



# Первопринципные расчеты проводимости и оптических свойств циркония и свинца в окрестности критической точки

В.Б. Фокин\*, Д.В. Минаков, М.А. Парамонов, П.Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН  
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)  
Москва, Россия

\*[Vladimir.Fokin@phystech.edu](mailto:Vladimir.Fokin@phystech.edu)



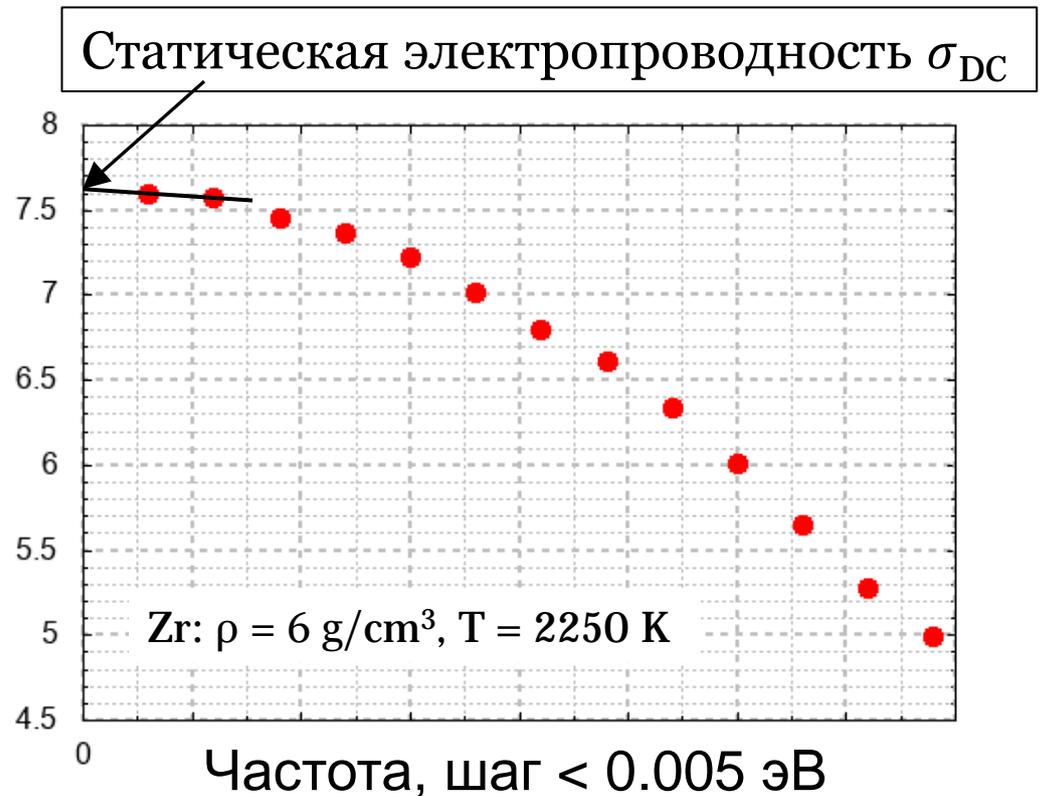
# Электропроводность: $\mathbf{j}_\omega = \sigma(\omega)\mathbf{E}_\omega$

$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$  – комплексная электропроводность

Формула Кубо–Гринвуда<sup>\*,\*\*</sup>:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^2}{3 m^2 \omega \Omega} \times \sum_{i,j,\alpha,\mathbf{k}} W(\mathbf{k}) |\langle \Psi_{i,\mathbf{k}} | \nabla_\alpha | \Psi_{j,\mathbf{k}} \rangle|^2 \times (f(\epsilon_{i,\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{j,\mathbf{k}})) \times \delta(\epsilon_{j,\mathbf{k}} - \epsilon_{i,\mathbf{k}} - \hbar\omega)$$

Электропроводность,  $10^5$  СМ/М



\*D.V.Knyazev and P.R.Levashov, Comput. Mater. Sci. **79**, 817–829 (2013)

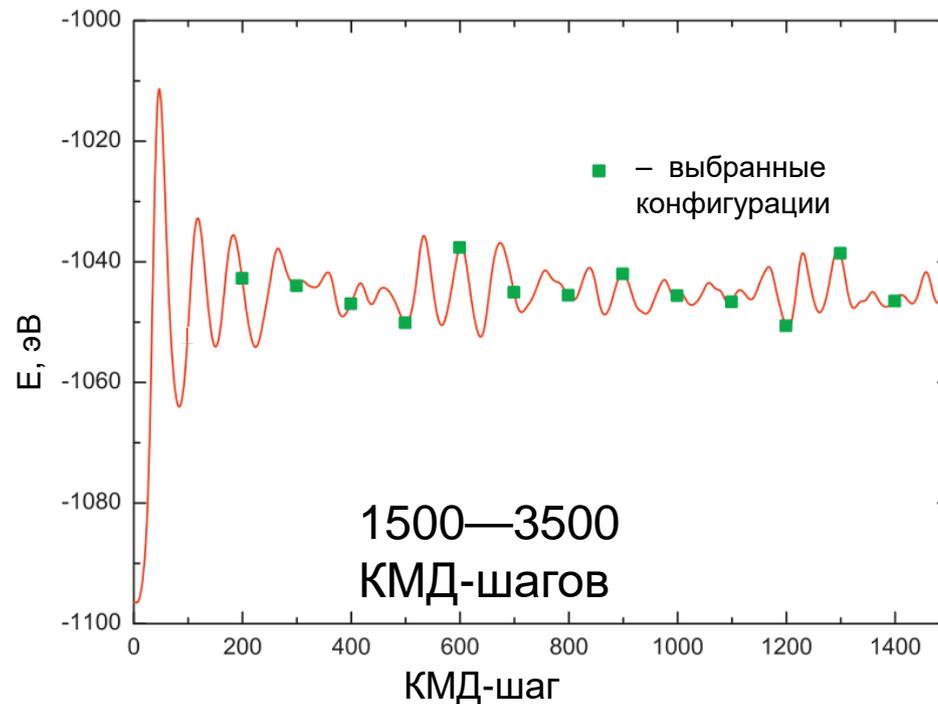
\*\* D.V.Knyazev and P.R.Levashov, Contrib. to Plasma Phys. **59**, 345–353 (2019)



# Параметры расчетов

250 атомов ОЦК; **Zr**:  $1.5 \leq \rho \leq 7$  г/см<sup>3</sup>, **Pb**:  $2.5 \leq \rho \leq 9$  г/см<sup>3</sup>.  $1 \leq T \leq 10$  кК

1. 1500 – 3500 КМД-шагов производится посредством *VASP*, – вычисляются ионные траектории



2. Выбирается несколько ионных траекторий для нахождения \*  
 $\langle \Psi_i | \nabla_\alpha | \Psi_j \rangle$

3. Вычисляется действительная часть электропроводности с помощью формулы Кубо–Гринвуда \*

4. Путем преобразования Крамерса–Кронига вычисляется мнимая часть электропроводности \*\*

