Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 1, с. 38 – 45

О плазменном фазовом переходе в многократно ионизованном разогретом плотном цезии

А. А. Филаткин[+1)], *И. М. Саитов*[+*], *Г. Э. Норман*[+]

[+]*Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия*

[*]*University of L'Aquila, Coppito (AQ), 67100 Via Giovanni Falcone, Italy*

Поступила в редакцию 6 июня 2025 г.
После переработки 24 мая 2026 г.
Принята к публикации 24 мая 2026 г.

Проведено моделирование разогретого плотного цезия методом квантовой молекулярной динамики. Обнаружены свидетельства существования фазового перехода первого рода. Область возникновения этого перехода оказалась изолированной от известных фазовых переходов в цезии. В отличие от них, для нового перехода найдено, что в некотором диапазоне удельного объема метастабильные состояния на изотерме одной фазы перекрываются с равновесными состояниями на изотерме второй фазы, как это уже предсказывалось для плазменного фазового перехода. Две фазы близки друг к другу по давлению, но резко различаются по проводимости. Оценены параметры верхней и нижней критических точек предполагаемого перехода.

DOI: 10.7868/S3034576626070067

1. Введение. Развитие средств генерации и диагностики разогретого плотного вещества (*warm dense matter*, WDM) позволило перейти к экспериментальным исследованиям фазового перехода флюид-флюид в WDM [1–9]. Из последних теоретических и вычислительных работ укажем на [10–22], рассмотревших различные аспекты этого перехода.

Усилия сконцентрированы на переходе флюид-флюид в разогретом плотном водороде [1–3, 5, 6, 11–13, 15, 19,–25]. В [21] описаны признаки, которые позволяют классифицировать данный переход как плазменный фазовый переход (ПФП). Сопутствующие переходу диссоциация молекул и некоторые другие факторы [21] затемняют картину, что побудило авторов [11] отвергнуть предположение о плазменном характере фазового перехода флюид-флюид в водороде.

Для понимания природы перехода были бы полезны результаты исследований и других веществ, помимо водорода. Однако имеющиеся данные по WDM ряда химических элементов, см. [8, 14, 21, 22, 26–28] и содержащиеся там ссылки, весьма отрывочны, опираются на свойства конкретных элементов и не позволяют добавить ясности в признаки, отличающие ПФП.

В настоящей работе рассматривается разогретый плотный цезий в рамках квантового молекулярного моделирования на основе теории функционала электронной плотности (ТФП). В силу малости первой энергии ионизации цезий уже использовался как модельное вещество для исследования плотной неидеальной плазмы [29–33]. В отличие от тех работ, данная сфокусирована на области многократной ионизации в WDM, как и в [26], где уже было получено указание на фазовый переход. Нахождение перехода в таких условиях практически не оставляло бы сомнений в его плазменной природе.

Параметры моделирования изложены в разделе 2. В разделе 3 представлены результаты расчетов изотерм давления. Раздел 4 посвящен обсуждению перекрытия ветвей изотерм, характерного для ПФП. В разделе 5 показано, что при найденном фазовом переходе происходит резкое изменение проводимости плазмы цезия.

2. Методика. Динамика системы воспроизводится интегрированием уравнений движения Ньютона с шагом по времени 2 фс. Действующие на ядра силы определяются по теореме Гельмана–Фейнмана для энергии электронной подсистемы.

Обменно-корреляционные эффекты учтены функционалом Perdew, Burke, Ernzerhof [34], построенном в приближении обобщенных градиентов. Данный функционал реализован во многих программных пакетах и воспроизводит параметр объемно-центрированной решетки цезия при атмосферном давлении с точностью до 10^{-2} Å. Электрон-

1)e-mail: filatkin.aa@phystech.su

ионное взаимодействие описывается посредством потенциала присоединенных спроектированных волн [35] с 9-ю валентными электронами.

Элементарная ячейка состоит из 64 атомов цезия. Решение уравнений Кона–Шэма находится в виде суперпозиции плоских волн с размером базиса 308 эВ и 600 эВ для температур 6000 K и более. Первая зона Бриллюэна представляется гамма-центрированной k-сеткой размера $2 \times 2 \times 2$. Указанные параметры обеспечивают сходимость энергии на уровне менее 10 мэВ/атом. Используется реализация описанного алгоритма в пакете программ VASP [36–38].

В качестве начальной конфигурации рассмотрены простая кубическая, объемно-центрированная, гранецентрированная, гексагональная плотно упакованная структуры, а также структуры, полученные случайным нормально распределенным смещением атомов относительно простой кубической структуры. Система находится в периодических граничных условиях. Достижение равновесия фиксируется по появлению временного участка размером не менее 0.5 пс, на котором достигнуто тепловое равновесие одновременно со стабилизацией давления. Участок выхода на первое равновесие при анализе опускается.

Система моделируется в NVT-ансамбле, релаксация и поддержание температуры происходит под действием термостата Нозе–Хувера. Время моделирования составляет от 3 до 16 пс. Макроскопические параметры системы получаются усреднением флуктуирующих величин по равновесным конфигурациям.

