

На правах рукописи

Бажиров Тимур Тынлыбекович

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ, СВЕРХПРОВОДЯЩИХ
И ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕД**

01.04.05 - Оптика

01.04.02 - Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань - 2011

Работа выполнена на кафедре оптики и нанофотоники Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего и профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Салахов Мякзюм Халимулович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Тагиров Ленар Рафгатович

доктор физико-математических наук,
профессор Сухоруков Анатолий Петрович

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Казанский физико-технический институт
им. Е. К. Завойского

Защита состоится 27 октября 2011 г. в 14.30 на заседании Диссертационного
Совета Д 212.081.07 при Казанском (Приволжском) федеральном
университете по адресу:
420008, Казань, ул. Кремлевская, 18, ауд. 210.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Казанского
(Приволжского) федерального университета.

Автореферат разослан _____ 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета _____ Камалова Д.И.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Первопринципные (*ab initio*) квантово-механические расчеты по праву считаются одним из самых достоверных теоретических подходов во многих областях фундаментальной науки. Полагаясь только на основные законы физики без привнесения каких-либо дополнительных предположений о рассматриваемых физических системах, (*ab initio*) методы позволяют с большой точностью исследовать широкий спектр задач путем предсказания свойств электронной структуры. Учет эффектов обмена и электронной корреляции позволяет применять данные методы для рассмотрения оптических свойств, свойств проводимости, механической устойчивости/пластичности, магнетизма и других.

Информация о характере электронной структуры является важной как с точки зрения развития фундаментальной науки, так и для создания многих приложений. В данной работе детально рассмотрен расчет энергетических зон полупроводников в рамках многочастичной теории возмущений. Исследуемый метод позволяет получать близкие по точности к экспериментальным данные о дисперсионных соотношениях кристаллов, а также спектры оптического поглощения. Другой многочастичный эффект рассмотрен на примере электрон-фононного взаимодействия и его влияния на сверхпроводящие свойства материалов.

Рассмотрение корреляционных поправок к собственным значениям энергии представляет интерес, поскольку в зависимости от строения зонной структуры энергетических уровней кристаллов полупроводников можно предсказывать свойства последних и пытаться их регулировать. Электронные переходы в полупроводнике между зоной проводимости и валентной зоной полностью определяют его оптические свойства. Именно поэтому точные расчеты ширины запрещенной зоны и ее характера (прямая или непрямая) позволяют более полно характеризовать степень применимости образца для конкретных оптических приложений, среди которых можно назвать такие широко востребованные области как солнечная энергетика и светодиодная техника.

Электрон-фононное взаимодействие играет определяющую роль при возникновении сверхпроводящего состояния во многих материалах, а также его учет важен для правильного описания оптических переходов в кристаллах. Для новых материалов, например для новых высокотемпературных сверхпроводников на основе железа, природа механизма сверхпроводимости остается до сих пор под вопросом, и не вполне ясна роль электрон-фононного спаривания. Исследование данного вопроса может позволить регулировать многие свойства новых материалов и, в частности, повысить температуру фазового перехода. В качестве примера приложений можно назвать сверхпро-

водящие магнитные устройства, применяемые в медицине (ядерно-магнитно-резонансные томографы), устройства передачи электрического тока на основе сверхпроводников.

Литий был выбран в качестве объекта исследования, поскольку механизм возникновения сверхпроводимости в нем до сих пор не является полностью исследованным. Селенид железа представляет интерес как самый простейший в плане кристаллической структуры представитель открытого в 2008 году семейства сверхпроводников на основе пниктидов и халькогенидов железа. Объяснение механизма образования сверхпроводящей фазы в данных материалах до сих пор является неразрешенной задачей. Поэтому анализ электрон-фононного взаимодействия представляется актуальным.

Наконец, методы атомистического моделирования основываются на результатах и являются хорошим дополнением к расчетам из первых принципов, а также позволяют рассмотреть масштабы, на которых применимость последних ограничена вычислительными мощностями. Атомистическое моделирование обладает достаточной точностью для предсказания многих механических и прочностных свойств веществ в различных конфигурациях. В работе приведено рассмотрение процесса кавитации или образования разрывов в метастабильной растянутой жидкости. Данный вопрос представляет интерес как с чисто фундаментальной точки зрения, так и для рассмотрения поведения жидко-металлических растворов теплоносителя в ударно-волновых термоядерных реакторах будущего.

Цель работы и задачи исследования

Целью диссертационной работы является разработка новых и модификация имеющихся теоретических подходов и вычислительных алгоритмов исследования электронной структуры в применении к оптическим свойствам зонной структуры полупроводников, сверхпроводящим свойствам кристаллов и прочностным свойствам жидкостей.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

- 1.** Проанализировать существующие методы исследования электронной структуры и выбрать наиболее подходящие для рассматриваемых приложений
- 2.** Провести сравнительный анализ эффективности вычислительных методов для рассматриваемых приложений, определить необходимые входные данные и привносимую погрешность
- 3.** Адаптировать существующие теоретические модели и разработать новый вычислительный алгоритм для получения точных данных о зонной струк-

туре и оптических свойствах полупроводников

4. Построить теоретическую модель для описания сверхпроводящих свойств кристаллического лития под высоким давлением на основе данных о его электронной структуре и параметрах электрон-фононного взаимодействия

5. Разработать теоретическую модель для исследования сверхпроводящих свойств селенида железа на основе данных об электронной структуре и электрон-фононном взаимодействии с учетом антиферромагнитного упорядочения спинов атомов железа

6. Разработать вычислительные методы и теоретические модели описания жидкометаллических растворов и оценить их механические характеристики: прочность на разрыв и частоту кавитации.

