

Raport de fază

**Contract nr. 120/16.09.2019 Calcul cuantic cu superpoziții de stări coerente /
Quantum Computation with Schrodinger cat states**

Cod depunere: PN-III-P3-ERA-NET Cofund Quantum Technologies QuCos

**Etapa 4: Elaborarea unui model teoretic pentru formarea Al granular în funcție de
temperatura și intensitatea fluxului de oxigen prezent la suprafața de Al**

Perioada: 01/01/2023 - 31/12/2023

Cuprins

1 Activități propuse în planul de realizare și rezultate estimate	1
1.1 Activități propuse	1
1.2 Rezultatele estimate ale etapei	1
1.3 Activități de diseminare	1
2 Descrierea stiintifica cu punerea in evidența a rezultatelor etapei anuale si gradul de realizare a obiectivelor	2
2.1 Setup computațional	2
2.2 Analiza geometrica	5
2.3 Analiza termodinamica	6
2.3.1 Energia de vibratie	6
2.3.2 Entropia vibrationala a sistemelor	8
2.3.3 Energia libera	8
2.4 Elaborarea unui model teoretic pentru formarea Al granular în funcție de temperatura și intensitatea fluxului de oxigen prezent la suprafața de Al	11
3 Activități suport	12
3.1 Întâlniri de lucru	12
3.2 Articole	12
3.3 Participari la conferinte si workshopuri	13
4 Rezumat executiv al activităților realizate în perioada de implementare	15

1 Activități propuse în planul de realizare și rezultate estimate

1.1 Activități propuse

In formatul initial al proiectului, aceasta etapa urma sa se desfasoare pe parcursul a doua luni, ianuarie si februarie 2023, iar data de 15 martie 2023 urma sa fie data de incheiere a proiectului. Din motive de forta majora (lockdown-ul a dus partenerii experimentali in imposibilitatea de a-si realiza experimentele), durata de implementare a fost prelungita cu aproximativ un an, pana in mai 2024. Aceasta prelungire s-a acordat fara finantare suplimentara, cu prelungirea activitatii de Diseminare pana la finalizarea proiectului.

In aceasta etapa, Etapa 4, este prevazuta o singura activitate stiintifica, **A4.2 Elaborarea unui model de determinare a contributiilor entropice la energia de formare pornind de la datele de dinamica moleculara ab-initio.**

1.2 Rezultatele estimate ale etapei

Rezultatele prevazute in Etapa 4 constau in calculul contributiilor entropice la energia libera si elaborarea unui model de determinare a contributiilor entropice la energia de formare.

1.3 Activități de diseminare

- Articole ISI: 1 articol publicat (Phys Rev B), 1 articol acceptat (Nature Physics), 1 articol in evaluare (Phys Rev B)
- Participări la evenimente stiintifice: 7 participari la conferinte (2 comunicari orale si 5 postere)
- Alte publicatii: 1 articol publicat in Market Watch (articul de coperta la numarul din septembrie 2023)
- Alte comunicari: 1 comunicare orala la meetingul RoNa din martie 2023
- Organizare evenimente: organizare QuantumSPEED impreuna cu Octagon Hub si Quarks Interactive cu ocazia World Quantum Day 2023
- Altele: o intalnire in format fizic; o vizita de lucru a partenerului KIT la ITIM; o vizita a partenerului ITIM la KIT; meetinguri online cu partenerii ori de cate ori s-a impus.

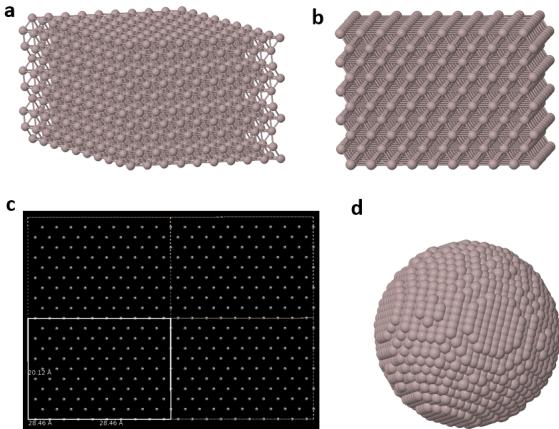


Figura 1: Modelele de baza de la care s-a pornit in investigarea dependentei de fluxul de oxigen. (a) suprafata de Al(111); (b) suprafata de Al(100); (c) Al bulk; (d) structura de nanograin. Toate modelele initiale contin 1000 de atomi de Al.

2 Descrierea stiintifica cu punerea in evidenta a rezultatelor etapei anuale si gradul de realizare a obiectivelor

Reamintim ca in etapele 1 si 2 au fost prevazute activitati de calculare a energiei de formare a oxidului de aluminiu pe suprafete de aluminiu ideale si cu defecte, iar in etapa 3 a fost prevazuta calcularea contributiilor lor entropice (vibrationale) si dependenta lor de temperatura.

Activitatile prevazute in Etapa 4 au rezultat in date de dinamica moleculara care coroborate cu rezultatele obtinute anterior descriu o serie de sisteme: suprafete de Al(100), Al(111), Al bulk si model in structura de nanograin. Toate acestea au stat la baza formularii modelului de determinare a contributiilor entropice la energia de formare pezentat in aceasta etapa.

2.1 Setup computațional

Calculele de dinamica moleculara (MD) au la baza forcefield-uri ReaxFF [2]. Campul de forte ReaxFF permite atat descrierea modului in care disociaza moleculele de oxigen pe suprafata cat si formarea de noi legaturi. Acestea sunt implementate in codul Gulp [3] care a fost utilizat pentru toate simularile prezentate in acest studiu.

Procesarea de date, analiza structurala si analiza vibrationala au fost realizate utilizand codurile dezvoltate de noi in cadrul grupului, respectiv RLAT2.0 pentru analiza geometriei structurilor si v-therm pentru analiza vibrationala.

Reprezentarea in format grafic a datelor s-a realizat cu ajutorul xmGrace [4] si gnuplot [5]. Reprezentarea vizuala structurilor s-a realizat cu xcrysden [6] si gdis [7].

Analiza dinamicii de formare a layerului de AlOx are la baza monitorizarea lungimii legaturilor Al-O din suprafata, care sunt implicit asociate tariei legaturii chimice Al-O in diverse configuratii (bulk, suprafata, nanograin). Modul

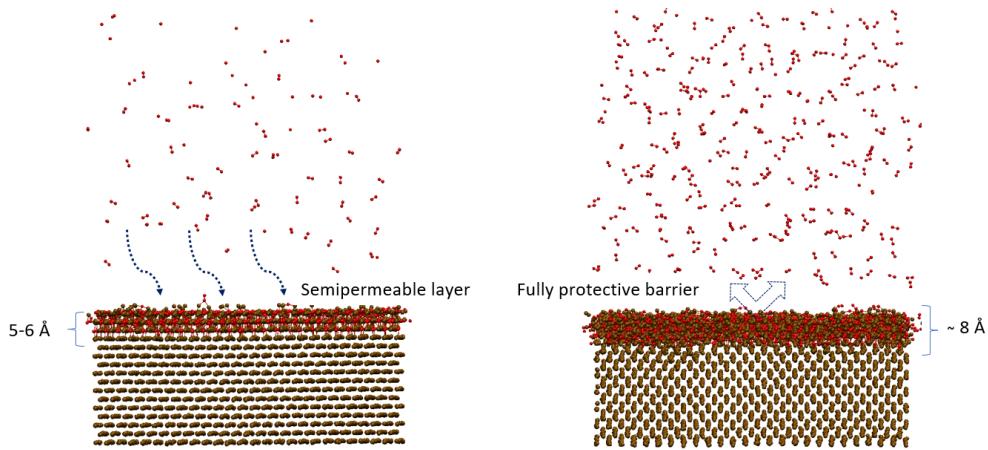


Figura 2: Modelele prezinta acelasi numar de atomi de Al, si un numar diferit de atomi de O.

de creare a modelelor in suprafata a fost prezentat in detaliu in etapa anterioara (etapa 3). In aceasta etapa, amintim doar ca modelele se formeaza prin adaugarea unor volume diferite de oxigen in topul suprafetelor, care incorporeaza astfel O in diferite concentratii.

Pentru a identifica modul de incorporare a oxigenului in aluminiu, toate modelele din etapa 4 contin acelasi numar de atomi de aluminiu (1000 de atomi). Modelele sunt reprezentate grafic in figura 1. Modelele de suprafata si nanograin (modelul a, b si d in figura 1) corespund observatiilor partenerilor experimentatorii, iar modelul in bulk (c) este generat pentru a analiza controlat gradul de umplere cu O. Modelul in nanograin (d) este un model asupra caruia nu avem controlul asupra volumului de oxigen pe care il incorporeaza. Configuratiile (a) si (b) din figura 1 presupun conditii la limita ale celulei unitate in directia x si y; in acest caz z=infinite (simulare de tip 2D). Configuratie (c) in bulk presupune conditii la limita ale celulei unitate in toate cele trei directii, x, y, z; configuratie (d) in nanograin nu are conditii la limita, simularea este realizata in modul molecule.

Fiecare sistem (baza de aluminiu si atomii liberi de oxigen din setupul initial) a fost propagat la 300 K utilizand un algoritm de tip Verlet timp de 4ps, cu un interval intre pasii de dinamica moleculara de 2fs. In aceasta etapa aluminiul inglobeaza atomii de O. Intrucat pe noi ne intereseaza doar structura solida obtinuta, atomii de oxigen care au ramas nelegati sunt indepartati dupa terminarea acestui ciclu de dinamica Verlet. In figura 2 exemplificam dependenta de cantitatea de oxigen. Se observa ca dupa ce se obtine bariera protectoare de AlOx, concentratia de oxigen din mediu nu mai are nici o relevanta. Oxigenul suplimentar este respins de suprafata.

Sistemele finale sunt obtinute dupa indepartarea excessului de oxigen (structurile de aluminiu acoperite de bariera de AlOx). Acestea au fost propagate folosind acelasi algoritm Verlet timp de 4 ps cu un pas de 2fs. In aceasta etapa configuratiile geometrice au fost salvate la fiecare pas, pentru a constitui baza de date pentru analiza de structura si analiza vibrationala.

Analiza numerica a acestor modele permite evaluarea energiei implicate in formarea invelisului de AlOx. Aceasta corespunde energiei libere calculate pentru fiecare structura investigata. Reamintim ca formarea legaturilor Al-O pe suprafetele de Al este un proces cu o pondere mare de efecte aleatorii influente de structura geometrica si chimica a materialului, de temperatura de formare si/sau de presiune.

Reamintim cateva notiuni de termodinamica care stau la baza acestor analize.

Energia libera se exprima ca

$$G = U + pV - TS \quad (1)$$

unde U - energia interna (suma gradelor de libertate electronic & vibrational & translational); p - presiune, V - volum, S - entropie iar T este temperatura. Daca $pV = \text{constant}$, $\Delta G = \Delta F$ (energia libera Helmholtz), unde F este

$$F = U - TS \approx U_{el} + U_{vib} - TS \quad (2)$$

(i.e. gradele de libertate vibrationale si electronice sunt dominante fata de alte efecte termodinamice).

Densitatea de stari vibrationale (VbDOS) $\mathcal{D}(\omega)$ este asadar definita ca in ecuatia [9]

$$\mathcal{D}(\omega) = \frac{2}{kT} \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 m_j \delta_j^\alpha(\omega) \quad (3)$$

unde m_j este masa atomului cu indicele j ; α este indicele coordonatei Carteziene.