Динамическая электропроводность вычисляется по формуле Кубо-Гринвуда с помощью программы KG4VASP [39] усреднением по 3–5 равновесным независимым конфигурациям, что оказывается достаточным для определения среднего значения статической проводимости с отклонением не более 10 % от ее величины.

Область исследования включает в себя диапазон плотностей 2–35 г/см^3 на изотермах 500–20000 K. Использовалась переменная сетка "сканирования": сначала были подробно исследованы изотермы 500, 2000 и 3000 K, затем просчитаны остальные лишь в более узкой области с наличием обсуждаемых далее особенностей.

3. Изотермы давления. На каждой из нескольких изотерм в промежутке 1000–20000 K обнаружен диапазон плотностей, при которых наблюдается два удовлетворяющих критерию равновесия состояния. Вдоль молекулярно-динамической траектории, порождаемой простой кубической структурой, среднее давление сначала остается на значении p_1, затем срывается к значению $p_2 < p_1$; как правило, $p_1 - p_2 \sim 10^{-2} p_1$ (см. вставку на рис. 1a). Одной плотности соответствует два давления на изотерме. Обратных скачков давления с p_2 на p_1 за время расчета не наблюдалось. Кроме того, дополнительное использование машинного обучения "на лету", реализованного в пакете программ VASP [40], показывает стабильность состояния с давлением p_2 на длинных траекториях (рис. 1a). Аналогичная многозначность давления, не присущая изотермам Ван-дер-Ваальса, описана химической моделью плазмы [21, 41].

Падение давления в NVT ансамбле соответствует малому скачкообразному росту плотности в NpT ансамбле. Это прямое указание на фазовый переход первого рода.

Типичный вид парной корреляционной функции (ПКФ) системы в состояниях 1 и 2 показан на рис. 1b. Оба состояния представляют собой флюидные структуры. В состоянии 2 пики становятся более узкими, начинается расщепление второго и последующего пиков. Положение первого пика при этом практически не изменяется, а его высота увеличивается.

ПКФ служит инструментом для определения фазы вне диапазона плотностей с двузначностью давления. Первое координационное число, рассчитанное из ПКФ вдоль изотерм, резко снижается после скачка давления (см. пример на рис. 2), на основании чего установлено, что состоянию 1 повышенного давления отвечают низкие плотности, а состоянию 2 пониженного давления – высокие плотности. Следовательно, как показано на рис. 3a, уравнение состояния цезия вдоль изотерм можно представить в виде двух перекрывающихся близко лежащих ветвей.

Слабая зависимость давления от температуры на рис. 3a объясняется тем, что основной вклад в давление вносит электронная компонента. Цезий в таких условиях — плазма с сильно вырожденными электронами, $\frac{\varepsilon_F}{kT} > 10$ во всем диапазоне исследованных температур, что делает экспоненциальный член в распределении Ферми–Дирака практически не изменяющимся с температурой. Этот факт приводит к существенному перекрытию по плотности самих участков перекрытия на различных изотермах.

Возникновение состояний повышенного давления обнаружено только при рассмотрении в качестве начальной конфигурации простой кубической структуры. При задании случайного смещения атомов от этой структуры время наблюдении такого состояния снижается с увеличением амплитуды смещения. Данный факт объясняется возможностью попадания в