Методы исследования

Для решения поставленных задач использовались методы квантовомеханических расчетов из первых принципов (*ab initio*) на основе модели псевдопотенциала: теория функционала плотности в приближении локальной плотности и обобщенных градиентов, многочастичная теория возмущений в приближении GW. Также были использованы аналитические теории: теория линейного отклика, теория сверхпроводимости в формулировке Мигдала-Элиашберга и теория электрон-фононного взаимодействия.

Для атомистического моделирования использован метод молекулярной динамики с межатомными потенциалами в модели "погруженного атома". Результаты сравнены с предсказаниями теории фазовых переходов Зельдовича. Дополнительно предложен метод, основанный на уравнении Колмогорова-Аврами.

Научная новизна

1. Реализован вычислительный алгоритм для точного расчета зонной структуры полупроводников в рамках многочастичной теории возмущений в приближении GW с использованием предельно достижимых параметров сходимости
2. Впервые рассчитано значение электрон-фононного взаимодействия в кристаллическом литии с использованием интерполяции Ванье; на основе детального исследования свойств поверхности Ферми, спектра электрон-фононного рассеяния и силы электрон-фононного взаимодействия были сделаны выводы об относительной роли каждого из факторов

3. Для FeSe, представителя нового класса высокотемпературных сверхпроводников - халькогенидов железа, впервые оценено влияние наличия антиферромагнитного упорядочения спиновых магнитных моментов атомов железа на величину электрон-фононного взаимодействия
4. Впервые проведена оценка прочностных свойств жидкометаллических расплавов свинца, лития и их эвтектики, предложен новый механизм оценки частоты зародышеобразования

Практическая значимость работы

Результаты расчета зонной структуры могут быть использованы для проектирования приложений на основе исследованных полупроводников в области светодиодной техники и солнечной энергетики. Также предложен метод увеличения температуры сверхпроводящего состояния в кристаллическом литии. полученная информация о механизме сверхпроводимости в селениде железа может быть использована для проектирования сверхпроводящих приложений на его основе. Наконец, оценки прочностных свойств жидкометаллических расплавов могут быть учтены при конструировании ударно-волновых термоядерных реакторов будущего.

Защищаемые положения

1. Реализован алгоритм, позволяющий получать точные в сравнении с экспериментом данные о дисперсионных соотношениях энергии в кристаллах полупроводников и создающий базу для точного расчета спектров оптического поглощения
2. Сверхпроводимость в гранецентрированном кристаллическом литии под давлением обусловлена значительно возросшим по величине электрон-фононным взаимодействием; топология поверхности Ферми также играет при этом важную роль
3. Наличие статических антиферромагнитных моментов атомов железа оказывает значительное воздействие на величину электрон-фононного взаимодействия в кристалле селенида железа, что может свидетельствовать о важности учета электрон-фононного спаривания для объяснения механизма формирования сверхпроводящего состояния
4. Разработанный подход для моделирования и оценки параметров кавитации в расплаве свинца и лития позволяет исследовать уравнение состояния вещества, границы стабильности и частоту зародышеобразования

Апробация работы

Научные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на следующих международных конференциях: Конференция Американского физического общества (APS March Meeting) 2010 года и 2011 года, Conference on Computational Physics, Brussels, Belgium, Sep. 5–8, 2007; Conference on Computational Physics, Gyeongju, Republic of Korea, Aug. 28 – Sep 1, 2006; XI Research Workshop Nucleation Theory and Applications, Dubna, Russia, April 2007; X Research Workshop Nucleation Theory and Applications, Dubna, Russia, April 2006; IX Research Workshop Nucleation Theory and Applications, Dubna, Russia, June 2005; XXII международная конференция “Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом”, Эльбрус, Россия, март 2007; XXI международная конференция “Уравнения состояния вещества Эльбрус, Россия, март 2006; XX международная конференция “Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом”, Эльбрус, Россия, март 2005; “Quantum molecular dynamics, the discussion”, Institute of Physics, London, September 2007. На всероссийских конференциях: 46-50 научные конференции Московского физико-технического института “Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук 2004-2007 гг.; 3-й симпозиум “Проблемы ультрабыстрых процессов в сильнонеравновесных средах Новый Афон, Грузия, Июль 2005.

Личный вклад автора работы состоял в подготовке теоретической базы, проведении всех вычислений, обработке результатов и написании статей. Автор выражает глубокую благодарность Калифорнийскому университету Беркли и лично профессору Марвину Л. Коэну за научные консультации.

Публикации

По теме работы опубликовано 9 работ в реферируемых журналах ВАК, 9 работ в сборниках статей, 10 работ в тезисах конференций.

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка публикаций по теме диссертации и списка цитируемой литературы из 134 наименований. Основная часть работы изложена на 101 странице машинописного текста, содержит 27 рисунков и 3 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертационной работы, формулируется цель, научная новизна и практическая значимость полученных результатов, дается краткое содержание глав работы.

В **первой главе** излагаются теоретические основы работы. Приведена краткая информация об основах Теории функционала плотности (ТФП): теоремах Хохенберга-Кона, уравнениях Кона-Шема; а также информация о способах учета электронной корреляции в рамках ТФП. Изложены основы теоретических методов и алгоритмов исследования электрон-фононного взаимодействия в рамках первопринципных квантовомеханических расчетов.

В рамках ТФП, однако, невозможно получить согласующиеся с экспериментом значения энергий одноэлектронных возбуждений, поскольку она является теорией основного состояния. Тем не менее, даже в самой простой и физически прозрачной формулировке ТФП может быть использована вместе с много-частичной теорией возмущений для получения данных об электронной структуре многих веществ со значительно улучшенным согласием с экспериментами. Среди способов улучшения результатов ТФП для расчета полупроводниковых кристаллов как один из наиболее предпочтительных на данный момент изложена квазичастичная теория в приближении локальной плотности с динамическим обменным экранированием. Последнее является многочастичным эффектом и дает возможность существенно улучшить погрешность расчетов для энергий междузонных переходов. В данной главе приведены основы многочастичной теории возмущений, а именно: функция Грина как основной параметр задачи, уравнение Дайсона и оператор собственной энергии как главная цель расчета. Проведены аналогии с теорией рассеяния, помогающие интерпретировать предложенный формализм.