Densitatea spectrala $\delta_j^\alpha(\omega)$ este determinata de patratul transformatiei Fourier a vitezelor [9]

$$\delta_j^\alpha(\omega) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{2\tau} \left| \int_{-\tau}^{\tau} v_j^\alpha(t) e^{-i2\pi\omega t} dt \right|^2 \quad (4)$$

Densitatea de stari vibrationale (VbDOS) se poate calcula din aceste relatii in urma inregistrarii configuratiei geometrice a sistemului in fiecare pas al similarii de dinamica moleculara.

O proprietate importanta este ca integrala pe toate starile vibrationale este definita prin relatia

$$\int_0^\infty \mathcal{D}(\omega) d\omega = 3N \quad (5)$$

unde N este numarul atomilor din sistem.

Asadar din VbDOS pot fi extrase proprietatile termodinamice corelate cu gradele de libertate vibrationale, tinand cont ca functia de partitie Q a sistemului se poate calcula din functia de partitie a oscilatorului armonic q_{HO} (i.e. statistica Bose-Einstein a fononilor din sistem) [8, 9, 10]

$$\ln Q = \int_0^\infty \ln q_{HO} \mathcal{D}(\omega) d\omega \quad (6)$$

Entropia vibrationala este

$$S = k \ln Q + \beta^{-1} \frac{\partial \ln Q}{\partial T} \quad (7)$$

unde k - constanta Boltzmann, iar $\beta = kT$ si T - temperaturi.

Energia libera vibrationala (Helmholtz), F este:

$$F = U - TS \quad (8)$$

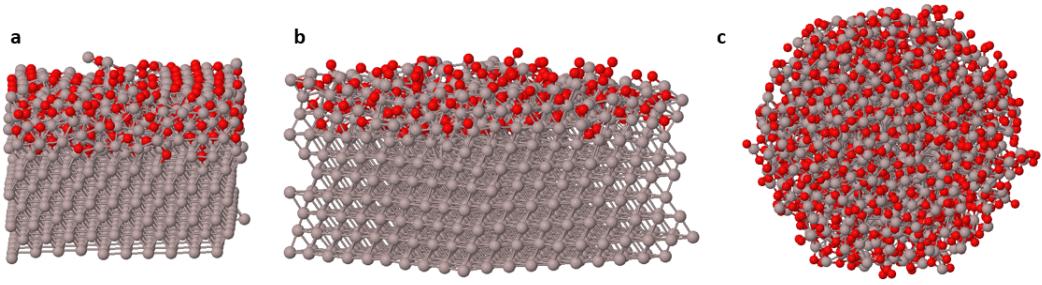


Figura 3: Modelele prezinta acelasi numar de atomi de Al (respectiv 1000 de atomi). Cele doua tipuri de suprafete incorporeaza O in mod diferit. (a) Al(100) a incorporat 300 de atomi de O, in mod organizat, cu o structura apropiata de Al_2O_3 . (b) Al(111) a incorporat doar 229 de atomi de O din cei 300 disponibili, intr-o structura dezordonata de tip AlOx . (c) Structura nanograin incorporeaza de asemenea O in mod dezordonat (AlOx).

unde U este energia vibrationala totala si poate fi calculata ca integrala produsului dintre VbDOS si functia de partitie a starilor energetice in ecuatia 6.

2.2 Analiza geometrica

Analiza de structura conduce la urmatoarele concluzii:

- Al(100) accepta mai mult O, unde procentul se refera la volumul total de material. Suprafetele care nu sunt plane accepta mai mult O; cu cat suprafata este mai deformata, cu atat inglobeaza mai mult O. Lungimile legaturilor Al-O din stratele de AlOx investigate nu variaza mult, respectiv valoarea medie din stratul de AlOx format pe suprafata de Al(111) este 1.96 ± 0.16 iar pentru cea din stratul format pe suprafata de Al(100) este 1.95 ± 0.17 .
- Referitor la adancimea de patrundere a O in bulkul de Al, simularile indica o patrundere mai adanca in suprafata de tip (111), pana spre aproximativ 15 Å; adancimea de patrundere in modelele similare pe suprafata de Al(100) este de maxim 12-13 Å. In medie, stratul de Al_2O_3 format pe Al(111) este cu 2 Å mai gros decat cel format pe Al(100), cu toate ca Al(111) accepta mai putini atomi de O decat suprafata in simetrie (100).
- Analiza de compositie chimica din structuri s-a efectuat utilizand o alta functionalitate a codului RLAT2.0, care calculeaza numarul de legaturi pe care le realizeaza fiecare atom de Al din sistem si le clasifica in functie de numarul si de tipul de vecini: (a) un atom de Al este metalic daca este inconjurat in proportie de 100% de alti atomi de Al; (b) un atom de Al este suboxid daca este inconjurat in proportie de 60-90% de atomi de Al si in proportie de 10-30% de atomi de O; (c) un atom de Al este oxid daca este inconjurat in proportie de 40-60% de atomi de Al si 40-60% atomi de O.

Aceasta analiza indica o cantitate mai mare de oxid in Al(100) comparativ cu Al(111), iar acest lucru ar putea sa explice grosimea mai mare a stratului de AlOx formata pe Al(111). Compozitia sistemului depinde de calitatea initiala a suprafetei (ne referim aici la rugozitate), respectiv cu cat suprafata este mai rugoasa, cu atat bulkul contine mai mult oxid si suboxid, iar Al metalic predomina in suprafetele netede (Figura 4).

