

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЛЮИДА ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Н. Д. Кондратюк^{1, 2, 3}, В. Г. Лукьянчук^{1, 2}, Г. А. Гляуделис^{1, 2},
И. М. Саитов², Н. М. Щелкачев⁴

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Россия

²Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

³НИУ «Высшая школа экономики», Москва, Россия

⁴Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Россия

Особый интерес для научного сообщества представляют динамические свойства флюида водорода при высоких давлениях и температурах, труднодоступные в эксперименте. В 2020 г. в работе [1] с использованием машинно-обученного межатомного потенциала была продемонстрирована возможность расчета коэффициента диффузии в плотном разогретом флюиде водорода. Затем в работе [2] в рамках теории функционала электронной плотности с учетом изотопических эффектов для H_2/D_2 было показано, что вблизи области фазового перехода флюид-флюид наблюдается существенное увеличение подвижности частиц. Обе упомянутые работы указывают на аномальный рост диффузии, однако причины этого феномена пока не до конца ясны. В настоящем исследовании [3] мы предлагаем объяснение этого аномального роста подвижности частиц. Для прогноза коэффициентов диффузии и сдвиговой вязкости (рис. 1) применяется классическая молекулярная динамика с машинно-обученным межатомным потенциалом DeepMD, разработанном на результатах квантово-механических расчетов в пакете VASP. Изучаются зависимости спектра колебаний, а также коэффициентов диффузии и сдвиговой вязкости от плотности водорода вдоль изотерм в диапазоне температур 600–1100 К.

Работа выполнена при поддержке Программы Министерства науки и высшего образования № 075-03-2025-662 от 17.01.2025. Работа частично поддержана в рамках научной программы Национального центра физики и математики.

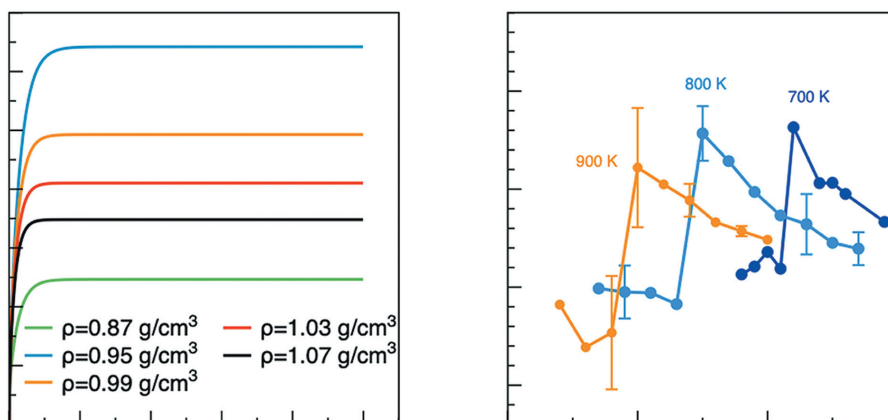


Рис. 1. Сходимость интегралов Грина–Кубо для различных плотностей при 800 К (слева) и зависимости вязкости от плотности вдоль разных изотерм (справа). Вязкость резко возрастает при тех же плотностях, что и коэффициенты диффузии, также указывая на возникновение фазового перехода при этих условиях

Литература

1. **Cheng, B.** Evidence for supercritical behaviour of high-pressure liquid hydrogen [Text] / B. Cheng, G. Mazzola, C. J. Pickard, and M. Ceriotti // *Nature*. – 2020. – Vol. 585, No. 7824. – P. 217–220.
2. **Van De Bund, S.** Isotope quantum effects in the metallization transition in liquid hydrogen [Text] / S. Van De Bund, H. Wiebe and G. J. Ackland // *Physical Review Letters*. – 2021. – Vol. 126, No. 22. – P. 225701.
3. **Gliaudelis, G.** Dynamical properties of hydrogen fluid at high pressures / G. Gliaudelis, V. Lukyanchuk, N. Chtchelkatchev, I. Saitov and N. Kondratyuk // *The Journal of Chemical Physics*. – 2025. – Vol. 162, No. 2.