

План курса «Основы моделирования энергетического спектра электронов и фононов в полупроводниковых наноструктурах»

Преподаватели: М.В. Дурнев и М.О. Нестоклон

Теоретическая часть

1. Введение: основные понятия, кристаллические решетки и обратное пространство, зона Бриллюэна. Метод конечных элементов на примере одномерной задачи Штурма-Лиувилля.
2. Метод функционала плотности (DFT). Основы: модель Томаса-Ферми, теорема Хоэнберга-Кона, подход Кона-Шема. Учет обменного взаимодействия и корреляционной части энергии в DFT. Различные приближения: LDA, SLDA, GGA.
3. Применение метода LDA на примере задачи об атоме диракия.
4. Простейшие модели расчета энергетического спектра колебаний решетки (фононов). Модель Китинга. Динамическая матрица.
5. Метод сильной связи (LCAO): процедура ортогонализации Левдина, орбитали Слэтера. Интегралы перекрытия орбиталей и учет геометрии решетки. Учет спин-орбитального взаимодействия.
6. Метод псевдопотенциала: основы, псевдопотенциал в реальном пространстве, разложение по плоским волнам. Учет спин-орбитального взаимодействия.
7. **kp**-метод: основы kp-теории возмущений, 8-зонная модель Кейна. Учет далеких зон и 14-зонная модель для кристаллов цинковой обманки. Гамильтониан Латтинжера.

Практическая часть

1. Метод конечных элементов: построение матриц операторов для различных пробных функций. Моделирование решений 1D-уравнения Шредингера в ямах с различными профилями квантующего потенциала.
2. Поиск энергетического спектра атома диракия: точное решение, метод Хартри-Фока, метод LDA.
3. Моделирование спектра фононов: построение динамической матрицы в двухпараметрической модели Китинга, спектр фононов в графене.
4. Метод сильной связи: расчет спектра электронов в одномерной квантовой яме.
5. Метод сильной связи: моделирование электронных спектров 2D кристаллов. Спектр графена, MoS₂.

6. Метод псевдопотенциала: моделирование электронного спектра объемных кристаллов (Si, Ge, GaAs).
7. Моделирование электронного спектра в квантовых ямах типа GaAs/AlGaAs в рамках многозонной **kp**-модели.

Список литературы:

1. C.M. Rosenthal, *Solution of the delta function model for heliumlike ions*, Jour. of Chem. Phys. **55**, 2474 (1971)
2. R.J. Magyar, K. Burke, *Density-functional theory in one dimension for contact-interacting fermions*, Phys. Rev. A **70**, 032508 (2004)
3. P. de Forcrand, P. Werner, *Computational quantum physics*, lectures given at ETH Zurich,
https://www1.ethz.ch/demoitp/itp/itp/education/lectures_fs09/cqp
4. E.L. Ivchenko, *Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures*, Alpha Science, Harrow UK (2005)
5. P.Y. Yu, M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors*, Springer (2005)
6. V. Perebeinos, J. Tersoff, *Valence force model for phonons in graphene and carbon nanotubes*, Phys. Rev. B **79**, 241409(R) (2009)
7. L. C. L. Y. Voon and M. Willatzen, *The kp method: electronic properties of semiconductors*, Springer (2009)