



Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ



Применение распределенных вычислительных систем для моделирования электронных состояний в наномасштабных полупроводниках и квантовых устройствах

А.М.Сатанин

*ННГУ им. Н.И.Лобачевского,
Лаборатория «Теория наноструктур» НИФТИ*

**Творческий коллектив
в рамках мероприятия СИ7 – сотрудники лаборатории «Теория
наноструктур» НИФТИ:**

1. Сатанин Аркадий Михайлович, профессор кафедры ТФ, фф, д.ф.м.н
2. Бурдов Владимир Анатольевич, доцент кафедры ТФ, фф, д.ф.м.н
3. Денисенко Марина Валерьевна, м.н.с. НИФТИ ННГУ
4. Пашин Дмитрий Сергеевич, студент 2 года магистратуры, физфак
5. Курова Наталья Викторовна, аспирант 3-го года обуч, физфак
6. Муняев Вячеслав Олегович, студент 1 года магистратуры, физфак
7. Гусейнов Давуд Вадимович, с.н.с. НИФТИ ННГУ к.ф.м. н
8. Сидоренко Кирилл Викторович, м.н.с. НИФТИ ННГУ

Проекты:

- 1) Диссипативная динамика (квантовый метод Монте-Карло)
- 2) Амплитудная спектроскопия кубитов
- 3) Туннелирование Ландау-Зинера
- 4) Генерация субгармоник в квантовых джозефсоновских цепях
- 5) Метод Кона-Шэма
- 6) Мемристоры
- 7) Нанокристаллы кремния

Смр-сервер (8х6 ядер) лаб “Теория наноструктур” НИФТИ



Сервер (STSS Flagman QD820) в составе:

Процессоры: 8 процессоров AMD® Opteron™
2.10GHz 8425 HE SixCore 4800MHz System Bus,
6x512Kb L2 cache, 6144Kb L3 cache

Чипсет: nVidia® nForce® Pro 2200 / 2050 Server
chipset

ОЗУ: 16 x DIMM 4096Mb DDR-II PC2-6400 ECC
Registered

Жесткие диски: 4 x HDD 300Gb SerialATA
10000rpm

ОС: Microsoft Windows Server Enterprise 2008
32/64bit



Станции с NVIDIA Tesla ускорителями: 3 КТФ

и 4+1 лаб “Теория наноструктур” НИФТИ и Тв. отд НИФТИ



2 станции (STSS Flagman WX240T.2) в составе:

Процессоры: 2 процессора Intel® Xeon® 2.66GHz X5550 Nehalem Quad Core w/HyperThreading 6.4GT/s FSB, 8192Kb L3 cache

Чипсет: Dual Intel® 5520 Server chipset

ОЗУ: 12 x DIMM 2048Mb DDR-III PC3-10600 ECC Registered

Видеоадаптер: nVidia® Quadro® FX 380 PCI-Express x16 256Mb DDR-3 Dual DVI

Ускорители: 4 вычислителя nVidia® Tesla® C1060 PCI-Express x16 4096Mb DDR-3

ОС: Microsoft Windows Vista Ultimate 64bit



6 станций (STSS Flagman WP120N.2) в составе:

Процессор: 3.06GHz Intel® Core™ i7 I7-950 EM64T QuadCore Hyper-Threading 4.8GT/s FSB, 8192Kb L3 cache

Чипсет: Intel® X58 + 2 x Nvidia® nForce200 chipset

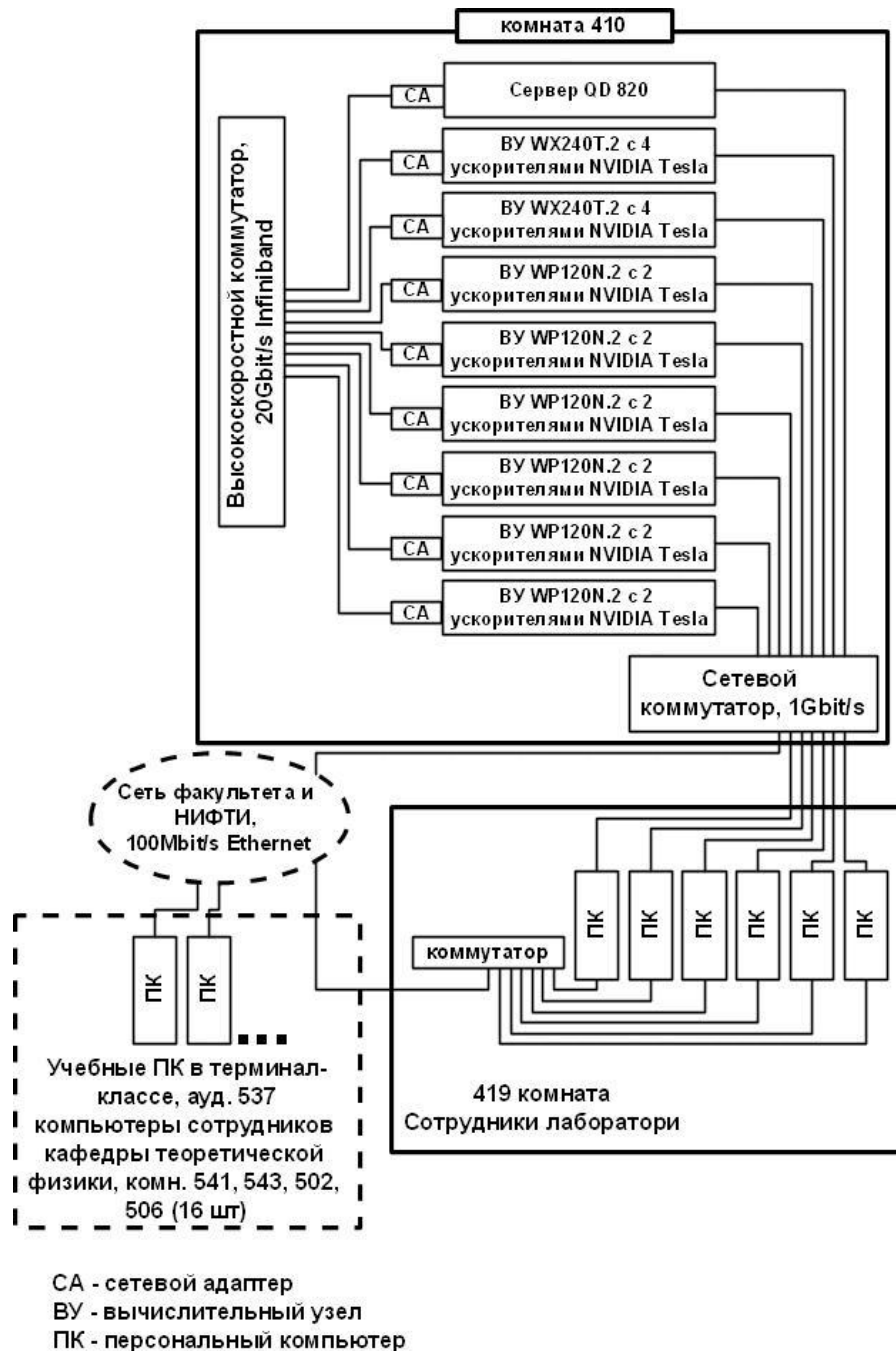
ОЗУ: 6 x 2048Mb DDR-III 1333MHz DIMM

Видеоадаптер: nVidia® Quadro® FX 580 PCI-Express x16 512Mb DDR-3 Dual DisplayPort

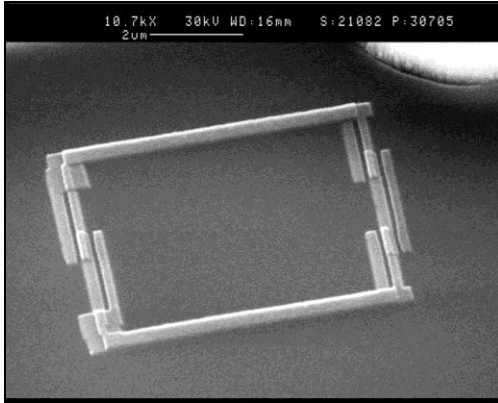
Вычислитель: nVidia® Tesla® C1060 PCI-Express x16 4096Mb DDR-3

ОС: Microsoft Windows Vista Ultimate

Схема кластера НИФТИ



Ландау-зинеровская спектроскопия кубитов джозефсоновских кубитов



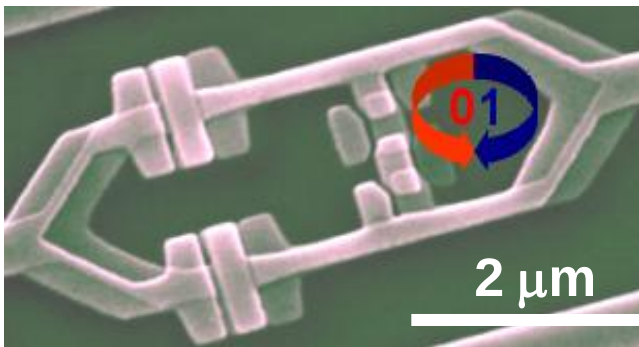
**Ильичев, Измалков и др,
Institute of Photonic
Technology**

material: Aluminum, shadow-evaporation technique,
two junctions 600x200nm

$I_C \approx 600$ nA,

the third one is smaller: $a = E_{J1} / E_{J2,3} \sim 0.8 \dots 0.9$,

inductance $L \approx 20$ -40 pH.



Mooij *et al.*, Science 285, 1036, 1999

flux qubit/Delft

$$E_J / E_C \sim 40$$

Двухуровневая система - кубит

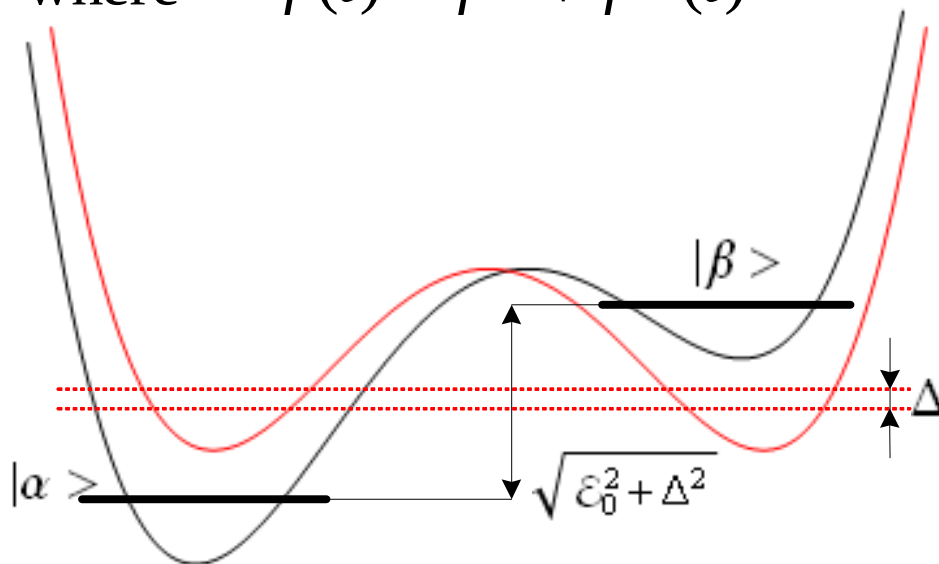
$$H(t) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon(t) & \Delta \\ \Delta & -\varepsilon(t) \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon(t) = 2 |I_c| \Phi_0 f(t)$$

where $f(t) = f^{dc} + f^{ac}(t)$

$$f^{dc} = \frac{\Phi^{dc}}{\Phi_0} - \frac{1}{2} \quad (\Phi_0 = h/2e)$$

$$f^{ac}(t) = \frac{\Phi^{ac}}{\Phi_0} \propto A(\cos(\omega t + \theta) - \gamma \cos(2\omega t))$$



Manipulation of qubit states

— $\varepsilon(t) = 0$
 — $\varepsilon(t) = \varepsilon_0$

Driving field:

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A(\cos(\omega t + \theta) - \gamma \cos(2\omega t))$$

Туннелирование Ландау-Зинера

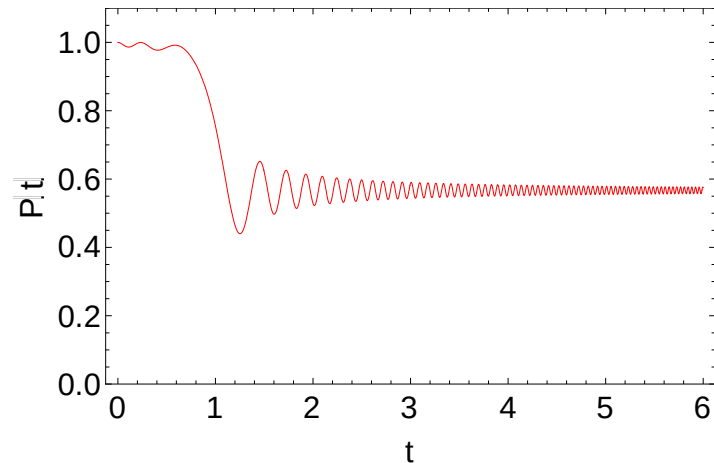
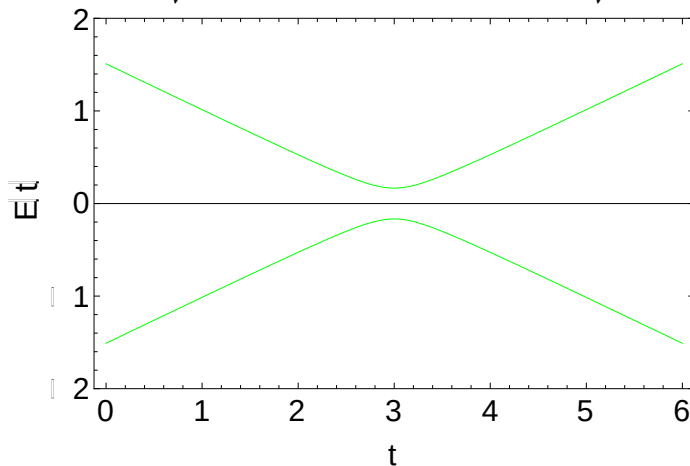
$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_- \\ c_+ \end{pmatrix} = H(t) \begin{pmatrix} c_- \\ c_+ \end{pmatrix}, \quad H(t) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} v\tau & \Delta \\ \Delta & -v\tau \end{pmatrix}$$

$$H(t) |\phi_{\pm}(t)\rangle = E_{\pm}(t) |\phi_{\pm}(t)\rangle$$

$$\frac{\partial^2 c_{\mp}}{\partial t^2} + \left\{ \mp \frac{iv}{2} + \frac{(v\tau)^2 + \Delta^2}{4} \right\} c_{\mp} = 0$$

$$E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{(v\tau)^2 + \Delta^2}$$

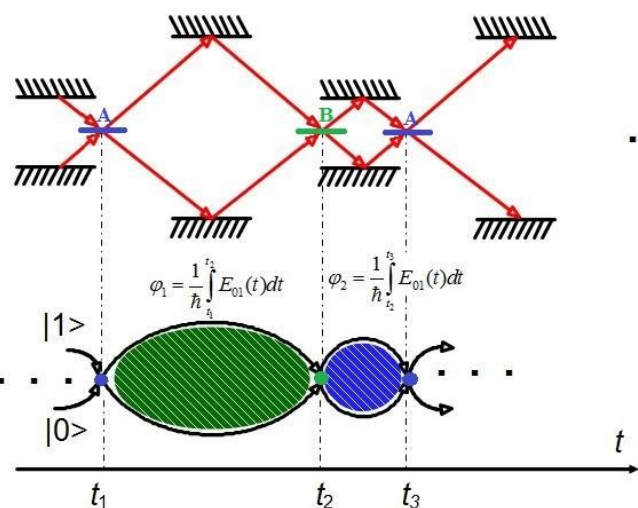
$$c_+(\tau) = A_+ D_{-i\frac{\Delta^2}{v}} \left(\sqrt{2} e^{i\pi/4} \frac{\Delta^2}{v} \tau \right) + B_+ D_{-i\frac{\Delta^2}{v}} \left(-\sqrt{2} e^{i\pi/4} \frac{\Delta^2}{v} \tau \right)$$