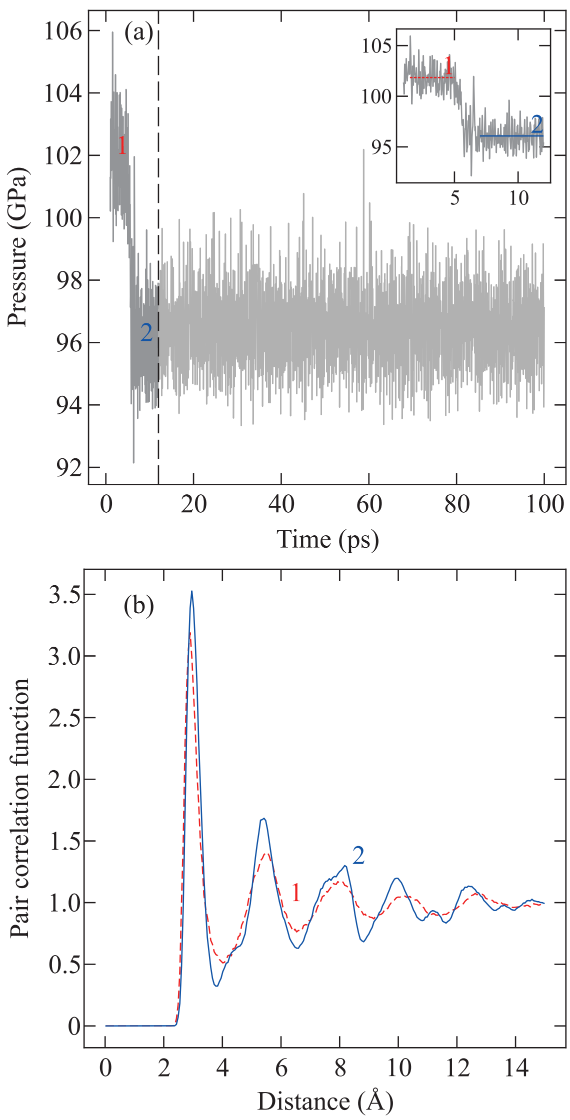

Рис. 1. (Цветной онлайн) Система атомов цезия при $T = 4000$ К, $\rho = 11$ г/см^3: (a) – молекулярно-динамическая траектория давления. Правее вертикальной пунктирной линии показана часть траектории, полученная методом машинного обучения. Участок траектории левее вертикальной пунктирной линии вынесен отдельно на вставке; (b) – парная корреляционная функция. Пунктирная линия *1* – состояние повышенного давления; сплошная линия *2* – состояние пониженного давления

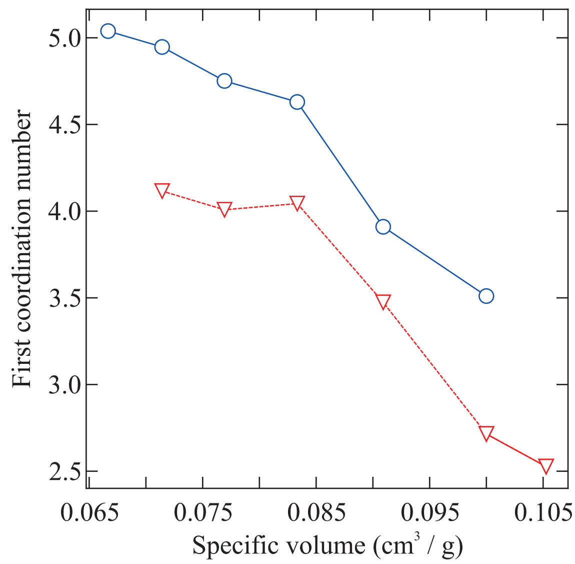

Рис. 2. (Цветной онлайн) Первое координационное число цезия на изотерме $T = 3000$ К. Треугольные точки – фаза 1 повышенного давления, круглые точки – фаза 2 пониженного давления. Для наглядности через конечные состояния (p_2) проведены сплошные линии, через промежуточные (p_1) — пунктирные

локальный минимум на поверхности потенциальной энергии, зависящей от выбора начальной точки на натянутой на поверхность траектории системы.

Многозначность давления демонстрирует существование метастабильных состояний. Продление траектории моделирования с помощью методов машинного обучения показывает стабильность фазы 2 на времена до 500 пс, метастабильные состояния фазы 1 лежат на ветви повышенного давления. При высоких плотностях время жизни метастабильного состояния сильно сокращается, происходит преждевременный срыв в равновесное состояние под действием термостата. Участок перекрытия ветвей простирается далее в область меньшего удельного объема, недоступную методу моделирования в данной работе. Следовательно, спинодаль на рис. 3a не достигнута.

Таким образом, схематический вид изотермы разогретого плотного цезия соотносится с видом изотермы ПФП [41], представленной на рис. 3b. В самом деле, удалось получить стабильные участки AB, DE, а также часть BC метастабильного участка ветви повышенного давления, оканчивающегося точкой спинодали C′. При движении из области низких давлений AB по достижении одного из состояний на участке BC происходит переход на участок DE, сопровождающийся наблюдаемым в ходе молекулярной динамики скачком давления. Линия сосуществования фаз BD представляет собой узкую “полочку” между ветвями вблизи правой (большей по удельному объему на рис. 3a) границы ветви пониженного давления.

Метастабильные состояния на ветви пониженного давления (участок DH на рис. 3b) не получены. Дело в том, что термостат является возмущением в системе, взаимодействие с которым на низких плотностях приводит к быстрому выходу на равновесие с потерей промежуточного состояния. Отключение термостата