Кратко изложены основные составляющие теории электрон-фононного взаимодействия и отмечены основные сложности, возникающие в процессе выполнения вычислений. Упомянуты способы преодоления данных сложностей, в частности, использование интерполяционной схемы Ванье для расчета матричных элементов электрон-фононного взаимодействия с большой точностью практически в любой точке зоны Бриллюэна.

Наконец, в данной главе приведены основы метода молекулярной динамики с использованием потенциалов "погруженного атома". Приводятся положения теории метастабильных состояний в применении к зародышеобразованию кавитационных полостей в жидкости и их интерпретация в рамках атомистического моделирования.

Во **второй главе** изложена методика вычислительной реализации расчета в рамках приближения GW и приведены результаты исследования зонной структуры кристаллов полупроводников на примере арсенида галлия, фос-

фата алюминия и хлорида лития. Проведен сравнительный анализ точности вычислений дисперсионных соотношений в зависимости от эффективности и затратности в плане расчетного времени на ЭВМ.

Зонная структура полупроводников была рассчитана с большой точностью на основе многочастичной теории возмущений в приближении GW, были использованы предельно достижимые на данный момент параметры сходимости. Результаты находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными. Различие составляет, как правило, величину в пределах 0.05 эВ, например, по параметру ширины запрещенной зоны (рис. 1).

В третьей главе рассмотрены сверхпроводящие свойства кристаллического лития и изложены основные результаты.

Во введении к данной части кратко изложены основные результаты предыдущих работ. Приведены экспериментальные данные по фазовой диаграмме лития, отмечены параметры межфазных переходов и возникновения сверхпроводящего состояния. Приведены имеющиеся теоретические модели описания механизма сверхпроводимости в кристаллическом литии и проведен их сравнительный анализ. Описаны основные преимущества используемых в данной работе методов над уже реализованными.

Путем анализа параметров электрон-фононного взаимодействия, отдельного рассмотрения топологических свойств поверхности Ферми (функции вложения), фононного спектра и матричных элементов было показано, что сверхпроводимость в ГЦК-литии (имеющем гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку) обусловлена усиленным в результате приложенного давления электрон-фононным взаимодействием и сильно зависит от топологии поверхности Ферми. На рис. 2 приведены рассчитанные параметры электрон-фононного взаимодействия для различных значений давления. Видно, что сила электрон-фононного взаимодействия значительно возрастает с увеличением давления.

Показано также, что низшая по энергии поперечная мода колебаний решетки ответственна более чем за половину взаимодействия и, в частности, фононные моды вдоль направления Г-К играют наиболее важную роль. Этот факт хорошо иллюстрирован на рис. 2. Видно, что наибольшее влияние увеличение давления оказывает возле точки К в зоне Бриллюэна (направление Г-К). Частоты фононных колебаний в этом месте локально становятся меньше (виден "провал"), но электрон-фононные матричные элементы являются наиболее восприимчивыми к повышению давления среди всех исследованных составляющих.

Топология поверхности Ферми обеспечивает необходимые условия для возникновения сверхпроводимости, поскольку функция вложенности имеет ярко выраженный максимум возле точки К (см. рис. 2). Однако именно возросшее