$$P_{LZ} \propto \exp(-2\pi\Delta^2 / v)$$

Переходы Ландау-Зинера в бигармоническом поле

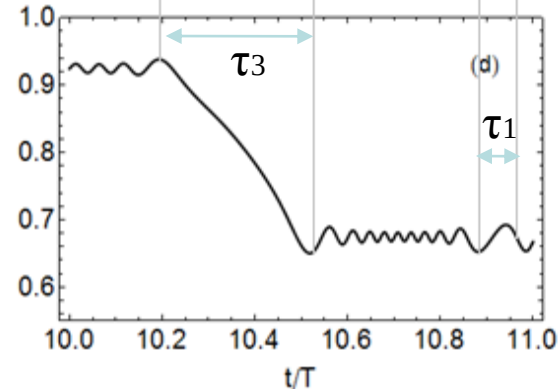
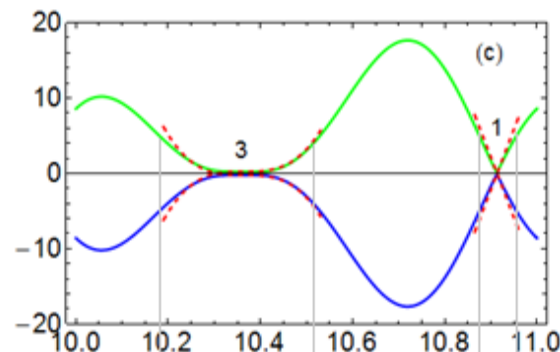
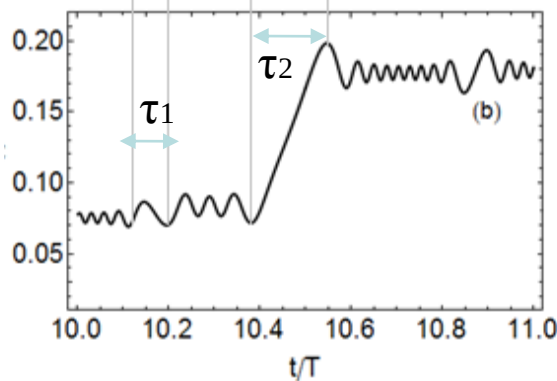
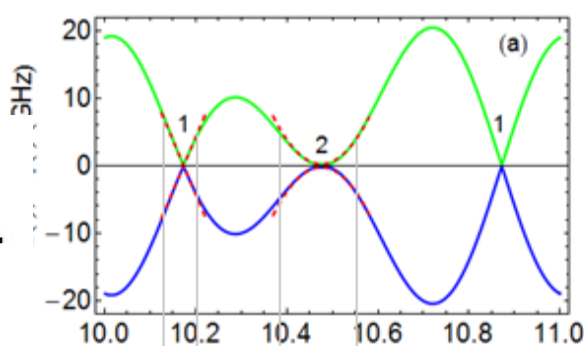
Аналогия с интерферометром Маха-Цендера



$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$$

$$H(t) |\phi_{\pm}(t)\rangle = E_{\pm}(t) |\phi_{\pm}(t)\rangle$$

$$P_{LZ} \propto \exp(-2\pi\Delta^2 / \nu)$$



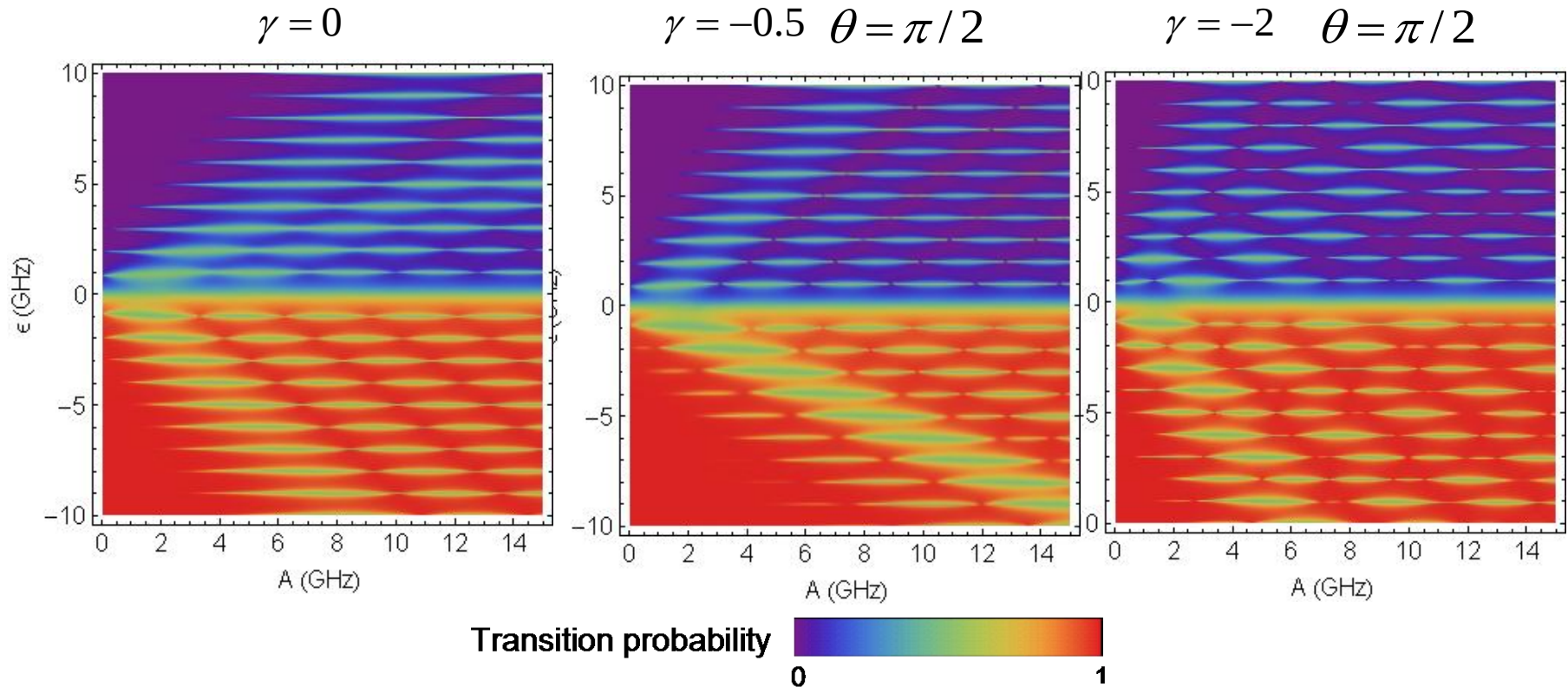
1 – ЛЗ туннелирование

2 – Квадратичный
сценарий

3 – Кубический сценарий

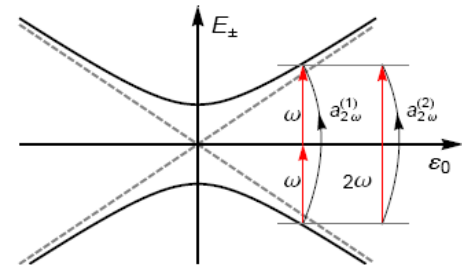
А.И. Гельман, М.В. Денисов, А.М. Сидоров // Вестник ННГУ,
5(2), 48 (2010)

Амплитудная спектроскопия



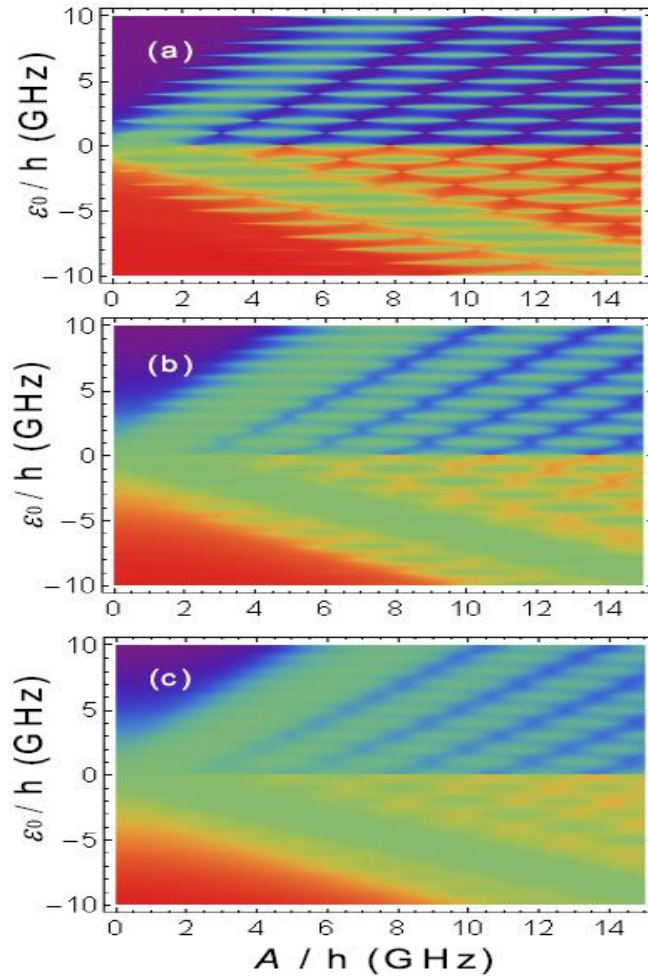
Parameters: $\Delta = 0.5 \text{ GHz}$, $\omega = 0.16 \text{ GHz}$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A(\cos(\omega t + \theta) - \gamma \cos(2\omega t))$$

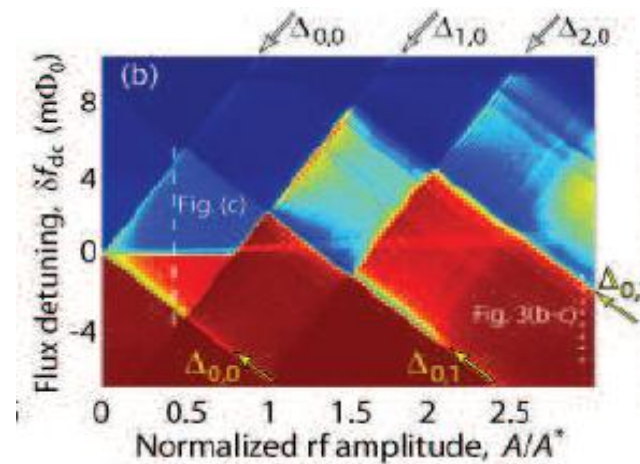


Фазовый шум

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] + \frac{1}{2} \Gamma (\sigma_z \rho \sigma_z^\dagger - \rho)$$

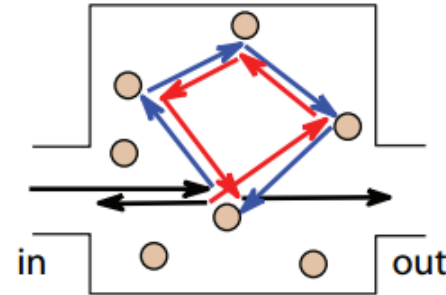


Experiment
J. Bylander *et al.*,
Phys. Rev. B **80**, 220506 (2009)



Мезоскопические флуктуации

1) Слабая локализация



Л.П. Горьков, А.И. Ларкин и Д.Е. Хмельницкий, письма в ЖЭТФ 30, 248 (1979).

E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions, Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).

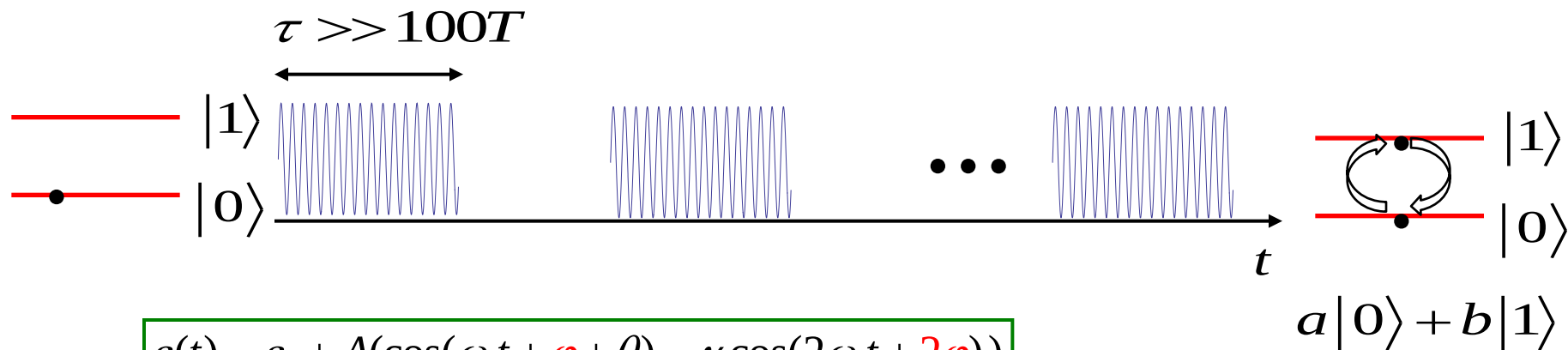
1) Кондантанс чувствителен к конфигурации рассеивателей

2) Флуктуации универсальны не зависят ни от степени беспорядка, ни от размеров системы

$$\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 \sim (e^2 / h)^2$$

P. A. Lee and A. D. Stone, Universal Conductance Fluctuations in Metals, Phys. Rev. Lett. 55, 1622 (1985).

Случайные процессы



$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A(\cos(\omega t + \varphi + \theta) - \gamma \cos(2\omega t + 2\varphi))$$

$$\cos\left(2\omega\left(t + \frac{\varphi}{\omega}\right)\right) = \cos(2\omega(t - t_0)), \quad t_0 = -\frac{\varphi}{\omega}$$

- i) Randomization phase is the result of a random arrival time of the driving pulse to qubit
- ii) Pulse duration is also a random variable because it is defined up to pulse period

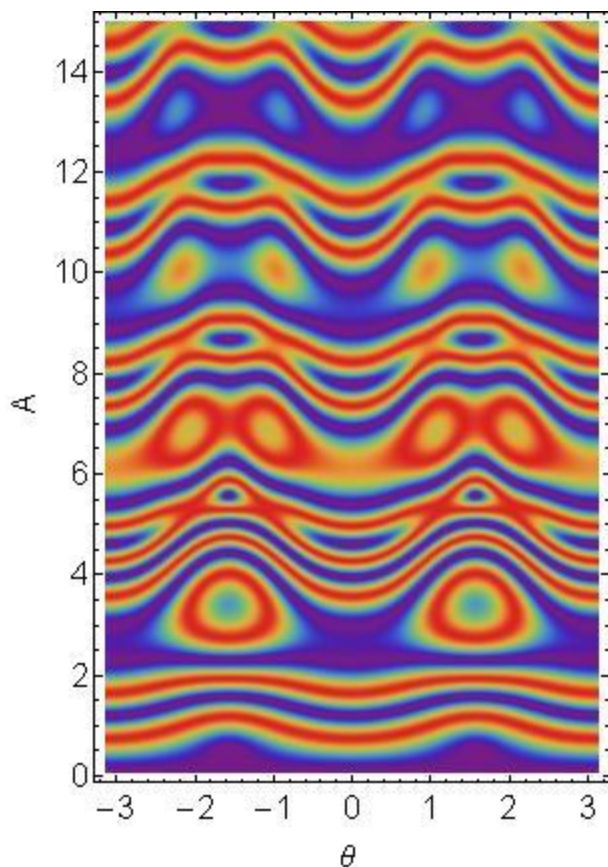
Сравнение точного решения и Раби-приближения

