

# Memoriu de activitate științifică

Drd. Amanda PREDA

Subsemnata, **Preda Amanda Teodora**, menționez principalele rezultate obținute în decursul activității științifice desfășurate ca doctorand la Facultatea de Fizica, direcția Fizica Stării Condensate, în perioada 2021-2025, fiind coordonată de domnul profesor universitar George Alexandru Nemneș. Tema tezei de doctorat este în domeniului transportului cuantic, în tandem cu metode computaționale de simulare în fizica materialelor, iar titlul este "Advanced Computational Methods for Quantum Information Processing".

Munca de cercetare în acest domeniu a început încă din ultimul an de master, lucrând sub îndrumarea domnului Dragoș Anghel, cercetător științific la IFIN-HH, Departamentului de Fizica Teoretică și a domnului profesor George Alexandru Nemnes. M-am familiarizat cu aspectele teoretice ale unui formalism relevant în cadrul transportului în sistemele mezoscopice numit metoda matricii R și am contribuit la un articol care explorează un extinderea formalismului într-un cadru biparticulă. Articolul a fost publicat în timpul primului meu an de doctorat, la revista Physics Letters A [1]. În continuare, am contribuit la articolul "Electric field control in phosphorene based heterostructures", publicat la Nanomaterials [2]. Am investigat influența substratului și a câmpului electric asupra fosforenei, în cadrul formalismului DFT-NEGF (density functional theory and nonequilibrium Green's functions) folosind SIESTA și TRANSIESTA. De asemenea, am lucrat la coduri Python care utilizează pachetul SISL pentru post-procesarea datelor obținute în urma calculelor DFT cu scopul de a vizualiza curenții de legătura ("bond currents") și curenții atomici ("atomic currents"). În felul acesta, pe lângă datele corespunzătoare funcțiilor de transmisie prin sistem, ne putem face o idee mai bună despre felul în care curentul este distribuit în diferitele regiuni și cum acest profil se schimbă în funcție de substrat și câmp electric. Rezultatele au fost prezentate pe scurt și în teza de doctorat, în cadrul capitolului "Methodologies of quantum transport", secțiunea 3.3.

În vara anului 2022, am susținut în cadrul conferinței internaționale IBWAP o prezentare orală cu titlul „Machine Learning Techniques Applied To Many-Particle States In Quantum Dot Systems”, în care am reluat rezultatele obținute în articolul „Investigation of bi-particle states in gate-array-controlled quantum dot systems aided by machine learning techniques”, publicat în Physica Scripta [3]. În cadrul prezentării am discutat despre metoda diagonalizării exacte aplicate în sistemele multi-particula pentru determinarea spectrului energetic, după care am analizat cât de eficientă este utilizarea unor metode de învățare automată („machine learning”) în scopul prezicerii valorilor proprii ale sistemului. Acesta a fost unul dintre primele studii în care am combinat rezultatele simulărilor de tip diagonalizare exactă cu metodele de învățare automată, una dintre tematicile centrale ale tezei de doctorat. Rezultatele sunt prezentate în teza în cadrul capitolului "Device modeling".

De asemenea, am aplicat codul de diagonalizare exactă în cazul unui rețea Lieb și studiem energia de dispersie în cazul variației mai multor parametri în sistem. Am folosit aceste date în cadrul unui model de tip „machine learning” bazat pe rețele neuronale. De asemenea, folosim pachetele Python „Pybinding” și „PythTB” pentru a compara rezultatele cu cele obținute în urma calculelor de tip „tight binding”. Ne-am concentrat pe ajustarea structurii de benzi a rețelei Lieb folosind modelul continuu, care este mult mai realist din perspectiva aplicațiilor experimentale (de exemplu procese litografice). Fiecare atom din structura corespunde unei gropi de potențial circulare și, impunând condiții periodice la frontiera și modificând potențialul, am reușit să reproducem structura unei rețele Lieb ideale. Pentru diferite configurații ale potențialului, am obținut, de asemenea, structura de benzi cu banda „flat” care este prezisă de modelele de tip „tight binding”.

Prin modificarea parametrilor esențiali putem crea clase de sisteme similare care pot fi explorate ulterior folosind tehnici de învățare automată. Aceste rezultate au fost prezentate sub forma de poster la conferința internațională “Northern Lights Conference 2022” din Reykjavik, Islanda.

În perioada octombrie-decembrie 2022, pentru două luni, am făcut parte dintr-un stagiu de practică la Universitatea Reykjavik din Islanda. Obiectivele principale ale stagiului de practică sunt studiul caracteristicilor I-V și al spectroscopiei de impedanță pentru celulele solare perovskitice, precum și simulările atomistice realizate cu ajutorul calculelor de tip DFT și utilizarea metodelor de învățare automată pentru analizarea datelor.

