

Idea kwantowego przetwarzania informacji i komputerów kwantowych jest niewątpliwie jednym z największych a zarazem najbardziej fascynujących wyzwań nauki, które może doprowadzić do kolejnej bezprecedensowej rewolucji technologicznej w 21 wieku. W odróżnieniu od tradycyjnych komputerów, gdzie każdą wartość reprezentującą przetwarzane dane zapisujemy za pomocą zera i jedynki, którym odpowiadają dwie rozróżnialne wartości napięcia na tranzystorach, w komputerach kwantowych dane reprezentowane są przez stan kwantowy układu stanowiącego kwantowy mikroprocesor. Podstawowym elementem budowy komputerów kwantowych są kwantowe bramki logiczne zwane kubitami, które mogą jednocześnie przyjmować wartość zero, jeden lub dowolną kwantową superpozycję tych dwóch stanów. Najbardziej enigmatycznym zjawiskiem fizycznym, które stanowi fundament obliczeń kwantowych, jest tzw. splątanie kwantowe. Objawia się ono tym, że w grupie oddziaływających obiektów, które są ze sobą splątane, stan kwantowy każdego pojedynczego obiektu nie może być opisany niezależnie, natomiast musi być opisany dla całego układu. Dostęp do tych stanów splątanych jest kluczem do eksploracji wykładniczo dużej mocy obliczeniowej systemów kwantowych. Nie mniej jednak, stany splątane kwantowo są ultraczułe na wszelkiego rodzaju źródła dekoherencji. W związku z powyższym, głównym wyzwaniem jest stworzenie kontrolowanego środowiska, w którym możliwe będzie manipulowanie splątanymi kwantowo kubitami bez interferencji ze światem zewnętrznym. Takim środowiskiem może być szeroko-przerwowy półprzewodnik, w którym spin elektronowy związany z paramagnetycznym defektem punktowym reprezentuje stan kwantowy kubita. Prototypem takiego defektu jest kompleks azot-wakans w strukturze diamentu, ze względu na indywidualną adresowalność jego stanów kwantowych, które można zainicjować, manipulować i odczytać z wysoką dokładnością w temperaturze pokojowej. Nie mniej jednak, aby zaprojektować skalowalny system kwantowy oparty na kubitach w diamentcie, trzeba wprowadzić szereg defektów punktowych, takich jak NV, do jego sieci w kontrolowany sposób, co stanowi wielkie wyzwanie dla istniejących technologii. Z tego powodu odkrycie analogicznych defektów punktowych w innym technologicznie dojrzałym półprzewodniku szeroko-przerwowym powinno doprowadzić do znacznego postępu w rozwoju skalowalnych technologii kwantowych.

Zainspirowany postępowaniem w dziedzinie kwantowego przetwarzania informacji na bazie defektów w diamentcie oraz obiecującymi wstępnymi wynikami dla azotków III-V, w ramach niniejszego projektu pragnę zbadać różne defekty punktowe i ich kompleksy w objętościowych i dwu-wymiarowych strukturach AlN i GaN. Postawiłem sobie za cel identyfikację nowych defektów punktowych w AlN i GaN, które będą atrakcyjnymi kandydatami do zastosowań w nanofotonice i kwantowym przetwarzaniu informacji, oraz które będzie można relatywnie łatwo i w sposób kontrolowany wytwarzać dostępnymi metodami inżynierii defektów. Aby osiągnąć ten cel, planuję wykorzystać zaawansowane narzędzia obliczeniowej mechaniki kwantowej (takie jak hybrydowa teoria funkcjonału gęstości, zależna od czasu teoria funkcjonału gęstości, wielociałowy rachunek zaburzeń GW), teorię grup a także obliczenia termodynamiczne. Oczekiwane rezultaty projektu to:

- Obszerna baza danych zawierająca energie tworzenia i jonizacji defektów, energie kwazilokalnych orbitali defektowych i ich charakterystyki, sygnatury optyczne (energie ekscytacji i linie zero-fononowe), sygnatury spektroskopii IR i Ramana (kwazilokalne mody fononowe), stałe struktury nadsubtelnej, stałe rozszczepienia w polu zerowym dla wyselekcjonowanych defektów punktowych i ich kompleksów w kryształach 2D i 3D AlN i GaN
- Szczegółowa teoria dotycząca cyklu optycznej polaryzacji spinowej oraz możliwych protokołów kontroli wyselekcjonowanych defektów punktowych. Bazując na rozważaniach teorii grup oraz wysokiej jakości danych numerycznych zamierzamy wyprowadzić efektywne Hamiltoniany w symetrycznie adaptowalnej bazie opisujące oddziaływania spin-spin, spin-orbita, elektron-fonon i efekt piezoelektryczny, oraz analizę możliwych przejść radiacyjnych i nieradiacyjnych związanych z tymi defektami
- Termodynamiczne diagramy fazowe pokazujące stabilność wyselekcjonowanych defektów punktowych, na podstawie których będzie możliwe zaprojektowanie optymalnych warunków do ich inżynierii

Jestem przekonany, że wyniki uzyskane w ramach niniejszego projektu pozwolą na poszerzenie wiedzy dotyczącej właściwości kwantowych defektów punktowych w objętościowych i dwu-wymiarowych strukturach AlN i GaN oraz wpłyną na rozwój dziedzin nanofotoniki i kwantowego przetwarzania informacji. Zidentyfikowanie atrakcyjnych kandydatów na bity kwantowe w AlN lub GaN oraz ich precyzyjna inżynieria w sieci krystalicznej hosta powinna w znacznym stopniu przybliżyć nas do zbudowania wysokiej jakości skalowalnych systemów kwantowych.