

# RAPORT STIINTIFIC FINAL

privind implementarea proiectului

## Metode de invatare automata pentru rezolvarea problemelor multi-particula in mecanica cuantica

### I. OBIECTIVELE PROIECTULUI

Proiectul are ca obiectiv principal dezvoltarea tehnicilor de invatare automata (*machine learning, ML*) pentru rezolvarea eficienta a problemelor multi-particula, la care se adauga probleme relevante pentru teoria informatiei cuantice si aplicatii in nanotehnologie. Exista o larga aplicabilitate a problemelor multi-particula, care pot viza domenii precum fizica nucleara sau fizica starii condensate. In cadrul proiectului, problemele multi-particula sunt abordate atat din perspectiva diagonalizarii exacte (*exact diagonalization, ED*), cat si din perspectiva calculelor atomistice folosind teoria functionalei de densitate (*density functional theory, DFT*). O serie de investigatii sunt dezvoltate, precum descrierea imprastierilor bi-particula, aplicatii de transport descris prin calcule *ab initio* sau in aproximatia masei efective, augmentate de tehnici de invatare automata (NEGF-DFT-ML), modele de neuroni artificiali, lista nefiind exhaustiva. Pe langa acestea, metodele de tip ML dezvoltate in cadrul proiectului sunt utilizabile si in alte domenii, avand un impact mult mai general.

Vom detalia in continuare rezultatele Etapei III, urmate de un sumar al rezultatelor obtinute in etapele anterioare si indicatorii de rezultat realizati. Apoi este discutat impactul estimat si este prezentat cel mai semnificativ rezultat. In final, este indicat un sumar al activitatilor desfasurate.

### II. DESCRIEREA STIINTIFICA, CU PUNEREA IN EVIDENTA A REZULTATELOR SI INDICATORILOR DE REZULTAT

- Eficientizarea schemei self-consistente in cadrul calculelor DFT utilizand retele neurale artificiale.
- Design-ul dispozitivelor de tip nanoFET si aplicatii ale retelelor neurale.
- Elaborarea unui model de neuron cuantic.
  - Implementarea unei abordari de tip multi-particula pentru probleme de imprastiere cu aplicatie la dispozitive neurale cuantice: stabilirea structurii/geometriei si optimizarea potentialului de imprastiere.
  - Integrarea dispozitivelor de tip neuron cuantic in retele neurale cuantice. Implementarea unei scheme de invatare de tip back-propagation, antrenare si testare.
- Invatare automata in spatii reduse pentru emularea corelatiilor de pairing in sisteme supraconductoare.
- Alte studii relevante pentru obiectivele proiectului.
- Sumar al activitatilor din Etapele I si II.
- Indicatori de rezultat realizati.

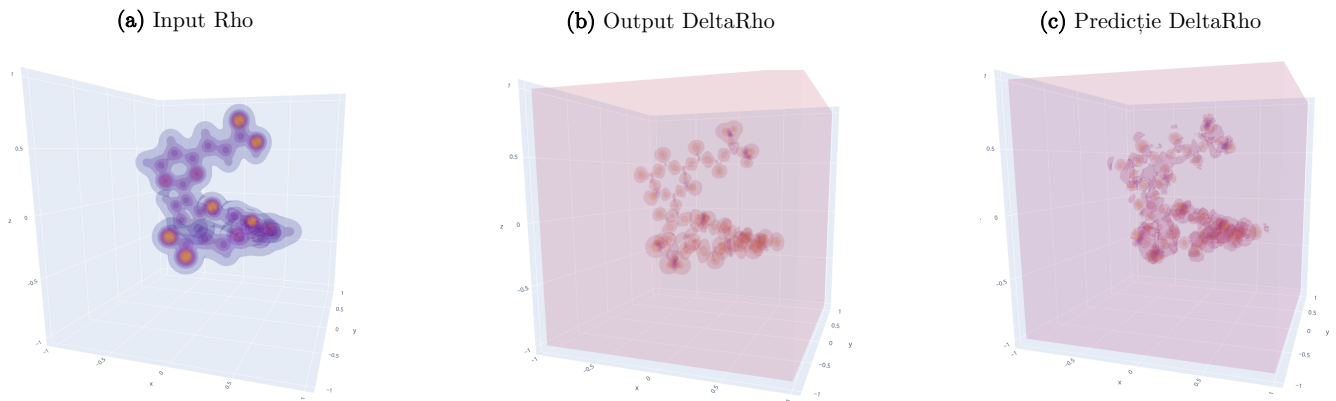


FIG. 1: (a) Densitatea de sarcina inițială  $\rho_i$ , (b) Diferența de sarcina calculată,  $\Delta\rho = \rho_f - \rho_i$ , dintre densitatea inițială  $\rho_i$  și cea finală  $\rho_f$  și (c) Diferența de sarcina prezisă,  $\Delta\tilde{\rho}$ , prin abordarea de tip cGAN.

### A. Eficientizarea schemei self-consistente în cadrul calculelor DFT utilizând rețele neurale artificiale

Calcululele de tip *ab initio* reprezintă un interes major în studiul de noi materiale și nanostructuri. Teoria funcționalei de densitate (*density functional theory* - DFT) reprezintă o metodă eficientă pentru a aborda sisteme cu mai mulți electroni, prin transformarea acestora în sisteme efectiv uni-particulă. Cu toate acestea, rezolvarea self-consistentă a ecuațiilor Kohn-Sham necesită un efort computațional considerabil atunci când numărul de atomi din simulare sau numărul total de sisteme analizate este mare (cateva sute până la mii de atomi în celula unitate, respectiv, mii până la zeci de mii de sisteme).

În cadrul acestei activități se urmărește predicția densității de sarcină pentru a reduce numărul de pași în cadrul schemei self-consistente, folosind metode de învățare automată de tip cGAN (*conditional Generative Adversarial Networks*). Sunt analizate sisteme moleculare de tip *non-fullerene acceptor* (NFAs) utilizând o bază de date ce conține peste 50000 de exemple [Lopez et al., *Joule* 1, 857 (2017)], utilizând pachetul software SIESTA, utilizând o funcțională de corelație și schimb parametrizată de Ceperley și Alder, în aproximația densității locale (LDA). Pentru câteva cazuri sunt efectuate teste pentru densitatea de sarcină cu o funcțională hibridă (B3LYP) utilizând pachetul TURBOLMOLE, obținându-se rezultate similare.

Rezolvarea ecuațiilor Kohn-Sham presupune un proces iterativ, pornind de la o densitate de sarcină inițială, care este dată de suma densităților atomilor individuali izolați, și în final ajungând la densitatea de sarcină obținută self-consistent. Acest proces iterativ este realizat într-un număr finit de pași, care poate în unele cazuri să fie mai scump din punct de vedere al resurselor computaționale alocate în funcție de structură. Urmărim astfel să dezvoltăm o procedură de tip învățare automată, cu scopul de a prezice densitatea finală și/sau diferența dintre cea inițială și cea finală în vederea reducerii numărului de pași în bucla de self-consistență (i.e numărul de iterații). Punctul de plecare este studiul publicat recent [Pantis et al., *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 4, 025023 (2023)], în care tehnicile de învățare automată au fost folosite pentru a prezice densitatea de sarcină al unui sistem 2D, multi-particulă plasat într-un potențial extern folosind rețelele de tip cGAN pentru translații de imagini. În cadrul acestei activități a fost dezvoltat un model pentru translații 3D, de la volum la volum, folosind rețele de tip cGAN. Acest model mapează densitățile de sarcină 3D inițiale, ușor de obținut, către cele finale. În figura 1 este prezentat un caz tipic, în care

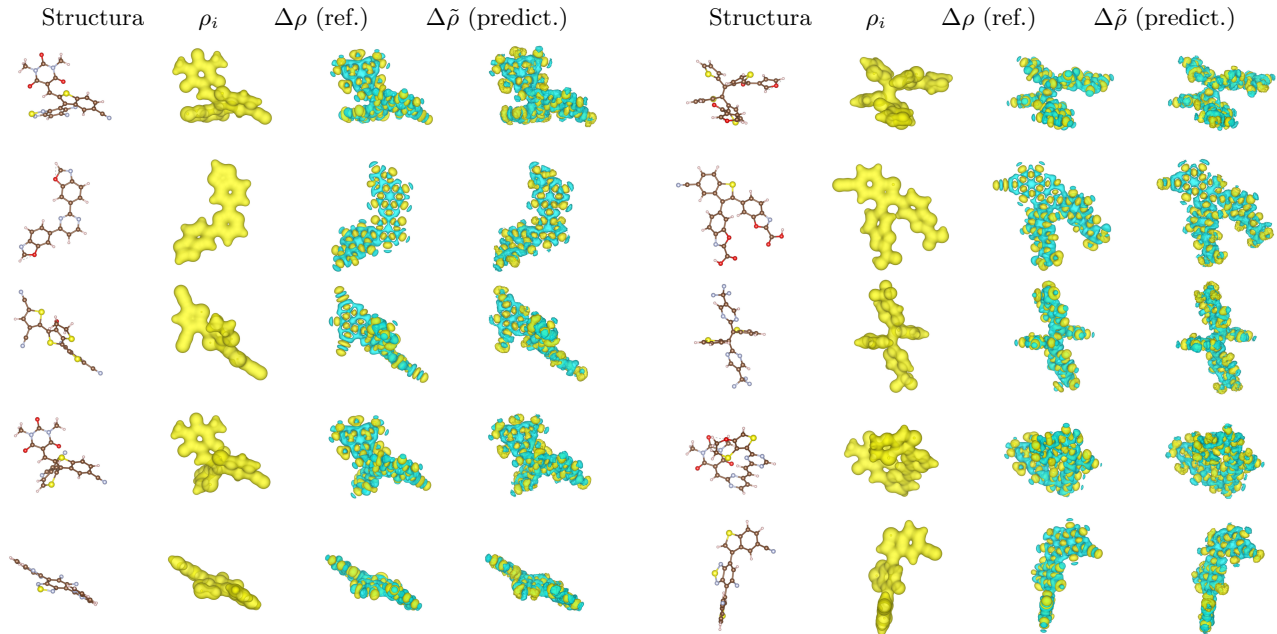


FIG. 2: Set molecule de test: configuratie atomica, densitatea initiala ( $\rho_i$ ), diferenta de sarcina reala/calculata ( $\Delta\rho$ ), diferenta de sarcina prezisa ( $\Delta\tilde{\rho}$ ).

sunt reprezentate: densitatea de sarcină inițială  $\rho_i$  (Input), diferența  $\Delta\rho$  (Output) dintre densitatea finală  $\rho_f$  și cea inițială  $\rho_i$ , precum și diferența de sarcină prezisă,  $\Delta\tilde{\rho}$ .

Odată prezise, aceste diferențe de sarcină pot fi servite ca input codului SIESTA. Astfel, bucla de self-consistență porneste de la o densitate mai apropiată de cea reală, fapt care conduce la reducerea numărului de iterații. Pentru antrenarea modelului este utilizat un număr de 2000 de structuri considerând diferite tipuri de molecule, cu un număr între 30 și 60 atomi. Exemple sunt indicate în Fig. Folosind codul SIESTA, au fost calculate densitățile inițiale și cele finale, pe un grid spațial de  $128 \times 128 \times 128$ . În cadrul modelului de învățare automată de tip cGAN sunt angajate două rețele, un Generator și un Discriminator, prima rețea încercând să creeze output-ul vizat, în timp ce a doua rețea clasifică imaginile generate ca fiind "Real" or "Fake". Generatorul are o arhitectură de tip U-Net, fiind practic un autoencoder care folosește straturi convolutive pentru a reduce dimensiunea volumului, formând anumite caracteristici (*features*) pentru învățare, după care reconstruiește volumul înapoi la forma originală sau dorită. Convoluțiile 3D au fost implementate cu o dimensiune a kernelului de  $K = 4$ , în pași de  $s = 2$  (*stride*), folosind ca inițializator o distribuție normală, iar arhitectura U-Net a fost realizată în  $\searrow 7 \times 7 \nearrow$  pași. Discriminatorul are ca funcție clasificarea volumului final prezis pe subregiuni și redus la dimensiunea  $14 \times 14 \times 14$ . Rezultatul discriminatorului va fi folosit pentru a calcula atât funcția loss a generatorului cât și cea a discriminatorului folosind *binary cross entropy error function*. Un factor  $\lambda = 100$  a fost folosit pentru a combina loss-ul generatorului (binary cross entropy) și o funcție de eroare  $L_1$  calculată folosind densitatea prezisă și cea reală. Pentru antrenarea ambelor modele a fost utilizat optimizatorul *Adam*, iar antrenarea a fost derulată pe parcursul a 40000 pași.