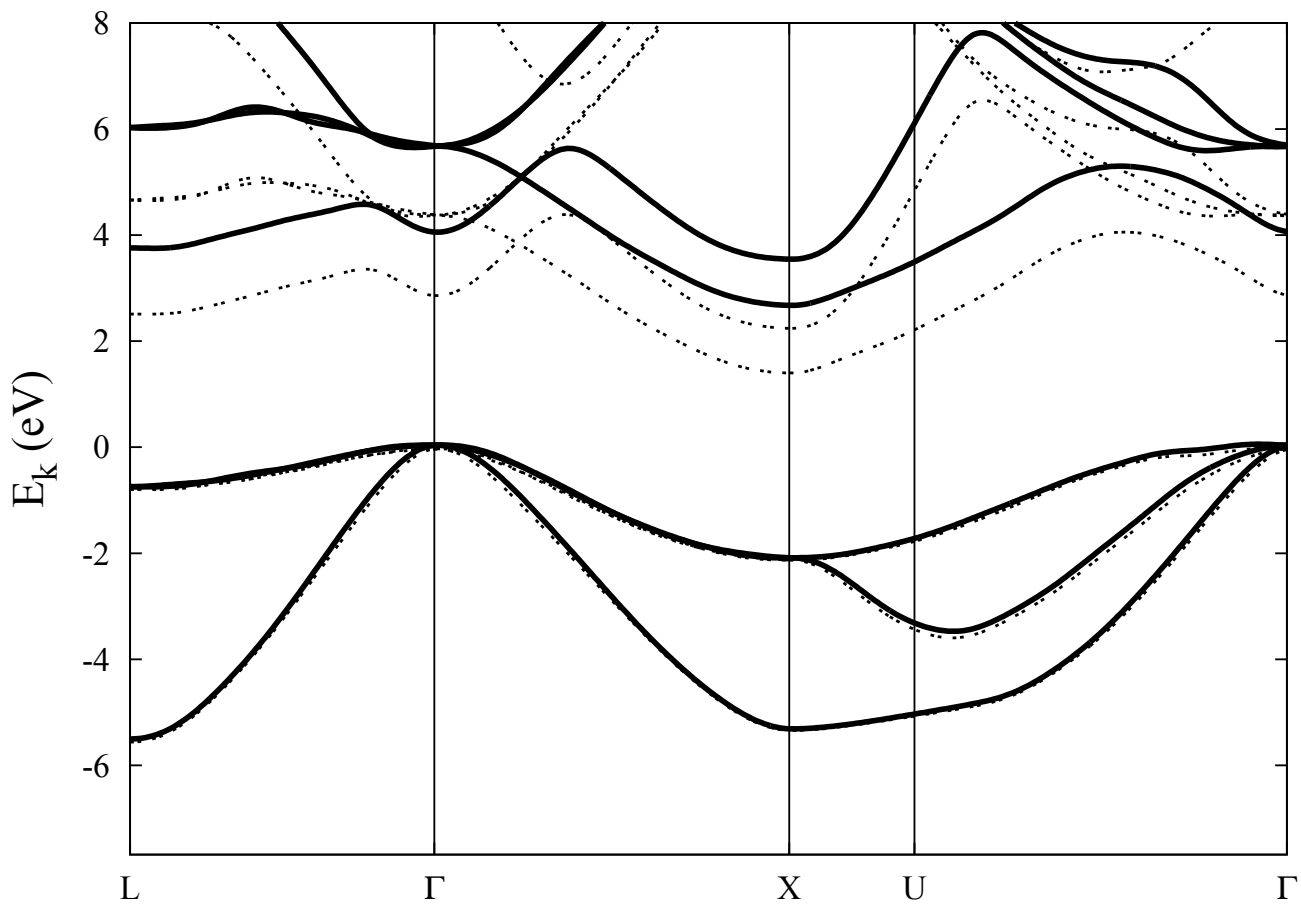


Рис. 1: Зонная структура AlP, рассчитанная в приближении локальной плотности (штрихованая линия) и в приближении GW (сплошные линии). По оси x отложена координата внутри зоны Бриллюэна и отмечены точки максимальной симметрии. Ширина запрещенной зоны составляет: прямая Γ - Γ 2.9 эВ (LDA), 3.9 эВ (GW), 3.63 эВ - эксперимент; непрямая Γ -X 1.4 эВ (LDA), 2.5 эВ (GW), 2.50 эВ - эксперимент.

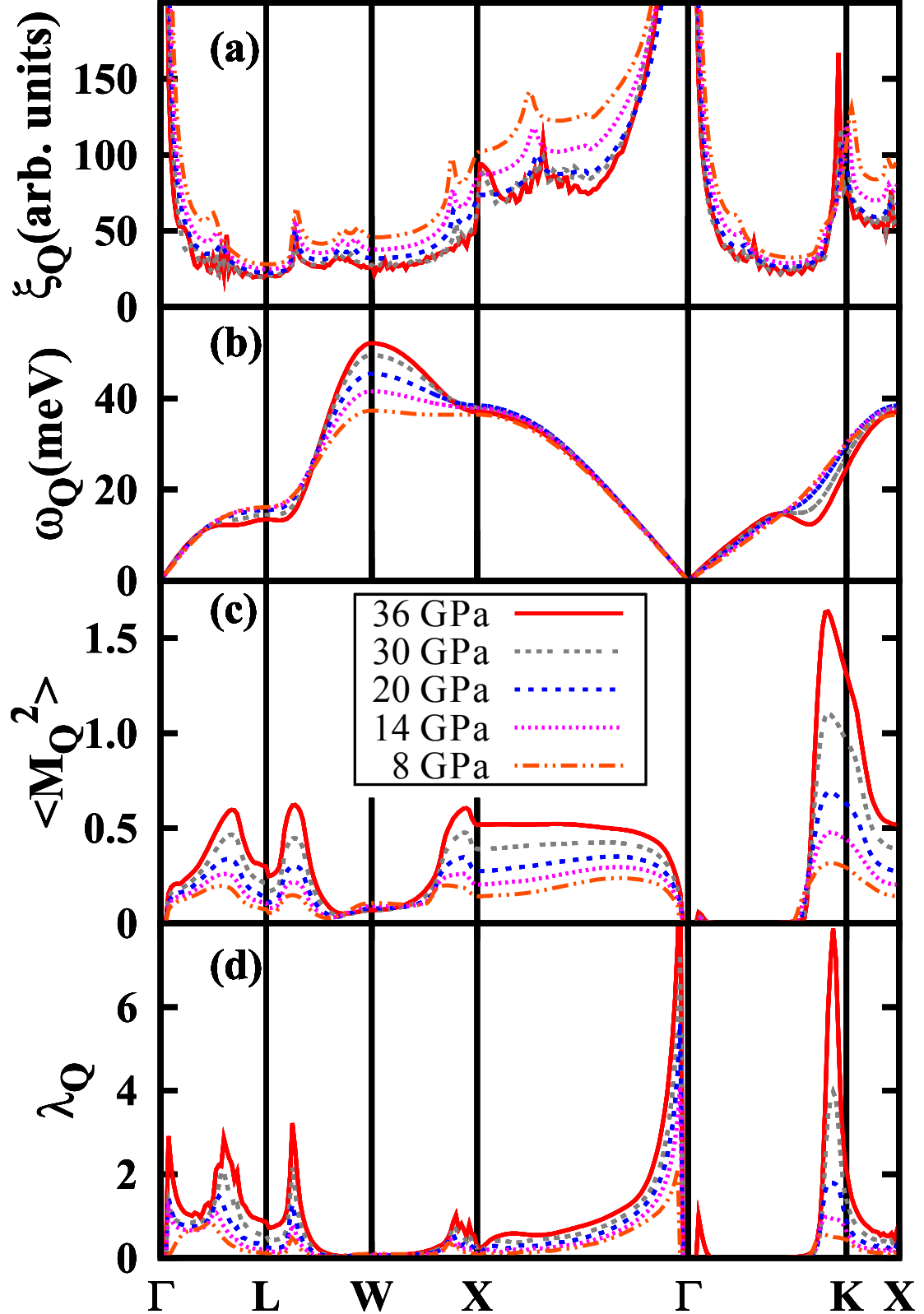


Рис. 2: Параметры ГЦК-лития вдоль выбранных направлений внутри зоны Бриллюэна: (a) функция вложенности поверхности Ферми, (b) частоты фоновых колебаний, (c) среднее значение электрон-фононного матричного элемента и (d) постоянная электрон-фононного спаривания. (b), (c), (d) даны для низшей по энергии поперечной моды $T1$. В (c) размерность матричных элементов есть $meV^2 \times 10^3$.