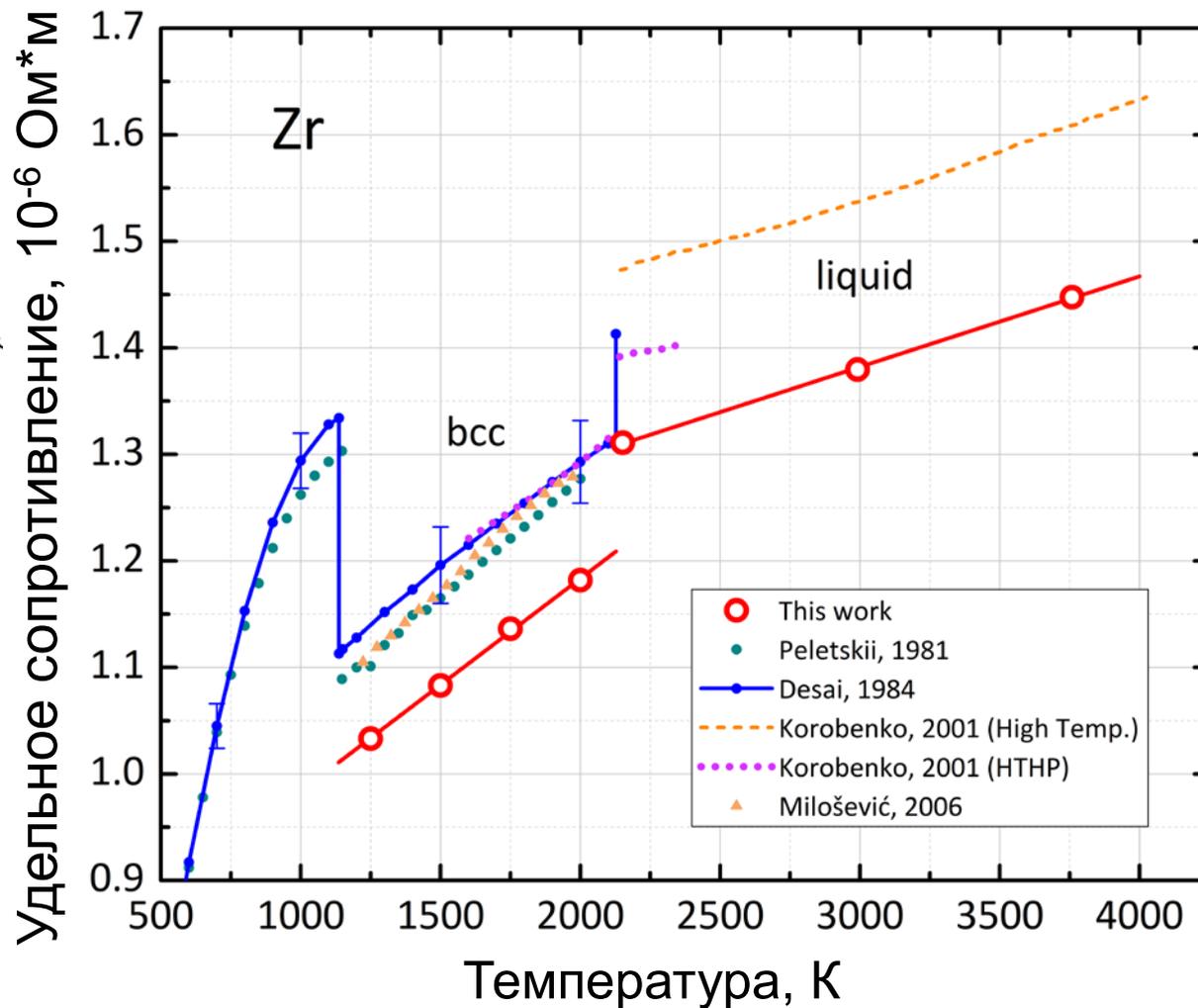
5. Рассчитываются оптические свойства

\*D.V.Knyazev and P.R.Levashov, *Comput. Mater. Sci.* **79**, 817–829 (2013)

\*\* <https://github.com/vf8/KrKrTr>, see also: Fokin, V., Minakov, D., Levashov, P. *Symmetry* 2023, **15**, 48



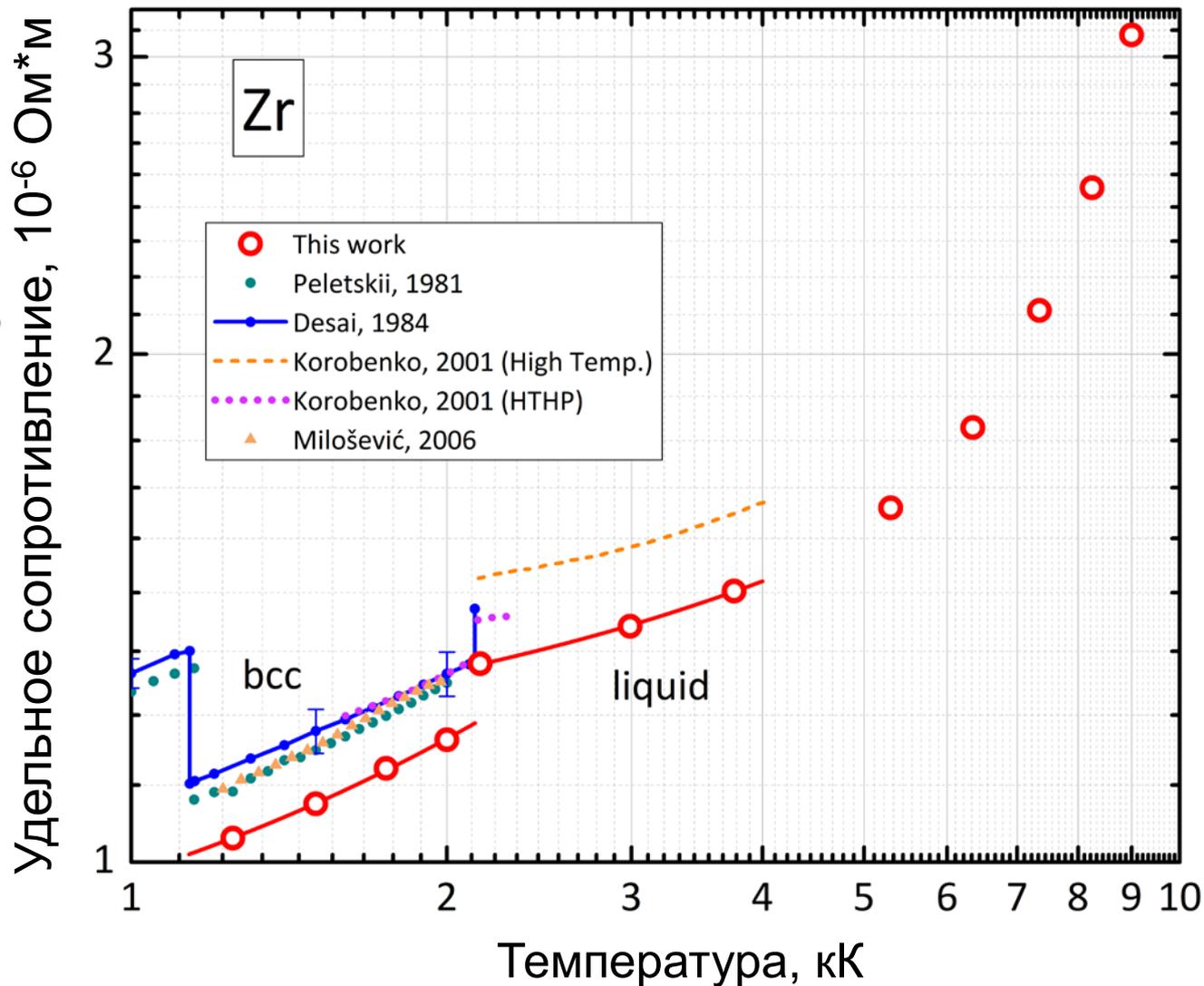
# Zr: Зависимость удельного сопротивления от $T^*$



\* M.A. Paramonov, D.V. Minakov, V.B. Fokin, D.V. Knyazev, G.S. Demyanov, and P. R. Levashov, J. Appl. Phys. **132**, 065102 (2022)