După o inspecție vizuală putem concluziona că diferențele de densitate sunt asemănătoare cu cele reale însă, pentru a testa modelul, calculele DFT efectuate cu SIESTA sunt reponite cu densitățile prezise. Un prim set de test de zece molecule, descris în Fig. 2, indică în unele cazuri o ușoară îmbunătățire în bucla de self-consistență, spre exemplu,

prin miscorarea numarului de pasi cu 1-2 (10-20%) din numarul initial de pasi ( $\sim 10$  pasi) pentru 7 cazuri de test, in timp ce unul dintre cazuri nu prezinta imbunatatiri, iar in altele doua cazuri numarul de pasi creste cu o unitate. Marind dimensiunea si complexitatea setului de test la 40 de exemple se obtine o reducere la numarul de pasi de pana la  $\sim 30\%$  in cel putin jumătate din cazuri. Rezultatele sunt incurajatoare, dovedind functionalitatea abordarii de tip cGAN pentru predictia densitatii. Aceste rezultate creeaza premisele dezvoltarii unui modul pentru eficientizarea calculului self-consistente din cadrul DFT, pentru un set larg de sisteme, in cadrul pachetului SIESTA. Pentru aceasta, vor fi necesare investigatii suplimentare privind un set mai amplu de sisteme, cu dimensiune si complexitate crescuta.

### B. Design-ul dispozitivelor de tip nanoFET si aplicatii ale retelelor neurale.

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

In cadrul acestei activitati este analizata configuratia unui nanoFET cu canal dublu, ilustrat in Fig. 3. Aceasta configuratie permite o buna comutatie a curentului de drena, care este controlat de un efect de *matching* intre unele quasi-stationare din cele doua canale. Potentialul electrostatic este determinat, intr-o prima aproximatie, prin rezolvarea ecuatiei Poisson cu conditii la capete fixate de potentialele asociate contactelor (Figura 4). Functia de transmisie indicata in Fig. 5 prezinta o serie de oscilatii corespunzatoare conditiei de *matching*, cu maxime corespunzatoare situatiei *in-phase* si minime pentru situatia *out-of-phase*.

Este analizata functia de transmisie pentru o configuratie tipica: dimensiunea laterala a contactelor sursa / drena  $D_C = 3$  nm, largimea barierei centrale  $D_B = 2$  nm, inaltimea barierei  $V_B = 2$  eV, lungimea canalului  $L = 30$  nm, masa efectiva  $m^* = 0.32m_0$ . Prin aplicarea potentialelor de drena ( $V_d$ ) si poarta ( $V_g$ ) potentialul de imprastiere se modifica si, odata cu acesta, curentul de drena,  $I_d(V_d, V_g)$ . Pentru rezolvarea eficienta a ecuatiei Poisson in doua dimensiuni, cu un grid suficient de fin, a fost utilizat pachetul Python *scipy*, mai exact rutina de rezolvare a sistemelor liniare de ecuatii bazata pe matrici sparse. La acesta se adauga offsetul de banda generat de bariera de potential in regiunea de imprastiere.

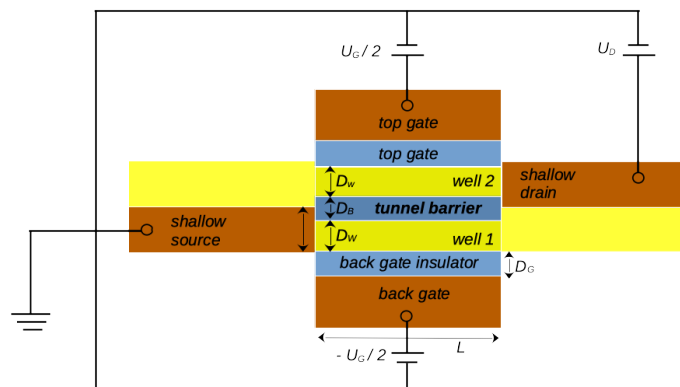


FIG. 3: NanoFET cu canal dublu, in care electronii din canalul inferior (de sursa) tuneleaza in canalul superior (de drena). Prin actiunea potentialelor aplicate pe portile *top-gate* si *bottom-gate*, transistorul poate trece din stare ON (conductie sursa-drena) in stare OFF.

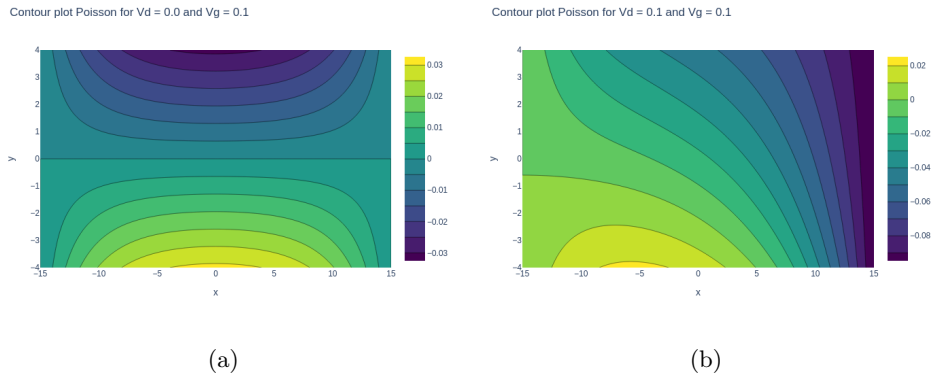


FIG. 4: Harta de potential electrostatic rezultata din rezolvarea ecuatiei Poisson, pentru diferite conditii de tensiune aplicata: (a)  $V_d = 0$  V,  $V_g = 0.1$  V; (b)  $V_d = 0.1$  V,  $V_g = 0.1$  V.

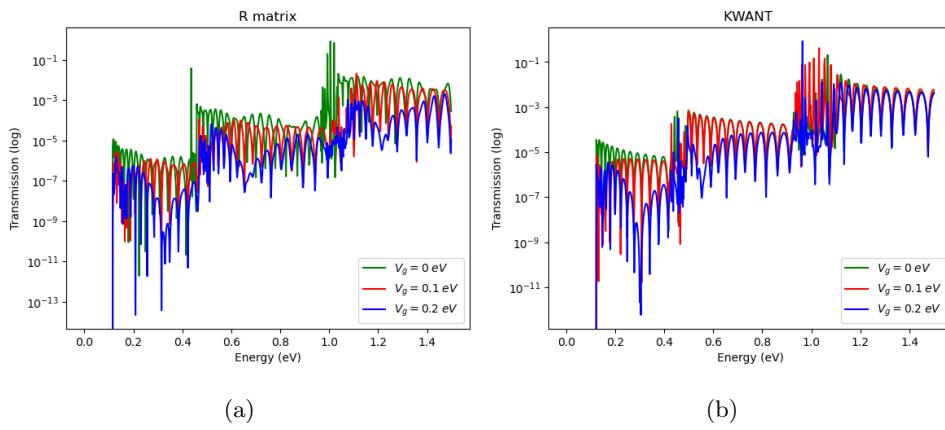


FIG. 5: Functia de transmisie sursa-drena fara la  $V_d = 0$  eV si  $V_g = 0, 0.1, 0.2$  eV. Comparatie intre rezultatele obtinute cu Kwant si matricea R.

Functia de transmisie este determinata folosind doua coduri diferite, R-matrix si KWANT, care descriu problema de imprastiere. Functiile de transmisie reprezentate in Fig. 5 indica rezultate foarte asemanatoare pentru cele doua metode, indicand o buna acuratete de calcul. Odata cu aplicarea unui potential simetric pe cele doua porti, se observa o scadere in transmisie. Oscillatiile functiei de transmisie se explica prin conditia de matching intre undele cvasi-stationare din cele doua canale, asa cum se evidentiaza in Fig. 6 .

In continuare, folosind facilitatile de calcul paralel, este determinat  $I_d(V_d, V_g)$  pentru 2000 de perechi  $(V_d, V_g)$ . Rezultatul este indicat in Fig. 7. Prin marirea potentialului de drena, se obtin platouri de quasi-saturatie in curentul de drena, dupa cum se poate observa in Fig.7b. Pe de alta parte, cresterea potentialului de poarta  $V_g$  conduce la o scadere a functiei de transmisie si, concomitent a curentului de drena, prin inchiderea canalului inferior. Astfel, transistorul trece din starea ON in stare OFF. Aceasta tranzitie este accentuata de prezenta barierei centrale in configuratia nanoFET-ului cu dublu canal.

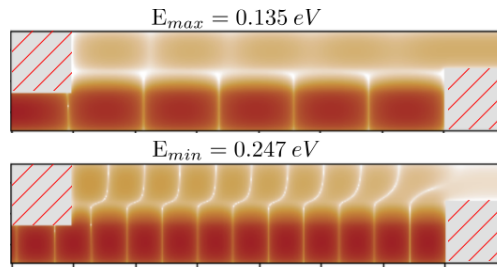


FIG. 6: Functii de unda corespunzatoare situatiilor (a) *in-phase*,  $E = 0.135$  eV si (b) *out-of-phase*,  $E = 0.247$  eV, care corespund unui maxim si, respectiv, unui minim in functia de transmisie. Functiile de unda au fost calculate in cazul fara potentiale aplicate,  $(V_d, V_g) = (0, 0)$ , la  $V_b = 2$  eV si  $m_{eff} = 0.32 m_0$

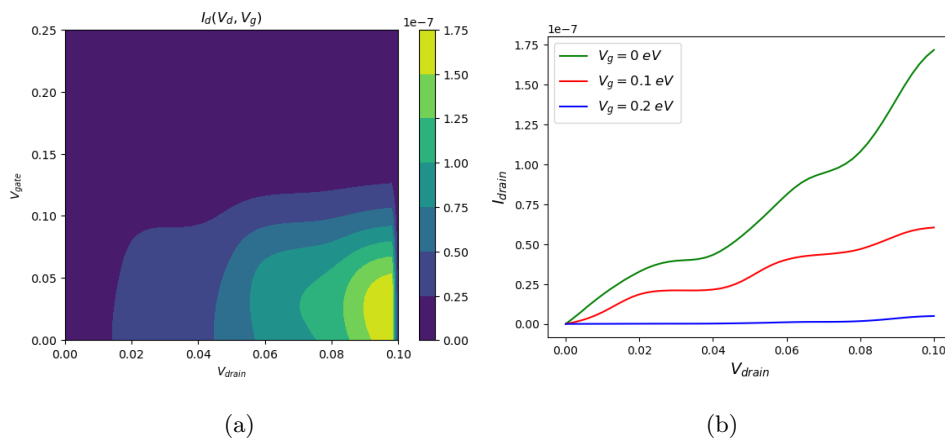


FIG. 7: Dependenta curentului de drena  $I_d$  ca functie de potentialele aplicate pe drena ( $V_d$ ) si portile *top-gate* ( $V_g/2$ ) si *bottom-gate* ( $-V_g/2$ ).

### 1. Implementarea retelelor neuronale artificiale dense

Rezolvarea problemelor de imprastiere necesita resurse importante atunci cand numarul de instante creste mult, dar si atunci cand se doreste o acuratete mare de calcul, in prezenta unor potentiale cu variatie rapida (e.g. bariera de potential din zona centrala). Prin urmare au fost investigate metode de invatare automata capabile sa reproduca dependenta curentului de drena de potentialul de imprastiere si, implicit, de potentialele aplicate pe electrozi. In prima faza, am testat aplicabilitatea retelelor neuronale artificiale ("artificial neural networks") pentru determinarea curentului de drena din valoarea potentialelor de poarta si drena, iar pentru implementarea arhitecturii retelei am folosit pachetul Tensorflow. In urma realizarii simularilor numerice bazate pe formalismul matricii R, am avut la dispozitie un set de 2600 de date pentru  $(V_d, V_g, I_d)$ , pe care l-am impartit in 2080 de date de antrenare (80% din setul complet de date) si 520 de date de test (20%). Dintre datele pentru antrenare, un procent de 20% au fost utilizate pentru validare, un proces prin care modelul isi evalueaza performanta in timp real pe parcursul procesului de "backpropagation" si scade probabilitatea de "overfitting". Potentialul de poarta aplicat a fost variat intre 0 eV si 0.25 eV, cu un pas de 5 meV, iar potentialul de drena a avut valori cuprinse intre 0 eV si 0.1 eV, cu un pas de 2 meV. Pentru optimizarea procesului de invatare al retelei neuronale, atat datele de intrare cat si datele de iesire,

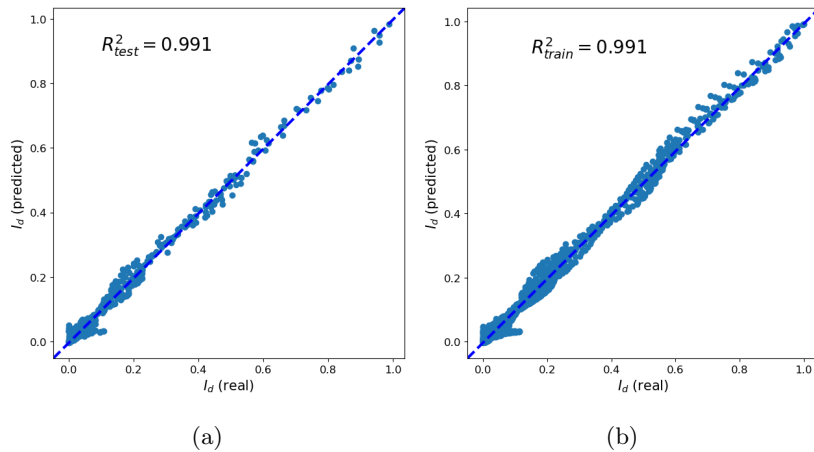


FIG. 8: Analiza grafica a performantei rețelelor neuronale artificiale pentru prezicerea curentului de drena. Pe abscisa sunt reprezentate datele reale, obținute din simulări, iar pe ordonata sunt datele prezise de model.