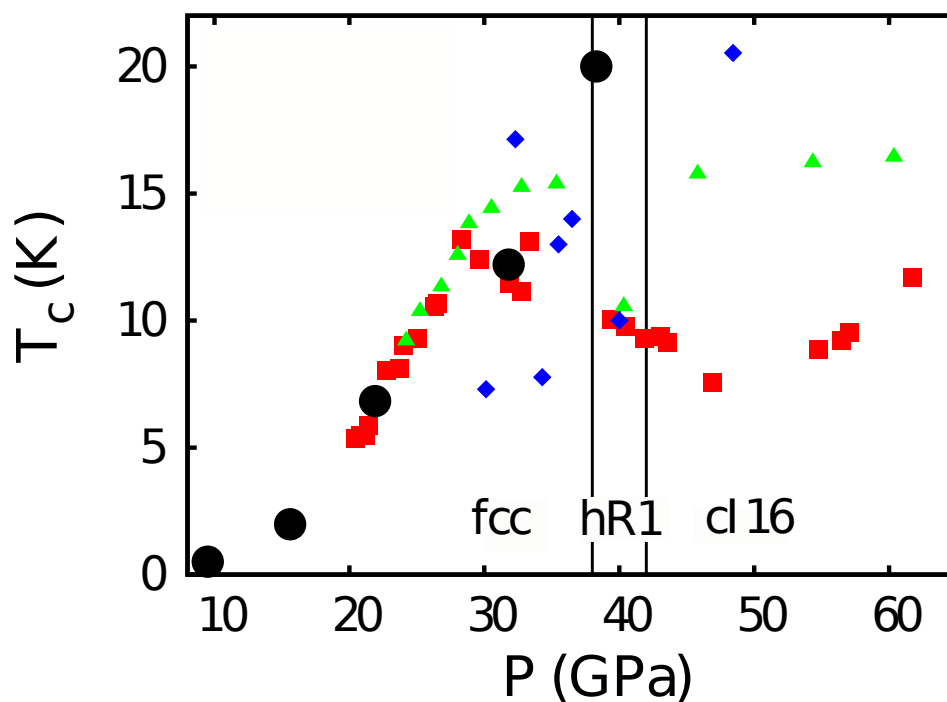


Рис. 3: Температура сверхпроводящего перехода в зависимости от давления. Показаны значения экспериментальных измерений и расчеты в рамках данной работы (кружками) на основе уравнения Аллена-Дайнса с $\mu^* = 0.13$. Примерные границы существования различных фаз показаны вертикальными разделительными линиями.

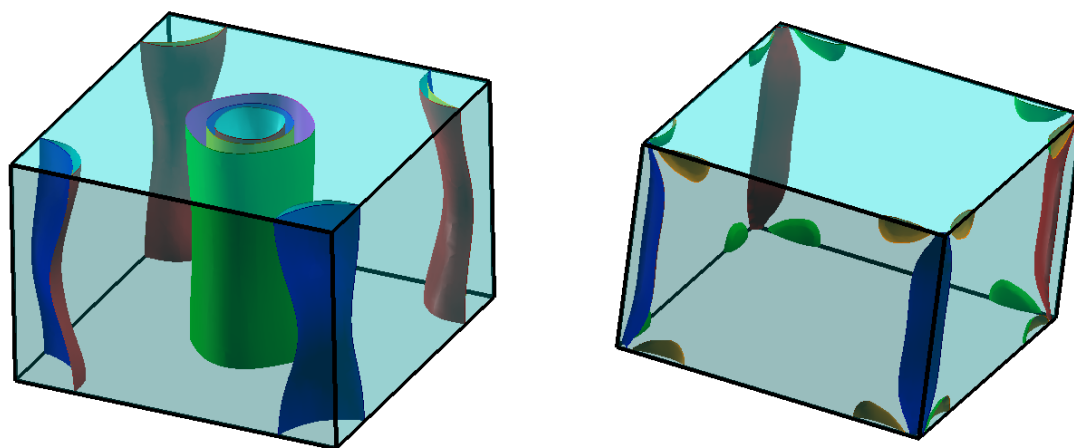


Рис. 4: Поверхность Ферми селенида железа в отсутствии спинов (вверху) и в спин-разрешенной конфигурации (внизу). Центр зоны Бриллюэна - точка Γ - находится в центре рисунка, углы соответствуют точке А, середина ребра вдоль оси z - точке М.