Проведено усреднение по общей фазе сигнала φ

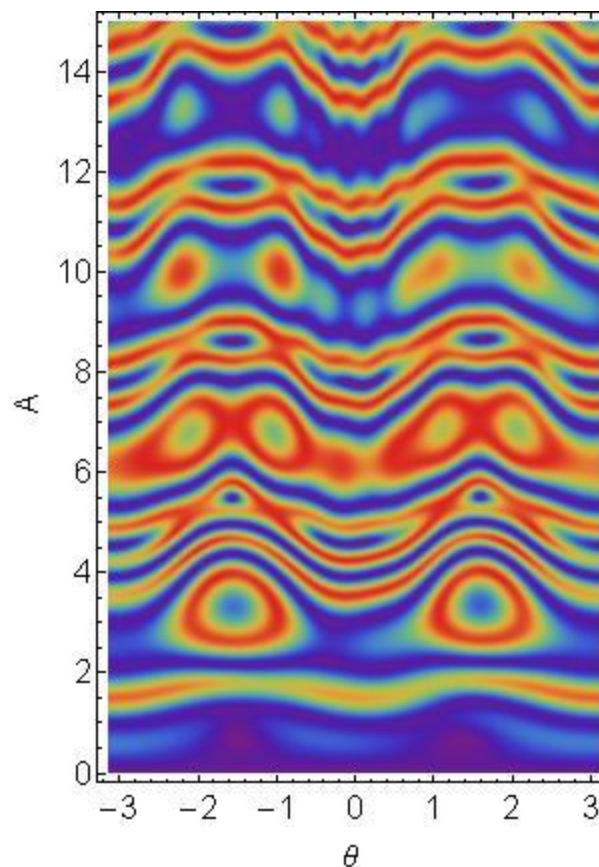
$$\overline{P_{\alpha \rightarrow \beta}(\theta, \gamma)}$$

Вероятность населенности кубита на верхнем уровне, в момент окончания действия импульса. Длительность импульса $\tau = 10 T$

Раби-приближение

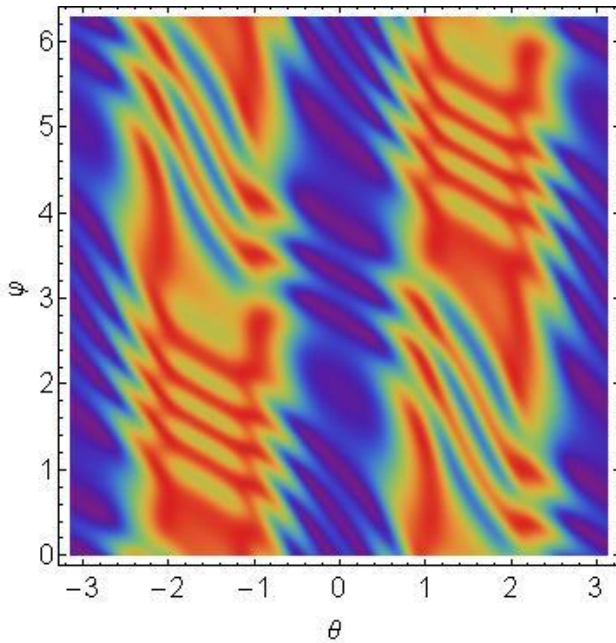


Численное решение

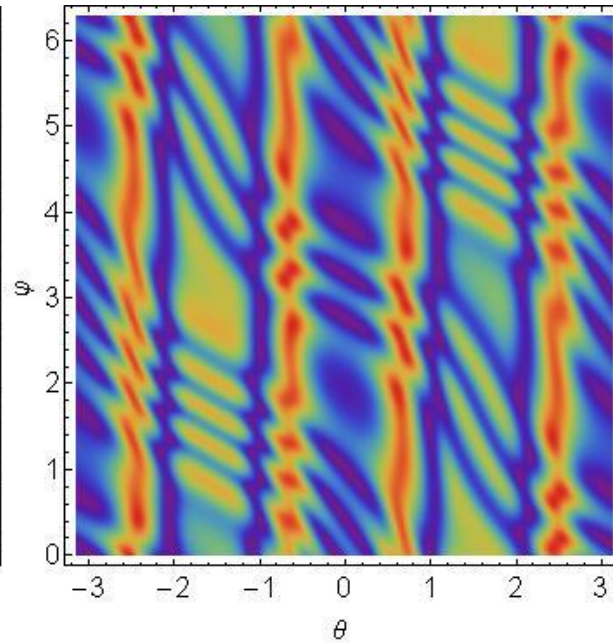


$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A(\cos(\omega t + \varphi + \theta) - \gamma \cos(2\omega t + 2\varphi))$$

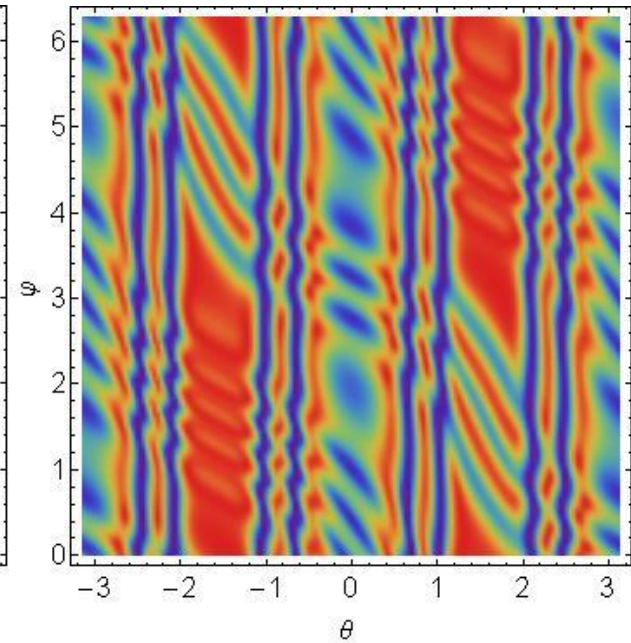
$\tau = 5T$



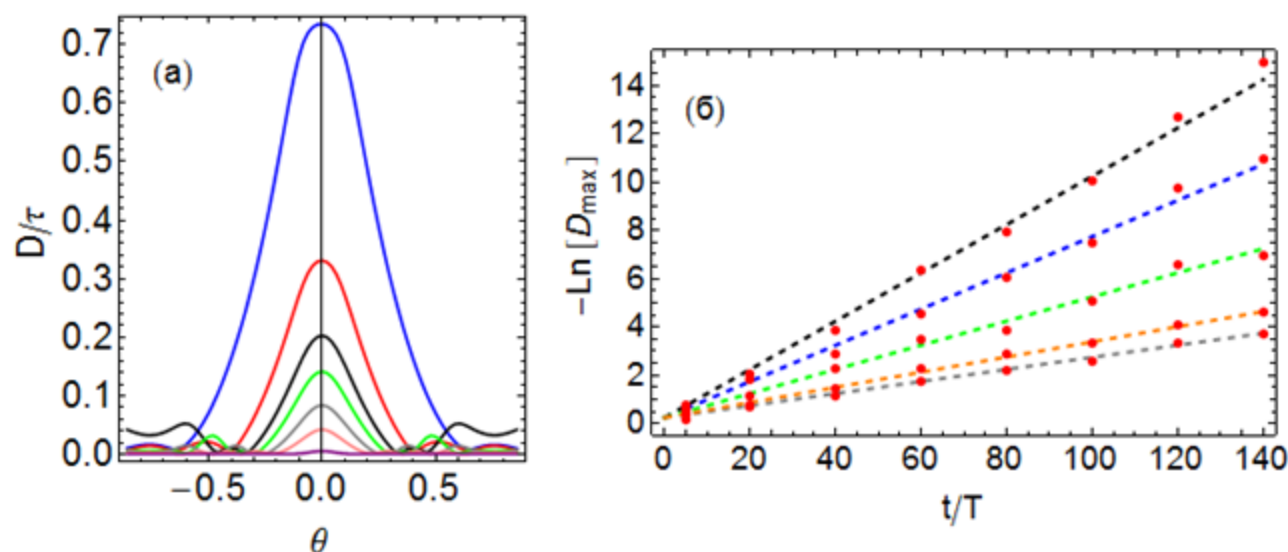
$\tau = 10T$



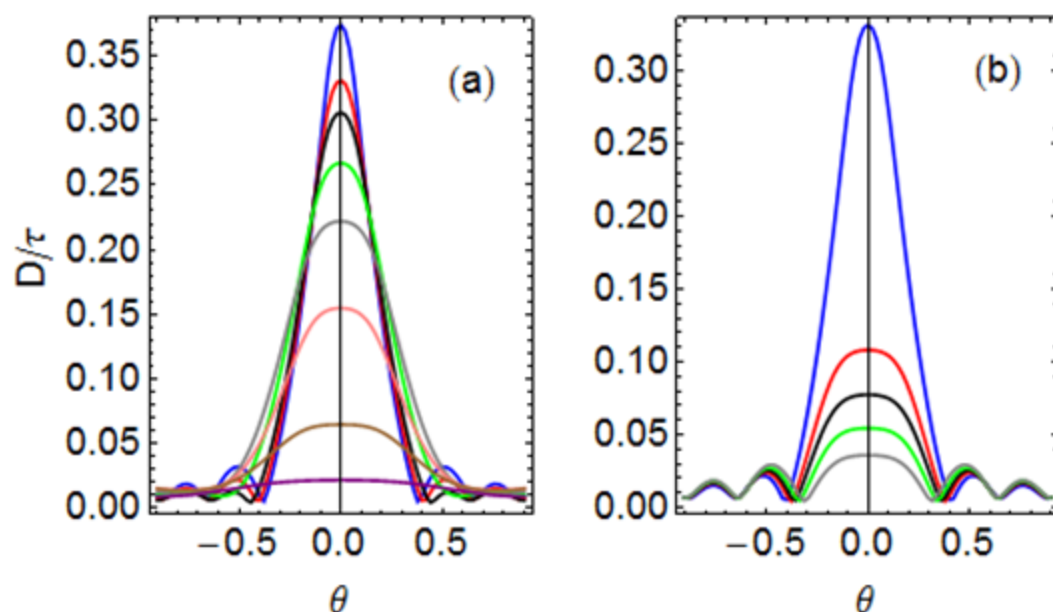
$\tau = 20T$



$A = 12 \text{ GHz}; \varepsilon_0 = 2 \text{ GHz}; \gamma = 0.25$



(а) Зависимость дисперсии D от относительной фазы импульса θ при $\Gamma_f/\omega = 0.005$ для $\tau = 5T$ - синяя, $\tau = 10T$ - красная, $\tau = 20T$ - черная, $\tau = 30T$ - зеленая, $\tau = 50T$ - серая, $\tau = 100T$ - розовая и $\tau = 200T$ - бардовая кривые. (б) Зависимость убывания пика дисперсии $D_{\max}$ от времени действия импульса. Красные точки - рассчитанные значения, а пунктирные линии - качественный закон убывания пика дисперсии. Черная линия при $\Gamma_f/\omega = 0.1$, синяя - $\Gamma_f/\omega = 0.075$, зеленая - $\Gamma_f/\omega = 0.05$, оранжевая - $\Gamma_f/\omega = 0.025$ и серая линия при $\Gamma_f/\omega = 0.005$. Параметры системы аналогичны тем, что представлены на рис. 2 (а).



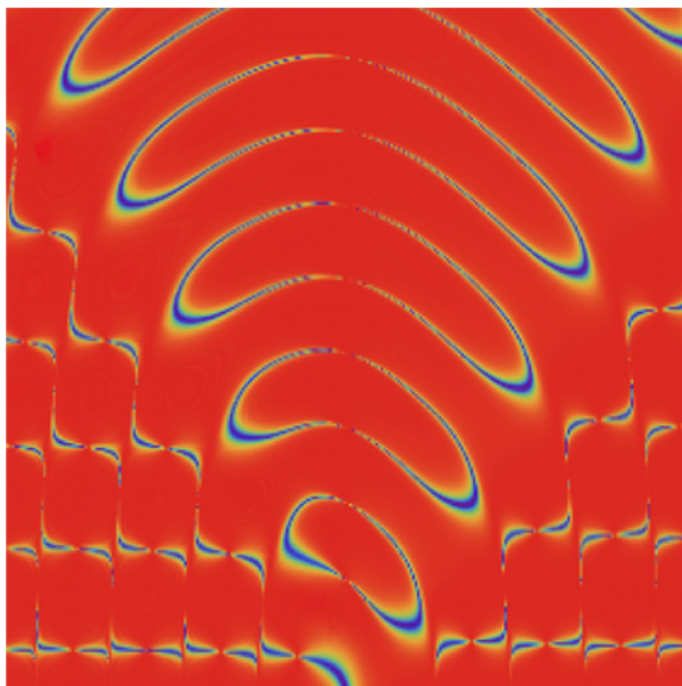
(а) Зависимость дисперсии при изменении относительной разности фаз θ при $\Gamma_e/\omega = 0.0001$ и различных значений фазового шума $\Gamma_f/\omega = 0.001$ синяя кривая, $\Gamma_f/\omega = 0.0075$ - красная, $\Gamma_f/\omega = 0.005$ - черная, $\Gamma_f/\omega = 0.0025$ - зеленая, $\Gamma_f/\omega = 0.01$ - серая, $\Gamma_f/\omega = 0.025$ - розовая, $\Gamma_f/\omega = 0.05$ - коричневая и $\Gamma_f/\omega = 0.075$ - бардовая. (б) Зависимость дисперсии при изменении относительной разности фаз θ при $\Gamma_f/\omega = 0.005$ и $\Gamma_e/\omega = 0.001$ синяя кривая, $\Gamma_e/\omega = 0.002$ - красная, $\Gamma_e/\omega = 0.003$ - черная, $\Gamma_e/\omega = 0.004$ - зеленая, $\Gamma_e/\omega = 0.005$ - серая. Остальные параметры системы: $\Delta/\omega = 0.5$, $A/\omega = 29,83$, $\varepsilon_0/\omega = 5$, $\gamma = 0.25$.

PHYSICAL REVIEW B

condensed matter and materials physics

Highlights Recent Accepted Authors Referees Search About 📡

Kaleidoscope



From the article:

[Amplitude and phase effects in Josephson qubits driven by a biharmonic electromag](#)

A. M. Satanin, M. V. Denisenko, A. I. Gelman, and Franco Nori

Phys. Rev. B **90**, 104516 (2014)

More Kaleidoscopes for September 2014

Дробные резонансы в квантовых системах

Применение осцилляторных систем для: • **инженерии квантовых состояний**

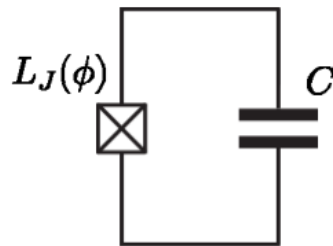
A. Wallraff, *et al.*, Nature (London) 431, 162 (2004)

Схема нелинейного осциллятора

Элементы:



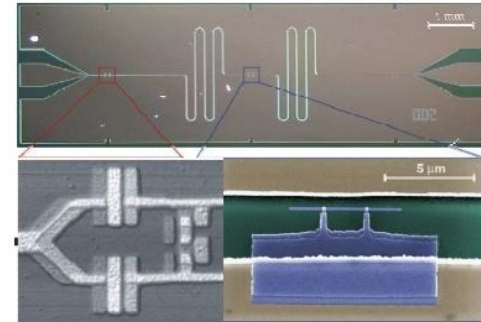
Участок цепи:



Неэквидистантный спектр!