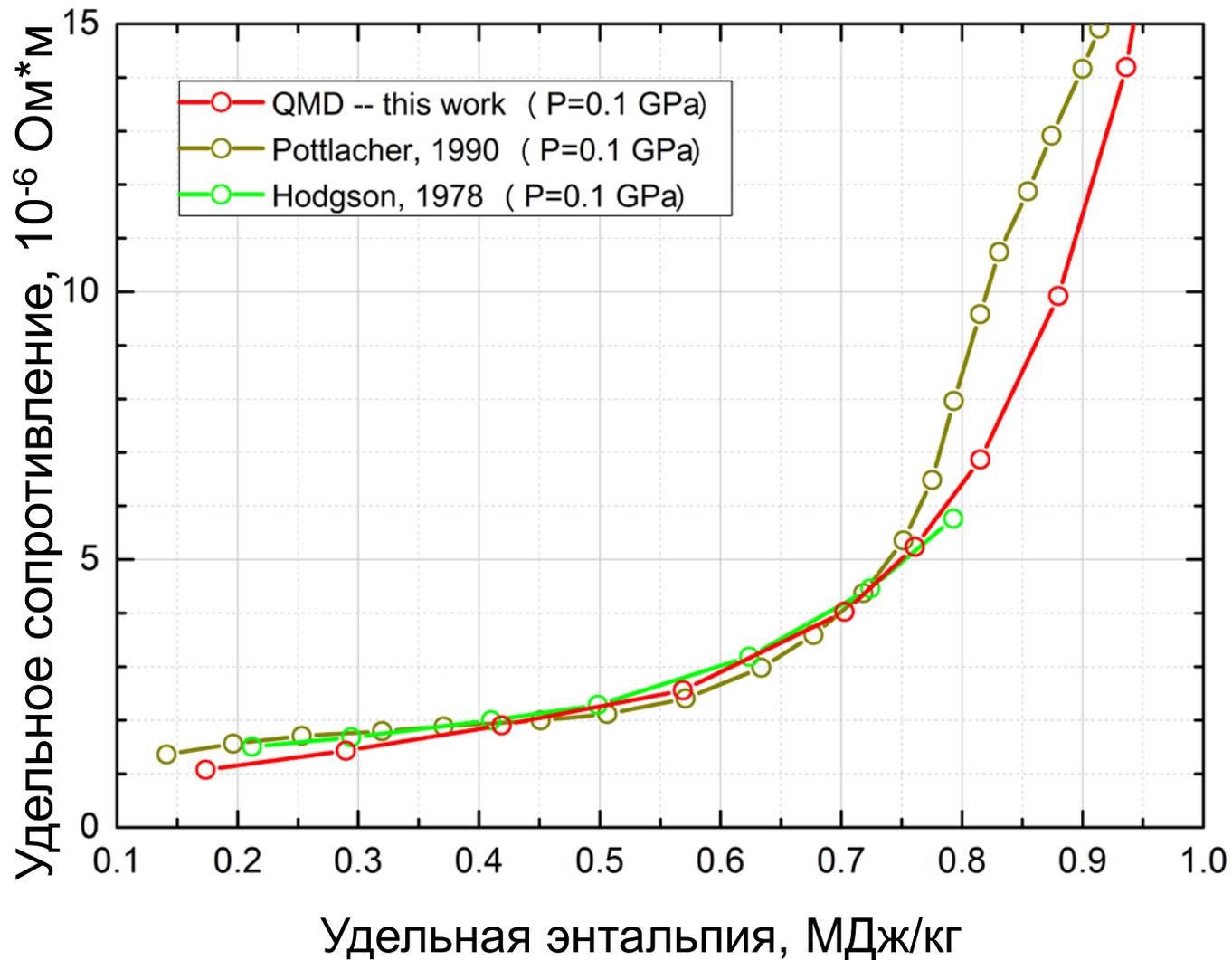


# Zr: Зависимость удельного сопротивления от $T^*$





# Pb: Зависимость удельного сопротивления от $H$

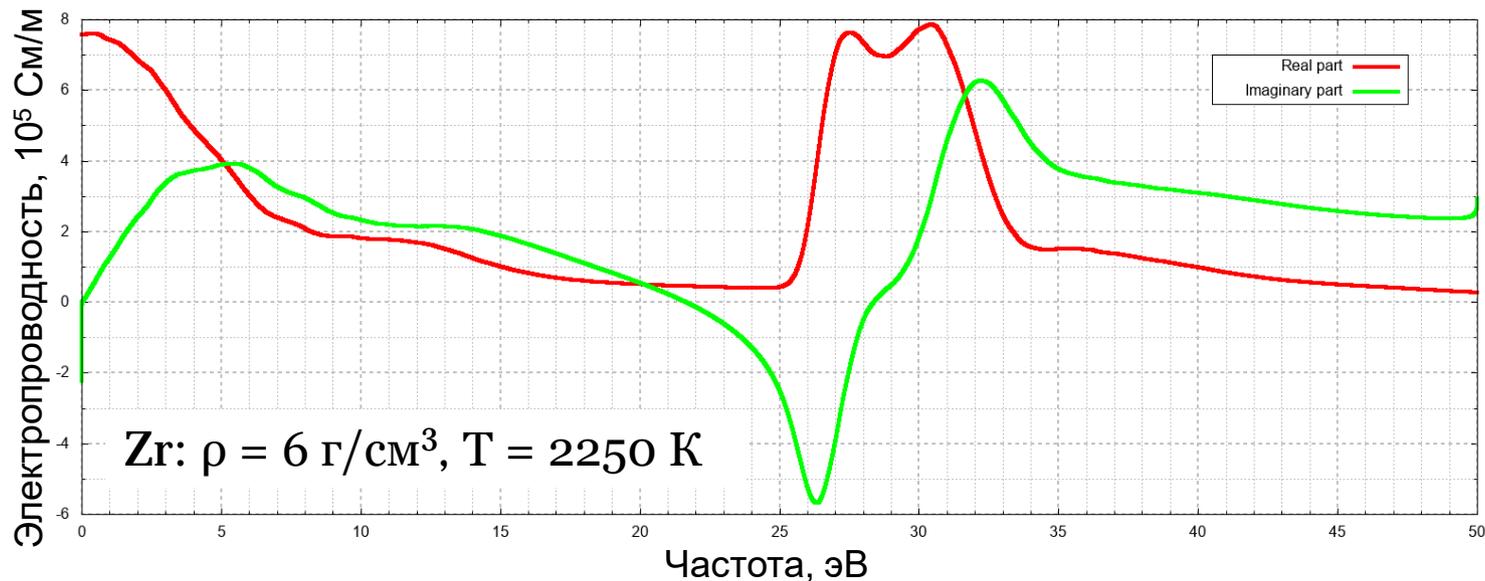




# Преобразование Крамерса–Кронига\*

$$\sigma_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} v.p. \int_0^{\infty} \frac{\sigma_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

При практических вычислениях:  $\sigma_2(\omega) \approx -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\sigma_1(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2 + i\eta} d\omega'$



\* <https://github.com/vf8/KrKrTr>, см. также: Fokin, V., Minakov, D., Levashov, P. Symmetry 2023, **15**, 48



# Оптические свойства

- Комплексная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\sigma_2(\omega)}{\omega\varepsilon_0}, \varepsilon_2(\omega) = 1 - \frac{\sigma_1(\omega)}{\omega\varepsilon_0}$$

- Комплексный показатель преломления  $n(\omega) + ik(\omega)$ :

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| + \varepsilon_1(\omega)}{2}}, k(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| - \varepsilon_1(\omega)}{2}}$$

- Отражательная способность:

$$R(\omega) = \frac{(1 - n(\omega))^2 + k(\omega)^2}{(1 + n(\omega))^2 + k(\omega)^2}$$

- Коэффициент поглощения:

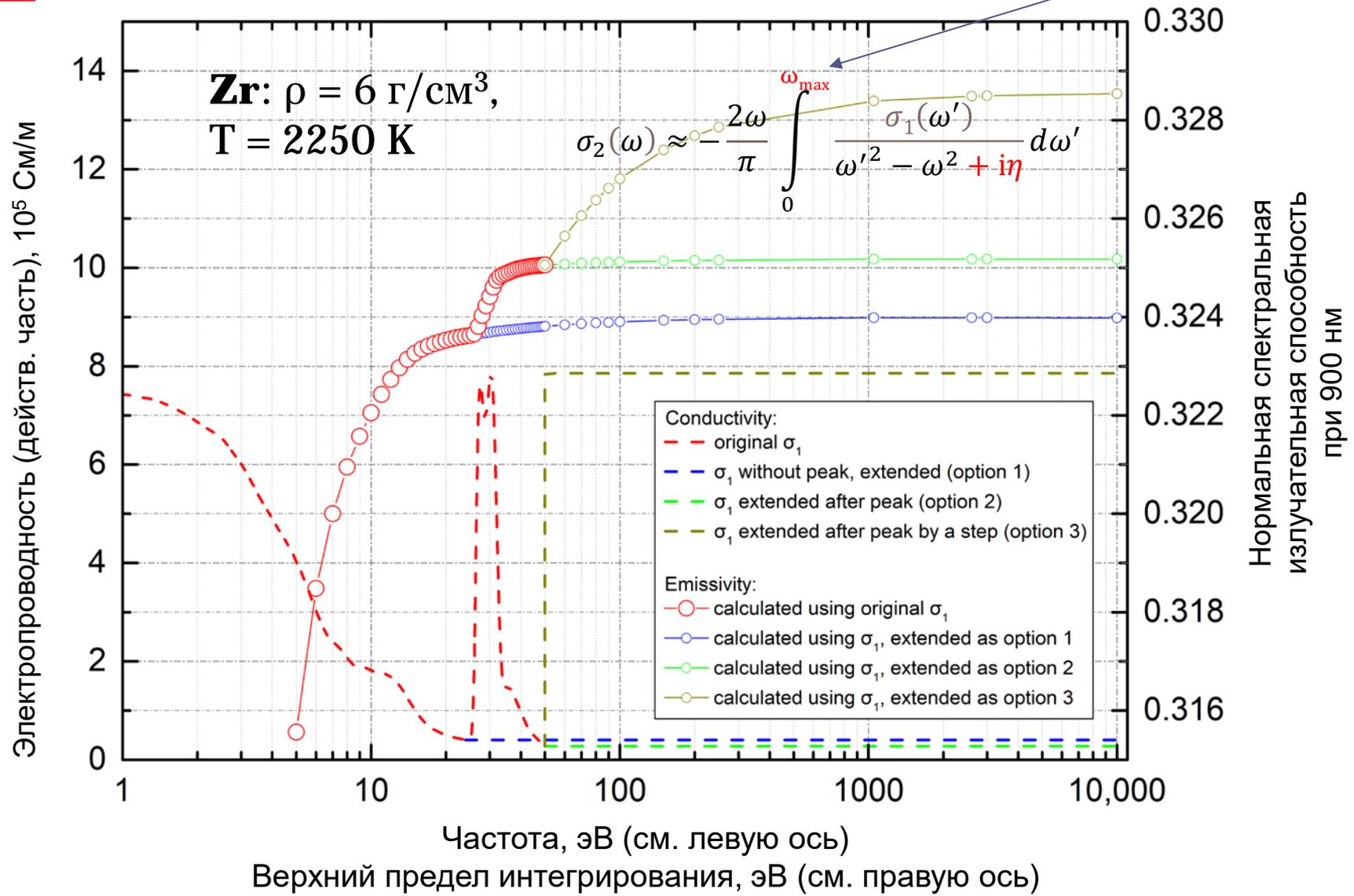
$$\alpha(\omega) = 2k(\omega) \frac{\omega}{c}$$