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 barieră, masa efectivă și dimensiunea canalului nanotranzistorului.

Arhitectura rețelei neuronale conține 4 straturi ascunse cu 10, 30, 50 și 100 de neuroni, funcția de activare fiind RELU. Intrările sunt tensiunile aplicate, iar ieșirea este curentul de drena. Procesul de antrenare a fost realizat pentru 1200 de epoci, cu un batch size de 16, iar optimizatorul folosit a fost ADAM. Acuratetea 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 pot evita cazurile în care modelul ajunge într-un stadiu de overfitting. Deși pentru multe dintre configurațiile sistemului curentul de drena este practic nul, rețeaua neuronală are o performanță foarte bună și coeficientul de determinare ajunge la 99%, după cum se observă în Figura 8. Am testat aceeași arhitectură și pentru seturi de date de antrenare de dimensiuni reduse, cu  $N_{\text{train}} = 1560, 1300, 780$ , iar coeficientul de determinare a rămas la valori de peste 90%, deși se observă 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.

## 2. Implementarea rețelelor neuronale convolutive

Oscilațiile în funcție de transmisie care se observă în figura 5 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 convolutive 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 traducere între o imagine de input și de output. Pentru sistemul bidimensional prin care am descris

Strat	Parametri	Funcție de activare
Input	(60, 60, 1)	-
Conv2D	$f = 16, k = (3,3)$	LeakyReLU
MaxPool2D	$d = (2,2)$	-
Conv2D	$f=32, k=(4,4)$	LeakyReLU
MaxPool2D	$d = (2,2)$	-
Conv2D	$f = 64, k = (5,5)$	LeakyReLU
MaxPool2D	$d = (2,2)$	-
Dense	$N = 32, \text{drop} = 0.2$	LeakyReLU
Dense	$N = 64, \text{drop} = 0.2$	LeakyReLU
Dense	$N = 500$	ReLU
Output	100	-

TABLE I: Arhitectura rețelei neuronale și parametri relevanți în antrenarea modelului. Notatia  $f$  denota numărul de filtre aplicate în stratul convoluțional, iar  $k$  este dimensiunea kernelului. De asemenea, ”drop” reprezintă metoda ”dropout”, prin care se elimină un număr de neuroni dintre două straturi ale rețelei neuronale.

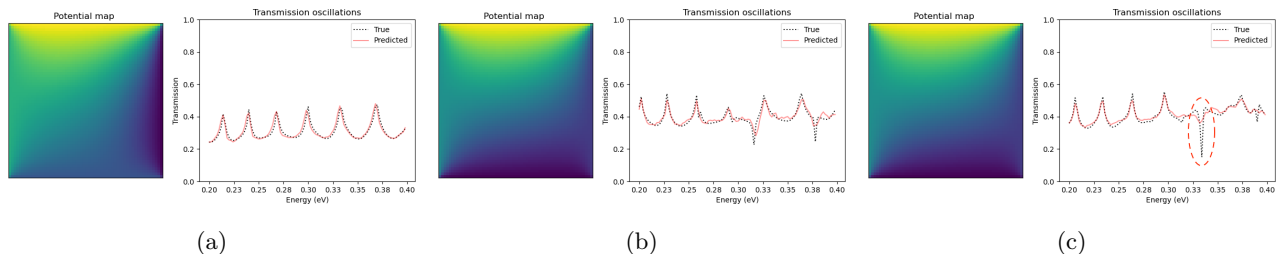


FIG. 9: Serie de rezultate reprezentative în urma antrenării modelului CNN. Coloana din stanga figureaza harta de potential electrostatic, iar în dreapta sunt funcțiile de transmisie reale și prezise. Se observă că erorile în predicție apar în regiunile de energie în care transmisia prezintă variații bruște sub formă de peak-uri înguste (figura c)).

tranzistorul, datele de intrare sunt hartile de potential electrostatic obținute prin rezolvarea ecuației Poisson. Am considerat întregul profil de potential electrostatic al nanostructurii, inclusiv regiunile izolatoare (”top gate insulator” și ”bottom gate insulator”). În comparație, în simularile realizate cu matricea R și KWANT, a fost luată în calcul doar zona de împrăștiere, compusă din cele două canale separate de bariera de potential. 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  $60 \times 60$ , 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 prețis. De asemenea, transmisia a fost mediata pe intervale de  $10^{-3}$  eV. Structura arhitecturii modelului bazat pe CNNs este prezentată în tabelul I, 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



si 20% pentru validare. Cateva dintre rezultatele obtinute pentru setul de date de test pot fi vizualizate in Figura 9. Pentru a evalua performanta modelului, am folosit coeficientul de determinare  $R^2$  si am obtinut o valoare de 92%. Procesul de predictie se poate eficientiza pe mai departe prin utilizarea unor sisteme dedicate, precum sistemul fpga Xilinx Alveo U50.

*Aspecte teoretice privind aceasta tema sunt dezvoltate pe mai departe in colaborare cu d-l Prof. Ulrich Wulf de la Universitatea Tehnica Brandenburg (BTU), fiind premise bune pentru realizarea unui prototip, pornind de la un wafer fabricat de Soitec si postprocesat de Helmholtz Center Dresden/Rossendorf (HZDR) si BTU.*

### C. Elaborarea unui model de neuron cuantic

In cadrul acestei directii de studiu propunem o abordare pe mai multe planuri privind design-ul unor dispozitive neuromorfe, care pot avea (i) rol in eficientizarea design-ului unor elemente de circuit multi-terminal, (ii) rol de interconectare a unor dispozitive cuantice, dar si (iii) rol activ de comutatie similar neuronilor artificiali. Metodologia implicata include diagonalizare exacta (*exact diagonalization*, ED) pentru determinarea starilor multi-particula, retele conditionale generativ-adversative (*conditional generative-adversarial networks*, cGAN) pentru translatie de imagini si rezolvarea problemelor de imprastiere in sisteme multi-terminal.

1. *Implementarea unei abordari de tip multi-particula pentru probleme de imprastiere cu aplicatie la dispozitive neurale cuantice: stabilirea structurii/geometriei si optimizarea potentialului de imprastiere.*

Interconectarea nano-dispozitivelor cu scopul asamblarii arhitecturilor pentru aplicatii de *quantum computing* este una dintre provocarile actuale in domeniul fizicii starii condensate aplicate. Transferul de informatie intre diferite componente ale unui circuit cuantic trebuie realizata prin intermediul unor componente aditionale de circuit, denumite generic interconexiuni cuantice (*quantum interconnects*). In functie de informatia transmisa, acestea pot fi implementate sub forma ghidurilor de unda fotonice, electronice sau magnetice. La o scala de ordinul nanometrilor, interconexiunile cuantice trebuie tratate intr-o maniera similara cu regiunile active ale dispozitivelor, deoarece din punct de vedere al descrierii in cadrul mecanii cuantice prezinta acelasi nivel de complexitate.

In aceasta etapa, am studiat localizarea de sarcina in sistemele neuromorfe bidimensionale care pot fi utilizate pentru realizarea conexiunilor intre puncte cuantice (*quantum dots*, QDs), care servesc ca registrii de intrare/iesire. Structura dispozitivului este determinata de un sistem de porti, generat prin intermediul unui strat de porti flotante, care impune profilul de potential pentru gazul electronic bidimensional. Densitatile de sarcina sunt calculate exact pentru cazul cu interactie Coulombiana intre electroni si ar putea fi determinate experimental prin masurarea curentului de tunelare perpendicular pe suprafata dispozitivului. Imaginea rezultanta din masurarea curentului de tunelare este, intr-o prima aproximatie, o convolutie intre densitatea de sarcina din starea fundamentala si un filtru, in general necunoscut, ce depinde de geometria varfului STM. Folosind metode de invatare automata pentru *image-to-image translation*, putem determina harta densitatii de sarcina avand ca input potentialul de confinare, dar si prin deconvolutia harta de curenti de tunelare, care poate fi accesata experimental.

Transferul de informatie cuantica intre registrii de puncte cuantice se bazeaza pe ghiduri de unda electronice. In sistemele neuromorfe, acestea au o structura similara sinapselor neuronului biologic, astfel incat mai multe puncte

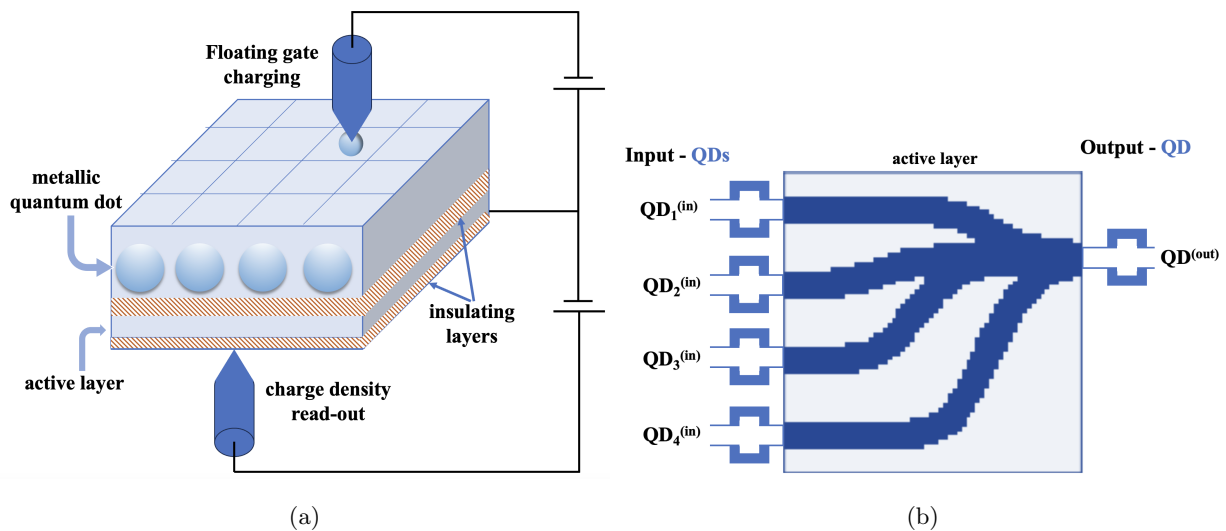


FIG. 10: Reprezentarea schematică a sistemului neuromorf reconfigurabil. (a) Un strat de porți flotante de QD-uri controlează confinarea în stratul activ; Varfurile STM efectuează încărcarea QD-urilor corespunzătoare portilor flotante și citirea densităților de sarcina din stratul activ. (b) O vedere în plan a stratului activ, unde este definit dispozitivul neuromorfic. Registrele QD sunt conectate la terminalele de intrare și de ieșire, inserand și colectând electroni.

cuantice sunt conectate la un singur output 10. O astfel de structura neuromorfică este generată pe un strat activ bidimensional, folosind confinare electrostatică indusă de porți flotante, alimentate de un ac STM. Profilul densității de sarcină în dispozitiv este legat în mod direct de forma ghidurilor de undă, care este la rândul ei setată de aspecte geometrice precum curbura lead-urilor și poziționarea punctelor de inflexiune. De asemenea, stările multi-electronice sunt influențate de aplicarea câmpurilor electrice care acționează în planul structurii, prin modificarea distribuției de sarcină în porțile flotante. Într-un set-up experimental, densitatea de sarcină poate fi extrasă prin măsurarea curentului de tunelare cu ajutorul unui al doilea ac STM. Densitatea reală de sarcină poate fi obținută prin deconvoluția hărților de curent de tunelare. Caracterul reconfigurabil al dispozitivului permite ajustări în timp real pentru sistemul cuantic și, prin utilizarea tehnicilor de învățare automată, permite o optimizare eficientă a dispozitivului.