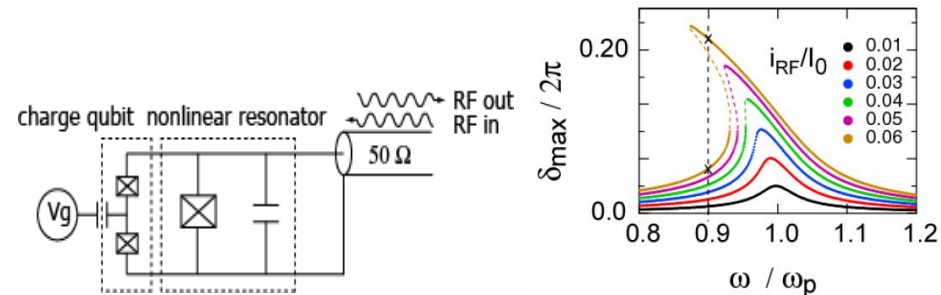
Возможности:

- Селективное заселение фоковских состояний;
- Измерение населенностей кубита



• **для сверхтонких измерений**

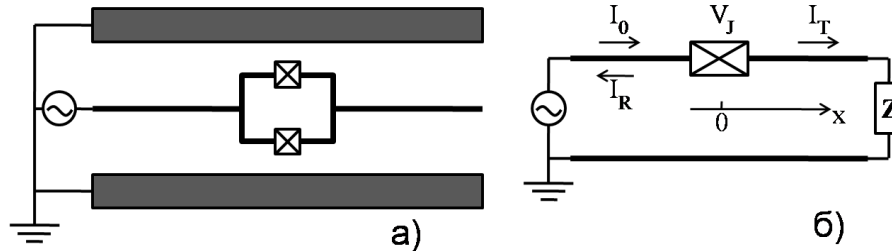
I. Siddiqi *et al.*, Phys. Rev. Lett. 93, 207002 (2004); I. Siddiqi, *et al.* Phys. Rev. B 73, 054510 (2006).



• **исследование нелинейных явлений (например, деление частоты)**

Пример реализации: волновод с встроенным джозефсоновским контактом

Центральная “жила” планарного волновода “разорвана” и в неё встроена слабая связь



Динамика перехода описывается в рамках резистивной модели:

$$\frac{\hbar}{2e} C \frac{d^2 \varphi_1}{dt^2} + \frac{\hbar}{2e} \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{2Z_l} \right) \frac{d\varphi_1}{dt} + I_{C1} \sin \varphi_1 + I_{C2} \sin(\varphi_1 - f) = \frac{1}{Z_l} V_0(t)$$

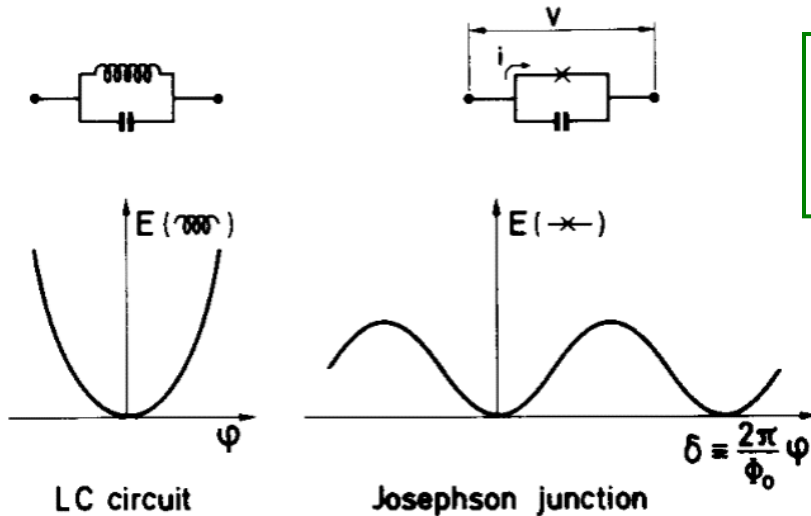
Вблизи минимума энергии, когда $I_{C1} \sin \varphi_1^{(0)} + I_{C2} \sin(\varphi_1^{(0)} - f) = 0$

$$\varphi_1 = \varphi_1^{(0)} + \psi \quad \frac{\hbar}{2e} C \frac{d^2 \psi}{dt^2} + \frac{\hbar}{2e} \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{2Z_l} \right) \frac{d\psi}{dt} + \frac{\hbar}{2e} C \omega_J^2(f) \psi - \beta \psi^3 = \frac{1}{Z_l} V_0(t) \quad \omega_J^2 = \frac{2eI_{C1}}{\hbar C}$$

$$a = \frac{I_{C2}}{I_{C1}}$$

$$\omega_J^2(f) = \omega_J^2 (1 + a^2 + 2a \cos f)^{1/2}$$

Гамильтониан джозефсоновского перехода



$$H = \frac{CV^2}{2} - \frac{\hbar}{2e} I_c \sin \varphi - \frac{\hbar}{2e} I(t) \varphi$$

$$E_c = \frac{e^2}{2C}$$

$$E_J = \frac{\hbar}{2e} I_c$$

Квантование: $\varphi \rightarrow \hat{\varphi}, p \equiv \dot{\varphi} \rightarrow \hat{p}$

При квантовании величин,
используем коммутационное
соотношение: $[\hat{\varphi}, \hat{p}] = i\hbar$

Плазменная частота

$$\hbar \omega_p = \sqrt{8E_c E_J}$$

$$H = \frac{8E_c}{\hbar^2} \frac{p^2}{2} - E_J \cos \varphi - \frac{\hbar}{2e} I(t) \varphi$$

С учетом слабой
нелинейности

$$H = \frac{\hat{p}^2 + \omega_p^2 \hat{\varphi}^2}{2} - \frac{\mu}{4} \hat{\varphi}^4 - f(t) \hat{\varphi}$$

Главный резонанс (n = 1)

$$\frac{\omega}{\omega_p} \approx 1$$

$$\ddot{\chi} + 2\gamma\dot{\chi} + \Omega^2\chi - \chi^3 = \zeta \cos \tau$$

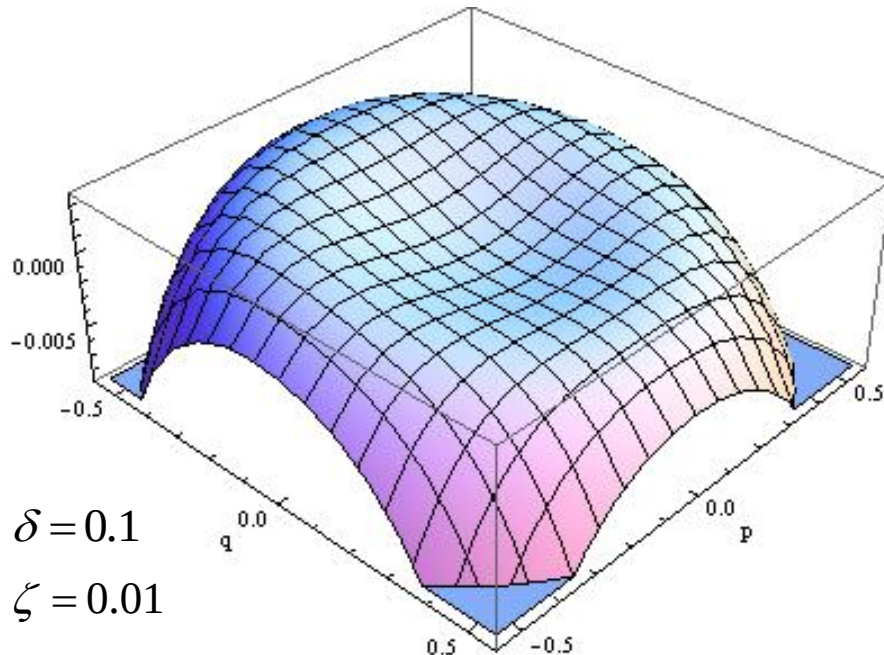
$$\chi = \Omega\sqrt{-\beta}\phi$$

$$\zeta = \frac{I_{ac}}{I_c} \Omega^3 \sqrt{-\beta}$$

Выделяем быстрые колебания:

$$\begin{cases} \dot{\chi} = -q \sin \tau + p \cos \tau \\ 0 = \dot{q} \cos \tau + \dot{p} \sin \tau \end{cases}$$

Квазиэнергетическая поверхность
в отсутствии трения



$$\delta = 0.1$$

$$\zeta = 0.01$$



После усреднения

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\delta}{2} p - \frac{3}{8} p (q^2 + p^2) - \gamma q \\ \dot{p} = -\frac{\delta}{2} q + \frac{3}{8} q (q^2 + p^2) - \gamma p + \frac{\zeta}{2} \end{cases}$$

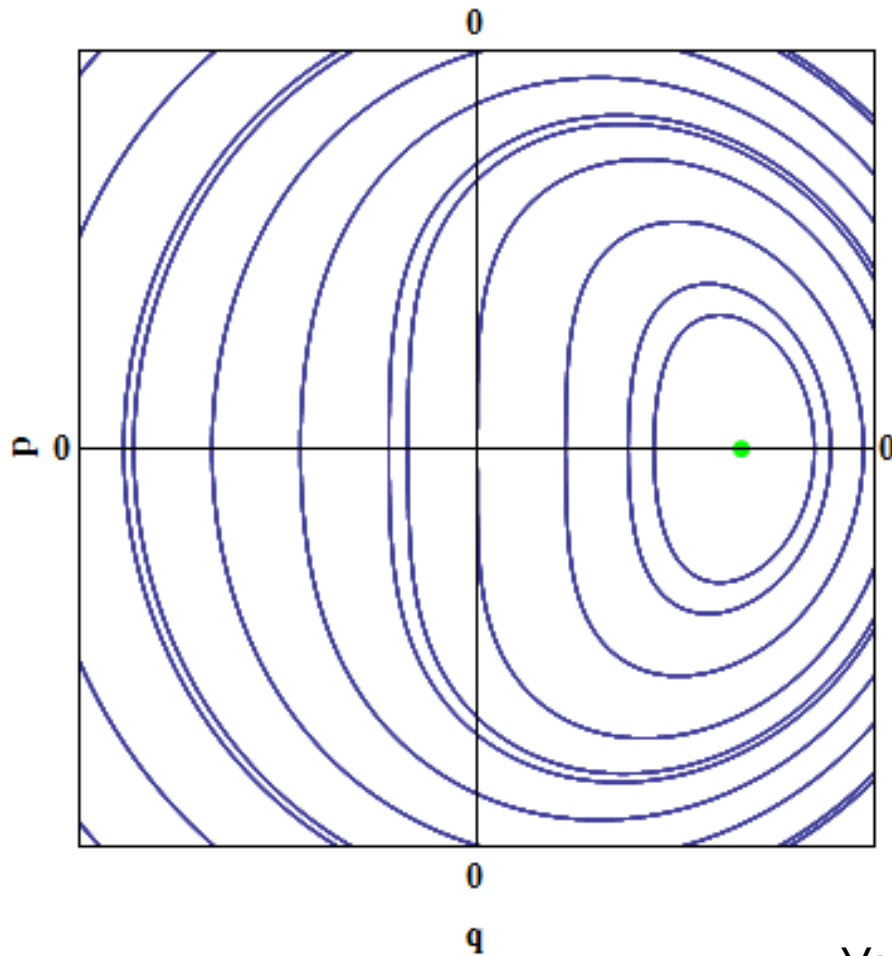
В отсутствии трения:

$$\bar{H} = \frac{(q^2 + p^2)}{32} (8\delta - 3(q^2 + p^2)) - \frac{\zeta}{2} q$$

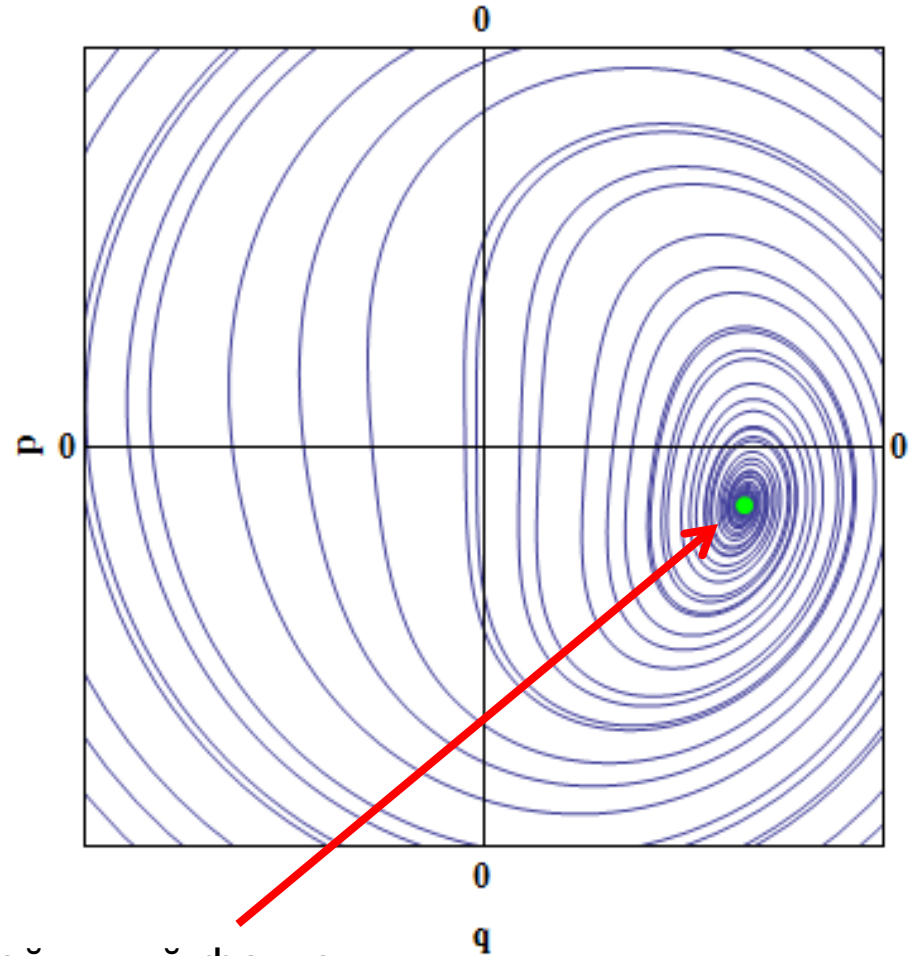
Фазовый портрет ($n = 1$)

Точный резонанс: $\delta = 0$ и $\zeta = -1$

Без трения



С трением: $\gamma = 0.1$



Устойчивый фокус

Дробный резонанс ($n = 3$)

$$\frac{\omega}{\omega_p} \approx 3$$

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \Omega^2 x + \beta x^3 = \zeta \cos(3\tau)$$

Линейный сдвиг: $x = \chi + A \cos(n\tau)$

$$A = \frac{\zeta}{\Omega^2 - n^2}$$



Квазиэнергетическая поверхность
в отсутствии трения

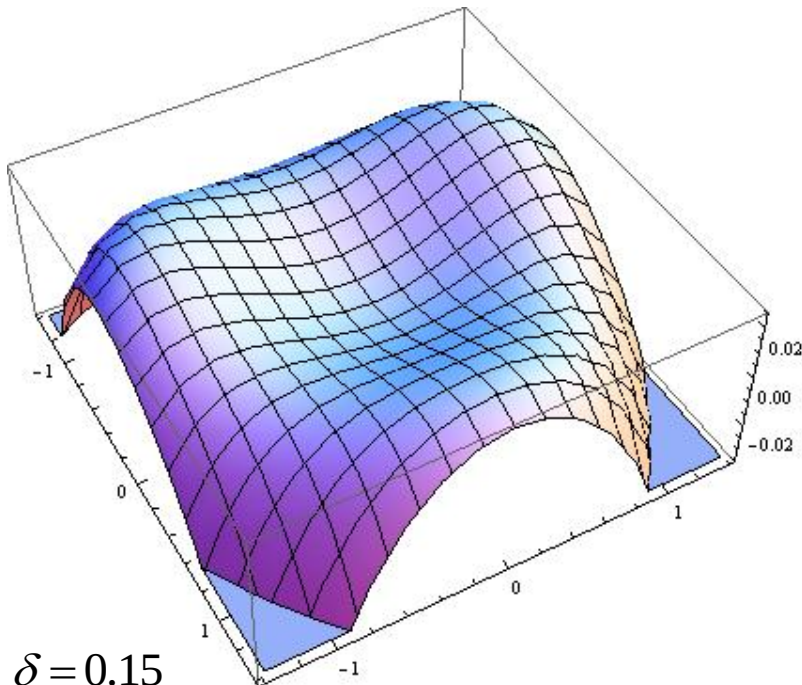
$$\ddot{\chi} + \Omega^2 \chi + 2\gamma(\dot{\chi} - A n \sin(n\tau)) + \beta(\chi + A \cos(n\tau))^3 = 0$$

$$\begin{cases} \dot{\chi} = -q \sin \tau + p \cos \tau \\ 0 = \dot{q} \cos \tau + \dot{p} \sin \tau \end{cases}$$

