

РАСЧЕТ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НИТРИДОВ, КАРБИДОВ И ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Левашов П.Р., Поварницын М.Е.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**pasha@jiht.ru*

Нитриды, карбиды и оксиды металлов широко применяются в науке и технике благодаря их уникальным свойствам: высокой температуре плавления, высокой микротвердости и коррозионной стойкости. Однако теплофизические свойства этих веществ изучены недостаточно: для большинства из них существуют измерения только при нормальной температуре, а при температурах выше 2000 К экспериментальных данных очень мало. В данной работе методом функционала плотности с использованием квазигармонического приближения проведены расчеты механических, термодинамических и транспортных свойств ряда нитридов, карбидов и оксидов, включая TiN, NbC и ZrO₂. Были получены температурные зависимости упругих модулей, модулей Юнга, сдвига и всестороннего сжатия, коэффициента Пуассона, коэффициента теплового расширения, изохорной и изобарной теплоемкости и коэффициента теплопроводности вплоть до температуры плавления. Коэффициент теплопроводности вычислялся из решения кинетического уравнения в приближении времени релаксации для фононов и электронов. Сравнение с имеющимися экспериментальными данными демонстрирует хорошее согласие, что подтверждает предсказательную способность современных численных кодов, основанных на методе функционала плотности.