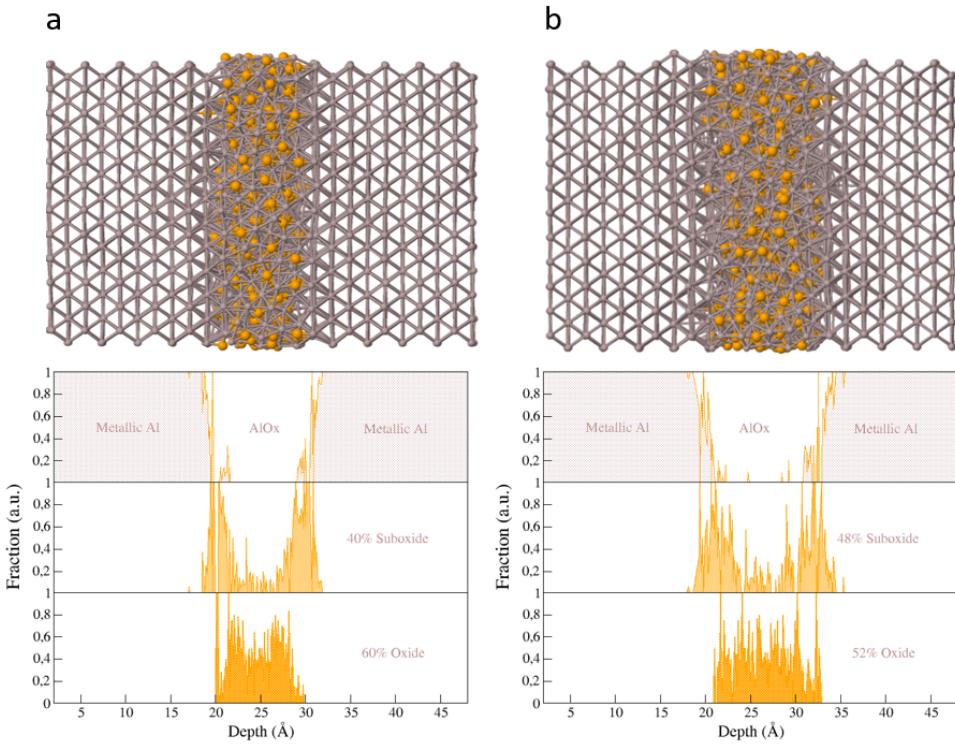


Figura 4: Reprezentarea grafica a modelelor in jonctiune exemplifica modul de analiza chimica a structurilor. (a) suprafata de Al plana; (b) suprafata de Al rugoasa.

- Corelat cu lungimile de legaturi si cu adancimea de patrundere a O, grosimea stratului AlOx depinde de calitatea suprafetetei. Cu cat suprafata este mai rugoasa, cu atat absoarbe mai mult oxigen si in consecinta are o grosime mai mare. Acest lucru se reflecta in analiza structurii de nanograin, care implicit are cea mai rugoase suprafata dintre modelele investigate.

2.3 Analiza termodinamica

2.3.1 Energia de vibratie

Energia de vibratie calculata pentru cele trei tipuri de sisteme este prezentata in figura 5. Se observa ca valorile energiilor de vibratie sunt mai mari pentru sistemele in suprafata decat pentru sistemul in bulk. O imagine de detaliu, care prezinta energia de vibratie pentru toate sistemele analizate, cu concentratii de O intre 1 si 30% este prezentata in figura 6 pentru comparatie. Se observa ca pana la incorporarea a 15% O in Aluminiu, energia vibrationala creste liniar. La volume mai mari de O, acest trend ramane liniar doar pentru sistemul in bulk, iar pentru sistemele in suprafata aceasta crestere isi pierde liniaritatea. Procentul maxim de O in Al este de 30% pentru Al(100) si doar 26% pentru Al(111). Energia de vibratie din sistemele Al(111) este intotdeauna mai mare, fapt care explica aceasta toleranta mai mica a suprafetei de Al(111) pentru O. In structura de nanograin (grAl) valoarea energiei de vibratie la 300 K este $U=39.24$ eV. Aceasta valoare este similara valorii calculate la 300 K pentru structuri in suprafata care au incorporat 10-15 % oxigen, sau structurii de bulk la 15-20%.

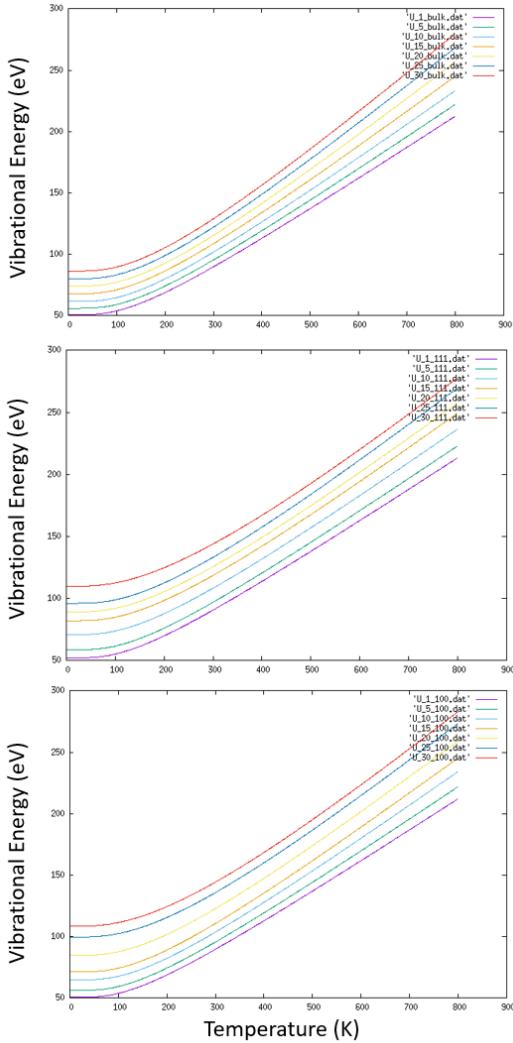


Figura 5: Energia de vibratie in eV la concentratii diferite de oxigen in volumul de aluminiu (intre 1% si 30%) pentru trei tipuri de sisteme: sus - bulk; mijloc - suprafata de Al(111); jos - suprafata de Al(100).