После усреднения



$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\delta}{2} p + \frac{3\beta}{8} (p(2A^2 + q^2 + p^2) - 2Aqp) - \gamma q \\ \dot{p} = -\frac{\delta}{2} q - \frac{3\beta}{8} (q(2A^2 + q^2 + p^2) + A(q^2 - p^2)) - \gamma p \end{cases}$$



$$\delta = 0.15$$

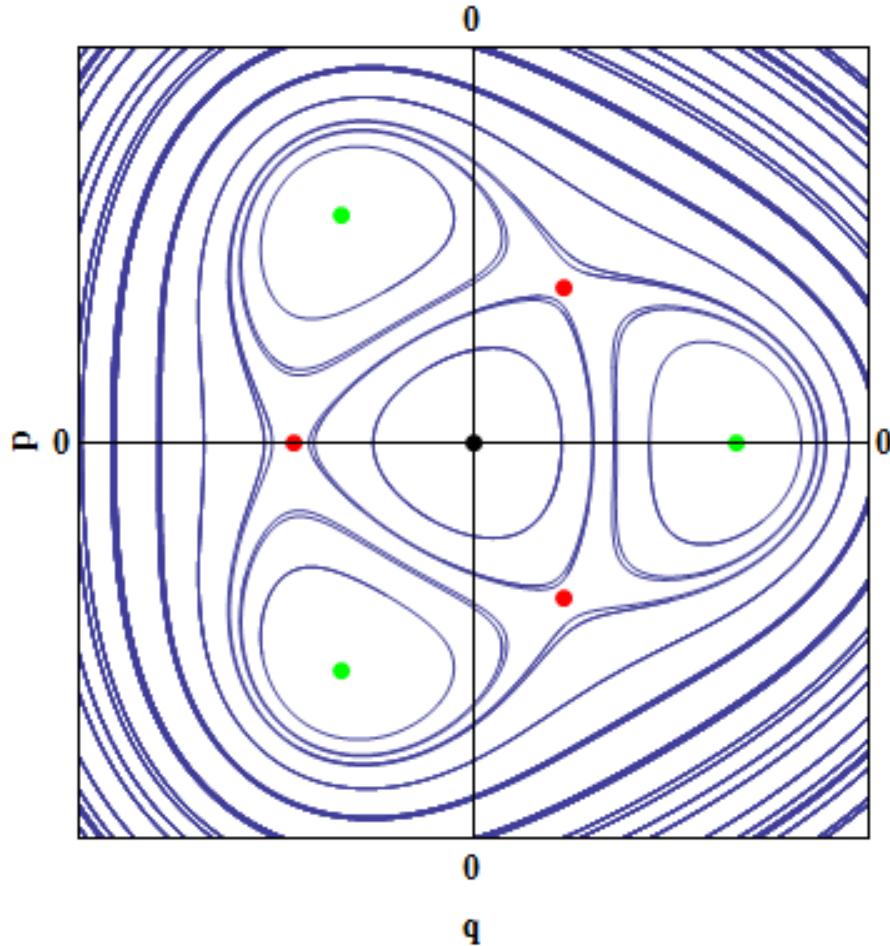
$$A = -0.3$$

В отсутствии трения: $\bar{H} = \frac{(q^2 + p^2)}{4} \left(\delta + \frac{3\beta}{8} (4A^2 + q^2 + p^2) \right) + \frac{A\beta}{8} q(q^2 - 3p^2)$

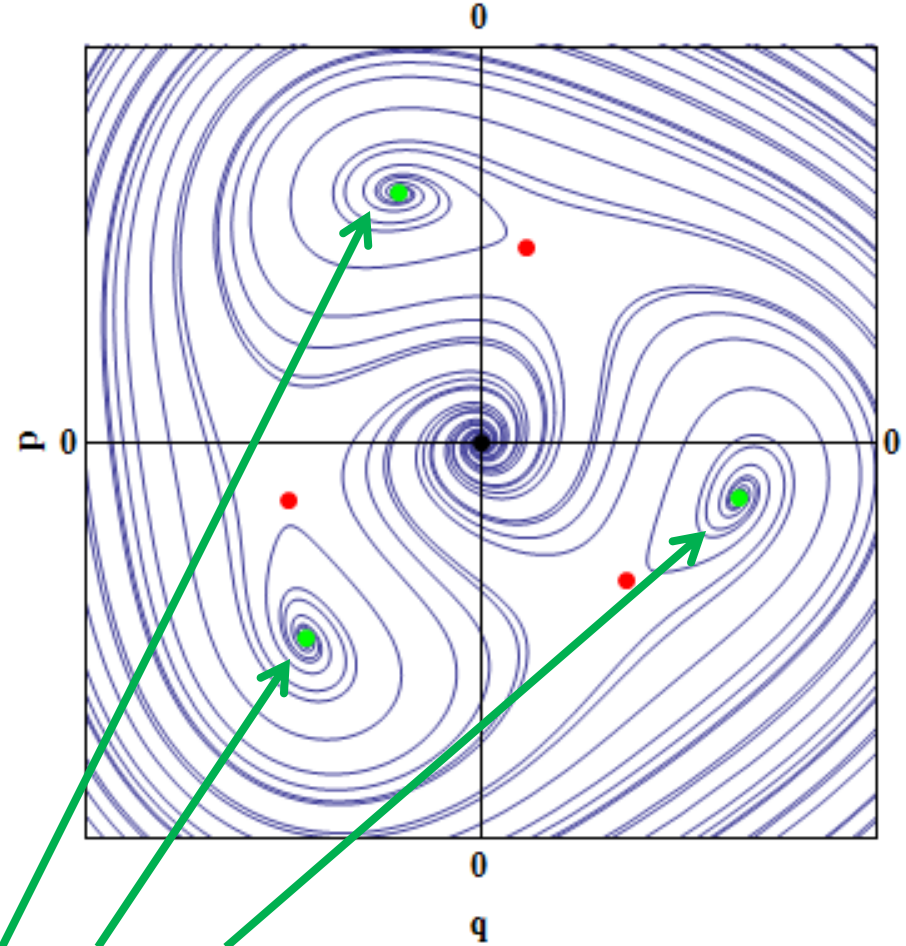
Фазовый портрет ($n = 3$)

Точный резонанс: $\delta = 0.1$ и $A = -0.3$

Без трения



С трением: $\gamma = 0.01$



Устойчивые точки равновесия

Квантовая теория нелинейного резонанса

$$H = \frac{\hat{p}^2 + \omega_p^2 \hat{\phi}^2}{2} - \frac{\mu}{4} \hat{\phi}^4 - f(t) \hat{\phi}$$

$$\hat{\phi} = \sqrt{\frac{1}{2\omega_p}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \hat{p} = i\sqrt{\frac{\omega_p}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a})$$

$$H = \omega_p \hat{a}^+ \hat{a} - \frac{\tilde{\mu}}{4} (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 - \tilde{f}(t) (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

Резонансное приближение

Совершим унитарный поворот и выделим вращение на частоте внешнего поля Ω

$$\tilde{f}(t) = f_0 \cos(\Omega t)$$

Стационарный гамильтониан в резонансном приближении:

$$H_{eff} = \delta \hat{n} - \frac{\tilde{\mu}}{4} \hat{n}^2 - \frac{f_0}{2} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

Разлагая волновую функцию по фоковскому базису $|\bar{\Psi}\rangle = \sum C_n(t) |n\rangle$ получим уравнение для коэффициентов

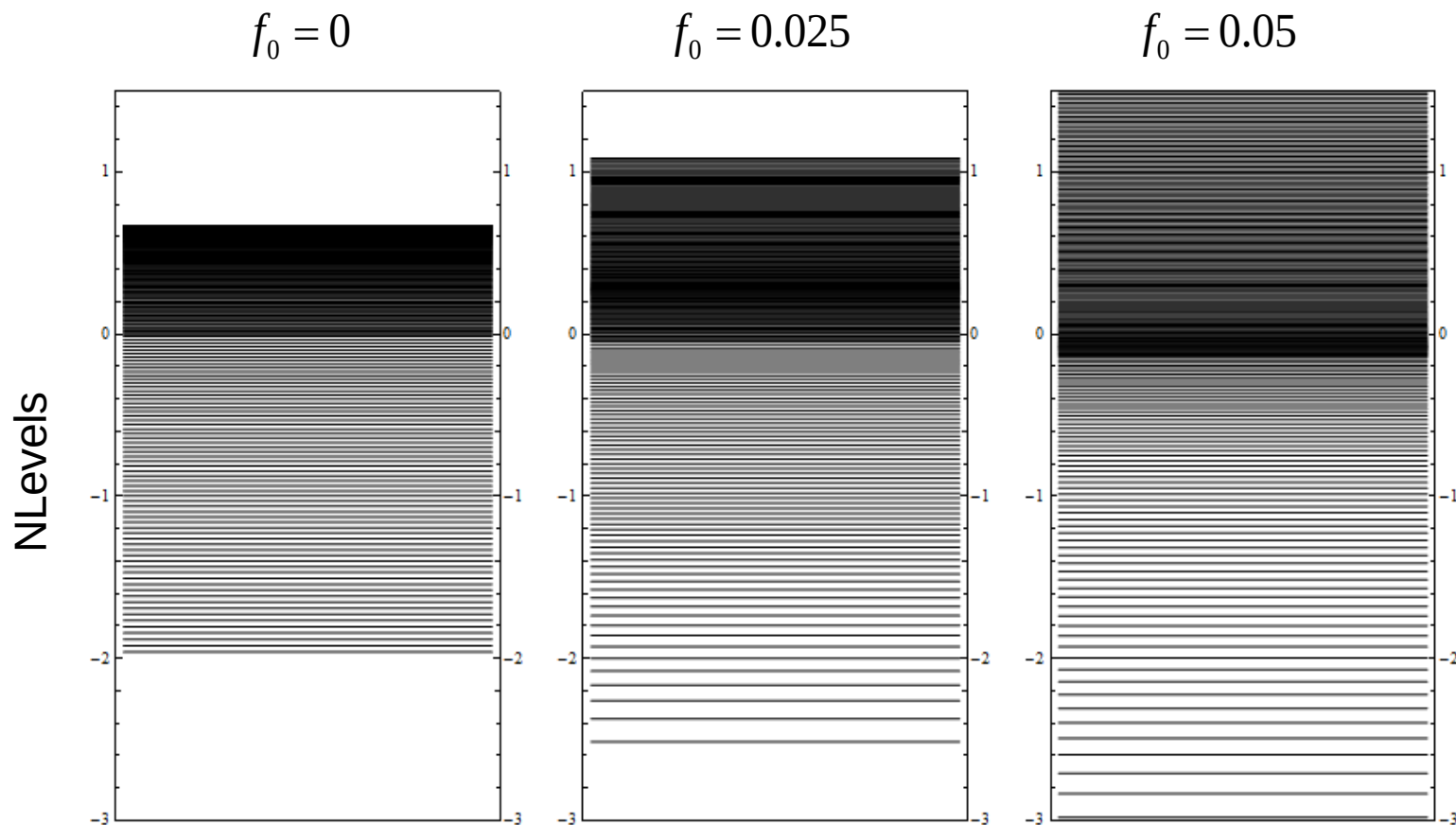
$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = (\delta n - \mu n^2) C_n - \frac{f_0}{2} (\sqrt{n} C_{n-1} + \sqrt{n+1} C_{n+1})$$

Условия захвата в нелинейный резонанс:

$$n_0 = \frac{\hbar \delta}{2\mu} \gg 1, \quad \delta n = \sqrt{\frac{f_0}{\mu}} (n_0)^{1/4} \ll n_0$$

Квазиэнергетическое представление

Спектр квазиэнергий

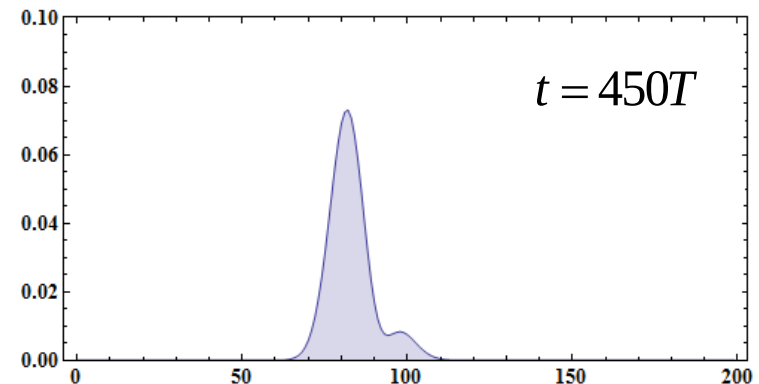
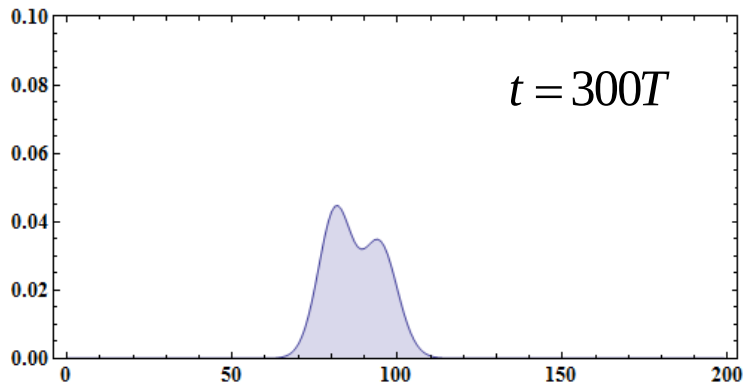
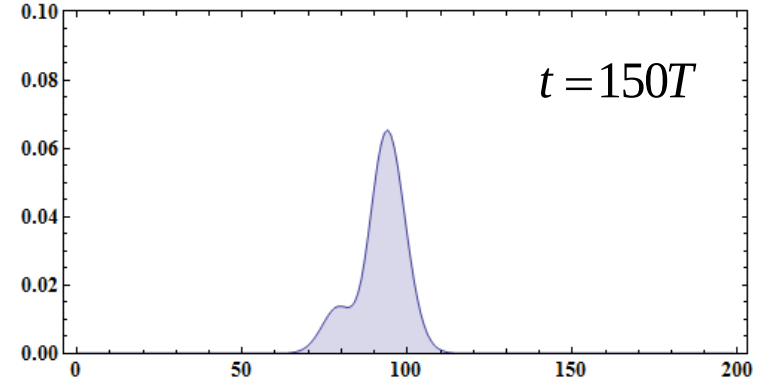
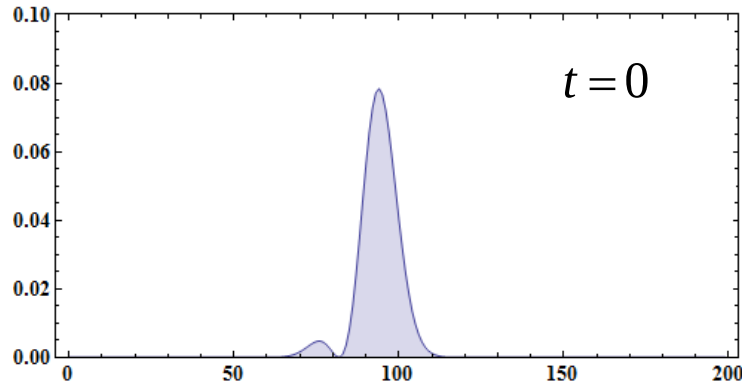
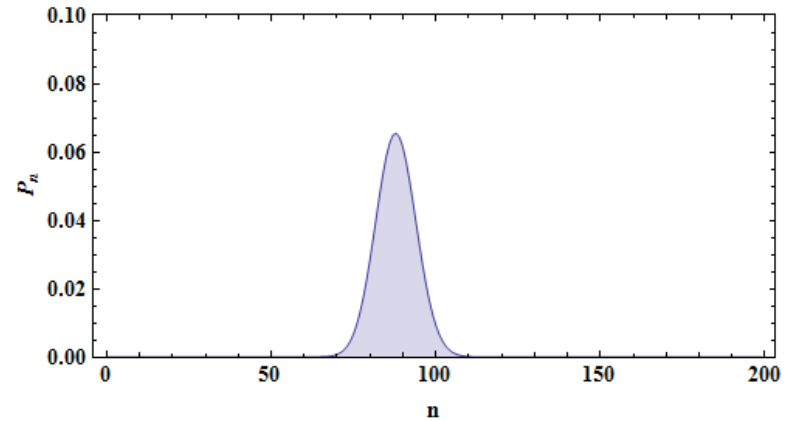


$$E_n = \delta n - \mu n^2 \quad n_{\max} = \frac{\delta}{2\mu}$$

Динамика населенностей при главном резонансе

Квазиэнергетическое состояние:

