**Кинетика плазменного фазового перехода в экспериментах с плотным флюидом молекулярного водорода: анализ основанный на первопринципной молекулярной динамике**

***Федоров И.Д.1,2,3, Стегайлов В.В.1,2,3***

*Аспирант, 3 год обучения*

*1Московский физико-технический институт, Москва, Россия*

*2Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

*3Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

*E-mail:ilya.d.fedorov@phystech.edu*

Переход плотного нагретого флюидного водорода из состояния изолятора в проводящее состояние при давлениях порядка 20-400 ГПа и температурах 500-5000 К является предметом активных научных исследований в течение последних нескольких десятилетий. Однако различные экспериментальные и теоретические методы не дают согласованных результатов. В данной работе предлагается новый механизм экситонной диссоциации для перехода флюида H2 из молекулярного состояния в плазму. Этот механизм способен дать количественное описание множества экспериментальных результатов, а также устранить расхождения между наблюдениями различных групп.

Количественные результаты, подтверждающие предложенный механизм, основаны на первопринципной молекулярной динамике, основанной на методе ограниченной открытой оболочки Кона-Шэма (ROKS). В работе используется ROKS для моделирования плотного водорода после теплового возбуждения в первое синглетное возбужденное состояние. Метод локализации Ваннье позволил проанализировать динамику экситонов в этой системе. Модель ROKS показывает, что ключевой механизм перехода связан с диссоциацией электрон-дырочных пар, что позволяет объяснить несколько стадий перехода флюида H2 из молекулярного состояния в плазму.

**Литература**

1. Fedorov I. D., Orekhov N. D., Stegailov V. V. Nonadiabatic effects and excitonlike states during the insulator-to-metal transition in warm dense hydrogen //Physical Review B. – 2020. – Т. 101. – №. 10. – С. 100101.

2. Федоров И. Д., Стегайлов В. В. Диссоциация экситонных состояний в разогретом плотном водороде //Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2021. – Т. 113. – №. 6. – С. 392-398.

3. Fedorov I. D., Stegailov V. V. Exciton Nature of Plasma Phase Transition in Warm Dense Fluid Hydrogen: ROKS Simulation //ChemPhysChem. – 2022. – С. e202200730.