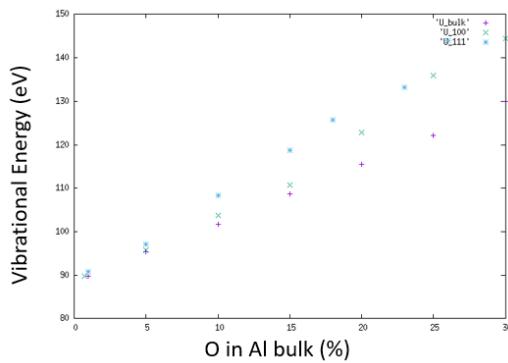


Figura 6: Energia de vibratie in eV, calculata la 300 K functie de concetratiile de oxigen in volumul de Al pentru configuriile geometrice analizate in figura 5.

2.3.2 Entropia vibrationala a sistemelor

Entropia vibrationala cea mai ridicata o au sistemele in bulk. In acest caz, se observa ca entropia creste cu cat bulkul de Al incorporeaza mai mult oxigen. In ce priveste AlOx format la suprafata Al(100), Al(111) sau la suprafata unui nanograin de Al, entropia cea mai mare o au sistemele de Al care au incorporat o cantitate mica de O, si aceasta scade (sistemul se destabilizeaza) cu cat sistemul de aproape de procentul de 30% O in aluminiu. In aceste conditii, mai instabil apare sistemul care se formeaza pe Al(111). Aceste rezultate par sa sugereze faptul ca formarea structurii de AlOx stabilizeaza sistemele. Valorile calculate pentru toate aceste tipuri de sisteme sunt:

- in bulk: intre 1 si 10% e 0.23 eV/K; intre 15 si 25% e 0.24 eV/K; la 30% e 0.25 eV/K.
- pe Al(100): intre 1 si 15% e 0.23 eV/K; la 20% scade la 0.22 eV/K; peste 25% scade la 0.21 eV/K.
- pe Al(111): intre 1 si 10% e 0.22 eV/K; intre 15 si 23% scade la 0.21 eV/K; 26% e procentul maxim de oxigen pe care il incorporeaza si scade la 0.19 eV/K.
- nanograin: 0.19 eV/K.

2.3.3 Energia libera

Energia libera este energia disponibila in sistem pentru a efectua lucru mecanic. Cu alte cuvinte, cu cat energia disponibila in sistem pentru torsuni, translatii, etc, este mai mica, cu atat sistemul poate fi considerat mai stabil.

In figura 7 este prezentata energia libera la concentratii diferite de oxigen in volumul de aluminiu - intre 1% si 30% - pentru trei tipuri de sisteme: bulk, suprafata de Al(100) si respectiv suprafata de Al(111). Se observa ca la temperaturi mari sistemul in bulk are o tendinta de convergenta care se aseamana cu aducerea sistemului spre punctul de topire. Aceasta tendinta de convergenta nu se observa pentru suprafete. In plus, se observa diferente intre suprafetele de Al(100) si Al(111): tendinta Al(111) de a incorpora mai putin O se vede inclusiv din analiza energiei libere: la temperaturi si concentratii de O mari, suprafata Al(111) tinde sa devina instabila.

Similar cu analiza energiei de vibratie din imaginea 6, in imaginea 8 se observa ca si energia libera creste liniar cu cresterea concentratiei pana la aproximativ 15% O in sistem, dupa care incepe sa apară neliniaritati. Singurul sistem care isi pastreaza tendinta liniara de crestere a energiei libere este sistemul in bulk.

Sistemul format pe Al(111) este stabil pana la incorporarea a 20-25% O in aluminiu, dupa care se destabilizeaza brusc. Aceasta tendinta nu este la fel de evidenta in cazul suprafetelor de Al(100). Mai remarcam si ca Al(111) este mult mai instabil decat oricare alt tip de sistem, chiar si la concentratii mici de O.

Cazul structurii in nanograin este analizat in figurile 9 si 10. Se observa ca atat dependenta energiei de vibratie si temperatura, cat si dependenta energiei libere a acestui sistem sunt foarte diferite de celelalte sisteme, mai ales la temperaturi mai mari decat RT. Structura de nanograin are practic o derivata de bulk, nu de suprafata, si se apropie de caracteristicile de "sistem topit".

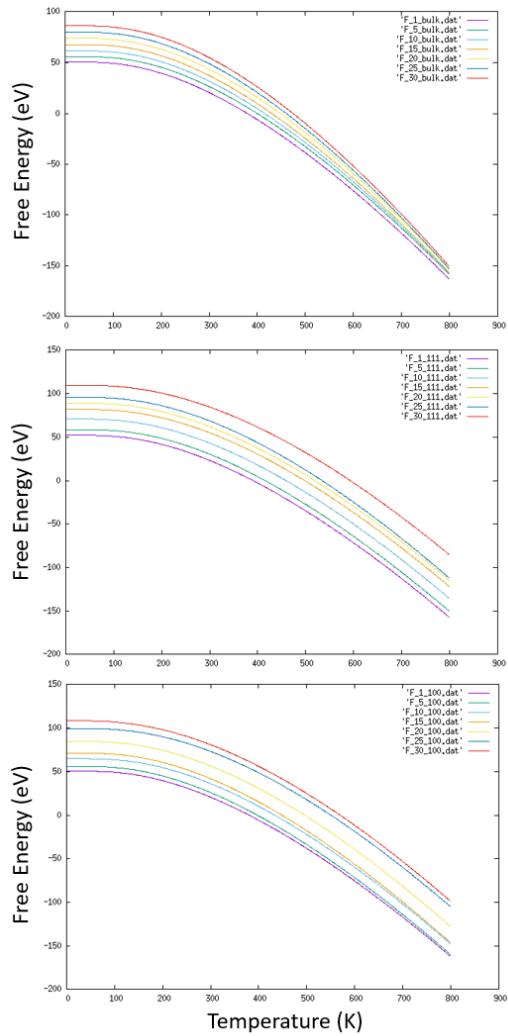


Figura 7: Energia libera in eV la concentratii diferite de oxigen in volumul de aluminiu (intre 1% si 30%) pentru trei tipuri de sisteme: sus - bulk; mijloc - suprafata de Al(111); jos - suprafata de Al(100).

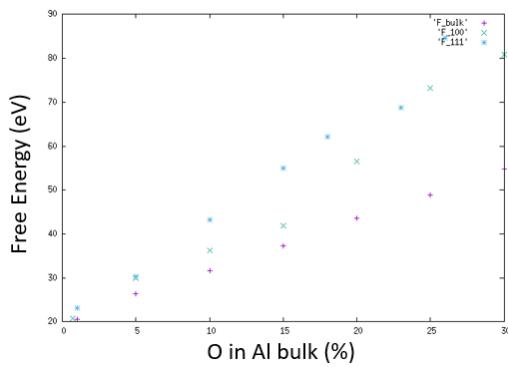


Figura 8: Energia libera in eV, calculata la 300 K functie de concentrațiile de oxigen in volumul de Al pentru configurațiile geometrice analizate in figura 7.

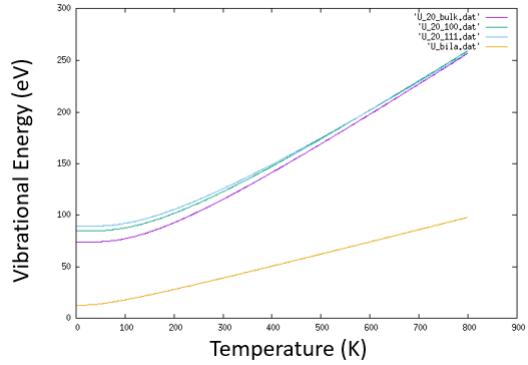


Figura 9: Energia de vibratie in eV la concentratia de 20% O in volumul de aluminiu pentru cele trei tipuri de sisteme, bulk, suprafata de Al(111) si suprafata de Al(100) comparate cu energia de vibratie in nanograin.

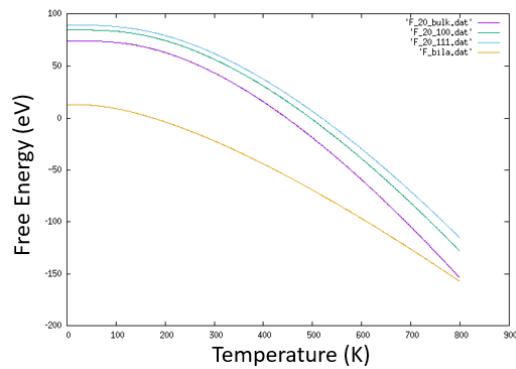


Figura 10: Energia libera din sistem in eV la concentratia de 20% O in volumul de aluminiu pentru cele trei tipuri de sisteme, bulk, suprafata de Al(111) si suprafata de Al(100) comparate cu energia libera in nanograin.

2.4 Elaborarea unui model teoretic pentru formarea Al granular în funcție de temperatură și intensitatea fluxului de oxigen prezent la suprafața de Al

In etapele precedente s-a investigat geometria si termodinamica unor suprafete plane si cu defecte. In aceasta etapa, aceste tipuri de sisteme au fost completate cu model in bulk si nanograin. Pentru toate sistemele s-a investigat dependenta de fluxul de oxigen si temperatura. Au fost aplicate metode de calcul bazate pe pe câmpul de forțe ReaxFF. Datele rezultante au fost procesate cu coduri informative in-house: RLAT2.0 are o serie de functionalitati de manipulare de date si permite atat preprocesare (permite constructia unei palete largi de sisteme initiale), cat si post-procesare si analiza; v-therm a fost dezvoltat ulterior pentru analiza proprietatilor vibrationale. Frecventa de vibratie a modului de stretching al legaturilor Al-O este o masura relativ directa de analiza a tipului de legatura: cresterea sau scaderea frecventei indica o legatura mai puternica/mai slaba. Cu cat interacțiunea dintre atomi este mai puternica, cu atat frecventa de vibratie creste. Din analiza VbDOS se poate calcula entropia sistemului, care la randul ei conduce la calcularea energiei libere. Aceasta energie libera reprezinta energia disponibila in sistem pentru a efectua lucru mecanic, adica torsioni, modificari de forma ale structurii, migratii ale atomilor. Cu alte cuvinte, analiza acestor energii conduce la evaluarea stabilitatii structurale a sistemelor si la descrierea modului de formare al AlOx.

Ca model de formare a grAl, analiza datelor de dinamica moleculara indica o stabilizare a tuturor sistemelor cu defecte comparativ cu suprafetele netede ideale. Cea mai mare stabilizare se observa in cazul modelului cu forma unei insule duble, care prin modul de taiere al suprafetei se apropie cel mai mult de formarea unui graunt (aluminiu granular). Exista diferente majore intre cele doua tipuri de simetrie structurala: Al(100) accepta mai mult O; de asemenea, suprafetele rugoase accepta mai mult O - cu cat suprafata este mai deformata, cu atat este mai dispuș sa inglobeze O. Analiza lungimilor legaturilor din stratul de AlOx arata ca Al-O sunt apropiate ca valoare pe ambele tipuri de simetrii ale Al. Analiza adancimii de penetrare a O in suprafata arata ca O patrunde in aluminiu in mod diferit functie de tipul de simetrie a suprafetei: in suprafata cu simetrie (100) O patrunde in medie pana la 15 Å cu 2-3 Å mai mult decat in suprafata cu simetrie (111). Analiza compozitiei sistemelor arata ca Al(111) contine mai mult suboxid comparativ cu Al(100). Cu cat suprafata este mai rugoasa, cu atat bulkul contine mai mult oxid si suboxid. In compensatie, Al metalic este predominant in suprafetele netede. Grosimea relativa a stratului de AlOx este in medie cu 2 Å mai mare pe Al(111) decat pe Al(100). Cu cat suprafata este mai rugoasa, cu atat incorporeaza mai mult oxigen si in consecinta stratul are o grosime mai mare.

