

**Vendredi 9 Février 2018 à 10h30**

**Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109**

---

## ***Hydrogène et hydrures sous hautes pressions; effets quantiques des noyaux d'hydrogène et leur simulation***

***GENESTE Gregory***

DAM/DPTA/SPMC

---

La position particulière de l'hydrogène dans le tableau périodique lui confère des propriétés originales. D'une part, son électronégativité médiane lui donne la possibilité d'exister dans un état de charge positif (proton H<sup>+</sup>) ou négatif (hydrure H<sup>-</sup>), selon l'élément chimique avec lequel il est mis en présence. D'autre part, sa légèreté rend sa dynamique sujette à des effets quantiques extrêmement forts, jusqu'à des températures assez élevées. Porté à de hautes pressions (~ 450 GPa), il peut devenir métallique et pourrait être un supraconducteur à température ambiante [1]. Le diagramme de phases de l'hydrogène sous pression présente une grande variété de phases, il sera ici décrit. Récemment, il a été suggéré que ces propriétés remarquables pourraient être atteintes à des pressions plus modérées (~ 100 GPa) dans des composés métal+hydrogène [2]. Ces hydrures présentent sous pression une chimie nouvelle, la pression permettant l'apparition de composés de stœchiométrie en hydrogène inédite, appelés "polyhydrures" ou "superhydrures" (car ils contiennent plus d'hydrogène atomique que les règles de valence ne le laissent présager). De nombreux superhydrures ont été prédits, par calcul, par plusieurs équipes. Récemment nous avons prouvé l'existence, et déterminé la structure d'un superhydrure de fer de formule FeH<sub>5</sub> [3], qui a ensuite été prédit comme un supraconducteur conventionnel avec T<sub>c</sub>=51 K [4]. Ce composé sera présenté. Par ailleurs, la méthode idéale pour simuler les effets quantiques des noyaux d'hydrogène avec la DFT est la méthode de la dynamique moléculaire par intégrales de chemins (PIMD), que nous avons implémentée dans le code ABINIT. La méthode sera brièvement décrite, ainsi que sa mise en pratique, et je montrerai son application à la phase II de l'hydrogène dense [5], et à la description de la liaison hydrogène. Pour finir, l'impact des effets quantiques sur le transport des protons dans un oxyde sera abordé.

[1] J. M. McMahon and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B 84, 144515 (2011)

[2] N. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. 92, 187002 (2004).

[3] C. M. Pépin, G. Geneste, A. Dewaele, M. Mezouar, P. Loubeyre, Science, 357, 382-385 (2017).

[4] A. Majumdar, J. S. Tse, M. Wu, Y. Yao, Phys. Rev. B 96, 201107(R) (2017).

[5] G. Geneste, M. Torrent, F. Bottin, P. Loubeyre, Phys. Rev. Lett. 109, 155303 (2012).

---

Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance, et ceux de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire, le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
DEN/DANS/DMN Service de Recherches de Métallurgie Physique  
Centre de Saclay – Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex – France