

PHD PROJECT

DEVELOPMENT OF COMPACT MODELS FOR JOSEPHSON JUNCTIONS USING *AB INITIO* SIMULATIONS

- [Institut Interdisciplinaire d'Innovation Technologique \(3IT\)](#)
- [Institut Quantique \(IQ\)](#)
- [Nanoacademic Technologies Inc](#)

Context: Superconducting circuits are one of the leading candidates for the implementation of practical quantum computers. In this context, Canada's first semi-industrial fabrication facility for superconducting circuits will soon be established at the Institut interdisciplinaire d'innovation technologique (3IT) at Université de Sherbrooke. This will involve the elaboration of a Process Design Kit (PDK) for academic and industrial users of the facility wishing to fabricate chips according to certain specifications. An important aspect in the success of this fabrication is the capability to predict device performance before fabrication using numerical simulations to avoid excessive trial and error. While classical components like capacitors, inductors, and resonators may be modeled efficiently with commercially available finite-element codes, properties of the Josephson junction are determined by quantum transport physics at the atomistic scale.

Research project: The aim of **this thesis project** is to develop compact models of Josephson junctions that include the impact of atomistic defects that are specific to the 3IT fabrication processes. Supported by the expertise of 3IT, IQ and Nanoacademic Technologies Inc. in the fields of fabrication, finite-element and atomistic simulation for superconducting circuits, **the student will have to** (i) perform atomistic simulations based on the Non-Equilibrium Green's Function Density Functional Theory (NEGF-DFT) technique, (ii) develop analytical models based on approximate approaches such as the WKB method to generate an accurate compact model for the devices, (iii) collaborate with experimentalists to compare experimental data for Josephson junction transport characteristics with analytical and numerical modeling data that take foundry-specific geometries and defects into account, and (iv) provide the numerical and theoretical skills necessary to integrate the Josephson junction's models into the 3IT PDK and combine it with Nanoacademic's QTCAD[®] software, leading to more predictive design and fabrication workflows.

Supervision & work environment: Under the supervision Prof. Dominique Drouin and Dr. Aldilene Saraiva, the work will be carried out mainly at the Interdisciplinary Institute for Technological Innovation (3IT) and at the Quantum Institute (IQ) of UdeS, in close collaboration with the company Nanoacademic Technologies Inc. 3IT is a unique institute in Canada, specializing in the research and development of innovative technologies for energy, electronics, robotics and health. The IQ is a state-of-the-art institute whose mission is to invent the quantum technologies of tomorrow and transfer them to the industry. Nanoacademic Technologies Inc. is a small scientific software company based in Montréal. Founded in 2008 as a spin-out of research done by the group of Prof. Hong Guo at the McGill Physics Department, Nanoacademic develops and distributes atomistic and quantum modeling software for material science and nanodevice engineering applications. Nanoacademic is currently leveraging its finite-element and atomistic simulation backends to develop new design tools for superconducting circuits. The student will thus benefit from an exceptional research environment that combines students, professionals, professors, and industrialists working hand-in-hand to develop the future technologies.

Researched profile:

- Specialization in physics or computational material science
- Programming skills in Python (preferred) or another scientific programming language
- Strengths: knowledge in superconducting qubits and the physics of Josephson junctions
- Assets: experience in computational *ab initio* modeling techniques such as density functional theory or molecular dynamics
- Excellent adaptability, autonomy, teamwork, and problem-solving skills.
- Strong taste for theoretical modeling work with immediate applications to experimental physics and engineering.

Contacts: jobnano@usherbrooke.ca

Documents to provide: CV, all post-secondary transcripts and references.

