

УДК 54.027 546.112

Методы квантовой молекулярной динамики для моделирования свойств веществ в экстремальной области

© 2025 г. А. С. Смаль, Ю. А. Богданова, А. А. Егоров

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

Рассмотрены теоретические основы методов квантовой молекулярной динамики и теории функционала плотности (DFT), реализованные в программном пакете Quantum ESPRESSO. Основное внимание уделено применению этих методов для атомистического моделирования свойств веществ в экстремальных условиях. Проведены расчеты энергии диссоциации изотопов водорода (H_2 , D_2 , T_2), показавшие хорошее согласие со справочными данными. Также выполнено моделирование процесса адсорбции водорода на поверхности алюминия и рассчитана энергия адсорбции, значение которой свидетельствует о термодинамической устойчивости образующейся системы. Верификация методики проведена на примере адсорбции воды на поверхности гидрида лития, что подтвердило ее точность. Полученные результаты имеют практическое значение для водородной энергетики, катализа и разработки новых материалов. Работа выполнена с использованием вычислительных инструментов, включая VESTA, Avogadro и BURAI, применение этих инструментов обеспечило достоверность результатов моделирования, наглядность представления данных и эффективность всего вычислительного цикла.

Ключевые слова: квантовая молекулярная динамика, теория функционала плотности (DFT), Quantum ESPRESSO, энергия диссоциации, изотопы водорода, адсорбция водорода, алюминий, поверхностные явления, энергия связи.

Введение

Исследование свойств веществ представляет собой важную научную задачу, имеющую практическое значение для развития ключевых областей современной науки и технологий, включая материаловедение, энергетику, катализ и нанотехнологии. Получение точных данных о физико-химических характеристиках материалов позволяет разрабатывать новые функциональные материалы с заданными свойствами, оптимизировать существующие технологические процессы и создавать инновационные устройства.

Среди современных методов исследования особое место занимают методы вычислительных экспериментов [1], которые являются незаменимым инструментом в изучении веществ на атомарном и молекулярном уровнях. В данной работе применяются методы компьютерного моделирования, в частности теория функционала плотности (DFT) [2], реализованная в программном пакете Quantum ESPRESSO¹. Данный метод позволяет с высокой точностью исследовать электронную структуру веществ, процессы адсорбции и поведение материалов в экстремальных условиях, преодолевая ограничения классических методов молекулярной динамики.

¹ Quantum ESPRESSO. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.quantum-espresso.org> (дата обращения 20.06.2025).

✉ А.С. Смаль: ASSmal@mephi.ru

Поступила в редакцию: 03.09.2025

После доработки: 07.10.2025

Принята к публикации: 21.10.2025

EDN PGHXDX

Квантовая молекулярная динамика

В основе описания динамики частиц лежит уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (1)$$

где Ψ – многоэлектронная волновая функция. Для стационарных состояний основная задача квантовой механики сводится к решению стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H} \Psi = E \Psi, \quad (2)$$

где $\hat{H}$ – гамильтониан системы; E – полная энергия электронов и ядер; $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ – волновая функция частиц (электронов и ядер).

Предполагая ядра неподвижными (метод Борна – Оппенгеймера) [3], можно записать оператор Гамильтона как

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}, \quad (3)$$

где $\hat{U}$ описывает электрон-электронное взаимодействие; оператор $\hat{T}$ – кинетическую энергию электронов, а оператор $\hat{V}$ – потенциальную энергию взаимодействия электронов с ядрами.

Основное отличие задачи одного тела от многочастичной системы состоит в том, что в последней появляется дополнительное слагаемое $\hat{U}$, отвечающее за взаимное влияние электронов друг на друга. Этот член существенно усложняет расчеты, так как требует учета обменно-корреляционных эффектов и делает невозможным точное аналитическое решение без применения приближенных методов.

