

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ЯДЕР В ПЛОТНОМ РАЗОГРЕТОМ ВОДОРОДЕ

В. Г. Лукьянчук^{1, 2}, Н. Д. Кондратюк^{1, 2, 3}, И. М. Саитов^{1, 2, 3}

¹Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

²Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

³НИУ «Высшая школа экономики», Москва, Россия

В настоящее время накоплено значительное число работ, посвященных исследованию влияния учета квантовых ядерных эффектов на термодинамические свойства систем, включающих водород при высоких давлениях [1, 2]. Использование метода интегралов по траекториям в сочетании с теорией функционала плотности дает возможность эффективно рассчитывать соответствующие поправки [3].

В данной работе изучается влияние квантовых эффектов ядер на флюид водорода при диапазоне давлений 100–200 ГПа, в котором наблюдается существование метастабильных состояний (молекулярного непроводящего и проводящего) [4, 5]. Освоена методика проведения расчетов в рамках молекулярной динамики на интегралах по траекториям с помощью программных пакетов VASP, PIMD. В ходе исследования обнаружено существование метастабильных состояний во флюиде водорода. Этот результат служит однозначным указанием на то, что наблюдаемый переход является фазовым переходом первого рода.

Используя связку методов VASP+PIMD, были рассчитаны изотермы в диапазоне температур 700–1500К. Разработан и успешно применен метод моделирования метастабильных состояний для всего набора исследованных изотерм. На основе проведенных расчетов получена фазовая кривая и выполнена оценка метастабильных областей. О сохранении молекулярной фазы вдоль метастабильных ветвей свидетельствуют высокие значения первых пиков парной радиальной функции распределения. Дополнительно была получена оценка теплоты фазового перехода по скачку парной энтропии. Показано, что зависимость электропроводности от давления демонстрирует наличие метастабильных ветвей.

Работа выполнена при поддержке Программы Министерства науки и высшего образования № 075-03-2025-662 от 17.01.2025. Авторы выражают благодарность Г. Э. Норману и А. В. Ланкину за продуктивные обсуждения и фундаментальные вопросы к основаниям метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям.

Литература

1. **Cheng, B.** Evidence for supercritical behaviour of high-pressure liquid hydrogen [Text] / B. Cheng, G. Mazzola, C. J. Pickard, M. Ceriotti // *Nature*. – 2020. – Vol. 585. – P. 217–220.
 2. **Celliers, P. M.** Insulator-metal transition in dense fluid deuterium [Text] / P. M. Celliers, M. Millot, S. Brygoo, R. F. Smith, et al. // *Science*. – 2018. – Vol. 361. – P. 677–682.
 3. **Morales, M. A.** Nuclear quantum effects and nonlocal exchange-correlation functionals applied to liquid hydrogen at high pressure [Text] / M. A. Morales, J. M. McMahon, C. Pierleoni, D. M. Ceperley // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 110, No. 6. – P. 065702.
 4. **Zaghoo, M.** Evidence of a first-order phase transition to metallic hydrogen [Text] / M. Zaghoo, A. Salamat, I. F. Silvera // *Phys. Rev. B*. – 2016. – Vol. 93, No. 15. – P. 155128
 5. **Ohta, K.** Phase boundary of hot dense fluid hydrogen [Text] / K. Ohta, K. Ichimaru, M. Einaga, K. Hirose, et al. // *Sci. Rep.* – 2015. – Vol. 5. – P. 16560.
-