- Нормальная спектральная излучательная способность:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - R(\omega)$$



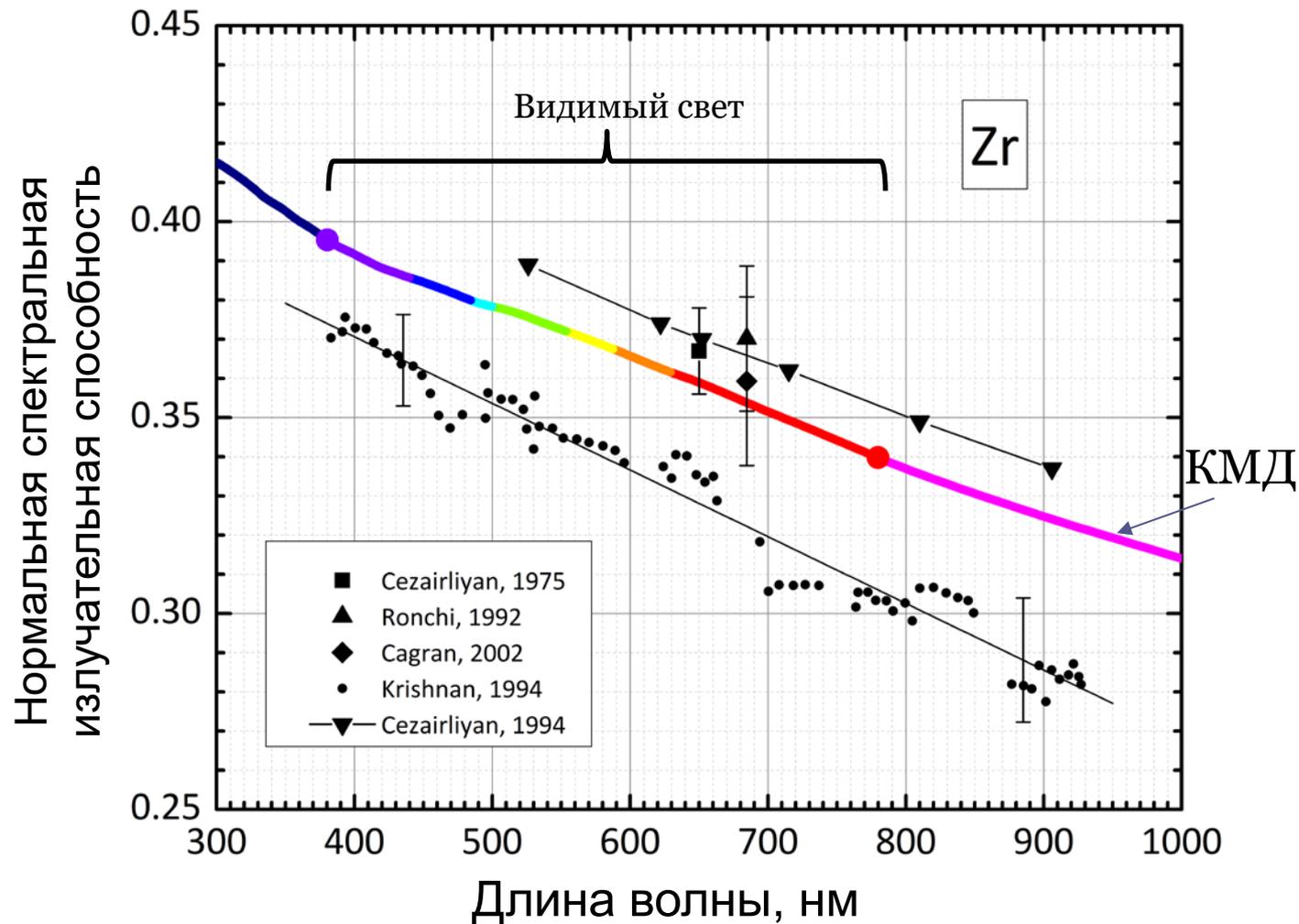
# Зависимость излучательной способности от верхнего предела интегрирования $\omega_{max}^*$



\* Fokin, V., Minakov, D., Levashov, P. Symmetry 2023, 15, 48



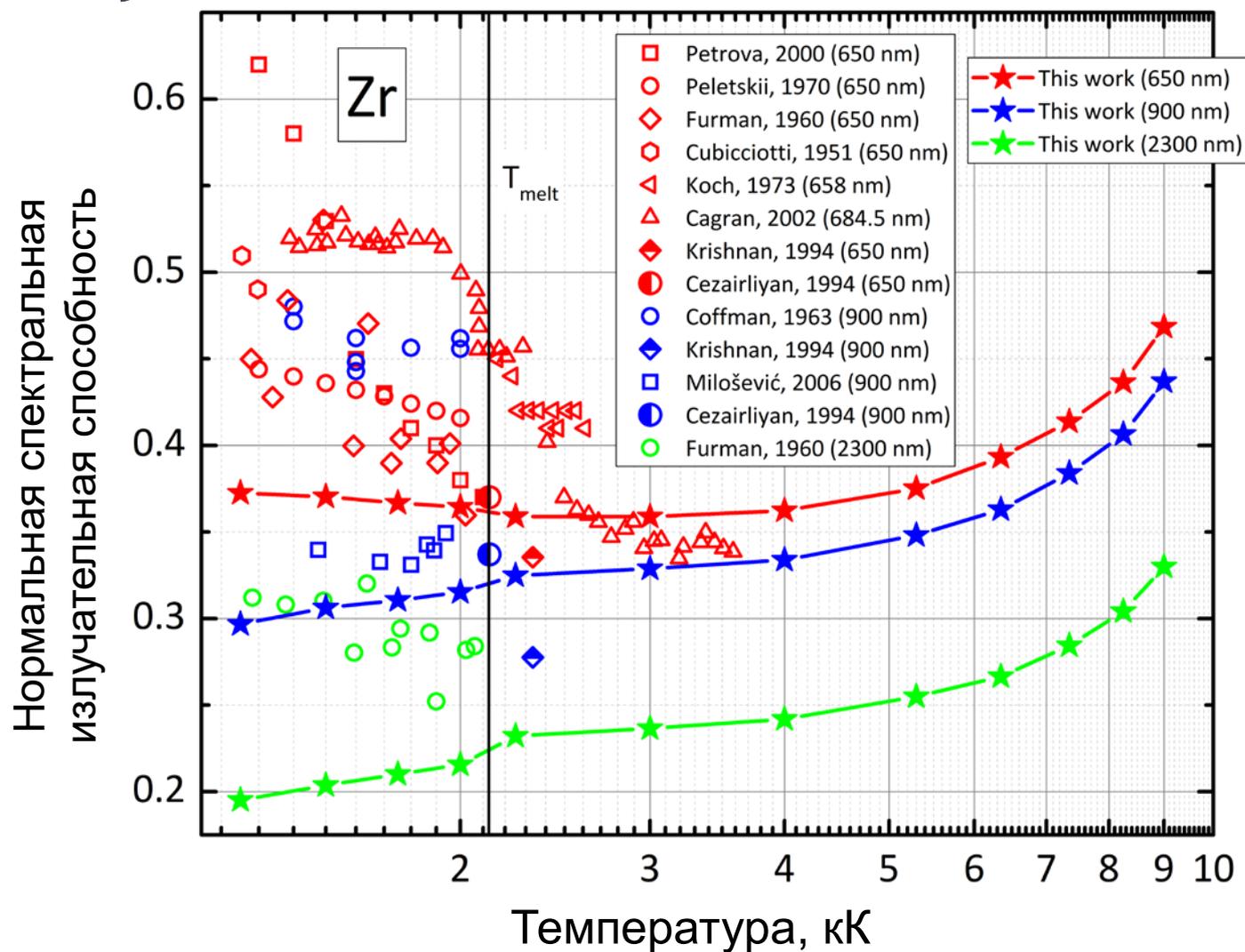
# Zr: Нормальная спектральная излучательная способность\*



\* M.A. Paramonov, D.V. Minakov, V.B. Fokin, D.V. Knyazev, G.S. Demyanov, and P. R. Levashov, J. Appl. Phys. **132**, 065102 (2022)