Теория функционала плотности

Для решения многоэлектронного уравнения Шредингера существует множество методов, основанных на представлении волновой функции в виде определителя Слейтера [4]. Наиболее простым из них является метод Хартри – Фока [2, 5]. Однако все эти подходы требуют высокие вычислительные мощности, что существенно ограничивает их применение и накладывает большие ограничения на размер исследуемых систем.

Метод теории функционала плотности (density functional theory – DFT) [2] основан на принципиально ином подходе, позволяющем преодолеть эти ограничения. Вместо работы с многочастичной волновой функцией метод DFT сводит задачу многих тел с электрон-электронным взаимодействием к эффективной одночастичной задаче.

Математическое обоснование DFT базируется на двух фундаментальных теоремах, доказанных Хоэнбергом и Коном [5, 6, 7]. Эти теоремы устанавливают взаимосвязь между электронной плотностью $n(\mathbf{r})$ и свойствами основного состояния многоэлектронной системы.

Первая теорема доказывает, что свойства основного состояния многоэлектронной системы определяются только электронной плотностью, зависящей от трех координат. Данная теорема сводит задачу об описании многоэлектронной системы из N электронов с $3N$ пространственными координатами к описанию функционала электронной плотности с тремя координатами. Более того теорема устанавливает, что полная энергия системы E может быть выражена как функционал от плотности

$$E[n(\mathbf{r})] = \Psi | \hat{H} | \Psi = F[n(\mathbf{r})] + \int v_{en}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (4)$$

Вторая теорема представляет собой вариационный принцип квантовой механики, сформулированный для функционала плотности, и утверждает, что минимум энергии системы, записанной как функционал плотности $F[n(\mathbf{r})]$, равен энергии основного состояния.

Функционал энергии может быть записан как эффективный функционал плотности частиц в одночастичной системе

$$F[n(\mathbf{r})] = \hat{T}[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})], \quad (5)$$

где электронная плотность $n(\mathbf{r})$ определяется выражением:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (6)$$

Первый член правой части в уравнении (5) является кинетической энергией одночастичного состояния:

$$\hat{T}[n(\mathbf{r})] = \sum_i \phi_i \left| -\frac{\nabla_r^2}{2} \right| \phi_i. \quad (7)$$

Второй член уравнения (5) представляет собой электростатическое кулоновское отталкивание между электронами с коэффициентом 1/2 из-за двойного счета, а $\varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]$ – обменно-корреляционный функционал, который содержит все остальные вклады в энергию многих тел электронов.

Подставляя уравнение (5) в уравнение (4), получаем значение полной энергии:

$$E[n(\mathbf{r})] = \hat{T}[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})] + \int v_{en}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

которую, согласно второй теореме, необходимо минимизировать для получения энергии основного состояния. На изменение электронной плотности накладывается условие сохранения общего числа электронов:

$$\int \delta n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0. \quad (9)$$

С использованием множителя Лагранжа ϵ_i и ограничением в уравнении (9) получаем уравнение Кона – Шэма в виде:

$$\left\{ -\frac{\nabla_r^2}{2} + v_{eff}[n(\mathbf{r})] \right\} \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (10)$$

где значение для эффективного потенциала $v_{eff}[n(\mathbf{r})]$ задается как

$$v_{eff}[n(\mathbf{r})] = v_{en}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (11)$$

Здесь первый член в правой части уравнения $v_{en}(\mathbf{r})$ – внешний потенциал, обусловленный ионами, второй член – потенциал Хартри v_H , последнее слагаемое является вариационной функциональной производной обменно-корреляционного взаимодействия $\varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]$.

Последний член уравнения (11) определяется как обменно-корреляционный потенциал:

$$v_{xc}[n(\mathbf{r})] = \frac{\delta \varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (12)$$

Основная проблема, связанная с методом DFT, заключается в том, что точные аналитические выражения для функционалов обменной и корреляционной энергии (12) известны только для частного случая газа свободных электронов. Тем не менее существуют приближения, позволяющие рассчитать ряд физических величин с достаточной точностью.

