

Первопринципные расчеты электропроводности и оптических свойств циркония и гафния

Фокин В.Б.^{1,2,@}, Минаков Д.В.^{1,2}, Парамонов М.А.¹ и
Демьянов Г.С.^{1,2}

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

² Московский физико-технический институт, Институтский пер. 9,
Долгопрудный, Московская область, 141701, Россия

@ Vladimir.fokin@phystech.edu

Цирконий и гафний — тугоплавкие металлы, которые широко используются в атомной промышленности. Произведен расчет удельной электропроводности и нормальной спектральной излучательной способности в широком диапазоне температур (до 10 кК) первопринципными методами посредством квантово-молекулярно-динамического моделирования. Динамическая электропроводность вычисляется с применением формулы Кубо–Гринвуда. На основе вычисленной электропроводности с использованием преобразования Крамерса–Кронига можно получить оптические свойства — излучательную способность, показатель преломления, отражательную способность. Полученные данные по электропроводности и оптическим свойствам можно применять при планировании эксперимента и при проектировании промышленных установок.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант РНФ No.26-19-00980).