Dispozitivul neuromorfic este implementat pe o suprafață pătrată cu aria  $2d \times 2d$ , din  $N_{wg} = 4$  ghiduri de undă cu o formă definită de funcția logistică generalizată, cunoscută, de asemenea, sub numele de curbă Richard:

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

Parametrii  $B = 6.0/d$ ,  $C = 1$ ,  $K = d/2$ ,  $Q = 1/2$  sunt fixați, în timp ce  $A = -3d/4, -d/4, d/4, 3d/4$  pentru fiecare ghid de undă (intrări). Un set de dimensiuni considerabile de interconexiuni cuantice pot fi generat 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 electrozii centrali ( $in_2, in_3$ ). Rezultatul este o structură de ghiduri de undă care se unesc într-un singur canal de ieșire. Parametrul  $L$  determină poziția electrodului de ieșire, în timp ce

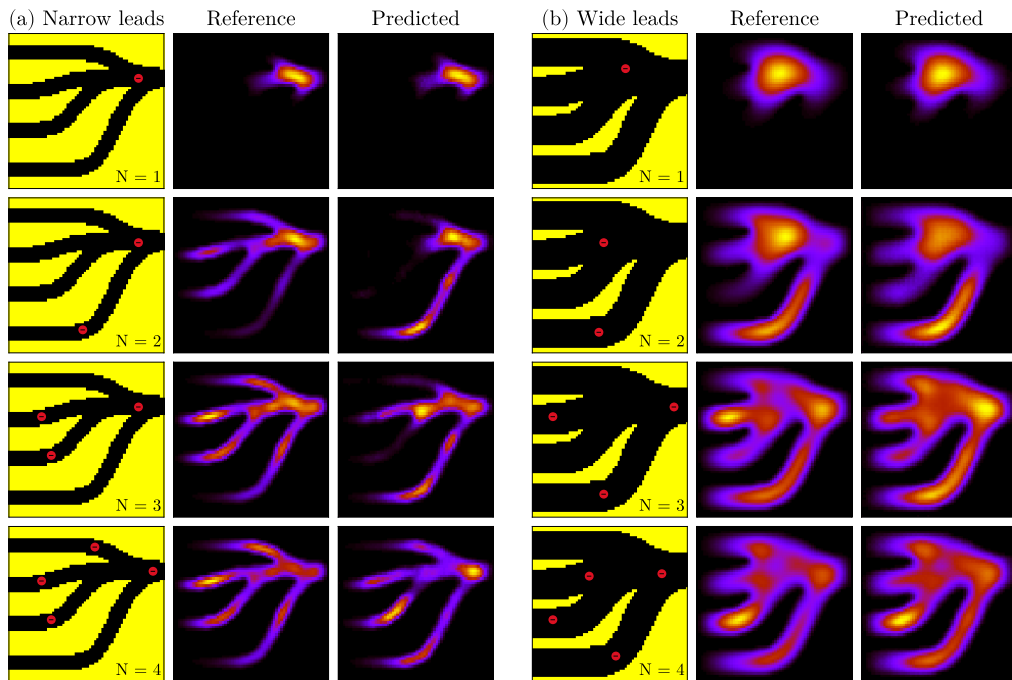


FIG. 11: Densitati de sarcina calculate prin metoda diagonalizarii exacte (ED) si prezise folosind retele cGAN, pentru  $N = 1, 2, 3, 4$  electroni, in sisteme neuromorfice cu (a) terminale inguste,  $R_0 = 10$  nm si (b) terminale late,  $R_0 = 20$  nm. In ambele cazuri, sunt indicate: potentialul de confinare, densitatile de referinta si cele prezise. Efectul interactiei Coulombiene este vizibil in extensia distributiei de sarcina.

parametrul  $M$  influenteaza punctele de inflexiune. Latimea ghidului de unda,  $\Delta_{wg}$ , este setata la aceeasi valoare pentru toate contactele. Pentru a mentine constanta latimea ghidurilor de unda, toate au fost generate dintr-un potential cu inaltimea  $V_b$ , folosind un cursor in forma circulara cu raza  $R_0$  care se deplaseaza de-a lungul curbelor definite de ecuatia 1, astfel incat  $\Delta_{wg} = 2R_0$  este constanta in lungul lead-urilor.

Controlul asupra starilor multielectronice se traduce in modificarea potentialului de confinare, care va ghida sarcina catre unul dintre terminale. Un camp electric aplicat in planul structurii va creste localizarea de sarcina intr-un terminal vizat, astfel incat electronii pot tunela intr-un anumit registru. In acest context, interconexiunile cuantice pot functiona si ca elemente active de comutare.

Starile electronice sunt determinate prin rezolvarea ecuatiei Schrodinger independente de timp in formalismul numerelor de ocupare. Avantajul metodei este ca permite un calcul exact care ia in considerare interactia Coulombiana dintre electroni – metoda diagonalizarii exacte (*exact diagonalization*, ED) [Nemnes et al, *Phys. Scr.* 97, 055813 (2022)]. Starile uniparticula sunt determinate ca solutii ale Hamiltonianului uniparticula, care include si potentialul de confinare impus de ghidurile de unda. Aceste stari formeaza un set ortonormal utilizat ulterior ca baza pentru problema multi-particula pentru a rezolva problema cu interactie.

Investigam asadar localizarea sarcinii in sistemele neuromorfe și utilizăm rețele conditional generativ-adversative (*conditional generative-adversarial networks*, cGAN) pentru a realiza o mapare imagine-la-imagine [Pantis et al., *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 4, 025023 (2023)], in vederea descrierii eficiente a densitatii starii fundamentale, pentru sisteme multiple. Acestea sunt generate prin modificarea potentialului de confinare, care permite transferul

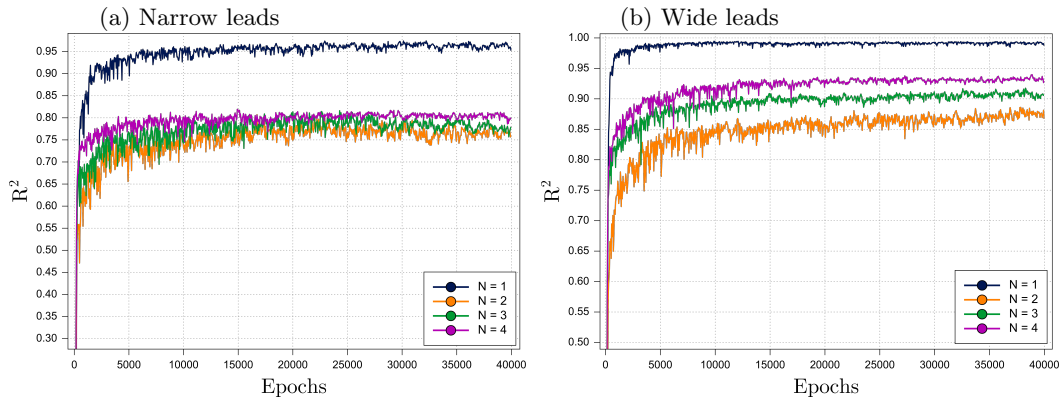


FIG. 12: Acuratetea de predicție pentru densitatea stării fundamentale, măsurată prin coeficientul de determinare statistică  $R^2$ : (a) lead-uri înguste,  $R_0 = 10$  nm and (b) lead-uri late,  $R_0 = 20$  nm.

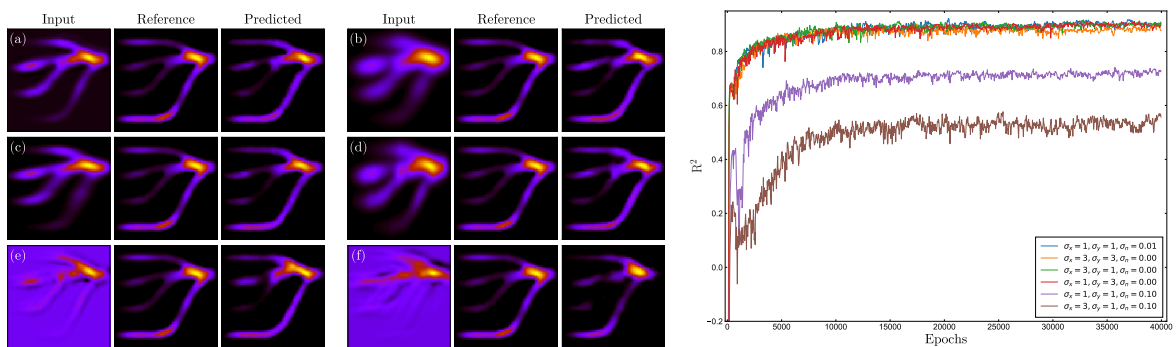


FIG. 13: Densități de sarcină obținute prin deconvoluția hărților de curent, comparativ cu densitățile de referință. Sunt analizate situații cu filtre simetrice și asimetrice, la care se adaugă un fond de zgomot: (a)  $\sigma_x = \sigma_y = 1$ ,  $\sigma_n = 0.01$ ; (b)  $\sigma_x = \sigma_y = 3$ ,  $\sigma_n = 0$ ; (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)  $\sigma_x = 3$ ,  $\sigma_y = 1$ ,  $\sigma_n = 0.1$ . Acuratetea de predicție este indicată prin coeficientul de determinare statistică  $R^2$ .

de electroni de la terminalele de intrare către cel de ieșire. În plus, harta curenți de tunelare obținut în procesul de citire (*read-out*) a densității multi-particula poate fi deconvolutată folosind aceeași abordare bazată pe cGAN.

Sunt generate două tipuri de sisteme, ce corespund lead-urilor înguste ( $R_0 = 10$  nm) și, respectiv, lead-urilor late ( $R_0 = 20$  nm), descrise în Fig. 11. Pentru fiecare grup, un număr de  $N_{\text{sys}} = 1000$  sisteme este generat, împărțit în  $N_{\text{train}} = 900$  și  $N_{\text{test}} = 100$  sisteme pentru antrenare și testare. Sunt efectuate calcule pentru  $N = 1, 2, 3, 4$  particule. Rezultatele predicției, antrenând modelul pe 40000 de iterații (epoci) sunt prezentate pentru unul din cazurile tipice. Acestea indică o bună acuratețe, prin descrierea coerentă a distribuțiilor de sarcină în funcție de numărul de particule. Pentru a caracteriza setul de test în ansamblu, este calculat coeficientul de determinare statistică,  $R^2$ , indicat în Fig. 12. Cazul *non-interacting* este cel mai bine descris, având o complexitate redusă prin localizarea evidentă a sarcinii în zona în care groapa de potențial este mai largă. Cazul  $N = 4$  se apropie de o distribuție mică uniformă, în timp ce cazurile  $N = 2$  și  $N = 3$  sunt mai greu de reprodus, având o complexitate mai ridicată.

Pentru o proiectare eficientă a structurilor neuromorfe, este necesară determinarea hărții de densitate cât mai precis

posibil. Folosind un al doilea varf STM se poate crea o harta curentului de tunelare, care este strans corelata cu imaginea densitatii de sarcina. Procesul relativ complicat de tunelare între stratul activ și acul STM poate fi modelat, într-o prima aproximatie, ca o imagine convolutata a densitatii stării fundamentale și a filtrului asociat cu geometria varfului. Presupunand ca funcția de filtru nu este cunoscuta, investigăm în ce măsură metoda de translație de imagini poate fi utilizată pentru a efectua deconvoluția, adică o mapare de la curentul de tunelare înapoi la densitatea de sarcina. Acest lucru ar fi semnificativ, deoarece harta curentului de tunelare reprezintă o informație direct accesibilă din experiment.

Investigăm mai multe scenarii cu privire la filtrele de convoluție așa cum este descris în Fig. 13. Cazul ideal corespunde unui filtru Gaussian bidimensional cu abaterea standard egale  $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$ . Pornind cu o valoare mică,  $\sigma = 1$ , avem doar o modificare ușoară a hărții curentilor față de harta densitatilor de referință. Prin urmare, se poate vedea că predicția se potrivește foarte bine cu originalul. Prin creșterea efectului de blurare, folosind o abatere standard mai mare,  $\sigma = 3$ , se obține o dispersie sporită a maximelor în hărțile de curenti. Cu toate acestea, metoda de translație de imagini oferă o precizie similară, pentru ambele filtre simetrice. Filtrele asimetrice, cu abaterea standard mai mare pe oricare dintre direcțiile  $x$  ( $\sigma_x = 3, \sigma_y = 1$ ) sau pe direcția  $y$  ( $\sigma_x = 1, \sigma_y = 3$ ), nu induc o degradare vizibilă a acurateții de predicție. Nucleul Gaussian este astfel ușor de recunoscut prin abordarea cGAN. În schimb, zgomotul are un impact mai semnificativ. Un nucleu simetric ( $\sigma_x = \sigma_y = 1$ ), care, în plus are o componentă de zgomot cu  $\sigma_n = 0.1$ , transformă harta de sarcina într-o componentă destul de diferită față de cea de referință. În acest caz, deși în general imaginea prezisă seamănă bine cu referința, acuratețea predicției este vizibil mai mică, așa cum se vede prin compararea maximelor proeminente situate în zona de ramificație. Un rezultat similar se obține pentru un nucleu asimetric ( $\sigma_x = 3, \sigma_y = 1$ ), ceea ce confirmă în continuare influența zgomotului asupra preciziei predicției. Analizând statistic acuratețea de predicție se obțin valorile  $R^2$  indicate în Fig. 13.