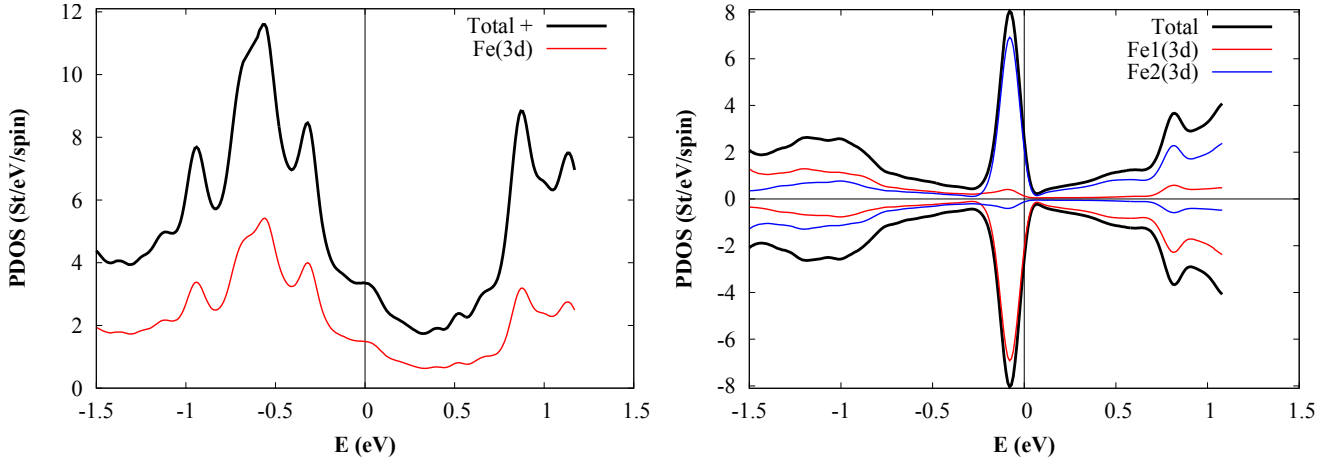


Рис. 5: Плотность электронных состояний для селенида железа в отсутствии спинов (вверху) и в спин-разрешенной конфигурации (внизу). Отмечены полная плотность (Total) и ее проекции на различные по орбитальной симметрии состояния (показана проекция на d-орбитали). Положительные и отрицательные значения соответствуют противоположным ориентациям спинов железа.

в силу электрон-фононное взаимодействие обеспечивает достаточные условия для наблюдения сверхпроводимости в районе 14 К.

Оценки зависимости температуры сверхпроводящего перехода от давления, полученные в данной работе, находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами (рис. 3). Аналогичный анализ электронной структуры ОЦК-лития при нормальном давлении и давлениях до 5 ГПа также приведен в данной главе.

В четвертой главе приведены результаты исследования сверхпроводящих свойств селенида железа.

На основе исследования немагнитной и антиферромагнитной (с рассмотрением спиновых магнитных моментов железа) конфигураций было обнаружено существенное различие. На рис. 4 приведены визуализации поверхностей Ферми для спин-независимой и спин-разрешенной конфигурации. В первом случае вид поверхности Ферми согласуется с предыдущими результатами. Для спин-разрешенной системы, как видим, часть возле точки Γ полностью отсутствует, что вызвано ренормализацией дырочных уровней. Возле точки M имеется один цилиндр, образованный электронным уровнем, а также возле точки A имеется клевероподобная структура, образованная сильно локализованными электронными состояниями, имеющими преобладающую $3d_{z^2}$ симметрию.

На рис. 5 можно видеть, что в случае спин-разрешенной системы 3d уров-

ни железа гораздо более сильно локализованы вблизи уровня Ферми, где приведены графики зависимости плотности состояний от энергии. Данное обстоятельство во многом определяет то, что для спин-разрешенной конфигурации постоянная электрон-фононного взаимодействия как минимум вдвое больше, чем для немагнитной системы. Обнаружена мода фононных колебаний, обладающая симметрией A_{1g} и имеющая преобладающую силу электрон-фононного спаривания в случае магнитной системы, и ответственная только за 20-30 % в немагнитной конфигурации. При переходе к магнитной конфигурации был отмечен эффект ренормализации фононных частот, однако не он играет определяющую роль в изменении величины электрон-фононного взаимодействия. Определяющим является то, что электрон-фононные матричные элементы гораздо являются гораздо большими по величине для спин-разрешенной конфигурации. Все вышеописанное может свидетельствовать о важности электрон-фононного спаривания для объяснения механизма сверхпроводимости в халькогенидах железа.

В пятой главе приведены результаты реализации подхода к расчету параметров стабильности к образованию кавитационных полостей для растянутой жидкости с использованием метода молекулярной динамики (МД). В качестве примеров даны исследования расплавов свинца, лития и их эвтектики. Приводятся результаты для границы устойчивости жидких расплавов на основе расчета фазовой диаграммы метастабильной жидкости. Оценки частоты зародышеобразования проведены с использованием стохастических свойств метода молекулярной динамики, а также путем предложенного в рамках работы подхода на основе уравнения Колмогорова-Аврами. Показано, что расчеты в рамках предложенных подходов для систем с большим и малым числом кавитационных полостей хорошо согласуются друг с другом (рис. 6).

В заключении подведены основные итоги работы, суммированы полученные результаты и выводы.