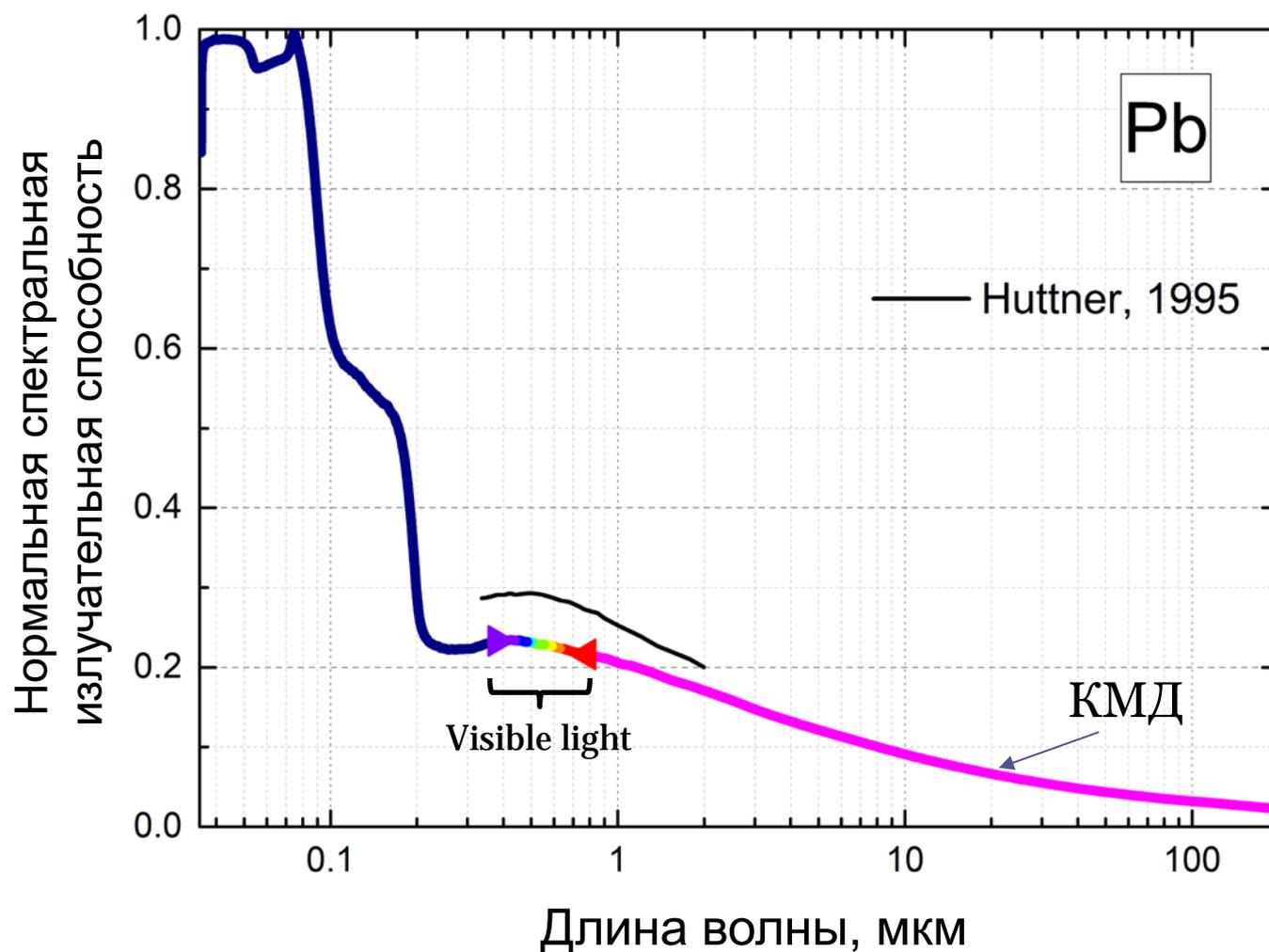
# Zr: Нормальная спектральная излучательная способность\*



\* M.A. Paramonov, D.V. Minakov, V.B. Fokin, D.V. Knyazev, G.S. Demyanov, and P. R. Levashov, J. Appl. Phys. **132**, 065102 (2022)