Эволюция суперпозиции квазиэнергетических состояний



Дробный резонанс

Аналогично классическому случаю совершаем линейный сдвиг

$$H = \omega_p \hat{a}^+ \hat{a} - \frac{\tilde{\mu}}{4} (\hat{a} + \hat{a}^+ + \alpha(t) + \alpha^*(t))^4,$$

$$\alpha(t) = i f_0 \int_0^t e^{i\omega\tau} \cos(3\omega\tau) d\tau$$

После перехода во вращающуюся систему координат и усреднения по быстро осциллирующим колебаниям, получаем

$$H_{eff} = \delta \hat{n} - \frac{\tilde{\mu}}{4} \hat{n}^2 - g(\hat{a}^3 + \hat{a}^{+3})$$

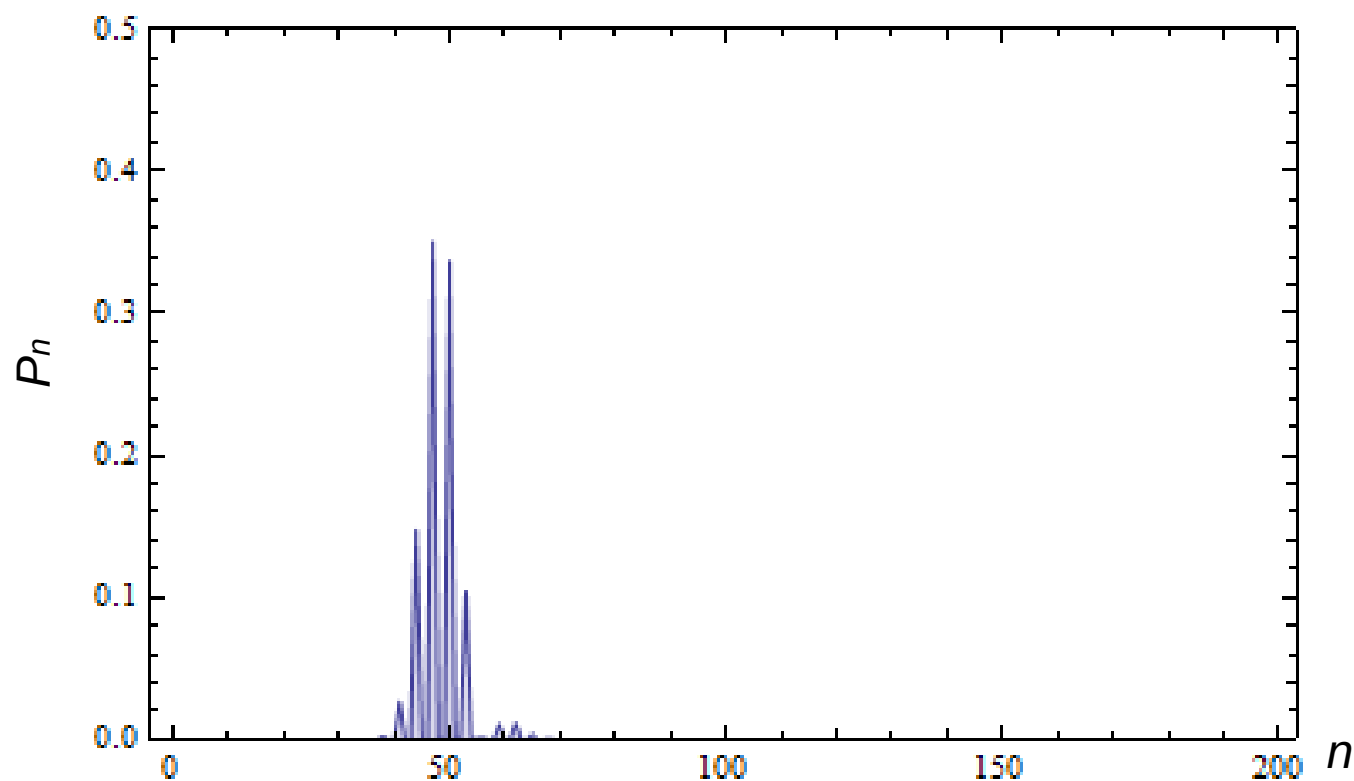
$$g = \frac{f_0 \omega_p}{8\sqrt{2}}$$

Уравнение

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \left(\delta \hat{n} - \frac{\tilde{\mu}}{4} \hat{n}^2 - g(\hat{a}^3 + \hat{a}^{+3}) \right) |\psi\rangle$$

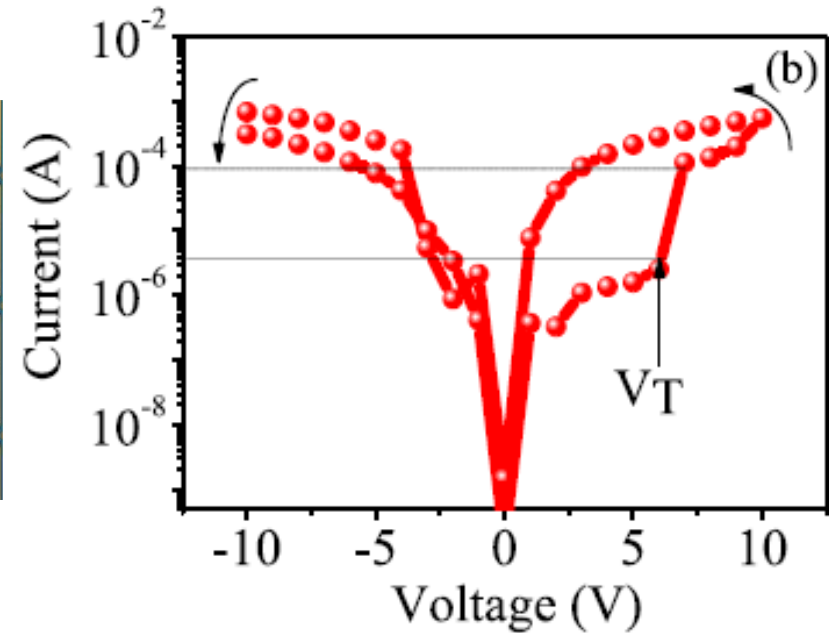
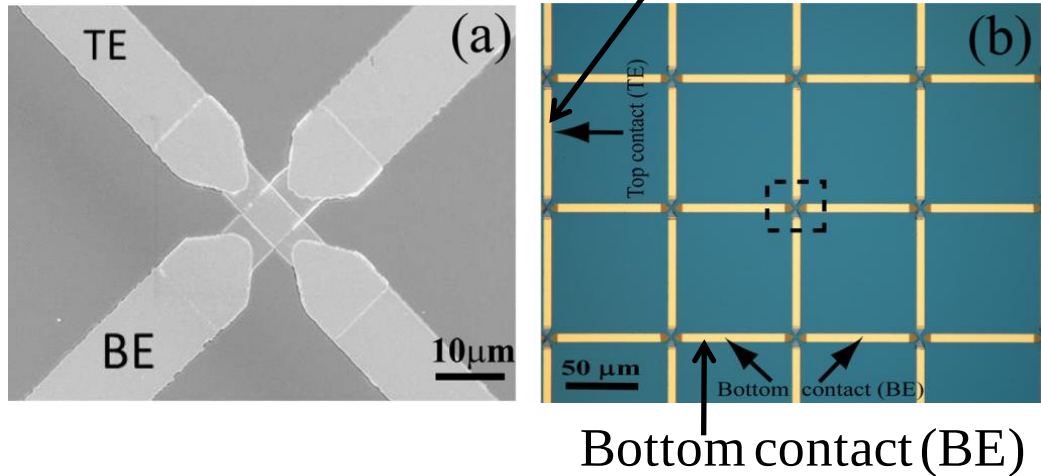
так же решаем в фоковском базисе: $|\psi\rangle = \sum C_n(t) |n\rangle$

Динамика населенностей при дробном резонансе



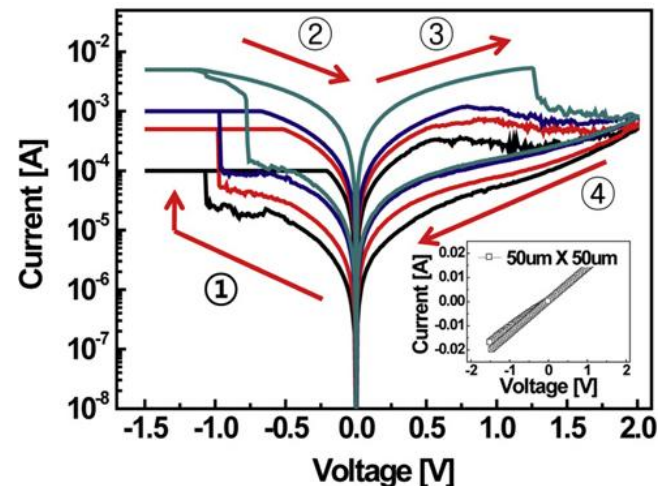
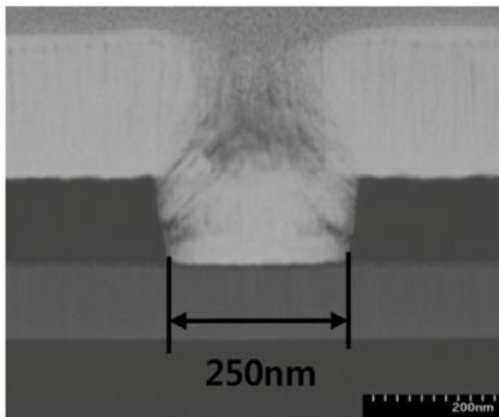
Мемристоры: моделирование процессов формирования токовых неустойчивостей в мемристорах

Структура Pt/TiO₂/Pt Top contact (TE)



Iulia Salaoru and at. el., Appl. Phys. Lett. **102**, 013506 (2013)

Структура Ir/TiO_x/TiN



Jubong Park, and at. el., Microelectronic Engineering **88**, 1136–1139 (2011)

Пространственная структура ZrO_2 и HfO_2

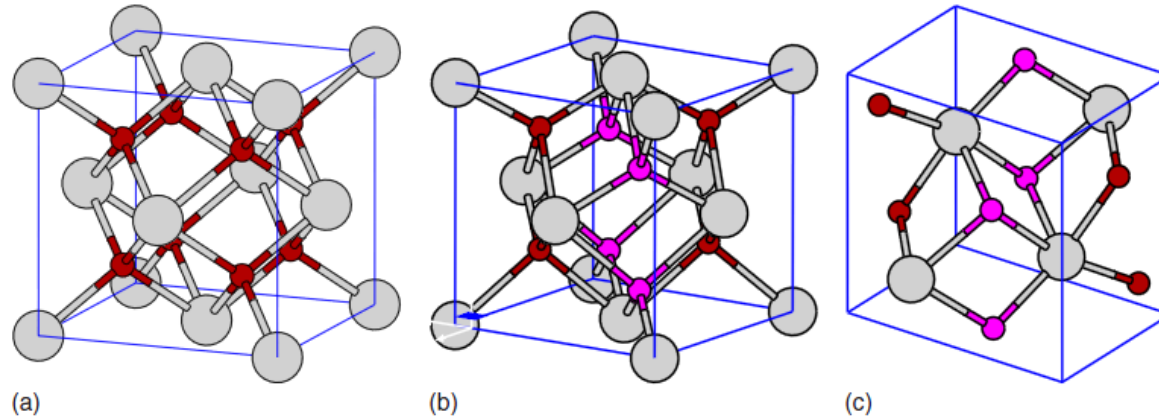


FIG. 1. (Color online) Illustrations of cubic (left), tetragonal (central), and monoclinic (right) lattice structures. Large spheres represent $M(=\text{Zr}, \text{Hf})$ atoms and small ones oxygen sites. Red (black) and pink (gray) colors distinguish oxygen atoms that are upward and downward displaced in the tetragonal structure, and the two nonequivalent oxygen atoms in the monoclinic structure.

Стабильные модификации недопированного ZrO_2 при атмосферном давлении:

- 1) Низкие температуры – моноклинная фаза,
- 2) $1440 < T < 2640$ К – тетрагональная фаза,
- 3) $T > 2640$ К – кубическая фаза.

Стабильные модификации недопированного HfO_2 при атмосферном давлении:

- 1) Низкие температуры – моноклинная фаза,
- 2) $T > 2000$ К – тетрагональная фаза,
- 3) $T > 2870$ К – кубическая фаза.

Теория функционала плотности

Уравнение Кона-Шэма:

$$[\hat{T} + V_H + V_{ext} + V_{xc}] \varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r})$$

$\hat{T}$ – оператор кинетической энергии

V_H – потенциал Хартри

V_{ext} – внешний потенциал

V_{xc} – обменно-корреляционный потенциал

Обменно-корреляционный потенциал в форме Беки-Джонсона:

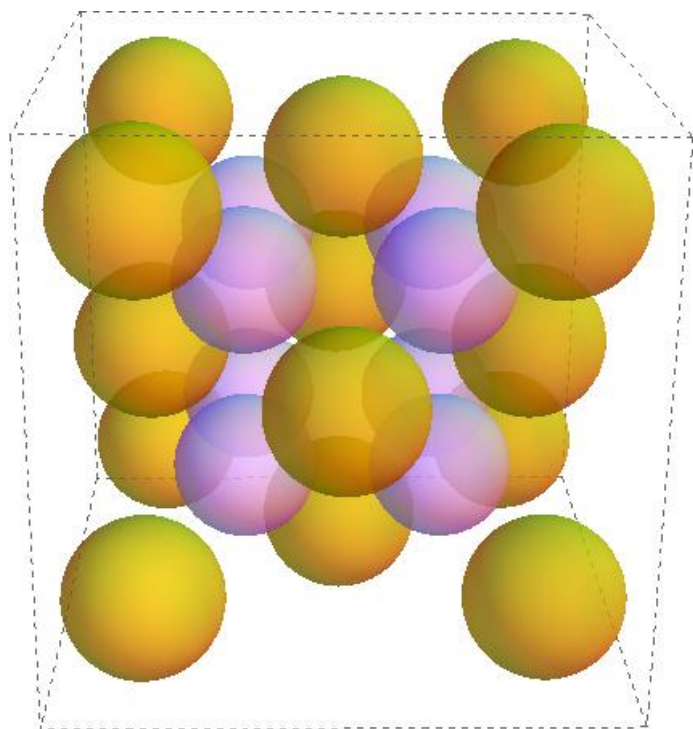
$$V_{xc} = c V_{x,\sigma}^{BR}(\vec{r}) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t(\vec{r})}{n(\vec{r})}}$$

$$V_x^{BR}(\vec{r}) \text{ – потенциал Беки-Рассела,} \quad t(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \nabla \varphi_i^*(\vec{r}) \nabla \varphi_i(\vec{r})$$

$$c = \alpha + \left(\beta \frac{1}{V_{cell}} \int d\vec{r} \frac{|\nabla n(\vec{r})|}{n(\vec{r})} \right)^{1/2} \quad (\alpha \approx -0.012 \text{ bohr}^{1/2}, \beta \approx 1.023 \text{ bohr}^{1/2})$$