2. *Integrarea dispozitivelor de tip neuron cuantic în rețele neuronale cuantice. Implementarea unei scheme de învățare de tip back-propagation, antrenare și testare.*

Sistemul neuromorfic propus în Fig. 10 poate realiza funcționalitatea unui neuron artificial. Prin încărcarea sistemului de porți flotante se poate ajusta transferul de sarcină de la registrii de intrare  $\{\text{QD}_i^{(in)}\}$  în dispozitivul neuromorfic și, totodată transferul către terminalul de ieșire,  $\text{QD}^{(out)}$ , utilizând bariere locale. Apoi, prin ajustări suplimentare ale potențialelor de poartă se modifică harta de potențial pentru a transfera sarcina între terminale pentru a obține rezultatul vizat (e.g. sarcina transferată la terminalul de output). Astfel, se obține echivalentul acțiunii de back-propagation, în care se corectează ponderile pe sinapse, însă aici modelul este conținut în distribuția de sarcină pe porțile flotante. Structura propusă a dispozitivului, cu registrii QD la intrări/ieșire, permite o înlănțuire a mai multor unități, realizând premisele dezvoltării unor rețele complexe. În continuare vom testa procesul de comutație, care joacă rolul esențial în stabilirea funcționalității sistemului neuromorfic.

Prin ajustarea potențialelor de poartă energia potențială în groapa de potențial din stratul activ se poate modifica. Vom opta pentru o ajustare simplificată, respectiv o variație liniară a potențialului pe o direcție fixată, ceea ce echivalează cu un câmp electric planar.

Analizând pentru început situația în care câmpul este orientat pe direcția  $x$ , observăm că sarcina inițial limitată la locația terminalului de ieșire este deplasată treptat către terminalele de intrare, așa cum este evidențiat în Fig.

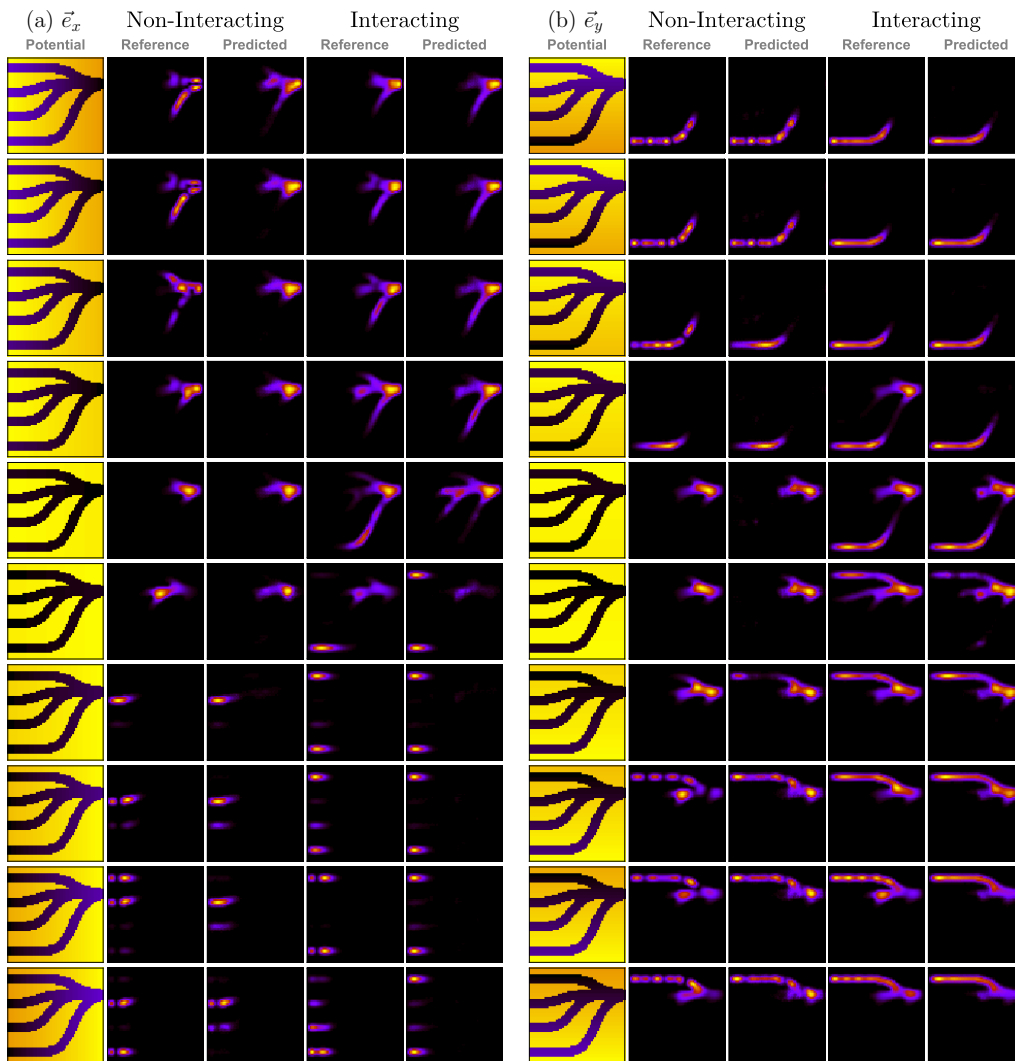


FIG. 14: Efecte de comutare prin aplicarea unui camp electric planar, cu componente pe directiile (a)  $\vec{e}_x$  and (b)  $\vec{e}_y$  orientations. Pentru fiecare caz, peste descris potentialul de confinare, urmat de densitatile corespunzatoare cazurilor *fara interactie* ( $N = 1$ ) si *cu interactie* ( $N = 2$ ), indicand hartile de referinta si cele prezise. Culoarea portocalie indica o energie potentiala mai mica, in timp ce nuantele de galben indica o energie potentiala mai mare.

14(a). Desi, per total, cazurile *non-interacting* si *interacting* par destul de asemanatoare, mai ales in cazul valorilor mari ale campului aplicat, care localizeaza densitatile de sarcina la marginile din stanga si din dreapta stratului activ, exista totusi unele diferente vizibile. Pentru campuri mici, interactia Coulombiana induce o delocalizare mai mare in distributia de sarcina pentru  $N = 2$ , spre deosebire de cazul care particulele nu interactioneaza. In plus, daca avem campul in plan complet inversat, observam diferente in acumularile la lead-urile de intrare. Din nou, interactia Coulombiana are un rol important in separarea crescuta a acumularilor de sarcina, proces ce nu are loc pentru cazul *non-interacting*. Pe masura ce campul este maximizat, modurile superioare devin vizibile in terminalele de intrare.

Atunci cand avem campul orientat de-a lungul directiei  $y$ , au loc procese de comutarea sarcina intre terminale. In conditiile de camp mare, terminalele de intrare exterioare devin cele mai populate cu sarcina, in timp ce terminalul

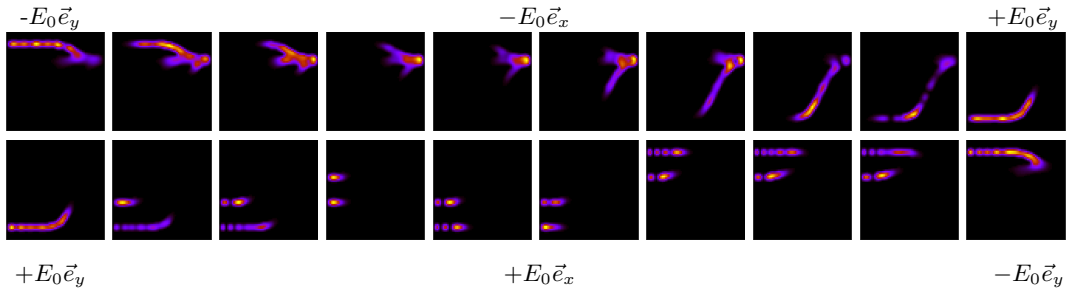


FIG. 15: Deplasarea sarcinii electronice prin utilizarea unui camp electric rotativ,  $\vec{E}_0$ .

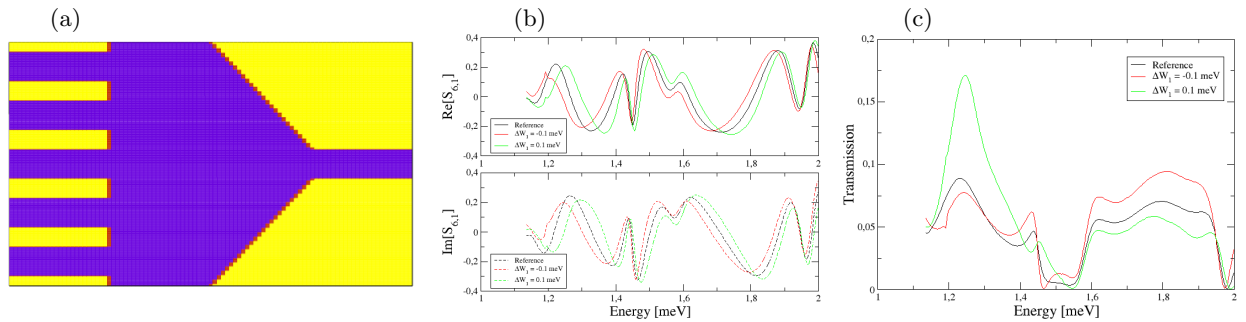


FIG. 16: (a) Potentialul de imprastiere in dispozitivul de tip neuron cuantic. (b) Partea reala si imaginara a elementului  $S_{6,1}$  – modificari datorate potentialului suplimentar aplicat in lead-ul 1,  $\Delta W = \pm 0.1$  meV. (c) Ajustarea functiei de transmisie.

de iesire este depopulat, daca este plasat la mijlocul laturii verticale. Totusi, în exemplul prezentat în Fig. 14(b), pozitionarea iesirii terminalul se afla în jumatatea superioara, ceea ce face ca acesta sa retină o cantitate considerabila de sarcina.

In plus, a fost testat efectul unui camp rotativ in plan si a fost analizat comutarea sarcinii electronice între terminalele de intrare si de iesire. Hartile de densitate de sarcina sunt prezentate în Fig. 15 indica faptul ca, pentru unele orientari ale campului, este posibil ca sarcina sa se localizeze complet la terminalele de intrare exterioare sau la terminalul de iesire. Campurile electrice orientate in mare parte de-a lungul directiei  $x$  favorizeaza divizarea sarcinii electronice in două terminale de intrare. Capacitatea de a regla valoarea sarcinii care este transferata într-un anumit registru QD este aspect important pentru efectuarea operatiilor de calcul. Sistemul prototip descris aici poate fi extins si mai mult pentru a dispune mai multe lead-uri de ieșire, in timp ce selectia poate fi realizata prin orientari particulare ale campului electric, stabilite prin sistemul de porti flotante.

O alta abordare, care permite explicit utilizarea numerelor complexe, se bazeaza pe relatia de definitie a matricii  $S$  (matricea de imprastiere). Intr-un sistem multi-terminal, avem pentru amplitudinile complexe ale undelor electronice  $\Psi_{\nu}^{(out)} = \sum_{\nu'} S_{\nu\nu'} \Psi_{\nu'}^{(in)}$ , unde  $\nu = (s, i)$ , in care  $s$  este indexul lead-ului si  $i$  este indicele canalului. Asadar, ponderile pe sinapse sunt asociate elementelor matricii  $S$ . In continuare vom dezvolta capacitatile unui neuron balistic propus anterior, urmarind posibilitatea ajustarii elementelor complexe ale matricii  $S$  prin potentiale aplicate individual pe terminalele de intrare. Schema dispozitivului este indicata in Fig. 16(a). Considerand cazul in care se propaga un singur mod ( $i = 1$ ), indexul  $i$  va fi omis. Lead-urile de intrare sunt indexate cu  $1 \dots 5$ , iar indexul lead-ului de

iesire este 6. Elementul de matrice  $S_{61}$  corespunde asadar ponderii de pe sinapsa (terminalul) 1. Prin aplicarea unor potentiale locale pe fiecare terminal de tip bariera sau groapa de potential ( $\Delta W = \pm 0.1$  meV) se poate modifica sistematic coeficientul complex asociat terminalului respectiv, in acest caz  $S_{6,1}$  (Fig. 16(b)). Astfel, se pot ajusta ponderile sinapselor in procesul de antrenare. Functia de transmisie este indicata in Fig. 16(c), care poate juca rolul unei functii de activare neliniare.

Prezenta mai multor moduri la intrare, e.g. prin largirea lead-urilor, in conditiile in care avem in continuare un singur mod la iesire, mentine aceeasi functionalitate de tip perceptron. Diferenta consta in adaugarea unor intrari suplimentare, fara a creste numarul de lead-uri. Acest fapt poate avea o importanta considerabila, fiindca se poate realiza o densitate mare de intrari pentru o geomtrie fixata. Pe de alta parte, existenta mai multor moduri la iesire implica o superpozitie a aceluasi set de intrari cu ponderi diferite. Aceste aspecte vor fi pe mai departe investigate.

#### D. Aplicatii ale transmiterii informatiei cuantice la distanta

In cadrul proiectului, se urmareste, de asemenea, dezvoltarea unor aplicatii pentru transmiterea informatiei cuantice la distanta, utilizand sisteme cuantice bipartite. Au fost studiate trei tipuri de corelatii cuantice generate prin clonarea locala a inseparabilitatii cuantice: entanglementul, discordul cuantic si consonance.