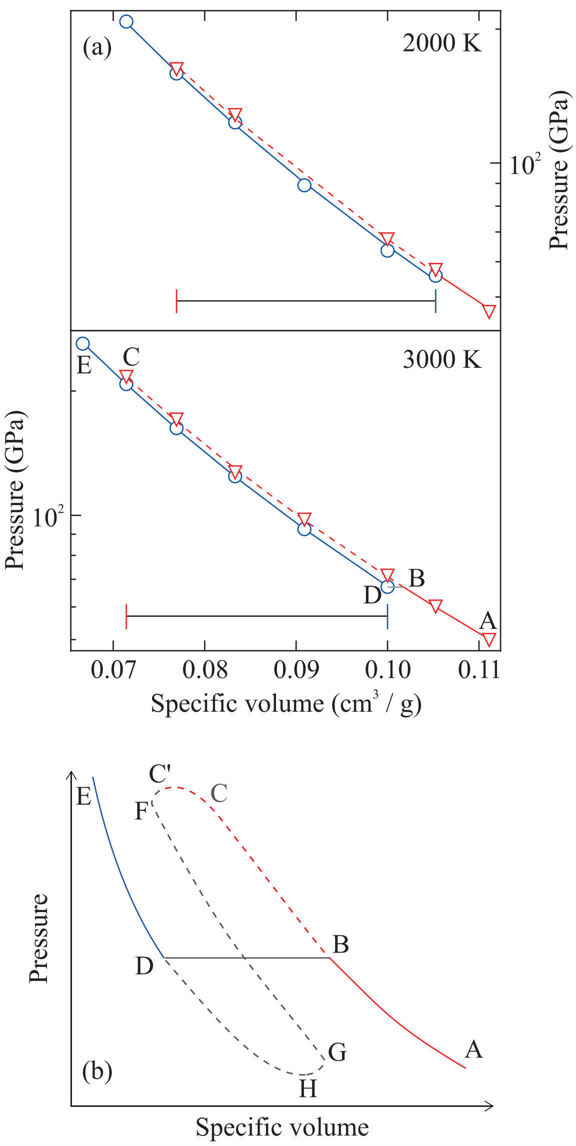

Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Уравнение состояния разогретого плотного цезия: участки двух изотерм давления, содержащие область перекрытия ветвей двух фаз. Обозначения соответствуют рис. 2. AB, DE – равновесные участки, BC – метастабильный участок, проведена сплошная линия равновесия фаз BD. Под изотермами для наглядности изображены линии с засечками, выделяющие диапазон перекрытия ветвей; (b) – Схема изотерм плазменного фазового перехода. Обозначения как на рис. 3a. Дополнительно мелким пунктиром показаны не полученные в работе метастабильные участки DH и FG, точками — неравновесные (лабильные) участки C′F и HG

переводит систему в NVE ансамбль, температура начинает изменяться, происходит срыв уже с изотермы, хотя предпринимаются попытки избежать такой проблемы кратковременным включением термостата [23], что в данной работе не проводилось.

Предполагаемая химическими моделями изолированная область метастабильных состояний FG на рис. 3b в случае разогретого плотного цезия крайне узкая и вытянутая по удельному объему, начальные условия для наблюдения таких состояний в работе подобрать не удалось.

4. Перекрытие ветвей изотерм. На рисунке 4 нанесены промежутки перекрытия ветви повышенного давления, содержащей метастабильные состояния, с ветвью пониженного давления для всех рассчитанных в работе изотерм (как линии с засечками на рис. 3a). Промежуток сдвигается к высоким давлениям при повышении температуры, уменьшаясь в размерах. Использованный обменно-корреляционный функционал теряет точность при плотностях более 18 г/см^3, поскольку атомные остовы начинают перекрываться, происходит многократная ионизация вплоть до внутренних (например, 4d) оболочек. Тем не менее, ожидается достижение предельной точки перехода, качественно показанной кружком в верхней части рис. 4, при оценочных температуре 22000 K, плотности 35 г/см^3 и давлении 3.65 ТПа, за которой появление метастабильных состояний не зафиксировано.

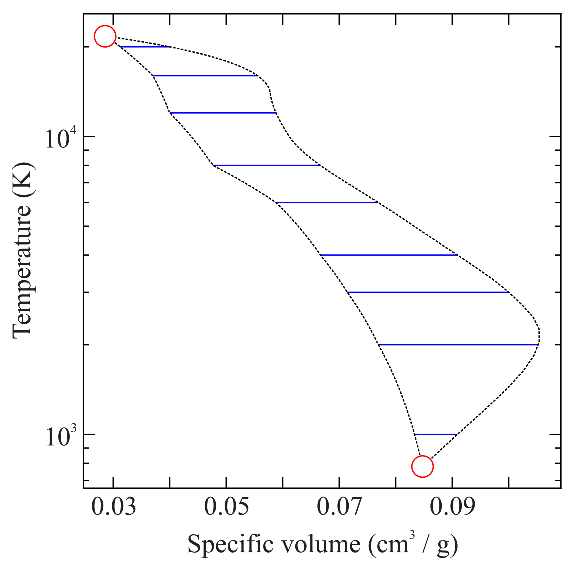

Рис. 4. (Цветной онлайн) Промежутки перекрытия метастабильного участка ветви фазы повышенного давления с ветвью фазы пониженного давления на всех исследованных изотермах. Для наглядности пунктиром проведены линии, ограничивающие промежутки. Кружками обозначены предполагаемые критические точки ПФП

При уменьшении температуры ниже 2000 K также происходит сокращение длины промежутка перекрытия ветвей. На изотерме 1000 K ширина промежутка уменьшается в более чем 2 раза. На изотерме 500 K в широком диапазоне плотностей 2–18 г/см^3 метастабильных состояний не обнаружено. Такая особенность позволяет допустить существование второй предельной точки с температурой, плотностью и давлением около 800 K, 11.8 г/см^3 и 0.11 ТПа соответственно.

Правая (наибольшая по объему) граница промежутка перекрытия ветвей является точкой линии фазового равновесия (см. участок BD на рис. 3b, являющийся очень узким на рис. 3a), соответственно, двухфазная область стягивается в те же точки – критические точки.