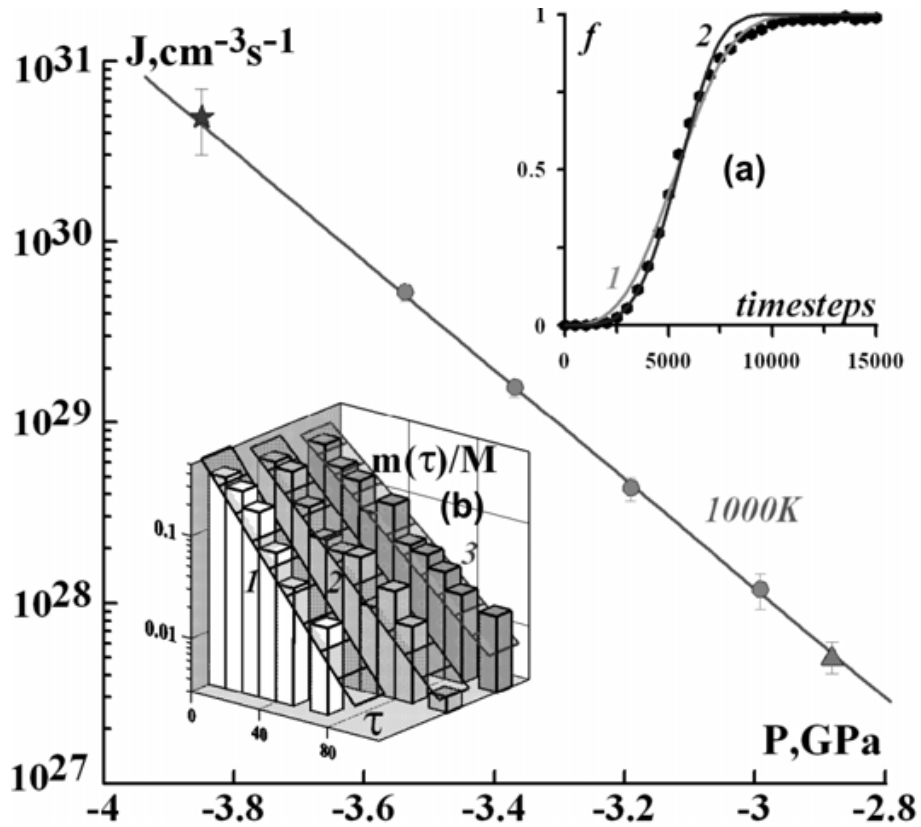


Рис. 6: Демонстрация самосогласованности результатов для двух подходов к определению частоты кавитации и для систем различного размера. Показана зависимость частоты кавитации в жидком свинце от давления для температуры в 1000 К: точка, полученная в рамках подхода, основанного на уравнении Колмогорова-Аврами показана звездочкой; точки, полученные в рамках стохастического подхода для систем в 13500 и 500000 атомов соответственно показаны кружками и треугольником. По точкам проведена прямая. Вставки объясняют два вышеупомянутых подхода. На верхней вставке (а) показана зависимость отношения объема полости к его конечной величине в зависимости от времени расчета. По точкам построено наилучшее приближение в рамках, кривая 1 - для $n = 3$, кривая 2 для $n = 4$. На основе последнего получена точка, отмеченная звездочкой на основном графике. На нижней вставке (b) показано распределение доли молекулярно-динамических траекторий $m(\tau)/M$ из исследованного ансамбля M , для которых момент начала кавитации τ_i лежит в интервале $(\tau, \tau + \delta\tau; \delta\tau = 15 \text{ ps})$. 1, 2, 3 - соответствуют различным значениям давления. Плоскостями показаны соответствующие распределения Пуассона.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Рассчитана зонная структура полупроводников GaAs, AlP, LiCl с большой точностью на основе многочастичной теории возмущений в приближении GW. Результаты находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными по параметру оптической ширины запрещенной зоны (различие в пределах 0.05 эВ) и пригодны для вычисления спектров оптического поглощения с учетом экситонных эффектов.

2. Сверхпроводимость в ГЦК-литии обусловлена усиленным в результате приложенного давления электрон-фононным взаимодействием и топологией поверхности Ферми. Электрон-фононные матричные элементы являются наиболее восприимчивыми к повышению давления среди всех исследованных составляющих. Расчетные значения зависимости температуры сверхпроводящего перехода от давления находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами.

3. Сравнительный анализ электронной структуры немагнитной и антиферромагнитной (с учетом спиновых магнитных моментов железа) конфигураций селенида железа показывает, что в случае спин-разрешенной системы 3d состояния железа более сильно локализованы вблизи уровня Ферми (согласуется с результатами фотоэмиссионной спектроскопии). Для спин-разрешенной конфигурации постоянная электрон-фононного взаимодействия вдвое больше, чем для немагнитной системы (0.24 против 0.12). Это свидетельствует о важной роли электрон-фононного спаривания для объяснения механизма сверхпроводимости.

4. Рассчитано значение постоянной электрон-фононного взаимодействия λ для ОЦК-лития при нормальном давлении с большой точностью. Неоднородный профиль λ внутри зоны Бриллюэна обусловлен топологическими особенностями поверхности Ферми и свойствами оператором фононного сдвига (phonon perturbation). Полученные значения температуры сверхпроводящего перехода совпадают с экспериментальными с учетом модели усиленного электрон-электронного взаимодействия в литии.

5. Подход к исследованию кавитации в метастабильной жидкости предложен и реализован на основе атомистической модели в рамках метода молекулярной динамики. Оценены границы стабильности расплавов свинца и лития по отношению к экстремальным растяжениям, реализуемым в ударных волнах. Частота зародышеобразования в данных веществах оценена с использованием стохастических свойств модели, а также с использованием нового метода оценки на основе уравнения Колмогорова-Аврами.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Бажиров Т. Т., Салахов М. Х. Расчет зонной структуры полупроводников на основе теории функционала плотности и многочастичной теории возмущений // Ученые записки Казан. ун-та. Серия физико-математические науки. 2011. Т. 153. Кн. 1. С. 85-100.
2. Bazhиров Т., Noffsinger J. and Cohen M. L. Superconductivity and electron-phonon coupling in lithium at high pressures // Physical Review B. 2010. Vol. 82. P. 184509.
3. Bazhиров Т. Т., Norman G. E. and Stegailov V. V. Cavitation in liquid metals under negative pressures. Molecular dynamics modeling and simulation // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. Vol. 20. P. 114113.
4. Insepov Z., Hassanein A., Bazhиров Т. Т., Norman G. E. and Stegailov V. V. Molecular dynamics simulations of bubble formation and cavitation in liquid metals // Fusion science and technology. 2007. Vol. 52. Pp. 885-889.
5. Bazhиров Т. Т., Norman G. E. and Stegailov V. V. Cavitation in liquid Pb and Li under negative pressures // Computer Physics Communications. 2007. Vol. 177. P. 41
6. Бажиров Т. Т., Куксин А. Ю., Норман Г. Э., Стегайлов В. В. О термодинамическом подобии границ устойчивости метастабильных состояний металлов // Журнал физической химии. 2007. Т. 81 С. 1165–1174.
7. Бажиров Т. Т., Норман Г. Э., Стегайлов В. В. О соотношениях подобия для границ устойчивости метастабильных металлов // Доклады академии наук. 2007. Т. 413. С. 463–468.
8. Bazhиров Т. Т., Norman G. E. and Stegailov V. V. Molecular dynamics simulation of cavitation in a lead melt at negative pressures // Russian Journal of Physical Chemistry. 2006. Vol. 80. Pp. S90-S97.
9. Бажиров Т. Т., Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Кавитация и границы устойчивости жидкого свинца при отрицательных давлениях: исследование методом молекулярной динамики // Доклады академии наук. 2005. Т. 405 С. 325–331.

