

Применение непрерывной формулы Кубо-Гринвуда для расчёта электропроводности жидкого алюминия

Князев Д.В.^{1,®} и Левашов П.Р.¹

¹ Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Ижорская ул., 13, корп. 2, Москва, 125412, Россия

® d.v.knyazev@yandex.ru

Важным способом получения переносных и оптических свойств вещества являются квантовые расчёты, основанные на квантовом молекулярно-динамическом моделировании, методе функционала плотности и формуле Кубо-Гринвуда. В рамках этого общего подхода мы развиваем собственную численную реализацию формулы Кубо-Гринвуда: так называемую непрерывную формулу [1].

В непрерывной формуле Кубо-Гринвуда электропроводность σ_{1DC} представляется в виде интеграла от произведения гладких кривых:

$$\sigma_{1DC} = \frac{2\pi e^2 \hbar^3}{m_e^2 \Omega} \int D(\varepsilon, \varepsilon) g^2(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}(\varepsilon) \right) d\varepsilon. \quad (1)$$

Анализ кривых $D(\varepsilon, \varepsilon)$, $D(\varepsilon, \varepsilon)g^2(\varepsilon)$, входящих в непрерывную формулу (1), позволяет лучше диагностировать такие внутренние источники погрешностей, как: недостаточную густоту электронных уровней, недостаточное число $\mathbf{k}$ -точек и атомов.

В этой работе мы рассчитываем электропроводность жидкого алюминия при $T = 3000$ К и плотности $\rho = 2.70$ г/см³. Расчёты по непрерывной формуле Кубо-Гринвуда производятся с помощью программы ConGrUbo, разрабатываемой Д.В. Князевым.