O concluzie generala care reiese din analiza tuturor acestor date, este ca stratul de AlOx are tendinta naturala de a se forma la suprafetele defecte si/sau sferice. Procentul maxim de O in stratul de AlOx este 25-30%. O grosime medie a stratului de AlOx este de 9-12 Å. Stratul de AlOx este mai gros cu pana la 2 Å cand se formeaza pe Al(111) si este mult mai dezorganizat. Pe Al(100) are o structura mult mai apropiata de Al₂O₃, si se organizeaza mult mai compact. O speculatie ar fi ca structura de nanograin nu este acoperita cu un strat omogen, intrucat prin natura ei are o suprafata cu mai multe tipuri de suprafete, si de asemenea cu "defecte" (trepte sau insule).

Energia libera creste liniar cu cresterea concentratiei pana la aproximativ 15% O in sistem, dupa care incepe sa apara neliniaritati. Singurul sistem care isi pastreaza tendinta liniara de crestere a energiei libere este sistemul in bulk. Sistemul in nanograin are o dependenta a energiei libere functie de temperatura, care, mai ales la temperaturi mai mari decat RT, nu mai are caracteristici de suprafata. Aceasta structura are practic o derivata de bulk, nu de suprafata, si se apropie de caracteristicile de "sistem topit".

3 Activități suport

3.1 Întâlniri de lucru

- *3rd QuCos Meeting - Întâlnirea dintre reprezentanții consorțiului a avut loc on-site la INSTITUT DE FISICA D ALTES ENERGIES, Hotel Campus, Universitat Autònoma de Barcelona - UAB, Barcelona, Spania intre 22-25 februarie 2023. SIUCs-QUCOS QuantERA meeting a fost o întâlnire comună de lucru intre două consorții Quantera, care au KIT partener comun. Tematicile celor două proiecte au în comun dezvoltarea de materiale noi, cu proprietăți îmbunătățite, pentru construcția de qubiti supraconductori. Prezentarea rezultatelor obținute de către cele două consorții s-a făcut prin comunicări orale, cu durată de 30 minute. Din partea ITIM au participat Dr. Luiza Buimaga-Iarinca și Dr. Liviu Zarbo. În plus de analiza activităților derulate în cadrul proiectelor, s-au discutat și perspective de colaborare. Au fost vizate în principal două teme: (i) fabricarea de noi materiale bazate pe aluminiu granular, pentru dezvoltarea de qubiti supraconductori; și (ii) transfer de competențe de la partenerii europeni, către grupul de Inginerie Cuantica al INCDTIM*
- Intre 19-22 iunie 2023 coordonatorul grupului de la KIT s-a aflat în vizita de lucru la INCDTIM.
- Luiza Buimaga-Iarinca a vizitat grupul de la KIT intre 1-5 august 2023. Au fost vizitate cele două laboratoare ale echipei de Tehnologii Cuantice de la KIT (Campus Nord și Campus Sud). S-a discutat cu personalul implicat în derularea proiectelor comune; s-a prezentat tehnologia de printare de qubiti și posibile noi materiale și metode de depunere; s-a vizitat camera curată din Campus Sud unde se printează qubitii și s-au identificat directii de colaborare noi. S-a vizitat hala de producție de frigidere de diluție, localizată în Campus Sud, care a rezultat ca spin-off dintr-un proiect de cercetare derulat la KIT.

3.2 Articole

- Observation of Josephson Harmonics in Tunnel Junctions

Dennis Willsch, Dennis Rieger, Patrick Winkel, Madita Willsch, Christian Dickel, Jonas Krause, Yoichi Ando, Raphael Lescanne, Zaki Leghtas, Nicholas T. Bronn, Pratiti Deb, Olivia Lanes, Zlatko K. Minev, Benedikt Dennig, Simon Geisert, Simon Gunzler, Soren Ihssen, Patrick Paluch, Thomas Reisinger, Roudy Hanna, Jin Hee Bae, Peter Schuffelgen, Detlev Grutzmacher, Luiza Buimaga-Iarinca, Cristian Morari, Wolfgang Wernsdorfer, David P. DiVincenzo, Kristel Michelsen, Gianluigi Catelani, and Ioan M. Pop

acceptat în NATURE PHYSICS

<https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.09192>

- Non-Lifshitz invariants corrections to Dzyaloshinskii-Moriya interaction energy

Doru Sticlet și Frederic Piechon

PHYSICAL REVIEW B 107, 195404 (2023)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.195404>

- Terahertz absorption at the interface between para-hydrogen crystals and superconducting resonators
Francesco Valenti, Andrew N. Kanagin, Andreas Angerer, Luiza Buimaga-Iarinca, Cristian Morari, Jorg Schmiedmayer, and Ioan M. Pop
in etapa a doua de evaluare la PHYSICAL REVIEW B
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.04112>
- ITIM – Catalizator al Transformării Cuantice Românești
Liviu Zarbo
articol de coperta la numarul din septembrie al Market Watch Romania.
<http://www.marketwatch.ro/articol/18298/>