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \text{ – распределение электронной плотности}$$

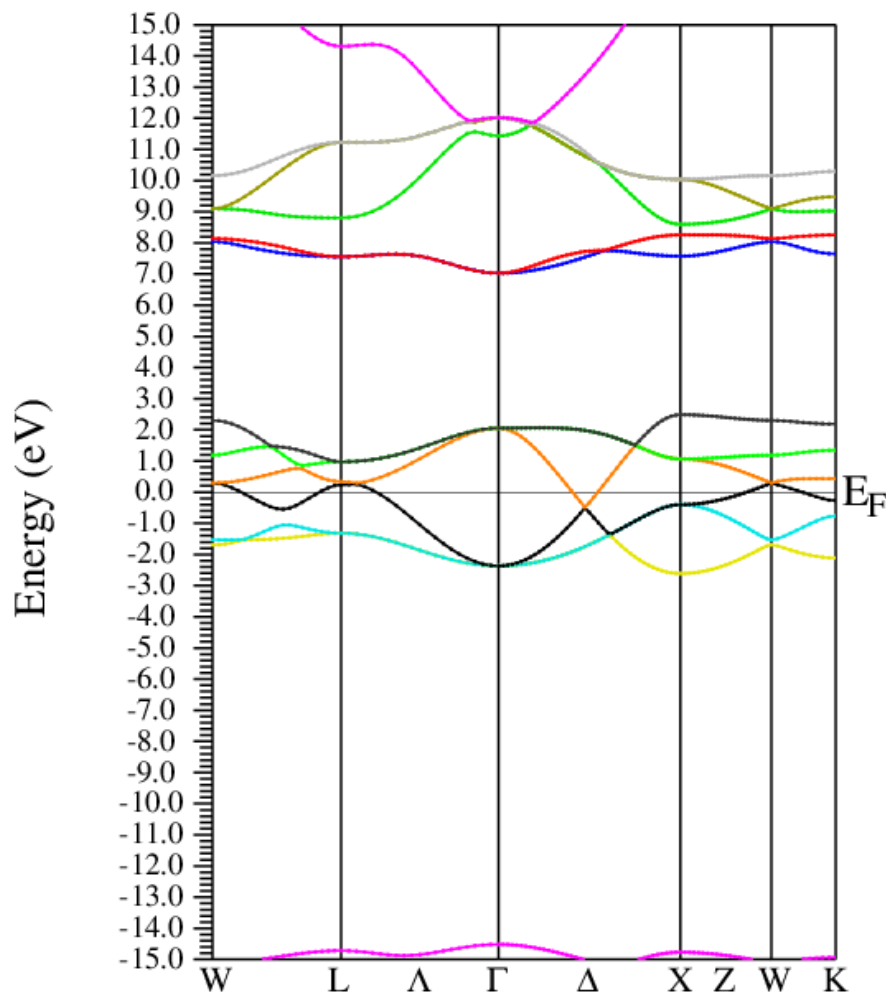
Кристаллическая структура и электронный спектр ZrO_2



● цирконий ● кислород

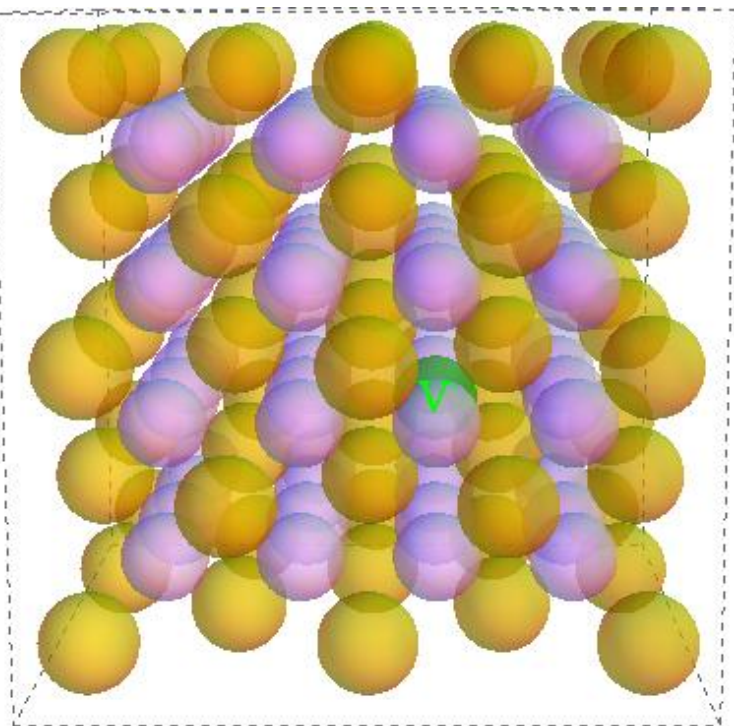
Элементарная ячейка – кубическая
гранецентрированная
(пространственная группа $Fm\bar{3}m$)

Параметр решётки $5.09 \text{ \AA}$



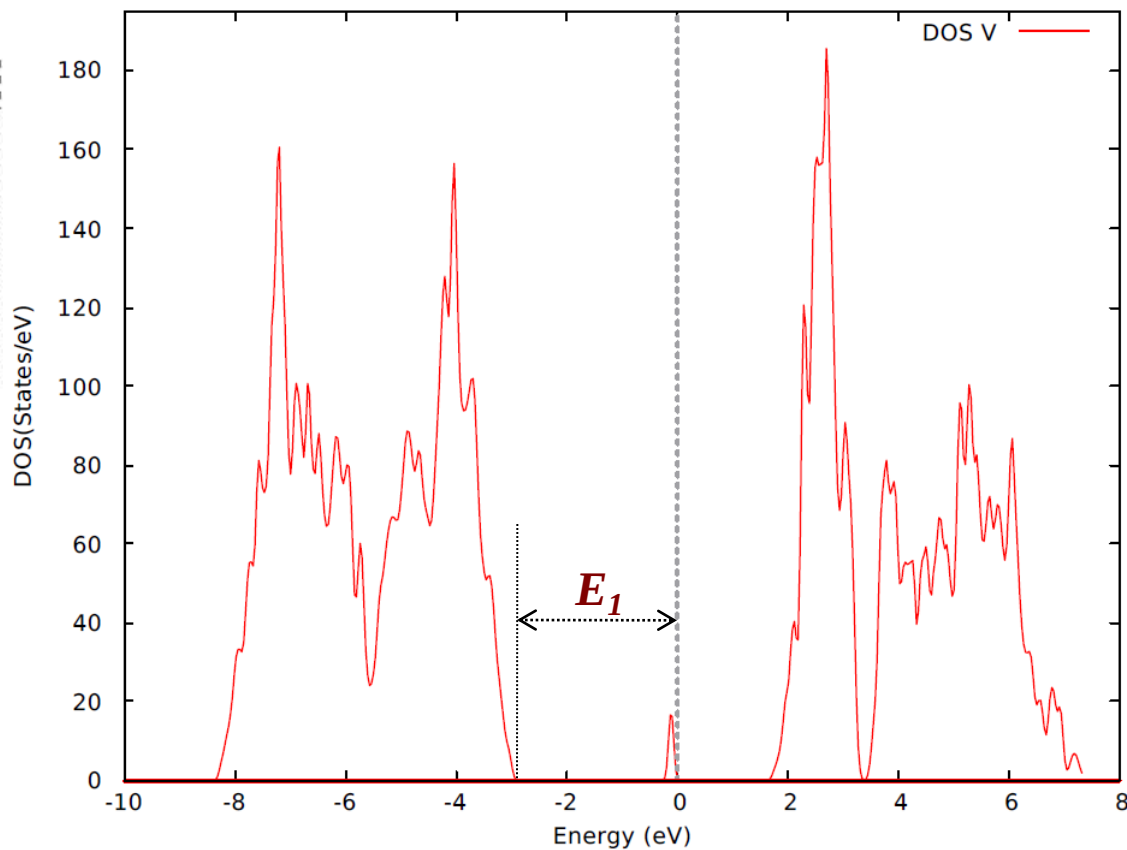
$$E_g \approx 4.54 \text{ eV}$$

Кислородная вакансия в ZrO_2



● кислородная вакансия

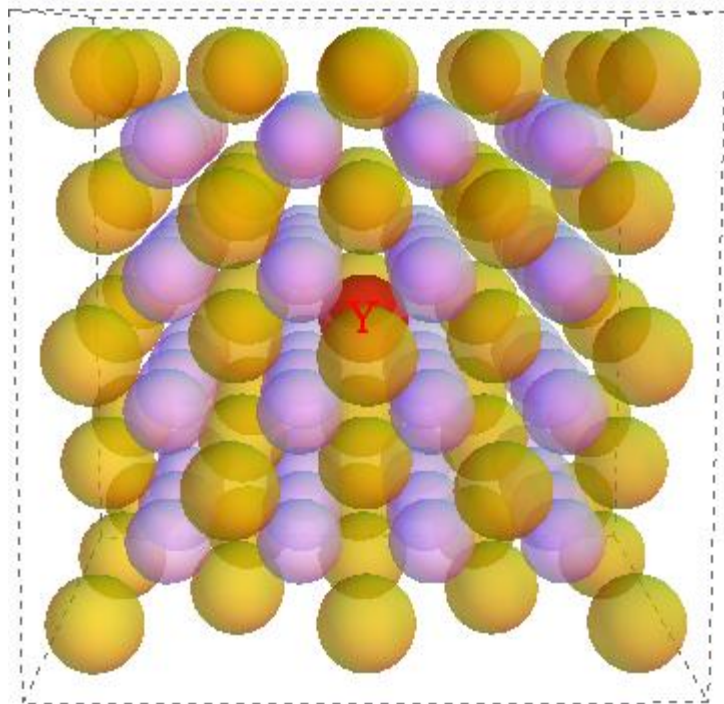
Суперячейка



Плотность состояний

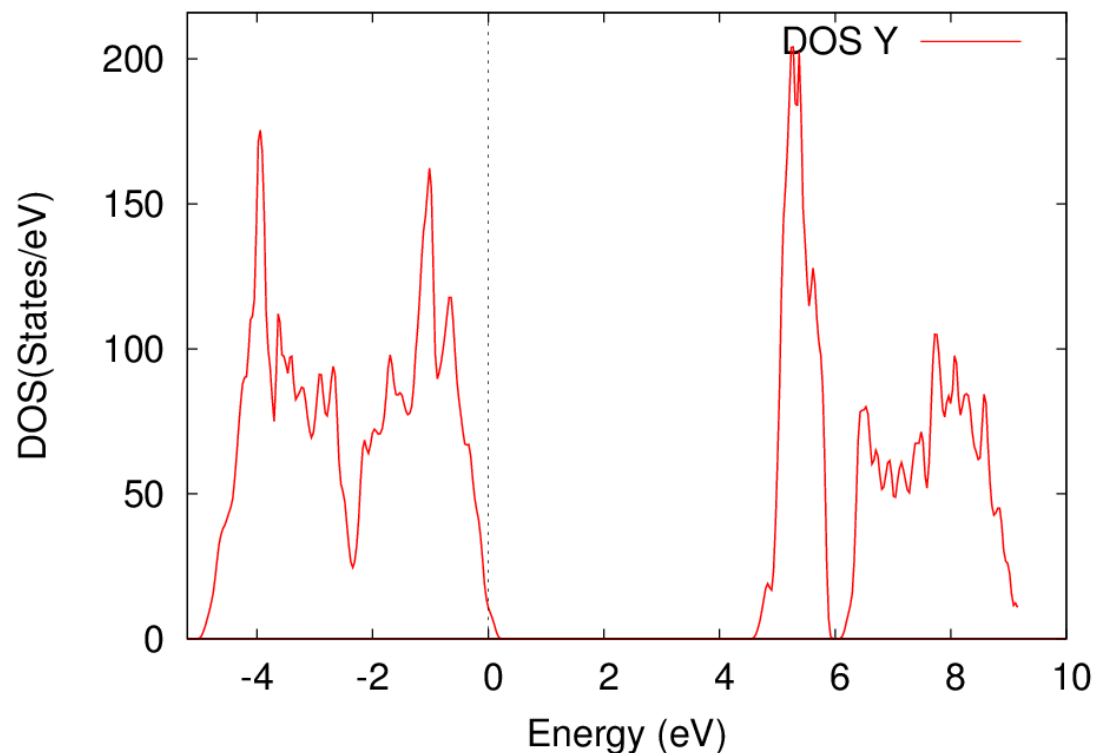
$$E_1 \approx 2.96 \text{ eV}$$

Замещение атомов Zr атомами Y



 иттрий

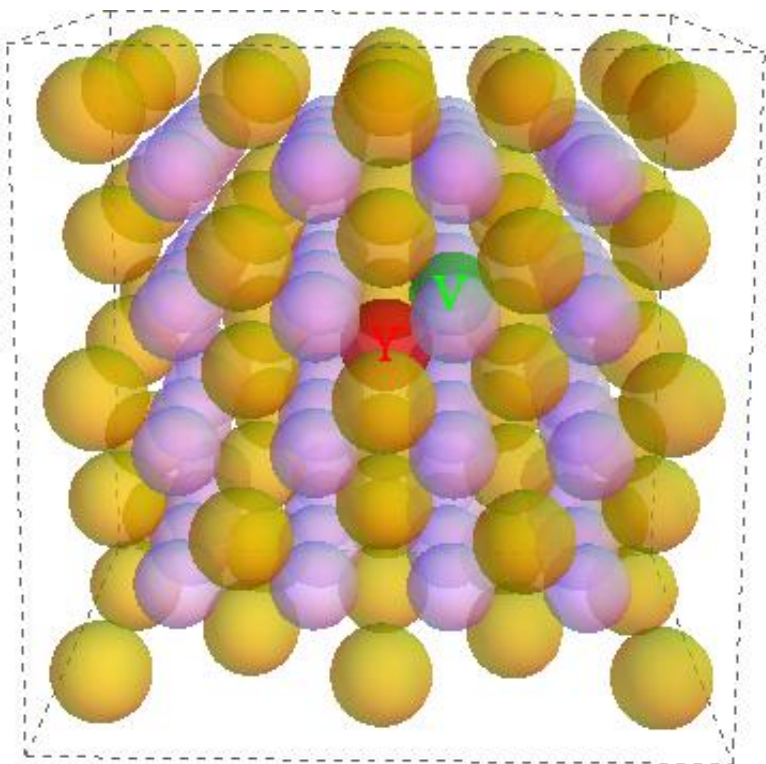
Суперячейка, содержащая 96 атомов



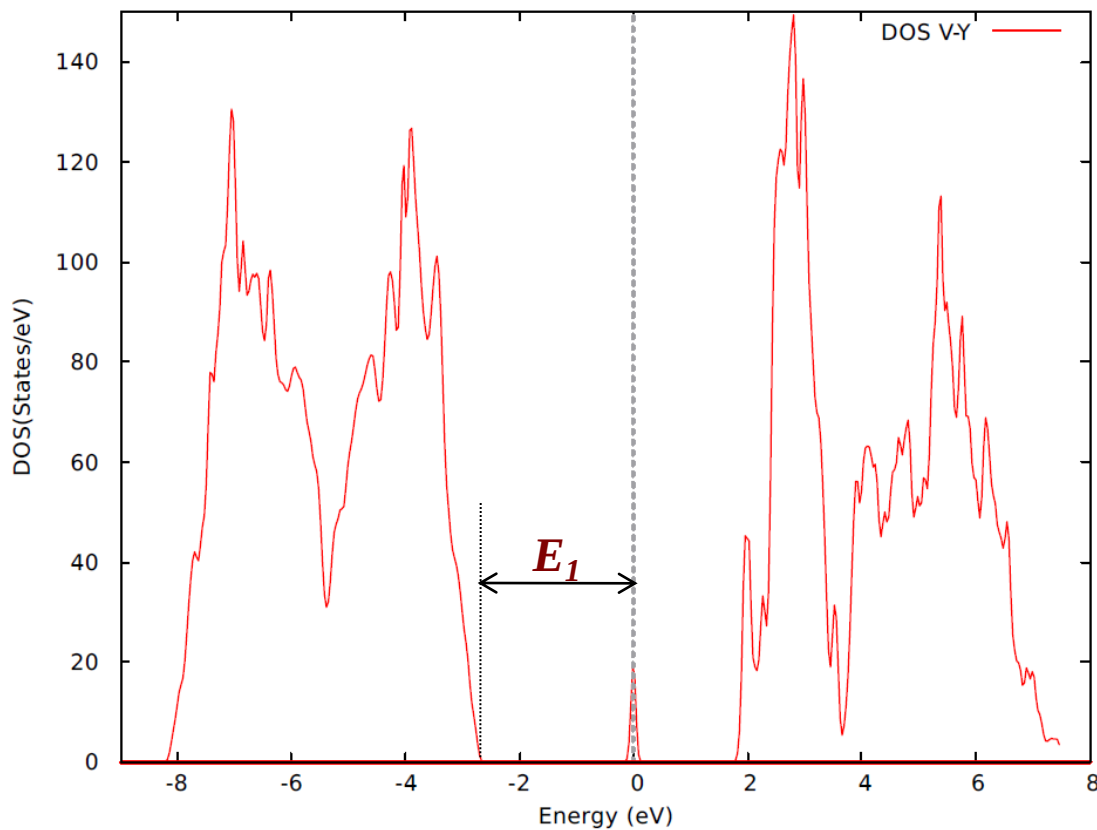
Плотность состояний

$$E_g \approx 4.18 \text{ eV}$$

Комплекс «атом Y – кислородная вакансия»