Предполагая, что с помощью приближений известно $\varepsilon_{xc}[n(\mathbf{r})]$, уравнение Кона – Шэма (10) можно решить методом самосогласованного поля (SCF) [7] в соответствии со следующими этапами:

- 1 – выбор начального приближения для электронной плотности $n(\mathbf{r})$;
- 2 – расчет потенциалов с использованием значения электронной плотности;
- 3 – решение уравнение Кона – Шэма, определение собственных функций и собственных значений одночастичного гамильтониана;
- 4 – расчет новой электронной плотности по волновым функциям;
- 5 – выполнение итераций 1–4 до желаемой точности.

На рис. 1 приведена наглядная блок-схема решения уравнения Кона – Шэма.

Такой подход реализован во многих современных вычислительных пакетах, включая Quantum ESPRESSO². Для ускорения расчетов в этих программах используются специальные приемы: базис плоских волн, позволяющий эффективно вычислять производные, и псевдопотенциалы, упрощающие описание электронов вблизи ядер. Также применяются методы параллельных вычислений для работы с большими системами.

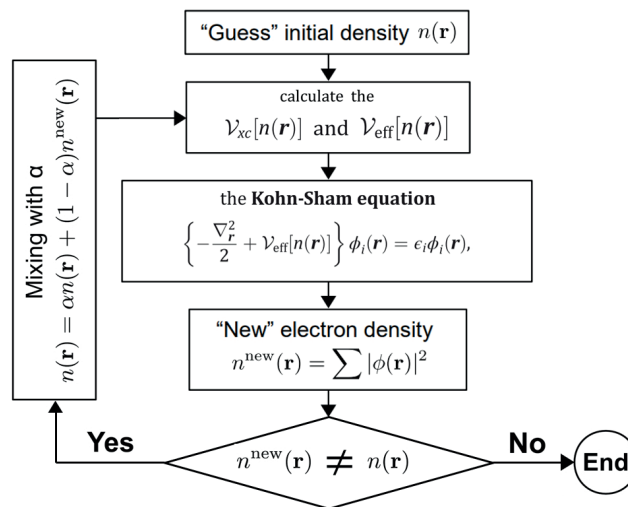


Рис. 1. Блок-схема метода самосогласованного поля для решения уравнения Кона – Шэма

² Quantum ESPRESSO. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.quantum-espresso.org> (дата обращения 20.06.2025).

Энергия диссоциации изотопов водорода

Молекулы водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 представляют собой простые двухатомные системы, что позволяет верифицировать квантово-химический подход для решения поставленных задач. Хотя электронная структура этих молекул идентична, поскольку изотопы имеют одинаковый заряд ядра, различие в массах ядер приводит к существенным изменениям в их колебательно-вращательных спектрах. Это, в свою очередь, влияет на энергию диссоциации молекул.

В данном исследовании расчеты были выполнены в программном пакете Quantum ESPRESSO с использованием функционала PBE [7] в рамках теории функционала плотности. Для определения равновесной конфигурации системы и энергии связи проводилось варьирование межатомных расстояний.

На рис. 2 представлена зависимость энергии молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 от межатомного расстояния. Минимумы на результирующей представленной зависимости соответствуют равновесным длинам связей и энергиям диссоциации. На оси абсцисс графика отложено межатомное расстояние, а на оси ординат – энергия, полученная из расчетов. Энергия приведена в единицах ридберг (1 Ry $\approx$ 13.6 эВ), а расстояние в ангстремах (Å).

