

# МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО И АТОМАРНОГО ЖИДКОГО ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

*Лукьянчук В.Г.,<sup>\*1,2</sup> Кондратьев Н.Д.,<sup>1,2,3</sup> Саитов И.М.<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>МФТИ, Долгопрудный, Россия, <sup>2</sup>ОИВТ РАН, Москва, Россия,

<sup>3</sup>ВШЭ, Москва, Россия

\*lukianchuk.vg@phystech.edu

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 рассчитывать данные поправки [3].

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

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. Данная работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02–2021–1316 от 30.09.2021).

- 
1. Deemyad S., Silvera I.F. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. No. 15. P. 155701.
  2. Celliers P.M., Millot M., Brygoo S., et al. // Science. 2018. V. 361. No. 6403. P. 677–682.
  3. Morales M.A., McMahon J.M., Pierleoni C., et al. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. No. 6. P. 065702.