Consideram doi observatori, Alice si Bob, aflati la distanta, care impart un sistem de doi qubiti aflat in starea inseparabila:

$$|\psi\rangle^{(12)} = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle, \quad (2)$$

unde  $\alpha$  si  $\beta$  sunt parametrii complecsi care verifica relatia  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Alice si Bob vor aplica fiecare masina de clonat optima, asimetrica, locala, care este descrisa de operatorul unitar  $U$ :

$$\begin{aligned} U(p)|0\rangle|00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+p^2+q^2}}(|000\rangle + p|011\rangle + q|101\rangle), \\ U(p)|1\rangle|00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+p^2+q^2}}(|111\rangle + p|100\rangle + q|010\rangle), \end{aligned} \quad (3)$$

unde  $p + q = 1$ .

Vom nota cu  $|\xi\rangle$  starea obtinuta de cei doi observatori dupa ce actioneaza fiecare cu clonerul  $U(p)$  caracterizat de acelasi parametru  $p$ , atat pentru Alice, cat si pentru Bob:

$$|\xi\rangle = U(p) \otimes U(p) |\psi\rangle^{(12)} |00\rangle^{(35)} |00\rangle^{(46)}. \quad (4)$$

Starile  $\rho^{(14)}$  si  $\rho^{(23)}$  impartite de Alice si Bob sunt reprezentate de operatorii densitate redusi:

$$\begin{aligned} \rho^{(14)} &= \text{Tr}_{2356} |\xi\rangle\langle\xi|, \\ \rho^{(23)} &= \text{Tr}_{1456} |\xi\rangle\langle\xi|. \end{aligned}$$

Mai intai am investigat comportarea entanglementului, folosind *concurrence* ca masura a acestuia. Am demonstrat ca pentru o stare data, adica  $\alpha$  cunoscut, masina de clonat care conduce la un concurrence maxim este cea simetrica, corespunzand cazului  $p = \frac{1}{2}$ .



Un alt tip de corelatie analizat in acest proiect este *discordul cuantic*. In cadrul teoriei informatiei clasice, informatia reciproca este descrisa de doua definitii echivalente: una care contine entropia Shannon si cealalta care contine entropia Shannon conditionata. Cele doua definitii sunt echivalente in cazul clasic.

Situatia este diferita atunci cand se generalizeaza cele doua definitii la cazul sistemelor cuantice. Se foloseste entropia von Neumann pentru generalizare si se constata ca se obtin rezultate diferite pentru informatia reciproca cuantica, plecand de la definitiile clasice. Tocmai aceasta diferenta dintre cele doua marimi cuantice ale informatiei reciproce reprezinta *discordul cuantic*. Daca masuratorile cuantice sunt efectuate asupra celui de-al doilea sistem cuantic, atunci obtinem definitia discordului  $D_A$ . Pentru acest tip de corelatie cuantica nu poate fi gasita o expresie analitica. Prin urmare, noi am calculat discordul cuantic al starilor finale  $\rho^{(14)}$  si  $\rho^{(23)}$  folosind metode numerice de evaluare, rezultatul fiind prezentat in Fig. 17

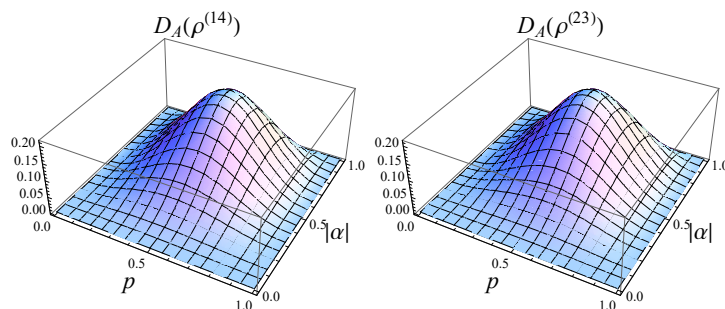


FIG. 17: Discordul cuantic al starilor finale  $\rho^{(14)}$  (stanga) si  $\rho^{(23)}$  (dreapta) obtinute folosind masina de clonat asimetrica locala.

Al treilea tip de corelatie cuantica investigat in proiect este *consonance*. Fie  $\rho$  operatorul densitate al unui sistem bipartit, pe care il exprimam astfel:

$$\rho = \sum_{i,j} \sum_{m,n} \rho_{ijmn} |ij\rangle\langle mn|. \quad (5)$$

Consonance este definit in felul urmatoar:

$$Cons(\rho) = \sum_{i,j} \sum_{m,n} |\rho_{ijmn}^c (1 - \delta_{im})(1 - \delta_{jn})|, \quad (6)$$

unde  $\rho^c = (U_A \otimes U_B) \rho (U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$  este obtinut astfel incat coerența locala  $\mathcal{L}$  se anuleaza. Prin coerența locala intelegem marimea definita mai jos:

$$\mathcal{L} = \sum_{i \neq m} \left| \sum_{j=n} \rho_{ijmn}^c \right| + \sum_{j \neq n} \left| \sum_{i=m} \rho_{ijmn}^c \right|. \quad (7)$$

Vom calcula consonance pentru starile finale  $\rho^{(14)}$  si  $\rho^{(23)}$  generate din clonarea locala a inseparabilitatii cu ajutorul definitiei (6) si obtinem:

$$Cons(\rho^{(14)}) = Cons(\rho^{(23)}) = \frac{8pq|\alpha||\beta|}{(1+p^2+q^2)^2}. \quad (8)$$

Mai departe vom face o comparatie intre cele trei tipuri de corelatii cuantice discutate: concurrence, discordul cuantic si consonance. In cazul concurrence si consonance, se obtine aceeasi expresie pentru starile finale  $\rho^{(14)}$  si  $\rho^{(23)}$ ,

adica avem:

$$\begin{aligned} C(\rho^{(14)}) &= C(\rho^{(23)}), \\ Cons(\rho^{(14)}) &= Cons(\rho^{(23)}). \end{aligned} \quad (9)$$

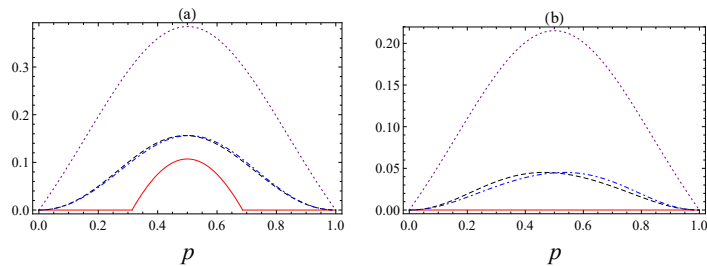


FIG. 18: Comparatie intre concurrențe  $C(\rho^{(14)}) = C(\rho^{(23)})$  - curba rosie continua, discordul cuantic al starii  $\rho^{(14)}$  - curba intrerupta neagra, discordul starii  $\rho^{(23)}$  - curba albastra intrerupta punctata si consonance  $Cons(\rho^{(14)}) = Cons(\rho^{(23)})$  - curba violet punctata. Am considerat: (a)  $\alpha = 1/2$ , (b)  $\alpha = 1/4$ .

In Figura 18 (a) desenam concurrențe, discordul cuantic si consonance in cazul  $\alpha = 1/2$ . In cazul cand  $\alpha = 1/4$ , observam in Figura 18 (b) ca stările  $\rho^{(14)}$  si  $\rho^{(23)}$  sunt separabile (deci concurrențe  $C = 0$ ), in timp ce discordul cuantic si consonance sunt nenule.

Pe de alta parte, realizam o comparatie intre cele trei tipuri de corelatie cuantica pentru un parametru  $p$ , care descrie masina de clonat, fixat. Cazul masinii de clonat optima, universala, simetrica, adica  $p = 1/2$  este prezentat in Figura 19 (a). In final, prezentam acelasi tip de comparatie in Figura 19 (b) in cazul in care o masina de clonat asimetrica este aplicata, caracterizata de  $p = 0.4$ .

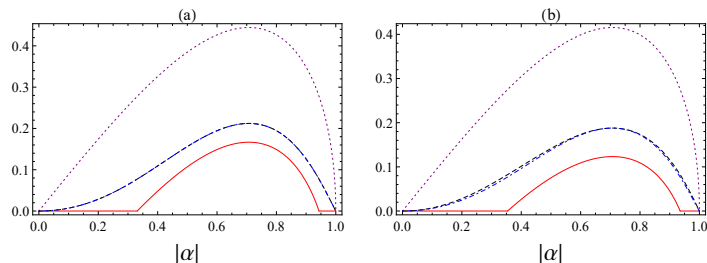


FIG. 19: Comparatie intre concurrențe  $C(\rho^{(14)}) = C(\rho^{(23)})$  - curba rosie continua, discordul cuantic al starii  $\rho^{(14)}$  - curba intrerupta neagra, discordul starii  $\rho^{(23)}$  - curba albastra intrerupta punctata si consonance  $Cons(\rho^{(14)}) = Cons(\rho^{(23)})$  - curba violet punctata. Am considerat masina de clonat cu: (a)  $p = 1/2$ , (b)  $p = 0.4$ .

In concluzie, am gasit un rezultat interesant si anume: consonance este mai mare decat discordul cuantic, care, la randul lui, este mai mare decat concurrențe:

$$Cons > D_A > C. \quad (10)$$

### E. Invatare automata in spatii reduse pentru emularea corelatiilor de pairing in sisteme supraconductoare

In prezent exista un interes considerabil in cadrul fizicii materiei condensate pentru sistemele cu proprietati topologice nontriviale, iar in ultimele doua decenii au fost studiate intens sisteme precum izolatorii topologici, semimet-

alele topologice si supraconductorii topologici. Fazele topologice sunt legate de singularitati izolate prezente in spectrul energetic, acolo unde doua benzi se intersecteaza intr-un singur punct. Recent, pentru jonctiunile Josephson au fost prezise faze topologice pentru un numar de trei si patru terminale supraconductoare, ale caror consecinte, precum cuantificarea transconductantei intre doua terminale, ar putea fi accesate experimental in viitorul apropiat.

Proprietatile topologice ale jonctiunilor Josephson cu mai multe terminale au fost analizate pana in prezent numai in cadrul unor modele teoretice simplificate, exclusiv in limita unui gap supraconductor infinit (nerealista din punct de vedere experimental). Recent, am dezvoltat o noua abordare teoretica ce permite obtinerea de predictii si in cazul realist al unui gap supraconductor finit [V. V. Baran et al, *Surrogate model solver for impurity-induced superconducting subgap states*, arXiv:2307.11646]. Aceasta se bazeaza pe descrierea terminalelor supraconductoare (ca sisteme infinite, dificil de abordat computational) in termeni de modele surogat cu putine nivele, ale caror structura este aleasa pentru a reproduce cat mai fidel functia de hibridizare a fiecarui terminal cu restul sistemului. In mod natural, cresterea numarului de nivele efective va duce la o precizie mai buna a rezultatelor, la un cost computational suplimentar. Pentru a mentine eficienta computationala a modelelor surogat, am ales folosirea Metodei de Baza Redusa (eng., Reduced Basis Method, RBM), care include un protocol de invatare automata bazat pe o estimare rapida a erorii de emulare (descrise in detaliu in raportul anterior).

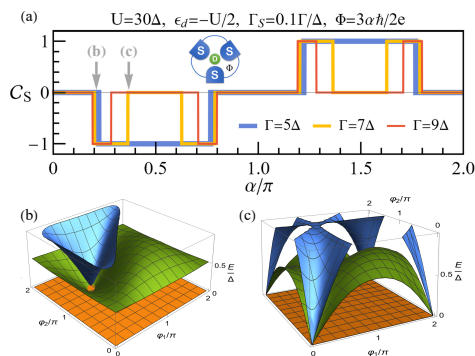


FIG. 20: Numarul Chern si spectrul energetic pentru jonctiunea Josephson cu trei terminale. (a) Numarul Chern  $C_S$  pentru starea de singlet ca functie de faza  $\alpha$  asociata fluxului magnetic extern, pentru diverse valori ale cuplajului QD-SC  $\Gamma$ . (b-c) Spectrul de energie in apropierea a doua puncte Weyl  $\alpha \approx 0.21\pi$ (b) si  $\alpha \approx 0.37\pi$  (c), pentru  $\Gamma = 7\Delta$  si  $\tilde{L} = 2$ . Prima stare de singlet (portocaliu, de referinta), a doua stare de singlet (albastru), starea de dublet (verde).

