

РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЦИРКОНИЯ И СВИНЦА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ФОРМУЛЫ КУБО–ГРИНВУДА

Фокин В.Б.,^{*1,2} Минаков Д.В.,^{1,2} Парамонов М.А.,^{1,2}
Левашов П.Р.^{1,2}

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

*Vladimir.fokin@phystech.edu

Цирконий и свинец — металлы, которые находят широкое применение в атомной энергетике.

Мы впервые рассчитали транспортные и оптические свойства этих металлов в окрестности критической точки. Поведение металлов в области фазовой диаграммы, соответствующей расширенному нагретому веществу, моделировалось первопринципным методом квантовой молекулярной динамики (с помощью пакета VASP). Для расчета динамической электропроводности использовалась формула Кубо–Гринвуда [1]. После расчета электропроводности оптические свойства (нормальная спектральная излучательная способность, отражательная способность, показатель преломления) восстанавливались с использованием преобразования Крамерса–Кронига [2].

Представлено сравнение удельного электрического сопротивления и нормальной спектральной излучательной способности циркония и свинца с экспериментальными данными [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-79-10398, <https://rscf.ru/project/20-79-10398/>

-
1. Knyazev D V and Levashov P R 2013 *Computational Materials Science* **79** 817–829
 2. Fokin V B, Minakov D V and Levashov P R 2023 *Symmetry* **15** 48
 3. Paramonov M A, Minakov D V, Fokin V B, Knyazev D V, Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Journal of Applied Physics* **132** 065102