

De DFT-1/2 methode voor qubits in breedband halfgeleiders

De elementaire bouwsteen van een kwantumcomputer is de qubit, het kwantum equivalent van de klassieke bit. Een veelbelovend fysisch systeem dat kan dienen als qubit is een single point defect in breedband halfgeleiders, zoals het Nitrogen Vacancy (NV) center in diamant. Wanneer een defect geïntroduceerd wordt in een materiaal dan kan dit leiden tot enkele atoomachtige diepe niveaus in de band gap. Met deze niveaus kan met twee-niveau systemen nabootsen en dus qubits maken.

In de deze thesis gebruik je Density Functional Theory(DFT) om de optische transitie en verschillende ladingstoestanden van zo'n defect te bestuderen in bijvoorbeeld Diamant, SiC, hBN etc. Iets specifieker, gaan we de DFT-1/2 methode gebruiken. Deze methode biedt een parameter vrije band gap correctie met dezelfde computationele schaling als DFT.