Ca o prima aplicatie am considerat dispozitivul cu trei terminale introdus in [R. L. Klees et al, Phys. Rev. Lett. 124, 197002 (2020)] si reprezentat in Fig. 20(a). Pentru a obtine proprietati topologice netriviiale, este necesara cuplarea directa a terminalelor supraconductoare (pentru rata de tunelare respectiva folosim notatia  $\Gamma_S$ ) si introducerea unui flux magnetic  $\Phi \equiv 3\alpha\hbar/2e$ . Hamiltonianul explicit este

$$\begin{aligned}
 H = & H_{\text{QD}} + \sum_{\beta=1}^3 H_{\text{BCS},\beta} + \sum_{\beta=1}^3 \sum_{j=1}^L \sum_{\sigma} \left( t \frac{1}{\sqrt{L}} c_{\beta j \sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + h.c. \right) \\
 & + \sum_{\beta=1}^3 \sum_{j,k=1}^L \sum_{\sigma} \left( r e^{i\alpha} \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1}{\sqrt{L}} c_{\beta+1,j,\sigma}^{\dagger} c_{\beta k \sigma} + h.c. \right), \quad (11)
 \end{aligned}$$

unde  $t$  ( $r$ ) este amplitudinea de hopping QD-SC (SC-SC). Folosim aici notatia QD (eng., Quantum Dot) pentru punctul cuantic aflat in regiunea centrala a jonctiunii, si SC (supraconductor) pentru a indica fiecare terminal. Construim

modelul surogat al jonctiunii prin inlocuirea secventiala a fiecarui terminal supraconductor cu propriul sau model surogat, obtinand in final

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & H_{\text{QD}} + \sum_{\beta=1}^3 H_{\tilde{\text{SC}},\beta} + \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\ell=1}^{\tilde{L}} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \sqrt{\gamma_{\ell}} \Gamma (\tilde{c}_{\beta\ell\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.}) \\ & + \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\ell,\ell'=1}^{\tilde{L}} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \Gamma_S \sqrt{\gamma_{\ell}\gamma_{\ell'}} (e^{i\alpha} \tilde{c}_{\beta+1,\ell,\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{\beta\ell'\sigma} + \text{h.c.}), \end{aligned} \quad (12)$$

unde  $\Gamma = \pi t^2/2D$ ,  $\Gamma_S = \pi r/2D$  and  $\tilde{c}_{4,\ell,\sigma} \equiv \tilde{c}_{1,\ell,\sigma}$ . Pentru detalii legate de ceilalti parametri, a se vedea [arxiv].

Singularitatile mentionate mai sus, cunoscute sub denumirea de puncte Weyl, sunt vizibile intr-un spatiu ale carui dimensiuni sintetice sunt definite de fazele terminalelor supraconductoare ale jonctiunii considerate. O tranzitie de faza topologica este semnalata de o schimbare in numarul Chern definit ca fluxul  $\mathcal{C}(\alpha) \equiv (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 d\varphi_2 (\partial_{\varphi_1} A_2 - \partial_{\varphi_2} A_1)$  asociat conexiunii Berry  $A_j = i\langle\psi|\partial_{\varphi_j}|\psi\rangle$  pentru o stare data  $\psi$  (cu  $\varphi_3 = 0$ ).

Numarul Chern pentru prima stare de singlet este reprezentat in Fig. 1a. Am observat o convergenta excelenta pentru aceasta cantitate topologica robusta deja pentru un numar de nivele efective  $\tilde{L} = 2$ . Rezultatele indica faptul ca exista o schimbare semnificativa a topologiei sistemului la o valoare moderata a cuplajului QD-SC  $\Gamma = 5\Delta$ . Aici, o noua pereche de puncte Weyl apar la  $\varphi_{1,2} = 0$  si  $\alpha = (2k+1)\pi/2$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ . Crescand cuplajul QD-SC, acestea din urma migreaza gradual in  $\alpha$ , apropiindu-se de punctele Weyl cunoscute deja din limita de gap infinit, reducand astfel regiunea topologic netriviala. Prezenta unei interactii Coulomb locale nu afecteaza semnificativ rezultatele din punct de vedere cantitativ.

Spectrul energetic in apropierea a doua puncte Weyl este reprezentat in Fig. 20(b), iar intreaga evolutie a acestuia de-a lungul unei perioade a fazei  $\alpha$  (asociata fluxului magnetic extern) este detaliata in Fig. S15 din lucrarea *arXiv:2307.11646*. Mentionam ca metoda RBM cu invatare automata a spatiului redus a fost esentiala in obtinerea acestor rezultate in mod eficient.

In concluzie, am demonstrat ca este posibila obtinerea de predictii legate de proprietatilor jonctiunilor Josephson topologice pentru valori ale parametrilor relevante experimental in cadrul unui model surogat accelerat prin metoda RBM cu invatare automata. Rezultate difera puternic din punct de vedere calitativ de cele obtinute anterior in literatura in modele simplificate si impun noi constrangeri asupra regimurilor de parametri in care efectele topologice pot fi observate experimental.

## F. Alte studii relevante pentru obiectivele proiectului

Pe langa studiile detaliate anterior, au fost efectuate si alte studii care imbina calcule *ab initio* cu tehnicile ML.

(1) Un studiu demarat in 2022 si finalizat in anul curent vizeaza descrierea dinamicii moleculare descrise in cadrul DFT, in sisteme de tip fulerena ( $C_{60}$ ) cu atomi de Ca encapsulati, prin intermediul metodelor de tip ML. Metoda propusa mapeaza campul de forte si modelul ML astfel generat este capabil sa descrie cu suficienta acuratete dinamica reala.

(2) De asemenea, tehnica NEGF-DFT-ML dezvoltata in etapa anterioara permite identificarea eficienta a biomarkerilor pentru afectiuni respiratorii, prin predictia conductantei electrice intr-un sistem de tip nanopanglica functionalizat cu biomoleculare (tema dezvoltata in parteneriat cu IFIN-HH).

## G. Sumar al activitatilor din Etapele I si II

In continuare sunt prezentate succint rezultate din etapele anterioare.

### Etapa I:

I.1. Este dezvoltat un formalism de imprastiere bi-particula in cadrul metodei matricii R. Elementul de noutate consta in abordarea riguroasa a starilor bi-particula in intreg sistemul, alcatuit din lead-uri si regiune de imprastiere. Astfel, anti-simetria functiei de unda bi-particula este mentinuta si in lead-uri, spre deosebire de abordarile anterioare in care sunt utilizate asimptotic functii de unda uni-particula.

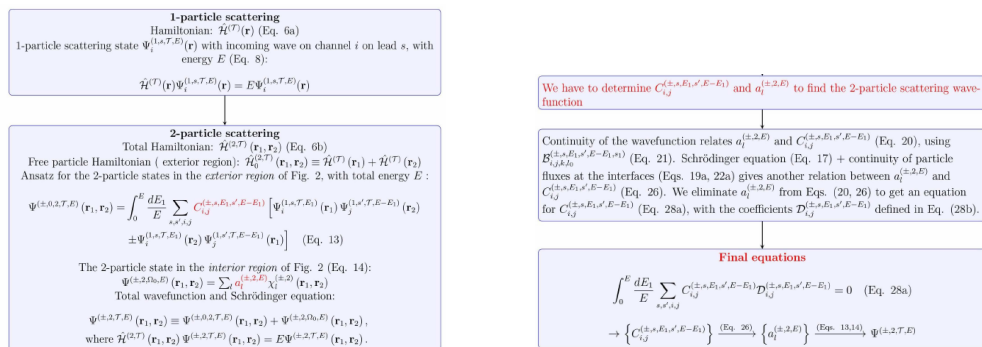


FIG. 21: Pașii principali și ecuațiile care duc la determinarea funcției de împrăștiere bi-particulă. (\*) Ecuațiile sunt numerotate conform lucrării *Phys. Lett. A. 425, 127865 (2021)*.

I.2. Este investigat un set sisteme bi-particula folosind metoda diagonalizării exacte. Sunt propuse scheme de tip ML capabile sa prezica cu o buna acuratete energiile proprii, folosind regresie multi-target. Sunt utilizate tehnici ML precum: *multivariate least squares* (MLS), *kernel ridge regression* (KRR), *Gaussian process regression* (GPR), *artificial neural networks* (ANNs) – Fig. 22. De asemenea, este implementata o problema de clasificare pentru identificarea starilor de single vs. triplet in starea fundamentala. Rezultatele se regasesc in *Physica Scripta 97, 055813 (2022)*.

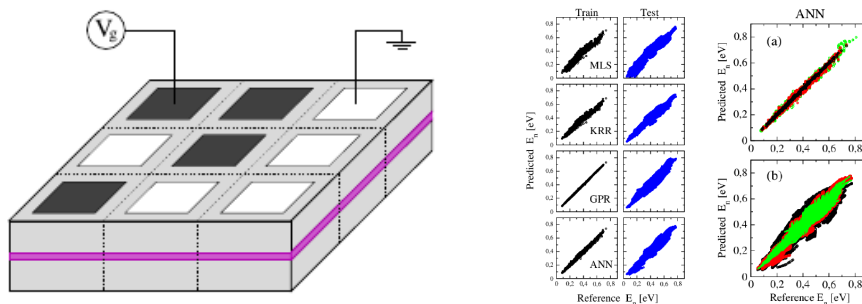


FIG. 22: Structura investigata si acuratetea de predictie ( $R^2$ ) pentru diferite tehnici de invatare automata: MLS (0.85), KRR (0.91), GPR (0.92), ANN (0.96).

I.3. Este realizat un dispozitiv de tip *quantum-sorter* (QS) probabilistic, care poate identifica starile particulelor incidente prin separarea acestora pe cate un port distinct la iesire. Astfel, identificarea starii cuantice nu se mai face prin masurarea observabilei, ci prin detectarea particulei pe unul din porturile de iesire – Fig. 23. In acest dispozitiv, este utilizata interactia spin-orbita de tip Rashba pentru a separa cele 4 stari incidente (2 moduri perpendiculare  $\times$

2 orientari de spin). Dispozitivul QS ofera in prezent un raspuns probabilistic, insa acesta se poate optimiza pe mai departe, modificand Hamiltonianul asociat regiunii de imprastiere.

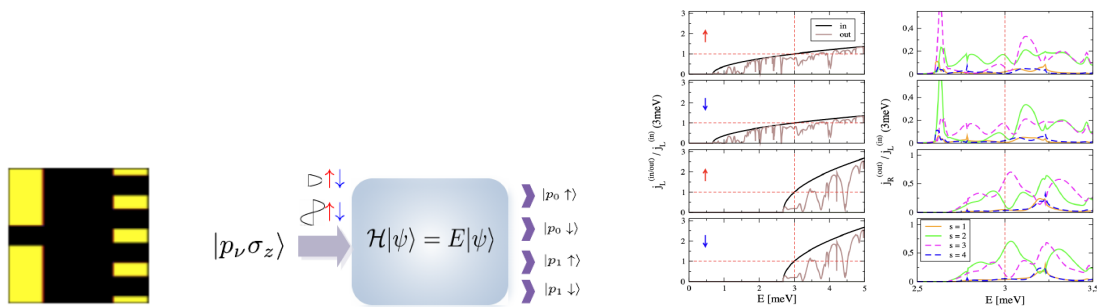


FIG. 23: Dispozitiv *quantum sorter*. Dispunerea stariilor la intrare si iesire. Functiile de transmisies corespunzatoare lead-urilor de iesire  $s = 1, 2, 3, 4$  pentru fiecare mod incident.

## Etapa II:

I.1. Sunt implementate calcule de tip *high-throughput computing* pentru determinarea conductantei in sisteme de tip nanopanglica de fosforena cu vacante, care creaza centri de legare pentru o molecula de test (e.g.  $\text{CO}_2$ ) – Fig. 24. Astfel de sisteme pot fi customizate ca senzori de gaz. In cadrul acestui studiu, obiectivul principal este dezvoltarea unei tehnici de tip NEGF-DFT-ML, pe baza de rețele neurale artificiale, care poate efectua predictii rapide in comparatie cu calculul de transport exact NEGF-DFT. Sunt investigate 1250 de sisteme, corespunzatoare diferitelor orientari ale moleculei de  $\text{CO}_2$ . Setul de trasaturi este alcatuit din elemente structurale, care descriu orientarea moleculei, usor de determinat. Coeficientul  $R^2$  pentru orientari arbitrare este de  $> 0.6$ , acesta imbunatatindu-se daca spatiul configuratiilor este restrictionat (e.g. in jurul pozitiei de echilibru). Relativ la complexitatea problemei de transport in abordarea NEGF-DFT, modelul ANN constituie un pas semnificativ pentru o modelare statistica eficienta.

