowiedzieć na te pytania i dostarczyć narzędzi niezbędnych do projektowania kolejnej generacji urządzeń kwantowych.

W wyniku projektu powstaną zaawansowane modele oraz wykonane zostaną bardzo złożone symulacje komputerowe, które pozwolą przewidywać, jak układy wielu kropek kwantowe zachowują się w zróżnicowanych konfiguracjach przestrzennych. Wyniki te będą weryfikowane w oparciu o dane eksperymentalne, dzięki ścisłej współpracy z grupami badawczymi z Francji i Danii. Projekt może utorować drogę do skalowalnych źródeł „kwantowego światła”, czy także elementów składowych przyszłych komputerów kwantowych, a przede wszystkim do pogłębienia wiedzy o podstawowych zjawiskach fizycznych zachodzących w nanoskali.