В сборниках статей:

10. Insepov Z., Bazhirov T. T., Norman G. E. and Stegailov V. V. Computer Simulation of Bubble Formation [Электронный ресурс] // Preprint ANL (Argonne National Laboratory), Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA). Monterey, California, Apr 15-19, 2007, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL. 2007. - 1 эл. опт. диск (CD-ROM)
11. Бажиров Т. Т. Гомогенная и гетерогенная кавитация в расплаве PbLi. Моделирование методом молекулярной динамики // "Физика экстремальных состояний вещества - 2007" (под ред. акад. Фортова В. Е.), Черногловка. 2007. С. 225-227.
12. Бажиров Т. Т., Куксин А. Ю. О соотношениях подобия для границ устойчивости // "Физика экстремальных состояний вещества - 2006" (под ред. акад. Фортова В. Е.), Черногловка. 2006. С. 56-58.
13. Бажиров Т. Т., Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Кавитация в жидком свинце при отрицательных давлениях. Исследование методом молекулярной динамики // "Физика экстремальных состояний вещества - 2006" (под ред. акад. Фортова В. Е.), Черногловка. 2005. С. 166-168.
14. Бажиров Т. Т. Динамика и кинетика гетерогенной кавитации в расплавах PbLi. Молекулярно-динамическое моделирование // Сборник трудов 50 конференции Московского физико-технического института "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук Москва-Долгопрудный. 2007. часть. IV. С. 137-140.
15. Бажиров Т. Т., Динамика и кинетика кавитации в Pb, Li и Pb83Li17. Молекулярно-динамическое моделирование // Сборник трудов XIX конференции Московского физико-технического института "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук Москва-Долгопрудный. 2007. часть IV. С. 75-77.
16. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Кавитация и границы устойчивости жидкого свинца при отрицательных давлениях. Молекулярно-динамический расчет // Сборник трудов XLVIII конференции Московского физико-технического института "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук Москва-Долгопрудный. 2005. часть IV. С. 79-81.
17. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Жидкий свинец при отрицательных давлениях. Моделирование на основе EAM-потенциала взаимодействия //

Сборник трудов XLVII конференции Московского физико-технического института "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук Москва-Долгопрудный. 2004. часть IV. С. 72-73.

18. Бажиров Т. Т., Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Молекулярно-динамическое моделирование и теория процессов нуклеации в фазовых переходах первого рода: распад перегретого твердого металла, кавитация в расплаве при отрицательных давлениях // Сборник трудов Института Теплофизики Экстремальных Состояний, выпуск 7 - 2004 (под ред. акад. Фортова В.Е. и акад. Лихачева А.П.). Москва. 2005. С. 209-214.

В тезисах конференций:

19. Bazhиров T., Noffsinger J. and Cohen M. L. Spin-resolved electron-phonon coupling in FeSe // abstracts of the 2011 American Physical Society Meeting, Dallas, TX, USA, Mar 21 - Mar 25, 2011.
URL: http://absimage.aps.org/image/MWS_MAR11-2010-004391.pdf
(дата обращения: 01.07.2011).
20. Bazhиров T., Noffsinger J. and Cohen M. L. Superconductivity in lithium under pressure from electron-phonon coupling // abstracts of the 2010 American Physical Society Meeting, Portland, OR, USA, Mar 14 - Mar 19, 2010.
URL: http://absimage.aps.org/image/MWS_MAR10-2009-006507.pdf
(дата обращения: 01.07.2011).
21. Bazhиров T. T., Norman G. E. and Stegailov V. V. Kinetics of cavitation under negative pressure in liquid Pb-Li alloys from atomistic simulations // abstracts of the 2007 Conference on Computational Physics, Brussels, Belgium, Sep 5-8, 2007. P. 224.
22. Bazhиров T. T., Norman G. E. and Stegailov V. V. Cavitation in liquid Pb and Li under negative pressures // abstracts of the 2006 Conference on Computational Physics, Gyeongju, Republic of Korea, Aug 29 - Sept 01, 2006. P. 28.
23. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Молекулярно-динамическое моделирование кавитации в жидкостях при отрицательных давлениях // тезисы XXII международной конференции "Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом", Эльбрус, Россия. Март. 2007. С. 161.
24. Бажиров Т. Т. Кавитация и границы устойчивости жидкого свинца при отрицательных давлениях: молекулярно-динамическое моделирование

- // тезисы XXI международной конференции “Уравнения состояния вещества”, Эльбрус, Россия. Март. 2006. С. 40.
25. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Кавитация в жидком свинце при отрицательных давлениях. Моделирование методом молекулярной динамики // тезисы XX международной конференции “Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом”, Эльбрус, Россия. Март 2005. С. 141.
 26. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Кавитация в жидком свинце при отрицательных давлениях. Моделирование методом молекулярной динамики // тезисы 3 международного симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах», Новый Афон, Грузия, Июль. 2005. С. 2-3.
 27. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Кавитация в жидком свинце при отрицательных давлениях. Моделирование методом молекулярной динамики // тезисы XI всероссийской конференции по термофизическим свойствам вещества, Октябрь 4-7, Санкт-Петербург. 2005. С. 55.
 28. Бажиров Т. Т., Стегайлов В. В. Кавитация в жидком свинце при отрицательных давлениях. Моделирование методом молекулярной динамики // тезисы III всероссийского совещания “Метастабильные состояния и флуктуации”, Екатеринбург, Октябрь 15-20. 2005. С. 13.