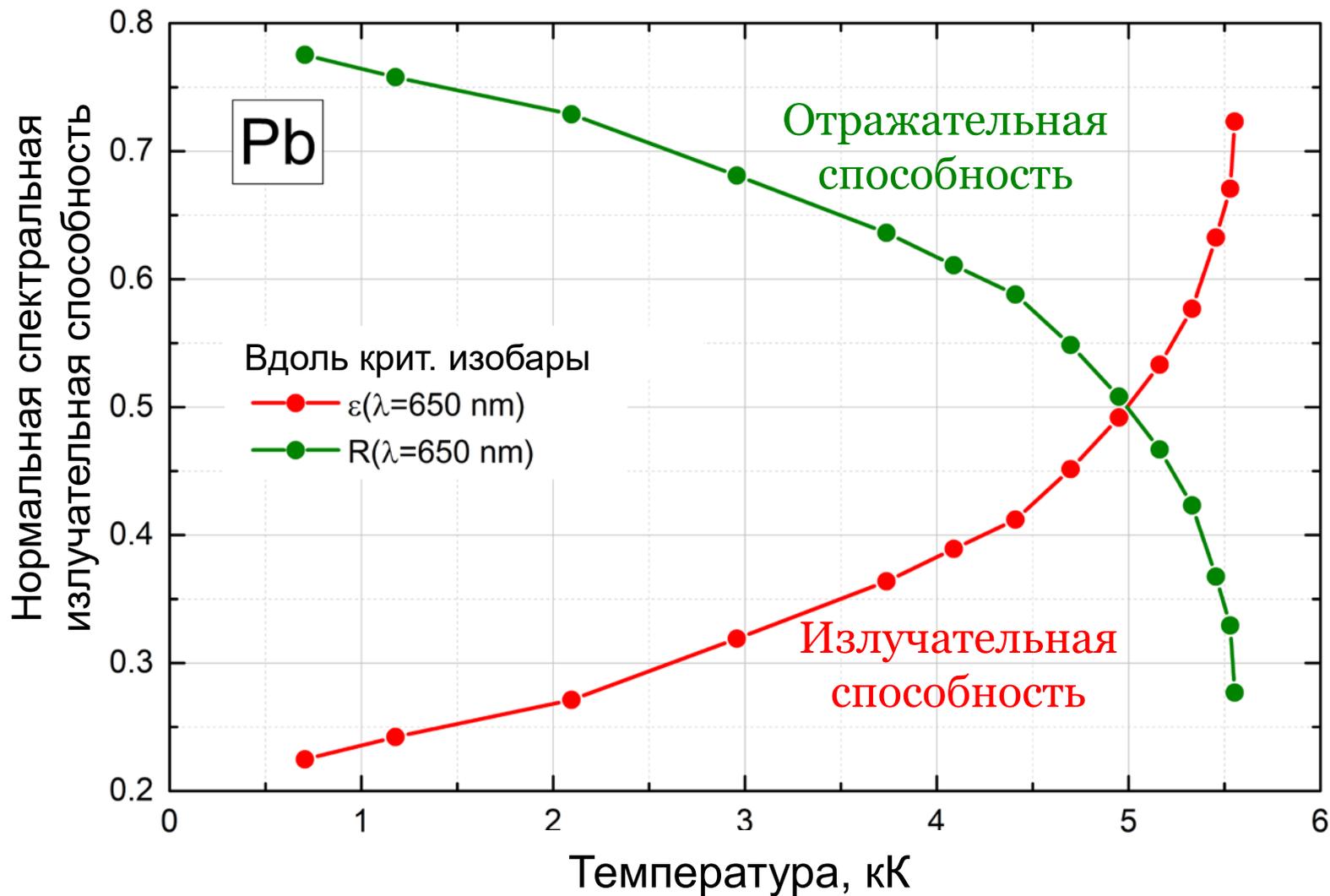


# Pb: Нормальная спектральная излучательная способность





# Pb: Нормальная спектральная излучательная способность

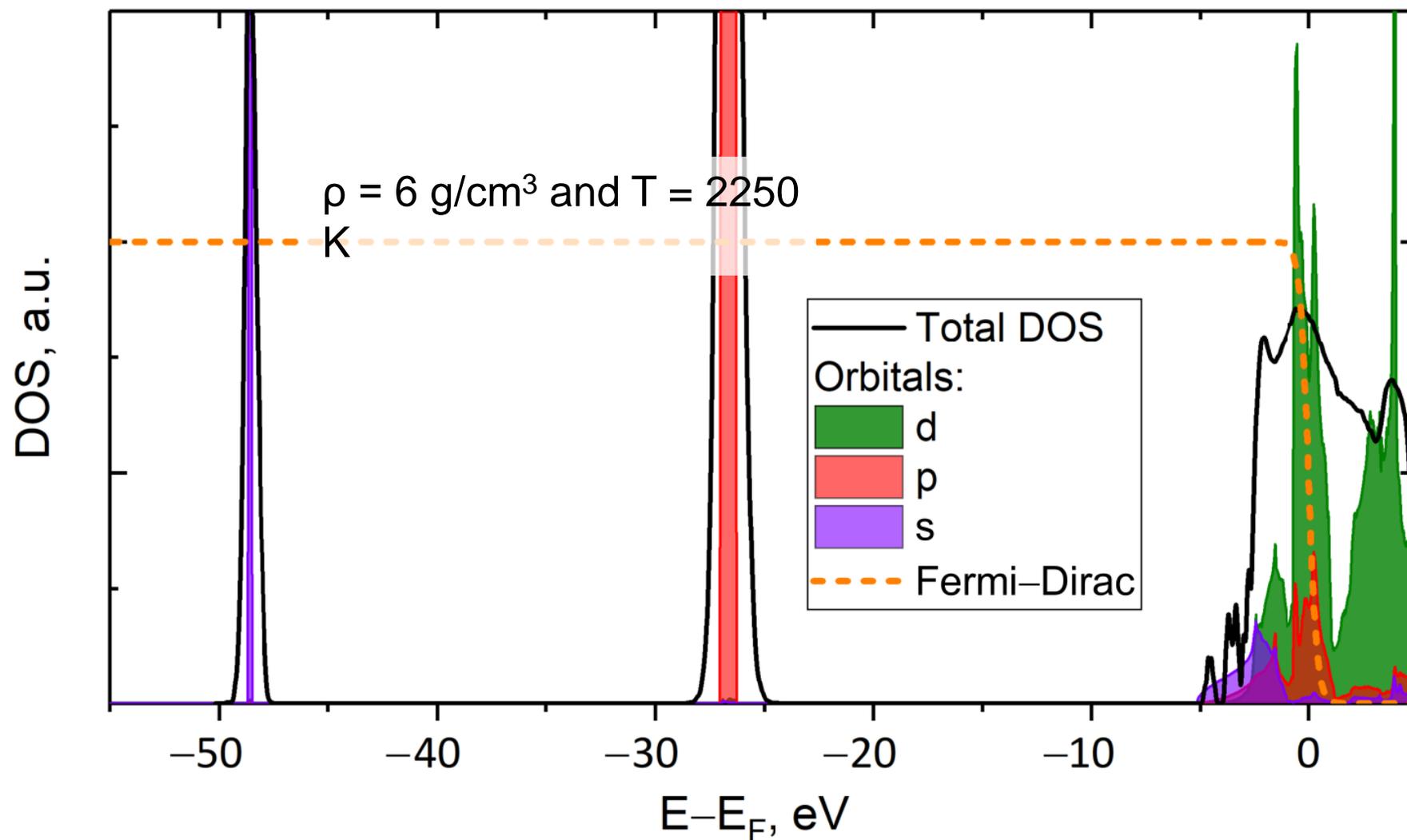




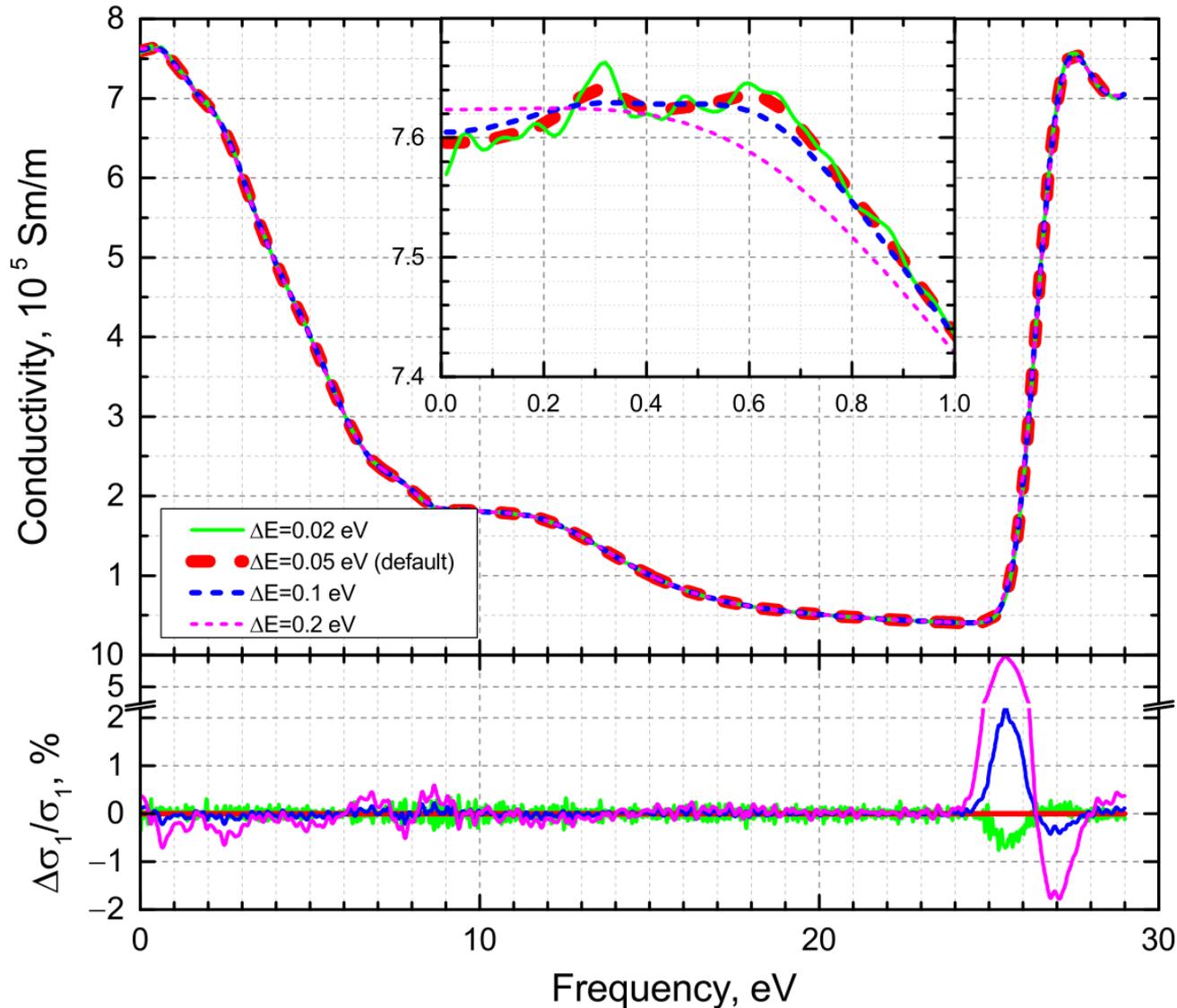
## Выводы

- Мы впервые представили электрическое удельное сопротивление и нормальную спектральную излучательную способность свинца и циркония в диапазоне температур до 10 кК
- Мы показали, что электроны внутренних оболочек дают ограниченный вклад в оптические свойства, поэтому для хорошей оценки оптических свойств достаточно учесть лишь валентные электроны
- Мы достигли удовлетворительного согласия с экспериментальными данными в расчетах проводимости циркония (разница составляет около 10%, но общая динамика соответствует эксперименту); при расчете проводимости свинца – хорошее согласие
- Для циркония мы не обнаружили резкого падения излучательной способности при плавлении
- Излучательная способность свинца растет с температурой в диапазоне до 6 кК