După întoarcerea în țară, am contribuit la posterul “Modelarea detecției de biomolecule folosind straturi active semiconductoare, optimizate prin tehnici de învățare automată”, prezentat la conferința DPG Spring Meeting 2023. În cadrul acestui studiu, au fost analizate în detaliu materialele semiconductoare 2D (ex. nanopanglică de fosforenă) care pot fi utilizate ca strat activ, în contact cu diferite tipuri de molecule de gaz. Inițial, pentru a studia proprietățile de transport ale sistemului în diferite configurații au fost folosite simulările DFT, realizate cu SIESTA și TranSIESTA. În continuare, după ce a fost analizat un număr considerabil de sisteme, am lucrat la modele de învățare automată bazate pe rețele neuronale artificiale pentru a obține în mod eficient predicții care vizează proprietățile fizice (ex. conductanța sistemului) din proprietățile structurale.

De asemenea, în această perioadă am început o colaborare cu dl. prof. Ulrich Wulf, de la Universitatea BTU din Cottbus, pentru a realiza simulări numerice care vizează un nanotranzistor dublu-canal. Am studiat un dispozitiv nanotranzistor cu efect de câmp realizat din Si/SiO<sub>2</sub>, care se bazează pe tunelarea rezonantă laterală între cele două canale de conducție paralele. Dl. prof. Wulf a introdus un model de potențial liniar pe baza căruia a calculat proprietățile de transport folosind metoda matricii R. În paralel, eu am realizat simulările numerice folosind același formalism și verificând rezultatele cu pachetul Kwant. În caracteristicile de transfer am observat un maxim îngust de tunelare rezonantă în jurul valorii zero a tensiunii de control. Un astfel de maxim îngust permite comutarea curentului de drenă cu tensiuni de control mici, deschizând astfel calea către aplicații cu consum redus de energie. Rezultatele obținute au fost publicate în articolul [4] și sunt prezentate și în teza de doctorat.

Am prezentat posterul “The Design Of A Probabilistic Quantum Sorter In The R-Matrix Formalism”, la conferința IBWAP 2023, pentru care am primit și locul 2 la competiția pentru cel mai bun poster. În cadrul acestui studiu, am analizat numeric, cu metoda matricii R, sistemele de tip multi-terminal (cu un singur input și multiple outputuri) care ar putea funcționa ca un sorter cuantic. Am propus în acest fel o implementare concretă a unui dispozitiv relevant în domeniul informației cuantice. În ultimele luni, am continuat în această direcție și am explorat materiale cu proprietăți topologice (izolatori topologici) și straturi de grafena decorate cu adatomii care induc o interacție spin-orbită puternică între atomii de carbon și favorizează menținerea unei faze topologice robuste.

Am publicat și articolul “Design of Nanoscale Quantum Interconnects Aided by Conditional Generative Adversarial Networks” [5], în care am studiat densitatea de sarcină în sisteme bidimensionale neuromorfe, care ar putea fi folosite pe post de interconexiuni cuantice între registre de puncte cuantice. Am investigat atât sisteme uniparticulă cât și sisteme cu mai mulți electroni, folosind metoda diagonalizării exacte și, ulterior, metode de învățare automată (“pix2pix”) pentru a explora viabilitatea acestora în eficientizarea calculelor. Rezultatele sunt prezentate în mod detaliat în teza de doctorat. De asemenea, am contribuit la simulările cu învățare automată (*machine learning*) pentru articolul “Collective dynamics of Ca atoms encapsulated in C60 endohedral fullerenes”, publicat la revista Physical Chemistry Chemical Physics [6].

Am ținut prezentarea intitulată “Quantum transport and information processing in multi-terminal devices” în cadrul evenimentului Quantum Days organizat în IFIN-HH, în care am discutat despre rezultatele grupului în domeniul transportului cuantic, metodele numerice și instrumentele de simulare pe care le folosim, precum și colaborările în curs de desfășurare.

În luna martie 2025, am susținut prezentarea cu titlul “Designing quantum sorters based on 2D topological insulators” la conferința DPG, unde am introdus o versiune bazată pe materiale topologice 2D a unui sorter cuantic. Ideea de sorter cuantic vine din domeniul informației cuantice

și sorterele cuantice universale care funcționează pentru orice observabilă arbitrară au fost propuse din punct de vedere teoretic. Pana acum, astfel de dispozitive au fost explorate mai ales în domeniul opticii cuantice. Noi am propus un sorter cuantic bazat pe materiale bidimensionale cu un terminal de intrare și mai multe terminale de ieșire care separa electronii după spin și impulsul transversal. Pentru a optimiza eficiența de separare a stărilor cuantice, am utilizat pachetul Kwant pentru a modela un sorter cuantic bazat pe materiale topologice descrise de Hamiltonianul BHZ. Am susținut prezentarea în cadrul secțiunii “Quantum transport and quantum Hall effects”. De asemenea, am asistat pe parcursul conferinței la o serie de alte prezentări relevante din domeniu.