Авторам неизвестны сообщения в литературе о наличии двух критических точек у фазового перехода в системе из атомов одного химического элемента.

Заметим, что во флюиде водорода участок перекрытия ветвей также смещается с ростом температуры "вправо вниз", что выражается в понижении давления при движении вдоль бинодали к критической точке, в противоположность модели Ван-дер-Ваальса [21, 23].

В координатах давление–объем на рис. 5 область из рис. 4 превращается в сильно вытянутую и узкую. Кроме того, эта область существования ПФП оказывается изолированной от других основных фазовых переходов в цезии, а также от предсказанного ранее положения линии фазового равновесия ПФП [26].

Экспериментальные исследования вблизи области ПФП пока не проводились. Эксперименты выполнены для жидкого и газообразного цезия более низких давлений, с использованием алмазных наковален в случае невысоких температур [32] и ударноволновых методов для температур в несколько тысяч Кельвин [29]. Отдельно с помощью пьезометра построены линии плавления [42] и насыщения [30]. Авторы работ [31, 33] приблизились к диапазону параметров данной работы. В [26] найдена лишь одна критическая точка, а перекрытие ветвей изотерм и метастабильные состояния не рассматривались.

5. Изотермы удельной электропроводности. Перекрывающиеся ветви изотерм возникают в системах, где играет роль ионизация либо диссоциация (см. [21, 41]), в связи с чем полезно определить проводимость цезия на обеих ветвях изотерм.

Статическая проводимость (удельная электропроводность) вычисляется аппроксимацией динамической электропроводности $\sigma(\omega)$ в длинноволновую область $\omega \to 0$. Ограниченность объема при моделировании реальных систем приводит к необходимости аппроксимации δ-функции, входящей в формулу Кубо-Гринвуда. В работе δ-функция приближается функцией Гаусса. В таком случае дополнительным параметром, влияющим на результат вычислений, становится эффективная ширина "колокола" Δ (см. подробнее в [43, 44]). Оптимальным выбрано Δ, обеспечивающее статическую проводимость, близкую к максимальной.

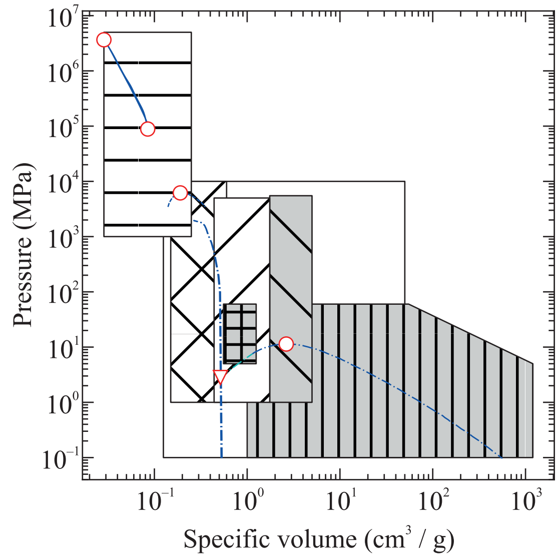

Рис. 5. (Цветной онлайн) Взаимное расположение некоторых исследованных областей фазовой диаграммы цезия. Закрашенные области – эксперимент: вертикальная штриховка – совокупность ранних работ [29]; квадратная плитка – [30]; штриховка с наклоном влево (\) – [32]. Незакрашенные области – моделирование: ромбическая плитка – [31]; штриховка с наклоном вправо (/) – [33]; без штриховки – первое сообщение о ПФП [26]; горизонтальная штриховка – данная работа. Штрих-пунктирные линии – сливающиеся в логарифмическом масштабе кривые плавления и кристаллизации по экспериментальным данным [42], а также продленная до гипотетической тройной точки (треугольник) кривая насыщения [30]; пунктирная линия – кривая фазового равновесия ПФП согласно [26]; сплошная толстая линия – область на рис. 4. Кружками отмечены соответствующие критические точки переходов

Во всей области двузначности давлений установлена и двузначность проводимости (пример на рис. 6). Разница проводимостей увеличивается при движении к точке спинодали (C$'$ на рис. 3b) на ветви повышенного давления. Срыв с ветви повышенного давления на ветвь пониженного давления сопровождается ростом проводимости до трех раз, в противовес слабому скачку плотности. Проводимость состояния повышенного давления меньше в силу флюидной структуры вещества согласно ПКФ (см. аналогию со