3.3 Participari la conferinte si workshopuri

- QuantumSpeed - eveniment organizat de OctogonHub si Quarks Interactive, in colaborare cu cercetatori de la cateva institute si universitati din Romania. Din INCDTIM au participat Liviu Zarbo, Larisa Pioras-Timbolmas si Luiza Buimaga-Iarinca
- comunicare orala Building better superconducting qubits, Liviu Zarbo si Larisa Pioras-Timbolmas, 14th International Conference PIM Cluj-Napoca, 2023
- poster Exploring the terrain of noise in superconducting qubits, Larisa Pioras-Timbolmas si Liviu Zarbo, 14th International Conference PIM Cluj-Napoca, 2023
- poster Computational assessment of Al-based materials, Luiza Buimaga-Iarinca, Liviu Zarbo, Cristian Morari, 14th International Conference PIM Cluj-Napoca, 2023
- comunicare orala Computational assessment of aluminium-based materials, Luiza Buimaga-Iarinca, The SIUCs-QUCOS QuantERA meeting, Institut de Fisica D Altes Energies, Hotel Campus, UAB, Barcelona, Spania, 2023
- poster Optimizing Fluxonium type devices, Larisa Pioras-Timbolmas si Liviu Zarbo, The SIUCs-QUCOS QuantERA meeting, Institut de Fisica D Altes Energies, Hotel Campus, UAB, Barcelona, Spania, 2023
- poster Noise topography in superconducting qubits, Larisa Pioras Timbolmas, Liviu Zarbo, The European Summer School in Quantum Science and Technology, Dorint Hotel, Durbach , Germania, 2023
- poster Optimizing devices based on the fluxonium qubits, Spring School on Superconducting Qubit Technology 2023, Benasque, Spania

Director de proiect

Dr. Luiza Buimaga-Iarinca

Cluj-Napoca

Referințe

- [1] Thomas P Senftle et. al., The ReaxFF reactive force-field: development, applications and future directions npj Computational Materials **2016** 2, 15011.
- [2] Sungwook Hong, Adri C.T. van Duin, Molecular Dynamics Simulations of the Oxidation of Aluminum Nanoparticles using the ReaxFF Reactive Force Field, J. Phys. Chem. C, 119, 31, 17876–17886 (2015)
- [3] J.D. Gale, JCS Faraday Trans., 93, 629 (1997); J.D. Gale and A.L. Rohl, Mol. Simul., 29, 291-341 (2003)
- [4] <https://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>
- [5] <http://www.gnuplot.info/>
- [6] <http://www.xcrysden.org/>
- [7] <https://github.com/arohl/gdis>
- [8] R . Carles, P. Benzo, B. Pécassou, C. Bonafos, Vibrational density of states and thermodynamics at the nanoscale: the 3D-2D transition in gold nanostructures, Scientific Reports volume 6, Article number: 39164 (2016)
- [9] A. A. McQuarrie, Statistical Mechanics, Harper & Row, New York, 1976.
- [10] Lin, S. T.; Maiti, P. K.; Goddard, W. A., Two-Phase Thermodynamic Model for Efficient and Accurate Absolute Entropy of Water from Molecular Dynamics Simulations, J. Phys. Chem. B 2010, 114, 8191–8198.
<https://doi.org/10.1021/jp103120q>
- [11] A. R. Leach, Molecular modelling, Prentice Hall, 2001.

4 Rezumat executiv al activităților realizate în perioada de implementare

Rezultatul final al proiectului “Quantum Computation with Schrödinger cat states” implementat de consorțiul QuCos va fi primul procesor cuantic corectat de erori dezvoltat în Europa. Arhitectura acestui procesor este bazată pe qubiti supraconductori, i.e. jonctiuni Josephson construite din aluminiu granular.

Rolul ITIM în cadrul proiectului este de a propune un model pentru procesul de formare al aluminiului granular. Problema abordată în cadrul acestui proiect, face parte din categoria high risk high gain. Este o problema de ordin fundamental, încă nerezolvată în literatură datorită complexității deosebite pe care o presupun metodele de investigare.

Pentru atingerea scopului propus am realizat o serie de studii pentru mai multe modele de formare a oxidului de aluminiu pe suprafete de aluminiu în diferite simetrie și configurații de structură. Am evaluat atât geometria legăturilor care se formează în suprafata, cât și chimia sistemelor - distribuția de oxid, suboxid, sau metal din sistem, și parametrii termodinamici ai suprafetei - energia de vibrație, entropia, energia liberă. Prin analiză exhaustivă a sistemelor formate din aluminiu - oxid de aluminiu am explicitat date experimentale cum ar fi formarea jonctiunilor (grosime, geometrie, chimie sau omogeneitatea materialului).

Analiza tuturor acestor date conduce la următoarele concluzii: Stratul de AlO_x are tendința naturală de a se forma la suprafetele defecte și/sau sferice. Procentul maxim de O în stratul de AlO_x este 25-30%. Grosimea medie a stratului de AlO_x este de 9-12 Å. Stratul de AlO_x este mai gros cu până la 2 Å când se formează pe Al(111) și este mult mai dezorganizat. Pe Al(100) are o structură mult mai apropiată de Al₂O₃, și se organizează mult mai compact. Structura de nanograins nu este acoperita cu un strat omogen de oxid, intrucât prin natură ei are o suprafata cu mai multe tipuri de suprafete, și de asemenea cu ”defecte” (trepte sau insule).

Energia liberă crește liniar cu creșterea concentrației până la concentrații mici (aproximativ 15% O) după care începe să apară neliniarități. Singurul sistem care își pastrează tendința liniară de creștere a energiei libere este sistemul în bulk. Sistemul în nanograins are o dependență a energiei libere funcție de temperatură, care, mai ales la temperaturi mai mari decât K_T, nu mai are caracteristici de suprafata. Aceasta structură are practic o derivată de bulk, și se apropie de caracteristicile unui ”sistem topit” ceea ce suportă ipoteza unui model mixt, de tip ”picatura de lichid” care pastrează un miez metalic solid.