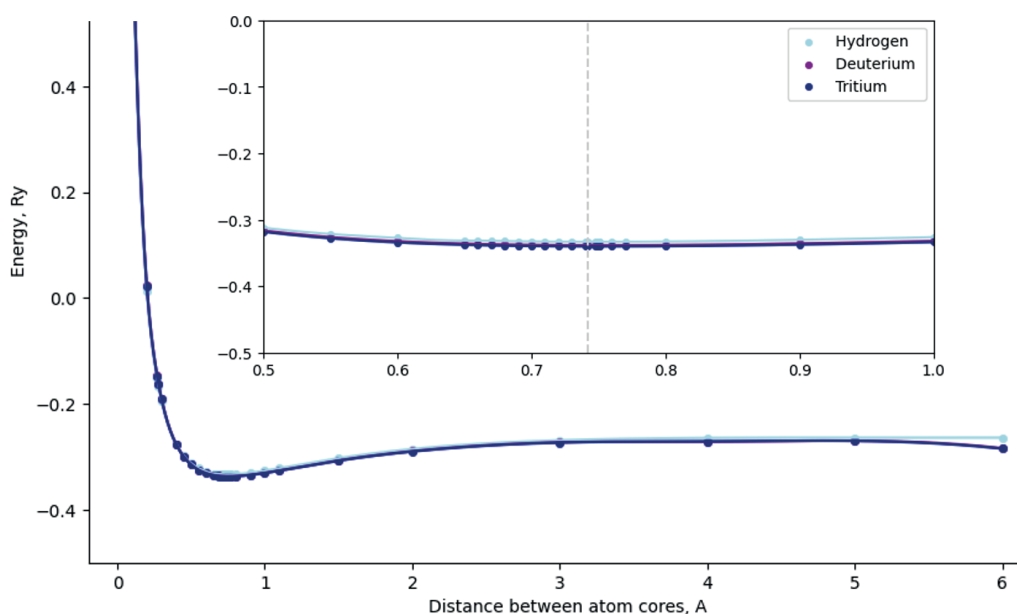


Рис. 2. График зависимости энергии атомов молекул водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 от расстояния между ядрами

В табл. 1 приведены полученные численные результаты и сравнение их со справочными данными [8, 9].

Результаты табл. 1 демонстрируют, что длина связи в молекулах водорода H_2 , дейтерия D_2 и трития T_2 остается примерно одинаковой из-за их сходной химической структуры, а энергия связи отличается. Чем больше абсолютное значение энергии связи, тем прочнее связь и стабильнее конфигурация.

В табл. 2 представлена статистика отклонений максимального среднего значений полученных результатов со справочными данными [8, 9].

Из табл. 2 видно, что результаты моделирования в данной работе согласуются со справочными данными в пределах 3.1 %.

Поверхностные явления. Адсорбция

После рассмотрения химических свойств водорода и его изотопов перейдем к анализу процессов поверхностной адсорбции на металлах, в частности на поверхности алюминия.

Таблица 1. Численные результаты расчетов энергии и длины связи водорода и его изотопов

Молекула	Quantum ESPRESSO		[8]		[9]	
	Длина связи, Å	Энергия, эВ	Длина связи, Å / δ, %	Энергия, эВ / δ, %	Длина связи, Å / δ, %	Энергия, эВ / δ, %
H ₂	0.7452	4.335	0.7416 0.49	4.477 3.2	0.74158 0.48	4.477 3.1
D ₂	0.7465	4.682	0.7416 0.66	4.555 2.8	0.74165 0.65	4.556 2.9
T ₂	0.7473	4.731	0.7416 0.78	4.588 3.1	0.7417 0.75	4.591 3.0

Таблица 2. Статистика отклонений рассчитанных значений энергии и длины связи в сравнении с данными [8, 9]

Источник справочных данных	δ, % (длина связи)	δ, % (энергия связи)
среднее значение модуля отклонения, %		
[8]	0.64	3.2
[9]	0.63	3.0
максимальное значение модуля отклонения, %		
[8]	0.78	3.2
[9]	0.75	3.1

Данное направление исследований имеет высокую значимость для современной науки и технологий [10], поскольку понимание механизмов взаимодействия позволяет разрабатывать новые материалы с улучшенными характеристиками, включая коррозионную стойкость и механическую прочность. Полученные результаты могут найти применение в создании эффективных систем хранения и транспортировки водорода, а также в разработке катализаторов для водородной энергетики.