OFFRE DE DOCTORAT**DEVELOPEMENT DE MODÈLES COMPACTS DE JONCTIONS JOSEPHSON PAR DES SIMULATIONS AB INITIO**

- [Institut Interdisciplinaire d'Innovation Technologique \(3IT\)](#)
- [Institut Quantique \(IQ\)](#)
- [Nanoacademic Technologies Inc](#)

Contexte : Les circuits supraconducteurs sont l'un des principaux candidats pour la mise en œuvre d'ordinateurs quantiques pratiques. Dans ce contexte, la première usine de fabrication semi-industrielle de circuits supraconducteurs au Canada sera bientôt implantée à l'Institut interdisciplinaire d'innovation technologique (3IT) de l'Université de Sherbrooke. Il s'agira de l'élaboration d'un Kit de design de processus (PDK) destiné aux utilisateurs académiques et industriels de l'installation souhaitant fabriquer des puces selon certaines spécifications. Un aspect important du succès de cette fabrication est la capacité de prédire les performances du dispositif avant la fabrication à l'aide de simulations numériques afin d'éviter des essais et des erreurs excessifs. Tandis que les composants classiques tels que les condensateurs, les inductances et les résonateurs peuvent être modélisés efficacement avec des codes d'éléments finis disponibles dans le commerce, les propriétés de la jonction Josephson sont déterminées par la physique du transport quantique à l'échelle atomistique.

Sujet : L'objectif de ce projet de thèse est de développer un modèle compact de jonctions Josephson incluant l'impact des défauts atomistiques spécifiques aux processus de fabrication au 3IT. Soutenu par les expertises de 3IT, IQ et Nanoacademic Technologies Inc dans les domaines de la fabrication et de la simulation par éléments finis et atomistique pour les circuits supraconducteurs, l'étudiant (e) sera en charge de (i) effectuer des simulations atomistiques basées sur les théories de la fonctionnelle de la densité et des fonctions de Green hors équilibre (NEGF-DFT), (ii) développer des modèles analytiques basés sur des approches approximatives telles que la méthode WKB pour générer des modèles compacts appropriés pour les dispositifs, (iii) collaborer avec les membres expérimentateurs de l'équipe pour comparer les données expérimentales sur les caractéristiques de transport des jonctions Josephson avec des données de modélisation analytique et numérique qui prennent en compte les géométries et les défauts spécifiques à la fonderie, et (iv) fournir les compétences numériques et théoriques nécessaires pour intégrer les modèles de jonctions Josephson dans le PDK du 3IT et les combiner avec le logiciel QTCAD® de Nanoacademic, conduisant ainsi à des processus de conception et de fabrication plus prédictifs.

Environnement de travail : Cette thèse sera réalisée sous la supervision du Pr. Dominique Drouin et de la Dre Aldilene Saraiva et se déroulera au 3IT/IQ. Le travail sera effectué principalement à l'Institut Interdisciplinaire d'Innovation Technologique (3IT) et à l'Institut Quantique (IQ) de l'UdeS, en collaboration étroite avec l'entreprise Nanoacademic Technologies Inc. Le 3IT est un institut unique au Canada, spécialisé dans la recherche et le développement de technologies innovantes pour l'énergie, l'électronique, la robotique et la santé. L'IQ est un institut de pointe ayant pour mission d'inventer les technologies quantiques de demain et de les transférer en milieu industriel. Nanoacademic Technologies Inc. est une petite entreprise de logiciels scientifiques basée à Montréal. Fondée en 2008 en tant que dérivé de la recherche effectuée par le groupe du professeur Hong Guo du département de physique de McGill, Nanoacademic développe et distribue des logiciels de modélisation atomistique et quantique pour des applications en science des matériaux et en ingénierie des nanodispositifs. Nanoacademic exploite actuellement ses moteurs de simulations par éléments finis et atomistiques pour développer de nouveaux outils de conception de circuits supraconducteurs. L'étudiant(e) bénéficiera ainsi d'un environnement de recherche exceptionnel où le personnel étudiant, professionnel, professoral et industriel travaillent main dans la main pour développer les technologies futures.

Profil recherché :

- Spécialisation en physique ou science numérique des matériaux
- Compétences en programmation en Python (de préférence) ou un autre langage de programmation scientifique
- Connaissances en qubits supraconducteurs et en physique des jonctions Josephson
- Atouts : expérience avec les techniques de modélisation numérique *ab initio* telles que la théorie de la fonctionnelle de la densité ou la dynamique moléculaire
- Forte capacité d'adaptation, d'autonomie, de travail en équipe et de résolution de problèmes
- Goût prononcé pour la modélisation théorique avec des applications immédiates à la physique expérimentale et à l'ingénierie.

Contacts : jobnano@usherbrooke.ca

Documents à fournir : CV, relevés de notes de toute l'éducation post-secondaire et références