De asemenea, am continuat cu versiunea de sorter cuantic bazat pe un dispozitiv mezosopic cu mai multe terminale, care are ca scop separarea stărilor de intrare în funcție de spin și de modulul transversal. Alegând un Hamiltonian potrivit în regiunea de împrăștiere, controlabil prin porți electrostatice, am simulat un dispozitiv care permite separarea auto-stărilor în cele patru ieșiri. În acest scop, am utilizat formalismul R-matrix și Kwant, un program Python bazat pe modelul tight-binding, pentru a modela dispozitivul propus. Rezultatele au fost publicate în Scientific Reports în luna iulie 2025 [7].

În paralel cu activitatea de cercetare, am avut și activitate didactică în facultate. În ultimul an, am predat seminarele și laboratoarele de Fizica Stării Solide pentru grupele de licență, precum și seminarul cursului de “Physics of Mesoscopic Systems” la grupa de master PAMN (*Physics of Advanced Materials and Nanostructures*).

În concluzie, pe parcursul studiilor doctorale am susținut o activitate de cercetare constantă care se reflecta în participările la conferințe internaționale și în articolele publicate în ultimii patru ani.

### Participări la conferințe:

- IBWAP 2022 (*International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science*), Constanta, Romania - prezentarea orală “Machine Learning Techniques Applied To Many-Particle States In Quantum Dot Systems ”
- Northern Lights 2022, Islanda-posterul “Tuning electronic band structure properties in Lieb-like lattices”
- DPG Spring Meeting - Condensed Matter Section 2023, Dresden, Germania - prezentarea orală “Predicting charge density maps in 2D nanostructures with machine learning techniques”
- Prezentare invitată la Universitatea BTU, Cottbus, Germania (2023) - “Quantum Transport for Information Processing”
- IBWAP 2023 (*International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science*), Constanta, Romania - poster ” “The Design Of A Probabilistic Quantum Sorter In The R-Matrix Formalism”
- DPG Spring Meeting - Condensed Matter Section 2025, Regensburg, Germania - prezentarea orală “Designing a quantum sorter based on two-dimensional topological insulators”

## Bibliografie

- [1] D.-V. Anghel, A. T. Preda, and G. A. Nemnes, “The r-matrix formalism for two-particle scattering problems,” *Physics Letters A*, vol. 425, p. 127865, 2022, ISSN: 0375-9601. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127865>. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960121007295>.

- [2] C.-A. Pantis-Simut, A. T. Preda, N. Filipoiu, A. Allosh, and G. A. Nemnes, “Electric-field control in phosphorene-based heterostructures,” *Nanomaterials*, vol. 12, no. 20, 2022, ISSN: 2079-4991. DOI: [10.3390/nano12203650](https://doi.org/10.3390/nano12203650). [Online]. Available: <https://www.mdpi.com/2079-4991/12/20/3650>.
- [3] G. A. Nemnes, T. L. Mitran, A. T. Preda, I. Ghiu, M. Marciu, and A. Manolescu, “Investigation of bi-particle states in gate-array-controlled quantum-dot systems aided by machine learning techniques,” *Physica Scripta*, vol. 97, no. 5, p. 055 813, Apr. 2022. DOI: [10.1088/1402-4896/ac5ff6](https://doi.org/10.1088/1402-4896/ac5ff6). [Online]. Available: <https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/ac5ff6>.
- [4] U. Wulf, A. T. Preda, and G. A. Nemnes, “Transport in a two-channel nanotransistor device with lateral resonant tunneling,” *Micromachines*, vol. 15, no. 10, 2024, ISSN: 2072-666X. DOI: [10.3390/mi15101270](https://doi.org/10.3390/mi15101270). [Online]. Available: <https://www.mdpi.com/2072-666X/15/10/1270>.
- [5] A. T. Preda *et al.*, “Design of nanoscale quantum interconnects aided by conditional generative adversarial networks,” *Applied Sciences*, vol. 14, no. 3, 2024, ISSN: 2076-3417. [Online]. Available: <https://www.mdpi.com/2076-3417/14/3/1111>.
- [6] M. Cosinschi *et al.*, “Collective dynamics of ca atoms encapsulated in c60 endohedral fullerenes,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 26, pp. 22 090–22 098, 33 2024. DOI: [10.1039/D4CP01048E](https://doi.org/10.1039/D4CP01048E). [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1039/D4CP01048E>.
- [7] A. T. Preda, I. Ghiu, L. Ion, U. Wulf, A. Manolescu, and G. A. Nemnes, “Implementation of a multi-terminal quantum sorter in solid state systems,” *Scientific Reports*, vol. 15, no. 1, p. 23 738, 2025. DOI: [10.1038/s41598-025-05860-x](https://doi.org/10.1038/s41598-025-05860-x). [Online]. Available: <https://doi.org/10.1038/s41598-025-05860-x>.

Semnătura,

