

# РЕАЛИЗАЦИЯ НЕПРЕРЫВНОЙ ФОРМУЛЫ КУБО–ГРИНВУДА ДЛЯ РАСЧЕТА ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ КВАНТОВОЙ ПЛАЗМЫ

Демьянов Г. С.,<sup>\*1,2</sup> Князев Д. В.,<sup>1,2</sup> Левашов П. Р.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный, Россия

\*demyanov.gs@phystech.edu

В настоящее время множество работ посвящено исследованию воздействия на материалы лазерного излучения. Для интерпретации таких экспериментов используется численное моделирование, для чего необходимо знать транспортные и оптические свойства. Они могут быть получены путем квантовых расчетов.

Наша работа заключается в первопринципном расчете транспортных свойств алюминия, который широко используется в экспериментах. В расчете применяется квантовая молекулярная динамика и метод функционала плотности с помощью Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP) [1]. Транспортные свойства мы рассчитываем по формуле Кубо–Гринвуда (КГ) с помощью написанной авторами работы параллельной программы. Детали метода расчета можно найти в [2,3].

Одна из целей нашей работы — понять, как формируются значения свойств. Поэтому расчет статической проводимости  $\sigma_{1DC}$  и теплопроводности  $K$  производится по *непрерывной формуле Кубо–Гринвуда*. Эта формула выражает  $\sigma_{1DC}$  и  $K$  как интеграл по электронному спектру энергий от произведения непрерывных функций. Таким образом, можно изучать вклады различных частей спектра в значения свойств.

Для реализации непрерывной формулы КГ мы разработали специальную технику, в результате чего получаем *сглаженные квадраты матричных элементов*  $D(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ . Функция показывает интенсивность перехода электрона между уровнями с энергиями  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ . С помощью  $D(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$  можно не только получить  $\sigma_{1DC}$  и  $K$ , но и анализировать вклады электронных переходов в их значения. Для расчетов по непрерывной формуле КГ мы написали совместимую с VASP параллельную программу **Continuous Kubo–Greenwood Program** (CUboGrAm).

Переносные свойства жидкого алюминия были рассчитаны при температуре  $T = 3000$  К и плотности  $\rho = 2.7$  г/см<sup>3</sup> с помощью программы CUboGrAm. Мы получили и проанализировали кривые плотности электронных состояний, сглаженных квадратов матричных элементов, дифференциальной проводимости и теплопроводности. Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 20-42-04421.

---

1. G. Kresse, J. Hafner // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558–561.

2. D. Knyazev, P. Levashov // Comput. Mater. Sci. 2013. V. 79. P. 817–829.

3. D. Knyazev, P. Levashov // *Contr. to Plasma Phys.* 2019. V. 59, 345–353.