В настоящей работе моделирование адсорбции водорода на поверхности алюминия проводилось с использованием методов квантовой молекулярной динамики и теории функционала плотности. Для расчетов применялись следующие программные средства: Quantum ESPRESSO для DFT расчетов, VESTA³ и Avogadro⁴ для визуализации и построения кристаллических структур, BURAI⁵ – графический интерфейс для Quantum ESPRESSO, упрощающий подготовку входных данных и анализ результатов.

Верификация методики. Для проверки корректности вычислительной методики проведена ее верификация на примере адсорбции воды H₂O на поверхности гидрида лития LiH. Данная система выбрана в качестве тестовой, поскольку для нее имеется набор экспериментальных и теоретических данных [11].

Начальное расстояние между атомом кислорода молекулы воды и поверхностью LiH было установлено равным 2.15 Å. После оптимизации геометрии с использованием функционала PBE структура молекулы воды сохранилась близкой к равновесной (рис. 3).

Энергия адсорбции определялась как разность энергии между взаимодействующей системой (молекулой воды на поверхности гидрида лития) и невзаимодействующими структурами (отдельно водой и поверхностью гидрида лития):

$$E_{ads}^{DFT} = E_{H_2O-LiH(periodic)}^{DFT} - E_{H_2O(isolated)}^{DFT} - E_{LiH(periodic)}^{DFT}. \quad (13)$$

Энергетические характеристики системы рассчитывались с использованием пакета Quantum ESPRESSO в рамках теории функционала плотности. Для удобства подготовки входных параметров,

³ VESTA. [Электронный ресурс]. URL: <https://jp-minerals.org/vesta/en/download.html> (дата обращения 20.06.2025).

⁴ Avogadro. [Электронный ресурс]. URL: <https://avogadro.cc/docs> (дата обращения 20.06.2025).

⁵ BURAI. [Электронный ресурс]. URL: <https://nisihara.wixsite.com/burai> (дата обращения 20.06.2025).

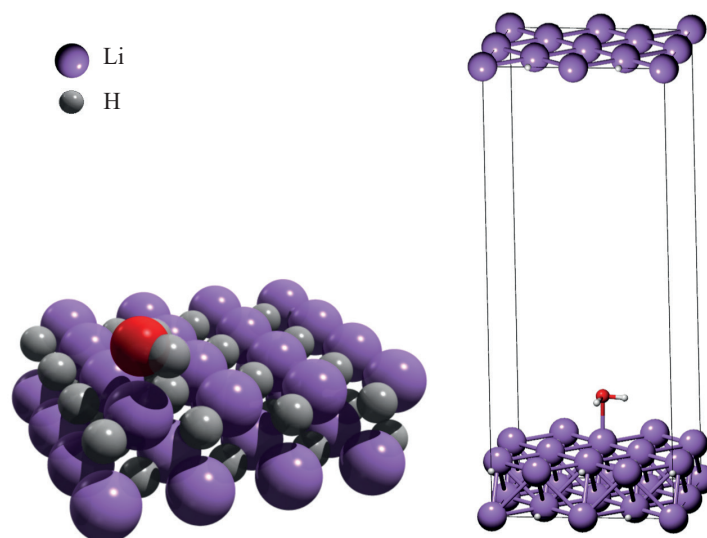


Рис. 3. Геометрия адсорбции воды на двухслойной пластине LiH

Таблица 3. Результаты расчета энергии

Система	Энергия, эВ
$E_{\text{H}_2\text{O}-\text{LiH}(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	-4137.667
$E_{\text{LiH}(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	-3538.29
$E_{\text{H O}(\text{isolated})}^{\text{DFT}}$	-599.15
$E_{\text{ads}}^{\text{DFT}}$	-0.223

запуска расчетов и обработки данных применялся графический интерфейс BURAI. Полученные значения энергии взаимодействия для исследуемых систем представлены в табл. 3.