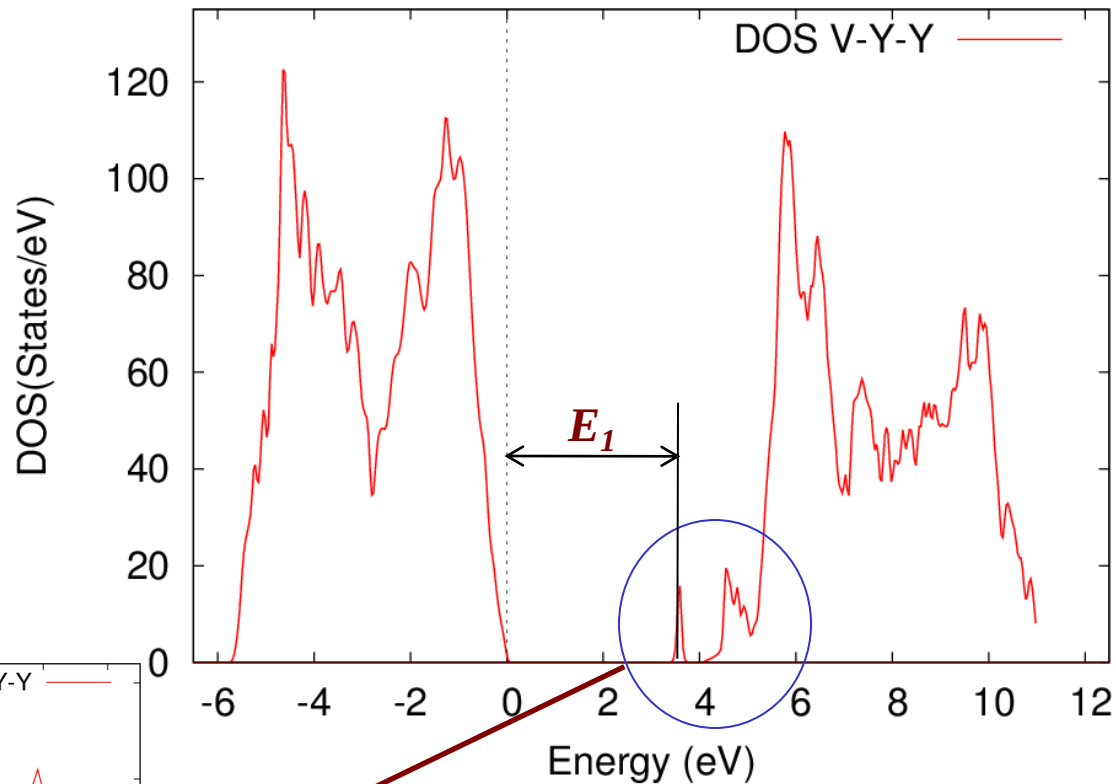
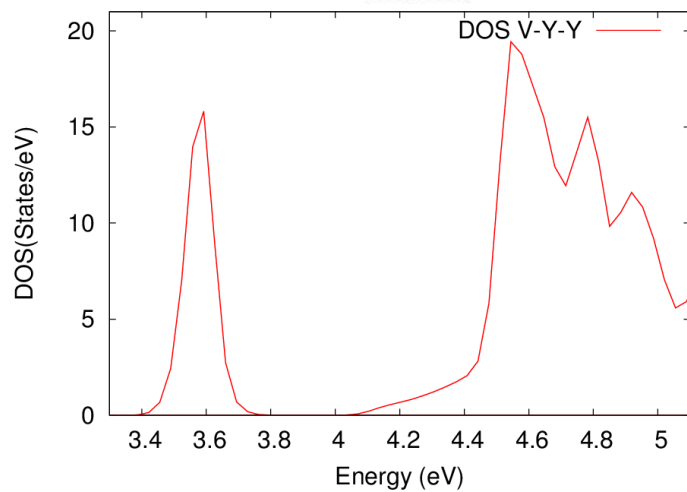
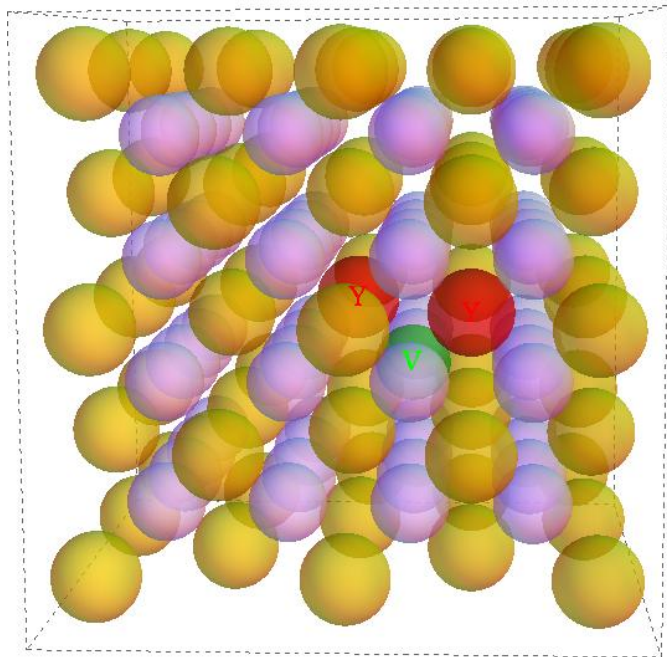
Суперячейка



Плотность состояний

$$E_1 \approx 2.61 \text{ eV}$$

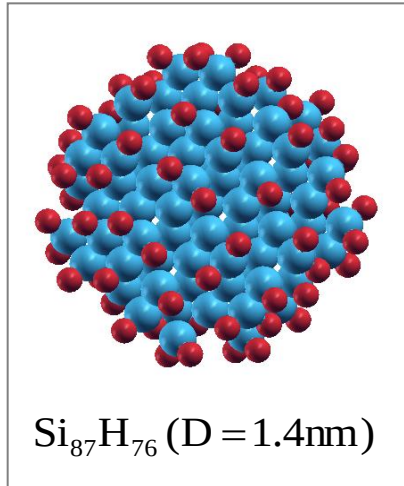
Комплекс «2 атома Y – кислородная вакансия»



Плотность состояний

$$E_1 \approx 3.43 \text{ eV}$$

Нанокристаллы кремния, легированные фосфором, литием и серой

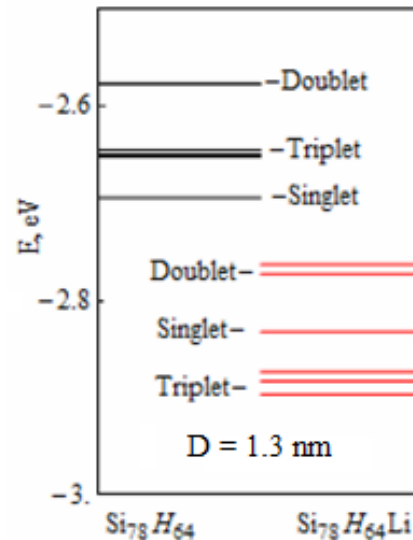
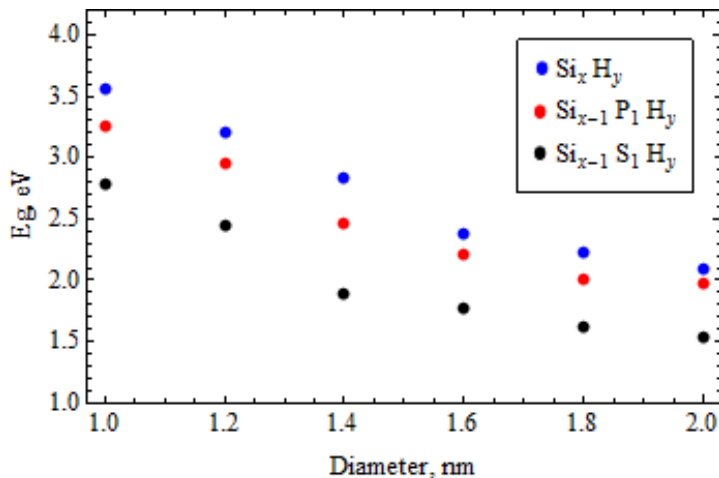


Problem: calculation of the electronic structure of silicon nanocrystals doped with P, S, Li

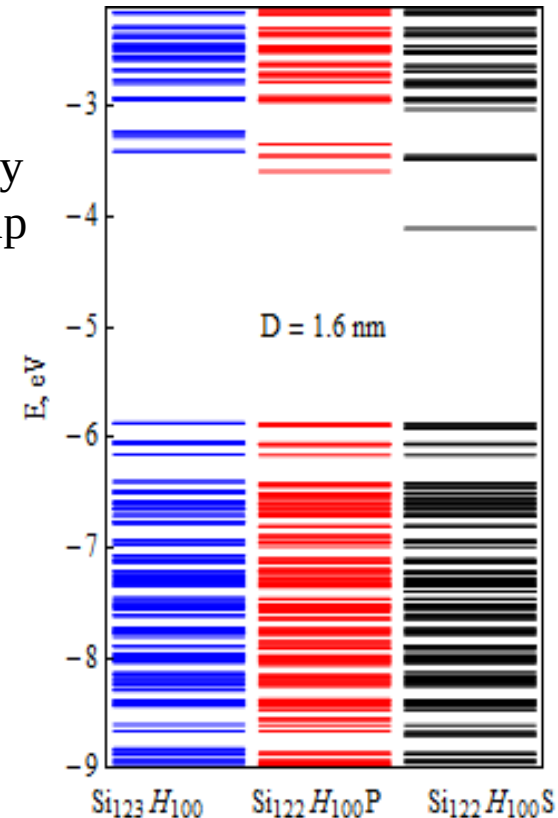
Method of calculation: stationary density functional theory with correction to the band gap width based on Casida's approach

Results:

1) Band gap width depending on nanocrystal's diameter for nanocrystals doped with P, S



2) Inversion structure of the Lithium levels (as in pure silicon)

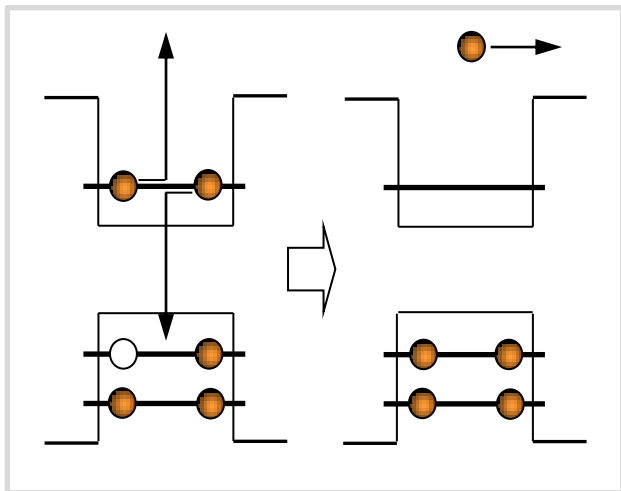


3) Electronic structure of silicon nanocrystals (pure and doped with P and S)

Оже-рекомбинация в нанокристаллах кремния

Problem: calculation of the Auger recombination rates in silicon nanocrystals doped with P, Li

Mechanism of the Auger process



Results:

1) Auger recombination rates in nanocrystals doped with lithium

τ^{-1}, s	Diameter, nm		
	1.0	1.4	1.6
Si-nc: Li	$1.24 \cdot 10^{13}$	$8.15 \cdot 10^{12}$	$5.02 \cdot 10^{12}$

Method of calculation:

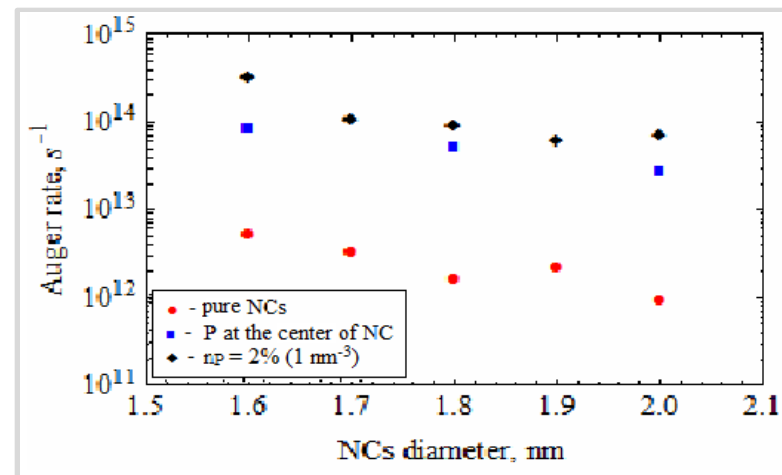
$$\text{Fermi Golden Rule: } \frac{1}{\tau_{if}} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{if}|^2 \delta(E_i - E_f)$$

$$\text{Matrix element of the Auger transition: } M_{fi} = \langle f | U | i \rangle$$

Electron-electron interaction:

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{\epsilon_s |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2 (\epsilon_s - \epsilon_d)}{\epsilon_s R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1) P_n(\cos \theta)}{n \epsilon_s + (n+1) \epsilon_d} \frac{r_1^n r_2^n}{R^{2n}}$$

2) Auger recombination rates in silicon nanocrystals: pure and doped with phosphorus



Формальные результаты

- 1) A.M. Satanin, M.V. Denisenko, A.I. Gelman, and F. Nori, Amplitude and phase control of Josephson qubits by biharmonic electromagnetic pulses // **Phys. Rev. B** 90, 104516 (2014)
- 2) A.A. Konakov, V.A. Belyakov, V.A. Burdov, “Electronic states and optical gap of phosphorus-doped silicon nanocrystals embedded in a silica host matrix”, **Solid State Phenomena** 205-206, 486 (2014)
- 3) V.A. Belyakov, K.V. Sidorenko, A.A. Konakov, A.V. Ershov, I.A. Chugrov, D.A. Grachev, D.A. Pavlov, A.I. Bobrov, V.A. Burdov, “Quenching the photoluminescence from Si nanocrystals of smaller sizes in dense ensembles due to migration processes”, **J. Lumin.** 155, 1 (2014)
- 4) Е.Ю. Ладилина, Т.С. Любова, Ю.П. Клапшин, К.В. Сидоренко, В.В. Семенов, Г.А. Домрачев, «Новый фторсодержащий алкоксисилан с разветвленным циклическим заместителем для получения защитных покрытий с низким показателем преломления», **Доклады академии наук** 456, № 6, 545 (2014)