УДК 533.922

Расчет переносных свойств жидкого алюминия

по непрерывной формуле Кубо-Гринвуда

Г.С. Демьянов1,2, Д.В. Князев1,2, П.Р. Левашов1,2

1Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)  
2Объединённый институт высоких температур РАН

В настоящее время значительное число работ посвящено изучению свойств веществ при высоких температурах и давлениях. Одним из способов создания таких экстремальных условий является фемтосекундный лазерный нагрев. Для лучшего понимания механизма такого быстротечного эксперимента возникает необходимость в его моделировании. При проведении численного эксперимента требуется знать переносные и оптические свойства рассматриваемого вещества. Их можно получить, производя первопринципные расчеты с использованием формулы Кубо-Гринвуда. Данная работа посвящена расчету переносных свойств жидкого алюминия, который используется в фемтосекундных лазерных экспериментах. Детали расчетов по обычной формуле Кубо-Гринвуда можно найти в наших предыдущих работах [1, 2].

При расчетах свойств возникает желание не только получить финальные значения, но и понять механизм их формирования. Для этого мы рассчитываем проводимость и теплопроводность по *непрерывной формуле Кубо-Гринвуда*: она выражает переносные свойства как интеграл по электронному спектру энергий от произведения непрерывных функций. Применяя данный подход, можно увидеть, какие участки спектра вносят наибольший вклад в финальные значения и . Метод численного расчета по непрерывной формуле Кубо-Гринвуда был впервые предложен и реализован в виде параллельной программы авторами данной работы. Демонстрация нового метода расчета проводимости и теплопроводности на примере жидкого алюминия представляет основной интерес предлагаемой работы.

На первом этапе расчета производится квантовое молекулярно-динамическое (КМД) моделирование на основе метода функционала плотности (МФП). Этот этап, как и следующий, выполняется с помощью коммерческого пакета Vienna Ab *initio* Simulation Package (VASP) [3]. На втором этапе для выбранных ионных конфигураций из КМД-моделирования рассчитывается детальная зонная структура, откуда мы получаем следующие величины: одноэлектронные уровни энергий, их Ферми-веса, химический потенциал, а также оптические матричные элементы переходов между уровнями. Все эти данные необходимы для проведения третьего этапа: расчета плотности электронных состояний (ПЭС) и переносных свойств по непрерывной формуле Кубо-Гринвуда. Он производится с помощью совместимой с VASP параллельной программы **C**ontinuous K**ubo**-**Gr**eenwood Progr**am** (CUboGrAm), написанной авторами данной работы.

Для расчета свойств по непрерывной формуле мы предлагаем новую процедуру сглаживания квадратов матричных элементов. Ее результатом являются *сглаженные квадраты матричных элементов*, которые входят в подынтегральный множитель непрерывной формулы. Эта функция показывает интенсивность перехода между электронными уровнями с начальной энергией и конечной . Она является гладкой и непрерывной, что позволяет изображать ее на графиках, а также исследовать ее зависимость, например, от температуры или плотности вещества. Зная сглаженные квадраты матричных элементов, можно рассчитать и по непрерывной формуле Кубо-Гринвуда, а также проанализировать вклады различных участков электронного спектра в эти значения.

В данной работе описанным методом рассчитывается статическая проводимость и теплопроводность жидкого алюминия при температуре и плотности . Для рассмотренной системы были получены кривые сглаженных квадратов матричных элементов, ПЭС, дифференциальной проводимости и теплопроводности, а также их интегральные значения: и .

Литература

1. *D. Knyazev, P. Levashov*, Ab initio calculation of transport and optical properties of aluminum: Influence of simulation parameters // Computational Materials Science. 2013. V. 79. P. 817-829.
2. *D. Knyazev, P. Levashov*, Thermodynamic, transport, and optical properties of dense silver plasma calculated using the GreeKuP code // Contributions to Plasma Physics. 2019. V. 59, 345-353.
3. *G. Kresse, J. Hafner,* Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558-561.