Значение энергии адсорбции, полученное в результате моделирования в данной работе, согласуется со значением $E_{\text{ads}}^{\text{DFT}} = -0.219$ эВ [11] в пределах 2 %. Таким образом, полученные результаты позволяют считать методику верифицированной и готовой для применения в анализе других структур.

Расчет энергии адсорбции водорода на поверхности алюминия. Расчет энергии адсорбции молекулярного водорода на поверхности алюминия (рис. 4) был выполнен в рамках теории функционала плотности с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO. Моделирование проводилось на поверхности алюминия с гранцентрированной кубической (FCC) решеткой, для чего была создана периодическая суперъячейка размером $3 \times 3 \times 3$, содержащая 126 атомов алюминия. Чтобы исключить нежелательное взаимодействие между периодическими изображениями системы вдоль направления, перпендикулярного поверхности (z -ось), был добавлен вакуумный зазор высотой 10.5 Å. Молекулы водорода размещались на расстоянии 1 Å от поверхности алюминия в наиболее энергетически выгодных позициях, соответствующих потенциальным сайтам адсорбции. Перед расчетом энергии адсорбции была проведена полная релаксация геометрии системы, включая оптимизацию позиций атомов и параметров решетки.

Энергия адсорбции определялась как разность энергии между взаимодействующей системой (молекулами водорода на поверхности алюминия) и невзаимодействующими структурами (отдельно водородом и поверхностью алюминия). Формула для расчета энергии адсорбции имела вид:

$$E_{\text{ads}}^{\text{DFT}} = E_{\text{H}_2-\text{Al}(\text{periodic})}^{\text{DFT}} - E_{\text{Al}(\text{isolated})}^{\text{DFT}} - E_{\text{H}_2(\text{periodic})}^{\text{DFT}}. \quad (14)$$

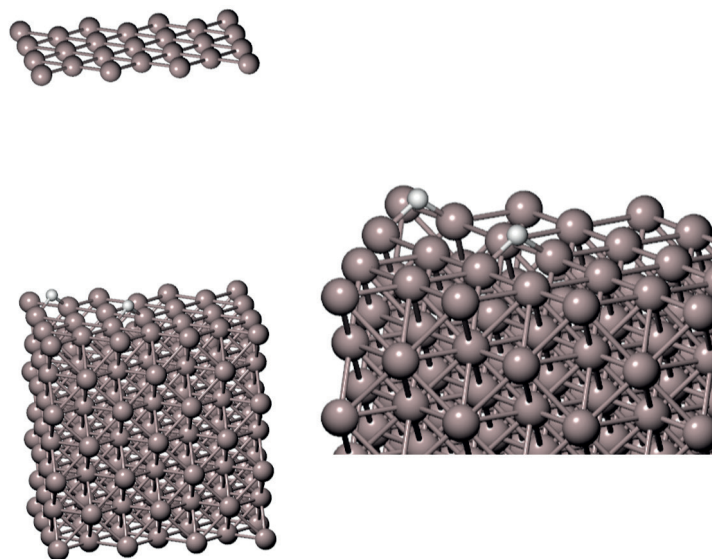


Рис. 4. Визуализация модели взаимодействия поверхности алюминия Al с молекулами водорода в программном пакете BURAI

В табл. 4 представлены результаты расчета энергии взаимодействия молекулы водорода с поверхностью алюминия.

Таблица 4. Результаты расчета энергии

Система	Энергия, эВ
$E_{\text{H}_2-\text{Al}(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	–8652.331
$E_{\text{Al}(\text{isolated})}^{\text{DFT}}$	–8619.669
$E_{\text{H}_2(\text{periodic})}^{\text{DFT}}$	–31.481
$E_{\text{ads}}^{\text{DFT}}$	0.919

Результаты расчетов показали, что энергия адсорбции водорода на поверхности алюминия составляет 0.919 эВ, что свидетельствует о термодинамической выгодности процесса и устойчивости образующейся системы. Для поверхности алюминия различные исследования предсказывают значения энергии адсорбции в диапазоне 0.8–1.2 эВ в зависимости от покрытия поверхности и наличия дефектов.