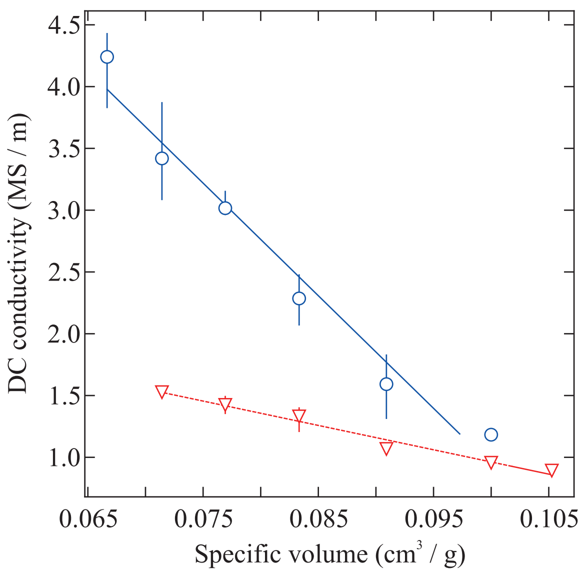

Рис. 6. (Цветной онлайн) Проводимость цезия на изотерме 3000 К. Обозначения как на рис. 3а. Погрешности характеризуют разброс значений по конфигурациям равновесного состояния

снижением энергии термической ионизации доноров с их концентрацией в полупроводниках [45]).

6. Заключение. Методом квантовой молекулярной динамики рассчитано уравнение состояния, а также ПКФ и проводимость в диапазоне температур 500–20000 К и давлений от ~ 1 ГПа до нескольких ТПа. Ключевыми являются следующие результаты.

1. Обнаружены свидетельства существования нового фазового перехода первого рода. По виду парных корреляционных функций выделены две фазы. Фазы различаются по плотности и проводимости.

2. Получены метастабильные состояния фазы повышенного давления. Найдено, что в некотором диапазоне удельного объема метастабильные состояния на изотерме одной фазы перекрываются с равновесными состояниями на изотерме второй фазы. Этот эффект невозможен для Ван-дер-Ваальсовых систем, но предсказывается для плазменного фазового перехода.

3. Установлено, что проводимости двух фаз различаются вплоть до нескольких раз, в то время как плотности двух фаз близки.

4. Найдена область существования нового перехода. Она оказалась изолированной от известных фазовых переходов в цезии, т.е. имеет верхнюю и нижнюю критические точки. Параметры верхней оцениваются как: температура 22000 К, плотность 35 г/см^3 и давление 3.65 ТПа, нижней – как: 800 К, 11.8 г/см^3 и 0.11 ТПа.

Авторы признательны МСЦ НИЦ "Курчатовский институт" [46] и суперкомпьютерному центру ОИВТ РАН [47, 48] за предоставление вычислительных ресурсов.

Финансирование работы. Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 3 "Газодинамика и физика взрыва") (А. А. Филаткин и Г. Э. Норман), а также при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание # 075-00270-26-00).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. V. E. Fortov, R. I. Ilkaev, V. A. Arinin, V. V. Burtzev, V. A. Golubev, I. L. Iosilevskiy, V. V. Khrustalev, A. L. Mikhailov, M. A. Mochalov, V. Y. Ternovoi, and M. V. Zhernokletov, "Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropical Compression at Megabar Pressures", Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).
2. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, A. Becker, R. W. Lemke, K. R. Cochrane, M. E. Savage, D. E. Bliss, T. R. Mattsson, and R. Redmer, "Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium", Science **348**, 1455 (2015).
3. M. Zaghoo, A. Salamat, and I. F. Silvera, "Evidence of a first-order phase transition to metallic hydrogen", Phys. Rev. B **93**, 155128 (2016).
4. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, В. Е. Фортов и др., "Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы гелия при постоянной конечной температуре 21000 K при давлениях до 600 ГПа", ЖЭТФ **163**, 439 (2023) [M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, V. E. Fortov et al. (Collaboration), "Quasi-Isentropic Compression ofa Nonideal Helium Plasma at a Constant Final Temperature of 21000 K and Pressures up to 600 GPa JETP **136**, 389 (2023)].
5. P. M. Celliers, M. Millot, S. Brygoo, R. S. McWilliams, D. E. Fratanduono, J. R. Rygg, A. F. Goncharov, P. Loubeyre, J. H. Eggert, J. L. Peterson, N. B. Meezan, S. Le Pape, G. W. Collins, R. Jeanloz, and R. J. Hemley, "Insulator-metal transition in dense fluid deuterium", Science **361**, 677 (2018).
6. S. Jiang, N. Holtgrewe, Z. M. Geballe, S. S. Lobanov, M. F. Mahmood, R. S. McWilliams, and A. F. Goncharov, "A Spectroscopic Study of the Insulator-Metal Transition in Liquid Hydrogen and Deuterium", Adv. Sci. **7**, 1901668 (2020).
7. A. Cadien, Q. Y. Hu, Y. Meng, Y. Q. Cheng, M. W. Chen, J. F. Shu, H. K. Mao, H. W. Sheng, "First-Order Liquid-Liquid Phase Transition in Cerium", Phys. Rev. Lett. **110**, 125503 (2013).
8. H. Poole, M. K. Ginnane, M. Millot, H. M. Bellenbaum, G. W. Collins, S. X. Hu, D. Polsin, R. Saha, J. Topp-Mugglestone, T. G. White, D. A. Chapman, J. R. Rygg,

S. P. Regan, and G. Gregori, "Multimessenger measurements of the static structure of shock-compressed liquid silicon at 100 GPa", Phys. Rev. Res. **6**, 023144 (2024).

9. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, С. В. Ерунов, А. О. Бликов, В. А. Огородников, С. Е. Елфимов, В. А. Аринин, В. А. Комраков, М. И. Лихутов, И. П. Максимкин, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, П. Р. Левашов, Д. Г. Минаков, М. А. Парамонов, "Свойства криптона при ударно-волновом и квазиизэнтропическом сжатиях в области давлений до 2700 ГПа", Письма в ЖЭТФ **119**, 854 (2024) [M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, S. V. Erunov, A. O. Blikov, V. A. Ogorodnikov, S. E. Elfimov, V. A. Arinin, V. A. Komrakov, M. I. Likhutov, I. P. Maksimkin, V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, P. R. Levashov, D. V. Minakov, and M. A. Paramonov, "Properties of Shock and Quasi-Isentropically Compressed Krypton in the Pressure Range of up to 2700 GPa", JETP Lett. **119885** (2024)].
10. А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, А. В. Филиппов, "Термоэлектрофизические свойства плазмы при давлениях мегабарного диапазона", Письма в ЖЭТФ **104**, 708 (2016) [A. N. Starostin, V. K. Gryaznov, and A. V. Filippov, "Thermoelectric properties of a plasma at megabar pressures", JETP Lett. **104**, 696 (2016)].
11. M. Bonitz, J. Vorberger, M. Bethkenhagen et al. (Collaboration), "Toward first principles-based simulations of dense hydrogen", Phys. Plasmas **31**, 110501 (2024).
12. T. Bischoff, B. Jäckl, and M. Rupp, "Hydrogen under Pressure as a Benchmark for Machine-Learning Interatomic Potentials", arXiv: 2409.13390.
13. G. Tenti, K. Nakano, A. Tirelli, S. Sorella, and M. Casula, "Principal deuterium Hugoniot via quantum Monte Carlo and δ-learning", Phys. Rev. B **110**, L041107 (2024).
14. M. W. C. Dharma-wardana, D. D. Klug, H. Poole, and G. Gregori, "Ionic structure, liquid-liquid phase transitions, x-ray diffraction, and x-ray Thomson scattering in shock-compressed liquid silicon in the 100–200 GPa regime", Phys. Rev. E **111**, 015205 (2025).
15. N. R. Fried, T. J. Longo, and M. A. Anisimov, "Thermodynamic modeling of fluid polyamorphism in hydrogen at extreme conditions", J. Chem. Phys. **157**, 101101 (2022).
16. T. J. Longo, S. V. Buldyrev, M. A. Anisimov, and F. Caupin, "Interfacial Properties of Fluids Exhibiting Liquid Polyamorphism and Water-Like Anomalies", J. Phys. Chem. B **127**, 3079 (2023).
17. S. V. Buldyrev, T. J. Longo, F. Caupin, and M. A. Anisimov, "Monte Carlo simulations of the blinkingcheckers model for polyamorphic fluids", Mol. Phys. **122**, e2371555 (2024).
18. S. V. Buldyrev, "Hamiltonian limited valence model for liquid polyamorphism", Condens. Matter Phys. **27**, 23601 (2024).
19. L. Lue, C. G. Pruteanu, and G. J. Ackland, "The reentrant transition from the molecular to atomic phases of dense fluids: The case of hydrogen", J. Chem. Phys. **160**, 194502 (2024).
20. A. Bergermann, L. Kleindienst, and R. Redmer, "Nonmetal-to-metal transition in liquid hydrogen using density functional theory and the Heyd–Scuseria–Ernzerhof exchange-correlation functional", J. Chem. Phys. **161**, 234303 (2024).
21. Г. Э. Норман, И. М. Саитов, "Плазменный фазовый переход", УФН **191**, 1153 (2021) [G. E. Norman and I. M. Saitov, "Plasma phase transition", Phys.-Uspekhi **64**, 1094 (2021)].
22. J. Vorberger, F. Graziani, D. Riley et al. (Collaboration), "Roadmap for warm dense matter physics", arXiv:2505.02494.
23. G. E. Norman, I. M. Saitov, and R. A. Sartan, "Metastable molecular fluid hydrogen at high pressures", Contrib. Plasm. Phys. **59**, e201800173 (2019).
24. M. Istas, S. Jensen, Y. Yang, M. Holzmann, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, "Liquid-liquid phase transition of hydrogen and its critical point: Analysis from ab initio simulation and a machinelearned potential", Phys. Rev. E **111**, 045307 (2025).
25. G. Tenti, B. Jäckl, K. Nakano, M. Rupp, and M Casula, "Hydrogen liquid-liquid transition from first principles and machine learning", Phys. Rev. B **112**, 104208 (2025).
26. V. S. Vorob'ev, A. S. Grushin, and V. G. Novikov, "Investigation of the phase transitions in cesium by the average atom model", Keldysh Institute Preprints **100**, 1 (2016).
27. M. A. Paramonov, D. V. Minakov, V. B. Fokin, D. V. Knyazev, G. S. Demyanov, and P. R. Levashov, "*Ab initio* inspection of thermophysical experiments for zirconium near melting", J. Appl. Phys. **132**, 065102 (2022).
28. M. A. Paramonov, D. V. Minakov, A. V. Dorovatovsky, M. A. Sheindlin, V. B. Fokin, G. S. Demyanov, and P. R. Levashov, "High-temperature thermophysical properties of liquid zirconium: Quantum molecular dynamics and pulse heating experiment", Phys. Rev. B **110**, 184204 (2024).
29. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Н. И. Кузнецова, В. И. Кучеренко, Г. Б. Лаппо, Б. Н. Ломакин, Г. А. Павлов, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора* (Атомиздат, М., 1980) [V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, U. G. Krasnikov, N. I. Kuznetsova, V. I. Kucherenko,