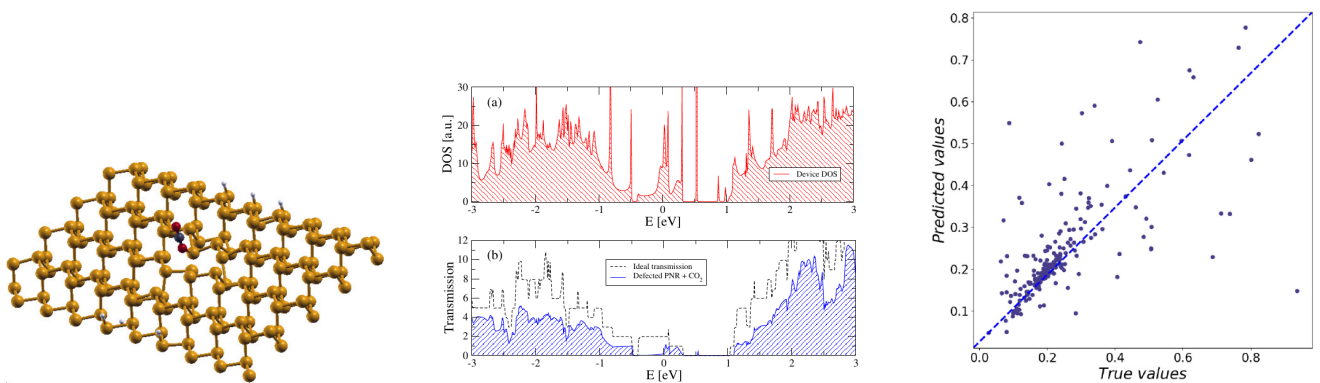


FIG. 24: Nanopanglica de fosforena, cu defect complex de tip format din 4 vacante si molecula de  $\text{CO}_2$  atasata.

Densitatea de stari si functia de transmisie pentru o configuratie tipica. Valorile conductantelor prezise.

II.2. Este utilizata o metoda de translatie de imagini care realizeaza o mapare intre potentialul de confinare si densitatea starii fundamentale, folosind rețele conditional generativ-adversative (cGANs) – Fig. 25. Problema de mapare inversa este, de asemenea, rezolvata cu foarte buna acuratete – *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 4, 025023 (2023). Acesta reprezinta rezultatul cel mai semnificativ si va fi prezentat mai pe larg in Sectiunea III.

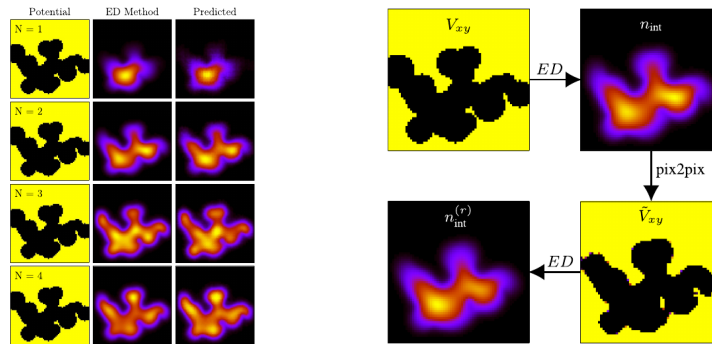


FIG. 25: Predictia densitatii de sarcina din potentialul de confinare pentru  $N = 1, 2, 3, 4$  electroni. Problema inversa, i.e. predictia potentialului pornind de la o densitate V-representabila.

II.3. Sunt investigate sisteme puternic corelate precum nuclee atomice sau insule supraconductoare utilizand abordarea EC / RBM (*Eigenvector Continuation / Reduced Basis Methods*) – *Phys. Rev. B 107, 144503 (2023)*. Pentru o determinare eficienta a punctelor de sampling, folosim un protocol de invatare automata bazat pe o estimare rapida a erorii de emulare (cunoscuta sub numele de *emulare offline*). Evolutia gap-ului canonic este prezentata in Fig. 26, prezentand o convergenta rapida (exponentiala) la valoarea exacta, intr-un mod oscilatoriu. Succesul emularii RBM a Hamiltonianul de pairing este incurajator pentru a accelera modelarea de sisteme supraconductoare mai complexe, precum suprafluide topologice sau nano-dispozitive hibride supraconductor-semiconductor in cadrul materiei condensate, sau sisteme proton-neutron in interactie in cadrul fizicii nucleare.

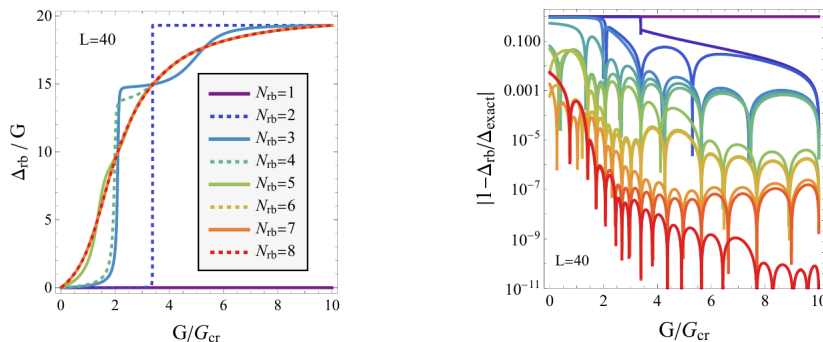


FIG. 26: Evolutia gap-ului canonic emulat cu ajutorul RBM si eroarea acestuia relativa la valoarea sa exacta.

## H. Indicatori de rezultat realizati

In cadrul proiectului au fost publicate 8 lucrari ISI, alte 3 fiind in evaluare, iar una este in pregatire:

### A. Lucrari publicate:

- I. Ghiu, *The quantum affinity of qubits subjected to noisy quantum channels*, *Rom. Rep. Phys.* 73, 119 (2021)
- D.V. Anghel, A.T. Preda and G.A. Nemnes, *The R-matrix formalism for two-particle scattering problems*, *Phys. Lett. A* 425, 127865 (2021)
- G.A. Nemnes, T.L. Mitran, A.T. Preda, I. Ghiu, M. Marciu, A. Manolescu, *Investigation of bi-particle states in gate-array-controlled quantum-dot systems aided by machine learning techniques*, *Physica Scripta* 97, 055813 (2022)

- M. Marciu, *Tachyonic cosmology with cubic contractions of the Riemann tensor*, *Eur. Phys. J. C* 82, 1069 (2022)
- C. Cirneci, I. Ghiu, *Analysis of Quantum Correlations Obtained Using Local Optimal Universal Asymmetric Cloners*, *Entropy* 25, 29 (2023)
- I. Ghiu, C. Cirneci, G.A. Nemnes, *The use of the output states generated by the broadcasting of entanglement in quantum teleportation*, *Phys. Lett. A* 479, 128924 (2023)
- V.V. Baran, D.R. Nichita, *Reduced basis emulation of pairing in finite systems*, *Phys. Rev. B* 107, 144503 (2023)
- C.-A. Pantis-Simut, A. Preda, L. Ion, A. Manolescu, G.A. Nemnes, *Mapping confinement potentials and charge densities of interacting quantum systems using conditional generative adversarial networks*, *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 4, 025023 (2023)

## B. Lucrari in evaluare:

- Virgil V. Baran, Emil J. P. Frost, Jens Paaske, *Surrogate model solver for impurity-induced superconducting subgap states*, (submitted, 2023).
- M. Cosinschi, A. T. Preda, C.-A. Pantis-Simut, N. Filipoiu, I. Ghitiu, M. A. Dulea, L. Ion, A. Manolescu, G. A. Nemnes *Collective dynamics of Ca atoms encapsulated in C<sub>60</sub> endohedral fullerenes*, (submitted, 2023).
- A. T. Preda, C.-A. Pantis-Simut, M. Marciu, D.-V. Anghel, A. Allosh, L. Ion, A. Manolescu and G. A. Nemnes, *Design of nanoscale quantum interconnects aided by conditional generative-adversarial networks*, (submitted, 2023).

## C. Lucrari in pregatire:

- A.T. Preda *et al.*, "A probabilistic quantum sorter for mode-lead disentangling using Rashba spin-orbit coupling"

## D. Participari la conferinte internationale:

- D.V. Anghel, A.T. Preda, G.A. Nemnes, *The R-matrix formalism for two-particle scattering problems*, IC-MSQUARE 6-9 Septembrie 2021
- G.A. Nemnes, T.L. Mitran, A.T. Preda, D.V. Anghel, I. Ghiu, V. Baran, M. Marciu, A. Manolescu, *Mapping energy spectra of Coulomb interacting bi-particle systems using multi-target regression methods*, IC-MSQUARE 6-9 Sept. 2021
- A.T. Preda, T.L. Mitran, I. Ghiu, M. Marciu, A. Manolescu, G.A. Nemnes, *Machine learning techniques applied to many-particle states in quantum dot systems*, IBWAP 12-15 Iulie 2022.
- V.V. Baran, D.M. Marinescu Pele, *Emulating superconducting pairing correlations in finite systems*, IC-MSQUARE 5-8 Septembrie 2022.
- A.T. Preda, N. Filipoiu, I. Ghitiu, C.A. Pantis-Simut, L. Ion, A. Manolescu, G.A. Nemnes, *Tuning electronic band structure properties in Lieb-like lattices*, Northern Lights Conference 22, 12-15 Octombrie 2022.
- A.T. Preda, C.A. Pantis-Simut, N. Filipoiu, L. Ion, A. Manolescu, G.A. Nemnes, *Predicting the topology of charge density maps in 2D nanostructures with machine learning techniques*, DPG Spring Meeting 28-30 Martie 2023.
- A.T. Preda, C.A. Pantis-Simut, I. Ghiu, G.A. Nemnes, *The design of a probabilistic quantum sorter in the R-matrix formalism*, IBWAP 11-14 Iulie 2023.



### III. CEL MAI SEMNIFICATIV REZULTAT SI IMPACT ESTIMAT

Cadrul mai larg al proiectului vizeaza studii privind principiile si modalitati concrete de functionare ale dispozitivelor electronice relevante pentru procesarea si transferul informatiei cuantice. Sunt abordate teme diverse, intre care mentionam: rezolvarea problemelor de imprastiere bi-particula, dezvoltarea unor metodologii pentru o rezolvare eficienta a unui set mare de *probleme multi-particula* in mecanica cuantica folosind tehnici de invatare automata (*machine learning*, ML), realizarea unor dispozitive de tip quantum sorter si neuron artificial pentru identificarea si, respectiv, procesarea starilor cuantice incidente, transmiterea informatiei cuantice la distanta, transport in sisteme atomistice prin schema NEGF-DFT-ML, modelul surogat pentru studiul proprietatilor jonctiunilor Josephson topologice accelerat prin metoda RBM cu invatare automata.

*Rezultatul cel mai semnificativ consta in elaborarea unei tehnici ML pentru translatie de imagini, avand la baza retele conditionale generativ-adversative (cGANs) pentru rezolvarea problemelor multi-particula in mecanica cuantica.* In studiul publicat recent, *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 4, 025023 (2023), FI = 6.8, AIS = 2.2, este realizata pentru prima data o mapare directa intre potentialul de confinare si densitatea starii fundamentale multi-particula, evitand calculele numeric intensive de diagonalizare exacta, pentru setul de sisteme de test. In plus, este realizata o mapare inversa, i.e. pornind de la o densitate de sarcina V-reprezentabila catre potentialul de confinare. Acest aspect este deosebit de important in design-ul de nanodispozitive, unde se are in vedere identificarea unei structuri pornind de la proprietati si functionalitate (*inverse design*). Totodata, rezolvarea problemei inverse este mult mai dificila in comparatie cu problema directa si, de multe ori, nu are o solutie evidenta. Rezolvarea problemelor inverse reprezinta un domeniu activ, care poate fi pe mai departe abordat cu metodologia propusa in cadrul acestui proiect.

Metodologia utilizata este reconfirmata in studiul recent incheiat, privind localizarea si transferul de sarcina in sisteme neuromorfe, dezvoltat in etapa a III-a. Designul-ul flexibil al dispozitivului reconfigurabil cu porti flotante propus este un cadru ideal pentru utilizarea metodei de translatie de imagini. Numarul mare de configuratii posibile face ca abordarea sa nu fie realista prin calcule de tip *high-throughput computing*. Astfel, asocierea metodei de tip ML devine esentiala pentru o explorare eficienta a unui spatiu configurational extins. Metoda pe baza de translatie de imagini reprezinta o abordare generala, care poate fi utilizata in multe domenii stiintifice.

Impactul proiectului este reflectat in lucrarile ISI publicate, intre care se numara reviste de prestigiu in domeniu, precum *Mach. Learn.: Sci. Technol.* si *Phys. Rev. B*. Dezvoltarea tehnicilor ML a cunoscut o dezvoltare impetuoasa in ultimii ani, asa incat studiile elaborate pot stimula alte cercetari in domeniul fizicii starii condensate si nu numai, prin prisma flexibilitatii in aplicarea metodologiilor ML. De mentionat ca in cadrul proiectului au adus contributii semnificative studentii doctoranzi Amanda T. Preda si Calin-Andrei Pantis-Simut, care au dobandit o buna formare in dezvoltarea tehnicilor ML pentru probleme de fizica. Pe plan local, prin organizarea unui Workshop intitulat "*Hands on DFT atomistic calculations and machine learning techniques*", 5-6 iulie 2023, au fost popularizate tehnicile de tip ML cu aplicabilitate pe sisteme atomistice pentru tineri cercetatori, ceea ce a prezentat un interes deosebit in domeniul de specializare al fizicii materialelor.

**Pagina web proiect:** <http://solid.fizica.unibuc.ro/~nemnes/QuanticLearn>

**Director de proiect,** Dr. George Alexandru Nemnes

