

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФЛЮИДА ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

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

¹МФТИ, Долгопрудный, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия,

³ВШЭ, Москва, Россия

*lukianchuk.vg@phystech.su

На сегодняшний день существует достаточно большое количество работ, в которых исследуется влияние учета квантовых эффектов ядер на термодинамические свойства систем, содержащих водород при высоких давлениях [1, 2]. Метод интегралов по траекториям совместно с теорией функционала плотности позволяет эффективно учитывать нелокальные свойства ядер [3].

В работе предлагается исследовать влияние данного эффекта на область существования метастабильных состояний (атомарного и молекулярного) флюида водорода при высоких давлениях (100–200 ГПа) [4, 5]. Освоена техника проведения расчетов в рамках метода молекулярной динамики на интегралах по траекториям с использованием программных пакетов VASP, PIMD. Обнаружены метастабильные состояния во флюиде водорода, существование которых является однозначным указанием на то, что наблюдаемый переход является фазовым переходом именно первого рода. Этот факт особенно важен для фазовых переходов с малой величиной скачка плотности.

В рамках метода VASP+PIMD рассчитаны изотермы для диапазона температур 700–1500 К. Разработан и успешно применён метод моделирования метастабильных состояний для всех исследуемых изотерм. Получена фазовая кривая и оценка на метастабильные области. О сохранении молекулярной фазы вдоль метастабильных ветвей свидетельствуют высокие значения высот первых пиков парной корреляционной функции. Получена оценка теплоты фазового перехода через скачок парной энтропии. Рассчитана зависимость электропроводности от давления, на которой явно видны метастабильные ветви.

Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение № 075-15-2024-200 от 06.02.2024).

-
1. Cheng B., Mazzola G., Pickard C. J., et al. // Nature. 2020. V. 585. P. 217.
 2. Celliers P. M., Millot M., Brygoo S., et al. // Science. 2018. V. 361. P. 677.
 3. Morales M. A., McMahon J. M., Pierleoni C., et al. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 065702.
 4. Zaghoo M., Salamat A., Silvera I. F. // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. P. 155128.
 5. Ohta K., et al. // Sci. Rep. 2015. V. 5. P. 16560.