Заключение

В данной статье представлены результаты исследования свойств веществ с использованием методов квантовой молекулярной динамики и теории функционала плотности. Основное внимание уделено расчету энергии диссоциации изотопов водорода (H_2 , D_2 , T_2) и энергии адсорбции водорода на поверхности алюминия. Применение программного пакета Quantum ESPRESSO позволило получить точные данные, которые хорошо согласуются с экспериментальными и теоретическими результатами.

Практическая значимость исследования заключается в возможности использования алюминиевых материалов для водородной энергетики и катализа, а также в разработке новых функциональных материалов с улучшенными свойствами. В дальнейшем предложенная методика может быть применена для изучения более сложных систем и оптимизации их характеристик.

Таким образом, работа демонстрирует эффективность методов квантовой молекулярной динамики для моделирования свойств веществ, открывая новые перспективы для научных и технологических приложений, в том числе для исследования механических свойств конструкционных материалов.

Финансирование

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 8 «Физика изотопов водорода», направление 8.1 «Исследования в области взаимодействия изотопов водорода с твердым телом»).

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.С. Смаль – разработка методик расчета; проведение численных расчетов; обработка результатов; участие в проведении исследования и обсуждении результатов; подготовка текста статьи.

Ю.А. Богданова – формулировка идеи и целей исследования; постановка задачи; выбор методов исследования; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

А.А. Егоров – обзор литературных источников; разработка методик расчета; обработка результатов; участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

Список литературы

1. Богданова Ю.А., Маклашова И.В., Трофимова А.Д., Егоров А.А. Моделирование свойств переноса изотопов гелия и водорода методами термодинамики и молекулярной динамики // Вестник НИЯУ МИФИ, 2024. V. 13. № 1. С. 40–51. DOI : 10.26583/vestnik.2024.285.
2. Koch W., Holthausen M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2002. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043.
3. Born M., Oppenheimer R. Zur Quantentheorie der Molekeln // Annalen der Physik, 1927. V. 84. P. 457–484. DOI: 10.1002/andp.19273892002.
4. Pavarini E., Koch E., Schollwöck U. Emergent Phenomena in Correlated Matter: Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013. Forschungszentrum Jülich, 2013. 527 p. ISBN 978-3-89336-884-6.
5. Parr R.G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford: Oxford University Press, 1994. 352 p.
6. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Physical Review, 1965. V. 140. № 4A. P. A1133–A1138.
7. Hung N.T., Nugraha A.R.T., Saito R. Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics. New York: Jenny Stanford Publishing, 2022. 372 p. DOI: 10.1201/9781003290964.
8. Справочник химика / под ред. Никольского Б.П. М.–Л.: ГНТИ Химической литературы, 1962. Т. 1. 1072 с.
9. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание. М.: Наука, 1981. 352 с.
10. Peng Z., Shuangxi W., Jian Zh., Chaohui H., Ping Z. First-principles study of H₂ adsorption and dissociation on Zr (0001) // Journal of Nuclear Materials, 2011. V. 418. Iss. 1–3. P. 159–164. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2011.06.029.
11. Tsatsoulis. T., Hummel. F., Usvyat. D., Schütz. M., Booth. G.H., Binnie. S.S., Gillan. M.J., Alfè. D., Michaelides. A., Grüneis. A. A comparison between quantum chemistry and quantum Monte Carlo techniques for the adsorption of water on the (001) LiH surface // Journal of Chemical Physics, 2017. V. 146 (20). Art. id. 204108. DOI: 10.1063/1.4984048.