G. B. Lappo, B. N. Lomakin, G. A. Pavlov, E. E. Son, and V. E. Fortov, *Teplofizicheskie svojstva rabochih sred gazofaznogo yadernogo reaktora* (Atomizdat, Moscow, 1980] [in Russian].

30. V. Kozhevnikov, "Equation of state and sound speed of cesium at temperatures up to 2200 K and pressures up to 60 MPa", ZhETF **97**, 558 (1990).
31. S. Falconi and G. J. Ackland, "*Ab initio* simulations in liquid caesium at high pressure and temperature", Phys. Rev. B **73**, 184204 (2006).
32. F. Decremps, S. Ayrinhac, M. Gauthier, D. Antonangeli, M. Morand, Y. Garino, and P. Parisiades, "Sound velocity and equation of state in liquid cesium at high pressure and high temperature", Phys. Rev. B **98**, 184103 (2018).
33. W. Lv, L. Yan, Z. Wang, D. Zhang, X. Li, H. Wang, Y. Hu, and B. Yue, "Development of modified embedded-atom model and molecular dynamics simulation of cesium", Comput. Mater. Sci. **194**, 110451 (2021).
34. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
35. G. Kresse and D. Joubert, "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method", Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
36. G. Kresse and J. Hafner, "*Ab initio* molecular dynamics for liquid metals", Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
37. G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes forab initiototal-energy calculations using a plane-wave basis set", Phys. Rev. B **54**, 11169 11186 (1996).
38. G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficiency of abinitio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set", Comput. Mater. Sci. **6**, 15 (1996).
39. L. Calderín, V. Karasiev, and S. Trickey, "Kubo-Greenwood electrical conductivity formulation and implementation for projector augmented wave datasets", Comput. Phys. Commun. **221**, 118 (2017).
40. R. Jinnouchi, F. Karsai, and G. Kresse, "On-thefly machine learning force field generation: Application to melting points", Phys. Rev. B **100**, 014105 (2019).
41. Л. М. Биберман, Г. Э. Норман, "О возможности существования переохлажденной плотной плазмы", ТВТ **7**, 822 (1969) [L. M. Biberman and G. E. Norman, "O vozmozhnosti sushchestvovaniya pereohlazhdennoj plotnoj plazmy", TVT **7**, 822 (1969)].
42. С. Стишов, "Термодинамика плавления простых веществ", УФН **114**, 3 (1974) [S. M. Stishov, "The thermodynamics of melting of simple substances", Phys.-Uspekhi **17**, 625 (1975)].
43. Г. Норман, И. Саитов, В. Стегайлов, "Расчет коэффициента отражения ударно-сжатого ксенона из первых принципов", ЖЭТФ **147**, 1032 (2015) [G. E. Norman, I. M. Saitov, and V. V. Stegailov, "First-principles calculation of the reflectance of shock-compressed xenon", JETP **120**, 894 (2015)].
44. G. Norman, I. Saitov, V. Stegailov, and P. Zhilyaev, "*Ab initio* calculation of shocked xenon reflectivity", Phys.l Rev. E **91**, 023105 (2015).
45. N. A. Poklonski, S. A. Vyrko, I. I. Anikeev, and A. G. Zabrodskii, "Maximum Hopping Direct Current Conductivity via Hydrogen-like Impurities in Semiconductors", Semiconductors **57**, 499 (2023).
46. G. I. Savin, B. M. Shabanov, P. N. Telegin, and A. V. Baranov, "Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences: Present and Future", Lobachevskii J. Math. **40**, 1853 (2019).
47. V. Stegailov, E. Dlinnova, T. Ismagilov, M. Khalilov, N. Kondratyuk, D. Makagon, A. Semenov, A. Simonov, G. Smirnov, and A. Timofeev, "Angara interconnect makes GPU-based Desmos supercomputer an efficient tool for molecular dynamics calculations", Int. J. High Perform. C.Int. J. High Perform. Comput. Appl. **33**, 507 (2019).
48. E. Dlinnova, S. Biryukov, and V. Stegailov, "Energy Consumption of MD Calculations on Hybrid and CPU-Only Supercomputers with Air and Immersion Cooling", Adv. Parallel Comput. **36**, 574 (2020).