

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАЛЛОВ С ПЕРЕГРЕТОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМОЙ

В.В. Стегайлов

Объединенный институт высоких температур РАН
Московский физико-технический институт (ГУ)

Описание электрон-ионной релаксации в конденсированной фазе реальных веществ с возбужденной электронной компонентой представляет собой в настоящее время актуальную теоретическую задачу, не имеющую общих стандартных методов решения в рамках методологии квантовой молекулярной динамики. Для анализа электрон-фононного взаимодействия в твердой фазе после импульсного энерговысвобождения в электронную подсистему использована конечно-температурная формулировка теории функционала электронной плотности (ТФП). Проведены исследования дисперсии фононов и изменения зонной структуры электронной подсистемы в двухтемпературной системе «холодная решетка – горячие электроны». Проведен анализ влияния температуры электронной подсистемы на устойчивость простых и d-металлов (Al, Au, Ni). Результаты свидетельствуют о существенном изменении распределения электронной плотности и эффективного межатомного потенциала в d-металлах при электронных температурах выше 2-3 эВ.