Methods of quantum molecular dynamics for modeling the properties of substances in the extreme range

A. S. Smal[✉], Yu. A. Bogdanova, A. A. Egorov

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

[✉] ASSmal@mephi.ru

Received September 3, 2025; revised October 7, 2025; accepted October 21, 2025

The theoretical foundations of quantum molecular dynamics and density functional theory (DFT) methods implemented in the Quantum ESPRESSO software package are considered. The main attention is paid to the application of these methods for the atomistic modeling of the properties of substances under extreme conditions. The dissociation energy of hydrogen isotopes (H_2 , D_2 , T_2) was calculated, which showed good agreement with the reference data. The hydrogen adsorption process on the aluminum surface was also modeled and the adsorption energy was calculated, the value of which indicates the thermodynamic stability of the resulting system. The verification of the technique was carried out using the example of water adsorption on the surface of lithium hydride, which confirmed its accuracy. The results obtained are of practical importance for hydrogen energy, catalysis, and the development of new materials. The work was performed using computational tools, including VESTA, Avogadro and BURAI, the use of these tools ensured the reliability of the simulation results.

Keywords: quantum molecular dynamics, density functional theory (DFT), Quantum ESPRESSO, dissociation energy, hydrogen isotopes, hydrogen adsorption, aluminum, surface phenomena, binding energy.

References

1. Bogdanova Yu.A., Maklashova I.V., Trofimova A.D., Egorov A.A. Modelirovanie svoystv perenosa izotopov geliya i vodoroda metodami termodinamiki i molekulyarnoy dinamiki [Modeling of the properties of helium and hydrogen isotope transfer by thermodynamic and molecular dynamics methods]. Vestnik NIYaU MIFI, 2024. Vol. 13. No. 1. P. 40–51 (in Russian). DOI : 10.26583/vestnik.2024.285.
2. Koch W., Holthausen M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. 2nd ed. Weinheim, Wiley-VCH, 2002. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043.
3. Born M., Oppenheimer R. Zur Quantentheorie der Molekeln. Annalen der Physik, 1927. Vol. 84. Pp. 457–484. DOI: 10.1002/andp.19273892002.
4. Pavarini E., Koch E., Schollwöck U. Emergent Phenomena in Correlated Matter: Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013. Forschungszentrum Jülich, 2013. 527 p.
5. Parr R.G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford, Oxford University Press, 1994. 352 p.
6. Kohn W., Sham L.J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Physical Review, 1965. Vol.140. no. 4A. Pp. A1133–A1138.
7. Hung N.T., Nugraha A.R.T., Saito R. Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics. New York, Jenny Stanford Publishing, 2022. 372 p. DOI: 10.1201/9781003290964.
8. Spravochnik himika / pod red. Nikol'skogo B.P. [Chemist's Handbook ed. by Nikolsky B.P.]. Moscow–Leningrad, GNTI Khimicheskoi literatury Publ., 1962. Vol. 1. 1072 p.
9. Gurvich L.V., Veits I.V., Medvedev V.A. et al. Termodinamicheskie svoystva individual'nyh veshchestv: Spravochnoe izdanie [Thermodynamic properties of individual substances: Reference publication]. Moscow, Nauka Publ. 352 p.
10. Peng Z., Shuangxi W., Jian Zh., Chaohui H., Ping Z. First-principles study of H_2 adsorption and dissociation on Zr (0001). Journal of Nuclear Materials, 2011. Vol. 418. Iss. 1–3. Pp.159–164. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2011.06.029
11. Tsatsoulis T., Hummel F., Usvyat D., Schütz M., Booth G.H., Binnie S.S., Gillan M.J., Alfè. D., Michaelides. A., & Grüneis. A. A comparison between quantum chemistry and quantum Monte Carlo techniques for the adsorption of water on the (001) LiH surface. Journal of Chemical Physics, 2017. Vol. 146 (20). Art. id. 204108. DOI: 10.1063/1.4984048.