

**Первопринципный расчет переносных и оптических свойств металлов:
сравнение результатов для алюминия и серебра**

Д.В. Князев^{1,2}, П.Р. Левашов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН

Данные по переносным и оптическим свойствам металлов необходимы при моделировании различных экспериментов в области физики высоких плотностей энергии. К числу таких экспериментов относятся: фемтосекундный лазерный нагрев металлов, электровзрыв металлов, воздействие на вещество тяжелоионных пучков. В данной работе переносные и оптические свойства металлов получаются в результате первопринципного расчета.

Расчет основан на квантовом молекулярно-динамическом (КМД) моделировании, теории функционала электронной плотности и формуле Кубо-Гринвуда. Методом КМД-моделирования определяются траектории ионов металла при заданных температуре и плотности. С вычисленных траекторий выбираются независимые ионные конфигурации, для которых производится детальный расчет электронной структуры. Полученная информация об электронной структуре используется для расчета динамических коэффициентов Онзагера по формуле Кубо-Гринвуда. Переносные (статические электро- и теплопроводность) и оптические (динамическая электропроводность, диэлектрическая проницаемость, отражательная способность) свойства выражаются через динамические коэффициенты Онзагера. КМД-моделирование и детальный расчет электронной структуры осуществляются с помощью известного программного пакета VASP. Более подробно метод расчета описан в работах [1 – 3] и нашей недавней работе [4].

Влияние технических деталей расчета на результат было подробно исследовано в работе [4]. Для жидкого алюминия при $T = 1273$ К и $\rho = 2.249$ г/см³ произведена оценка погрешности расчета статической электропроводности (20%). Произведено сравнение результатов с доступными расчетами других авторов [1, 2], справочными и экспериментальными данными.

В этой работе произведены расчеты переносных и оптических свойств

алюминия и серебра при нормальных плотностях и температурах от 3000 К до 20000 К. Результаты для алюминия и серебра значительно отличаются.

Для алюминия в рассматриваемом диапазоне температур зависимости динамической электропроводности от частоты имеют вид, качественно соответствующий предсказаниям теории Друде. У серебра же кривые динамической электропроводности состоят из двух участков. При низких частотах их вид качественно соответствует теории Друде. При достаточно высоких частотах электропроводность практически не зависит от частоты. Как в случае алюминия, так и в случае серебра статическая электропроводность уменьшается с ростом температуры. Теплопроводность жидкого алюминия возрастает с увеличением температуры. Теплопроводность же серебра немонотонным образом изменяется с ростом температуры. Указанные различия в результатах для алюминия и серебра, вероятно, связаны с более сложной электронной структурой последнего.

Одним из направлений продолжения работы является построение полуэмпирических моделей диэлектрической проницаемости. Результаты первопринципного расчета комплексной диэлектрической проницаемости предполагается аппроксимировать выражением в виде суммы формулы Друде и конечного числа полюсов Лоренца. Такая форма аппроксимации диэлектрической проницаемости обеспечивает устойчивость численной схемы, используемой для решения уравнений Максвелла в веществе. Построение модели, таким образом, откроет возможности для практического использования результатов первопринципного расчета.

Литература

1. *Desjarlais M.P., Kress J.D., Collins L.A.* Electrical conductivity for warm, dense aluminum plasmas and liquids. – Phys. Rev. E. – 2002. – V. 66. – P. 025401.
2. *Recoules V., Crocombette J.-P.* Ab initio determination of electrical and thermal conductivity of liquid aluminum. – Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P. 134206.
3. *Holst B., French M., Redmer R.* Electronic transport coefficients from ab initio simulations and application to dense liquid hydrogen. – Phys. Rev. B. – 2011. – V. 83 – P. 235120.
4. *Knyazev D.V., Levashov P.R.* Ab initio calculation of transport and optical properties of aluminum: Influence of simulation parameters. – Comput. Mater. Sci. – 2013. – V. 79. – P. 817 – 829.