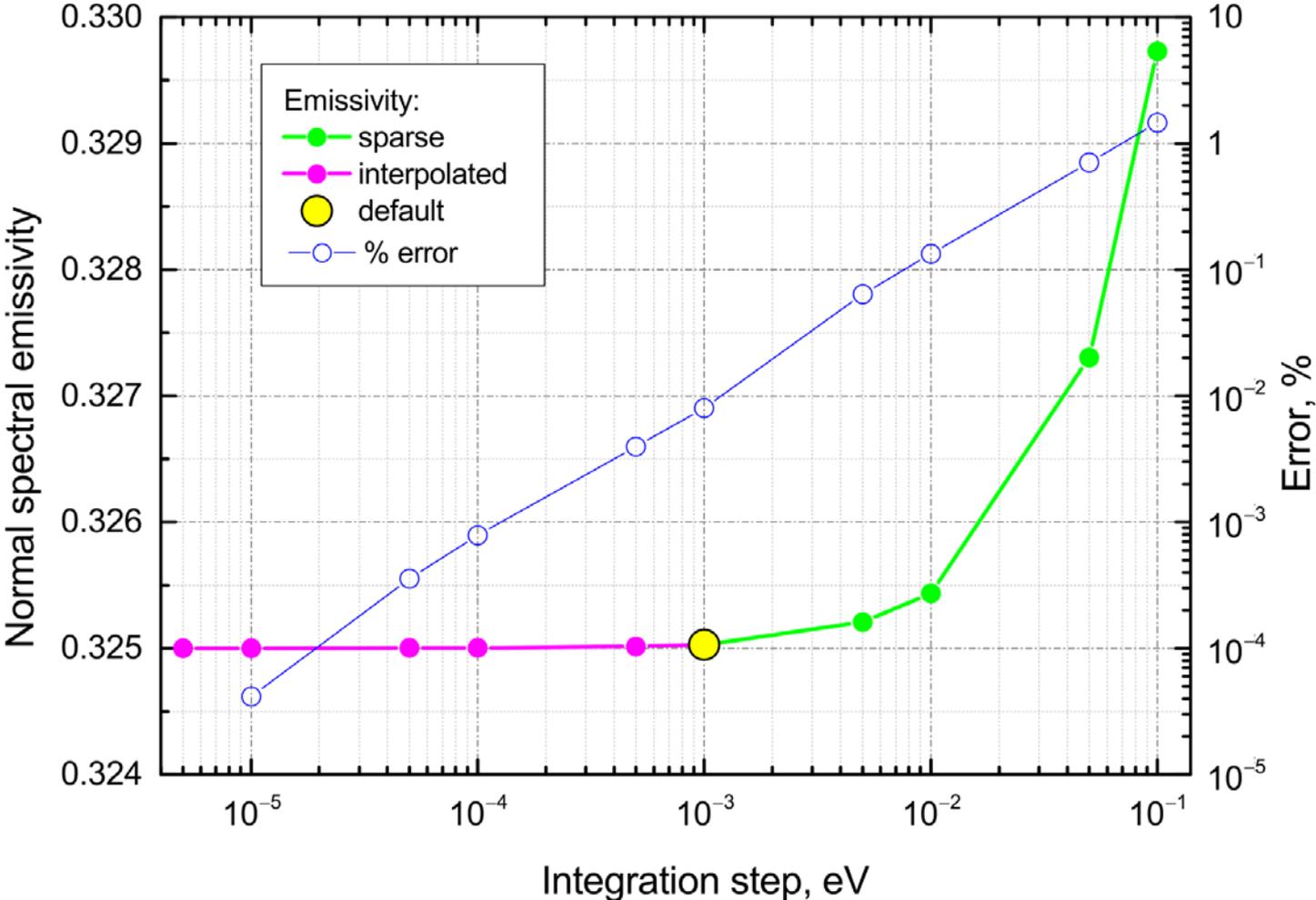
# Electronic DOS of liquid Zr



# Broadening influence to the $\sigma_1$

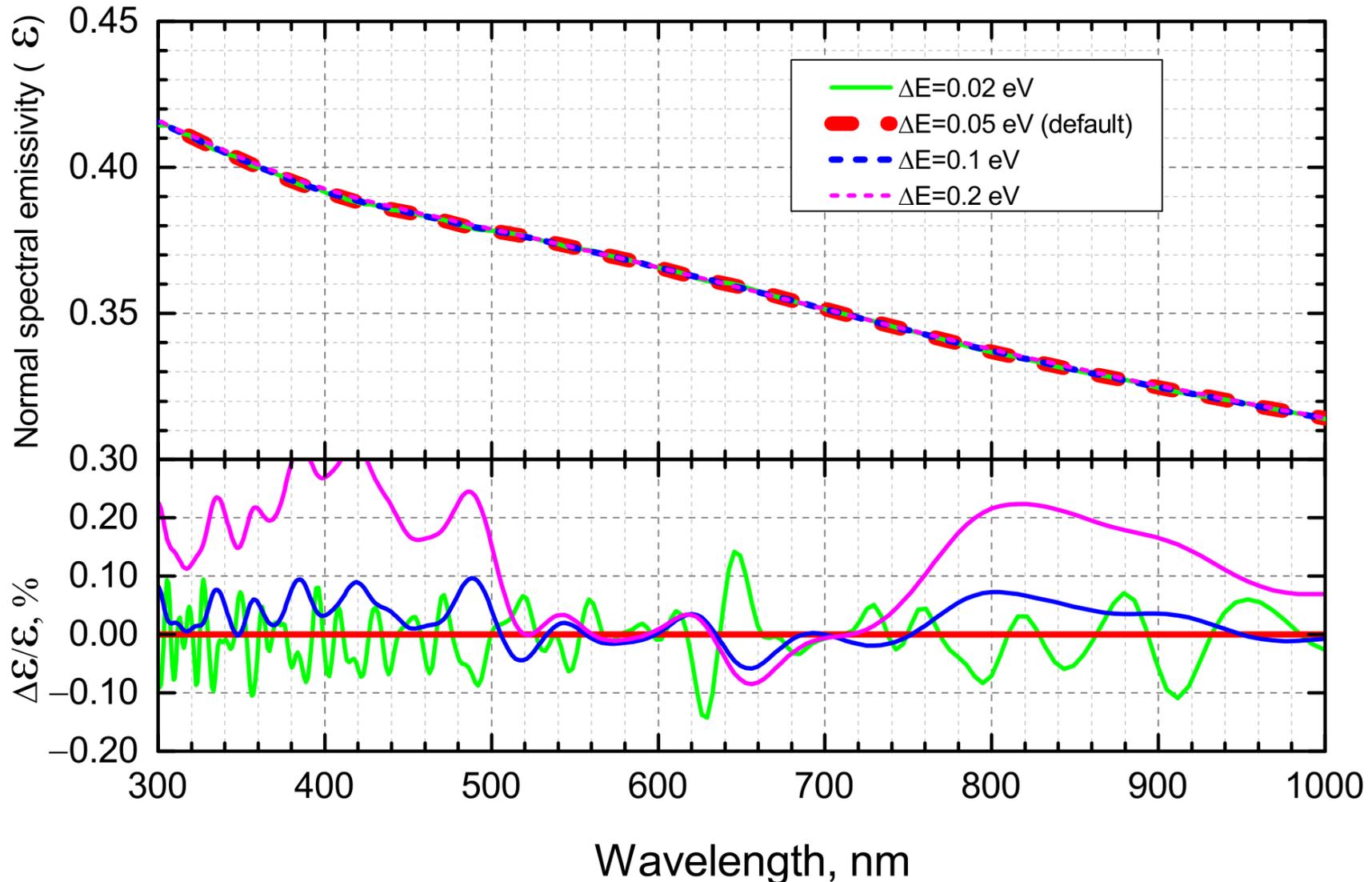


# Integrator step influence

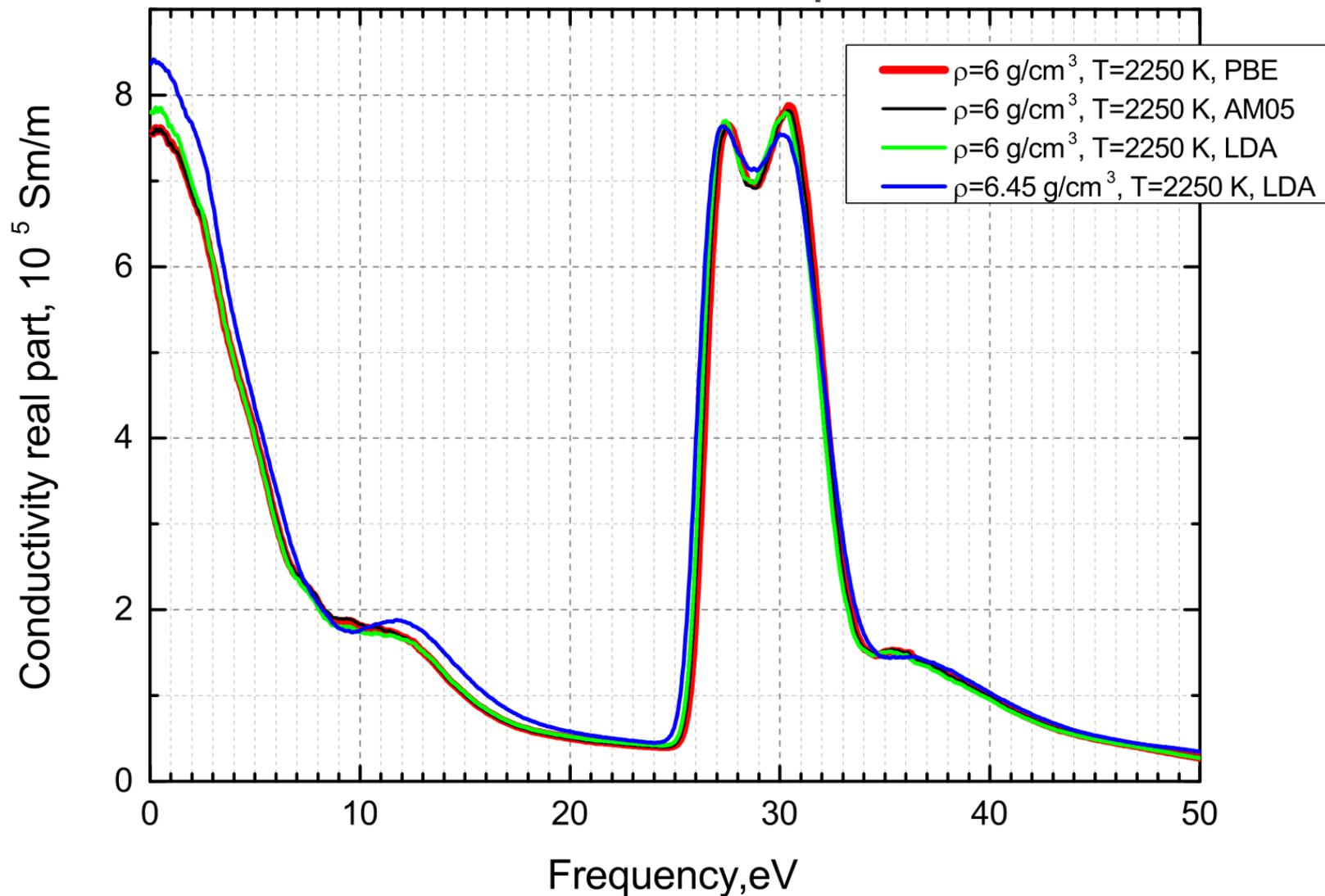


\* Fokin, V., Minakov, D., Levashov, P. Symmetry 2023, **15**, 48

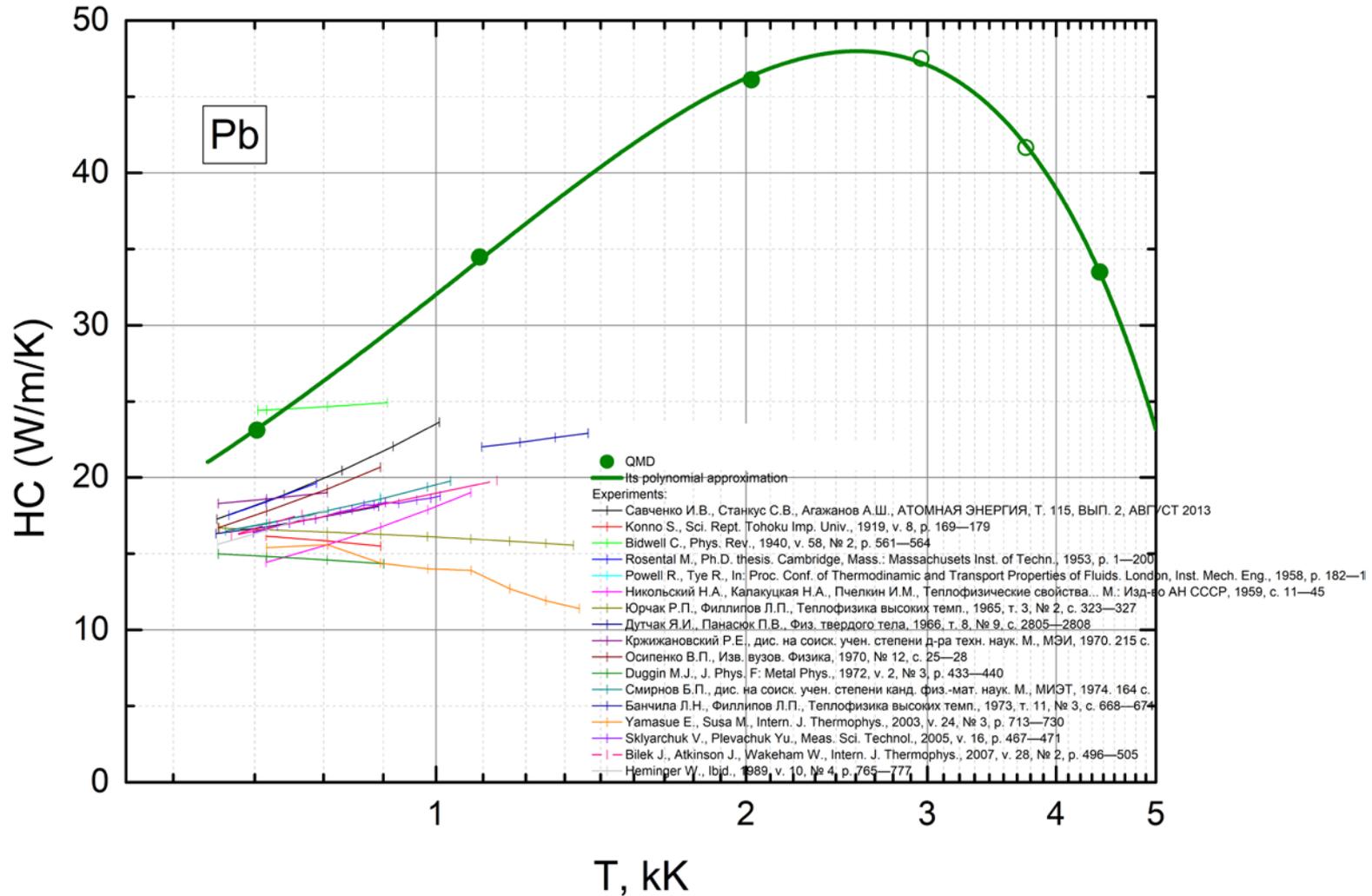
# Broadening influence to optics



# XC influence to the $\sigma_1$



# Pb: Heat Conductivity

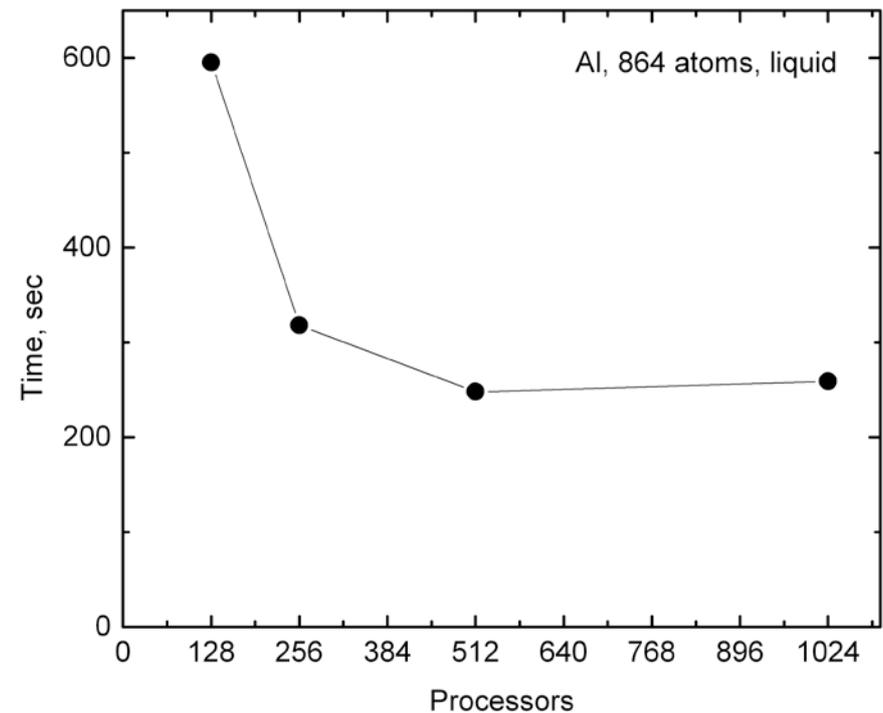
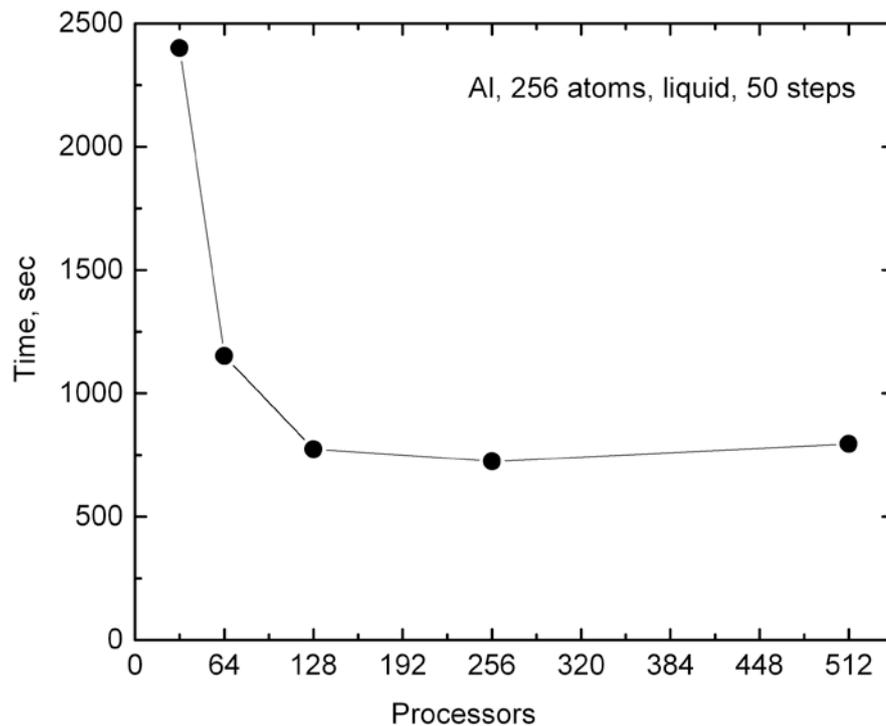




# VASP: масштабируемость метода квантовой молекулярной динамики

Алюминий, 256 атомов

Алюминий, 864 атома



- Результаты зависят от числа частиц, оптимально использовать количество ядер, примерно равное количеству частиц
- Насыщение наступает уже на нескольких сотнях процессорных ядер