

УДК 533.95; 533.95:537.84
МРНТИ 29.27.00

<https://doi.org/10.55452/1998-6688-2025-22-4-386-400>

¹**Коданова С.К.**,
к.ф.-м.н., профессор, ORCID ID: 0000-0001-7098-471X,
e-mail: kodanova@physics.kz

^{1*}**Исанова М.К.**,
PhD, ассоциированный профессор, ORCID ID: 0000-0002-0264-2694,
*e-mail: issanova@physics.kz

¹**Бастыкова Н.Х.**,
PhD, ассоциированный профессор, ORCID ID: 0000-0002-8400-7183,
e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz

¹**Кенжебекова А.И.**,
PhD, ст. преподаватель, ORCID ID: 0000-0003-0223-0216,
e-mail: kenzhebekova.a@kaznu.kz

²**Хоффманн Д.**,
доктор наук, профессор, ORCID ID: 0000-0003-0922-7802
e-mail: hoffmann@physik.tu-darmstadt.de

¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

²Технический университет Дармштадт, г. Дармштадт, Германия

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ И ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ ПРИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЯХ

Аннотация

В работе приведены результаты исследования оптических свойств водорода, в частности коэффициентов отражения и преломления электромагнитных волн, при этом диэлектрическая проницаемость вещества описывается обобщенной моделью Друде–Лоренца. В настоящей работе проведено исследование продольных и поперечных спектров колебаний микроскопического ионного тока в водороде при различных значениях температуры и плотности, а также выполнен анализ влияния электронных обменных и корреляционных эффектов. Исследование проводилось на основе эффективного потенциала взаимодействия с учетом коррекции локального поля, полученного из моделирования методом квантового Монте-Карло. Применение точных моделей локального поля, таких как аппроксимации на основе квантово-статистических расчетов, позволяет достоверно воспроизводить транспортные и оптические свойства плотных электронных систем. В частности, учет функции локального поля приводит к существенным поправкам в расчетах оптических и динамических свойств, что критически важно для моделирования горячего плотного вещества, металлизированной плазмы и вырожденных электронных систем. Кроме того, наличие точной формы функции локального поля позволяет корректно описывать оптические и динамические свойства плазмы, включая коэффициенты отражения и поглощения, собственные моды колебаний.

Ключевые слова: плотная плазма, эффективный потенциал, оптические свойства, коэффициент отражения, коэффициент поглощения, собственные моды колебаний.

Введение

В последние десятилетия активно проводятся как экспериментальные, так и теоретические исследования, направленные на изучение поведения водорода,дейтерия и трития в широком диапазоне температур и плотностей. Физические свойства водорода при высоких давлениях и умеренных температурах имеют решающее значение для моделирования процессов, протекающих в недрах планет [1–2], а также представляют практический интерес для исследований

в области инерционного термоядерного синтеза [3–4], поскольку изотопы дейтерий и тритий используются в качестве рабочих материалов (DT-топлива) в подобных экспериментах.

Согласно результатам моделирования методом Монте-Карло, плотный жидкий водород способен испытывать фазовый переход первого рода в металлическое состояние, при котором критическая точка достигается при давлении около 50 ГПа и температуре порядка 10 000 К [5]. В работе [6] экспериментально зафиксировано существование металлической фазы водорода при давлении 140 ГПа и температуре около 3000 К. При экстремальных ударных давлениях также ожидается появление металлической проводимости в жидком состоянии. Для уточнения диапазона давлений, при котором ударно-сжатый водород переходит в проводящее состояние, в исследовании [7] были проведены измерения оптической отражательной способности фронта ударной волны в интервале 20–500 ГПа. Полученные данные показали, что возрастание оптического коэффициента отражения свидетельствует о достижении ударным дейтерием состояния, характерного для металлической жидкости.

С экспериментальной точки зрения измерения кривой Гюгонио и оптической отражательной способности ударно-сжатого водорода [8–9] представляют собой важный источник информации для современных вычислений уравнения состояния и оптических свойств вещества [10–11]. Эти результаты существенно расширяют представления о поведении водорода и дейтерия в условиях теплой плотной материи, характерных для импlosionных процессов в экспериментах по инерционному термоядерному синтезу (ИТС). Особый интерес среди работ, посвященных экспериментальному изучению изменений оптических характеристик в течение нескольких пикосекунд после лазерного облучения мишени, представляет исследование [12], где интерпретация экспериментальных данных была выполнена с использованием формулы Кубо–Гринвуда для описания электропроводности.

Взаимодействие лазерного излучения с веществом лежит в основе множества современных физических и технологических процессов, включая генерацию высокоэнергетических частиц и коротковолнового электромагнитного излучения [13–14]. При облучении твердой мишени интенсивными лазерными импульсами вещество проходит последовательные стадии преобразований: от исходного холодного твердого состояния к горячей плотной плазме, известной как теплая плотная материя (WDM), и далее к слабо связанной плазме, свойства которой динамически изменяются во времени и пространстве.

Материалы и методы

В данной работе рассматривается плотная водородная плазма, представляющая особый интерес для широкого круга направлений – от астрофизики и физики взаимодействия лазерного излучения с твердыми телами до физики высоких давлений. Теоретические и экспериментальные исследования плотного водорода во многом обусловлены интересом к проблематике теплой плотной материи в физике конденсированных сред, а также ее приложениями в области инерционного термоядерного синтеза. В условиях плотного вещества ключевую роль играют межчастичные взаимодействия. Для их описания разработан ряд эффективных моделей. Так, в классической плазме широко используется потенциал Дебая–Хюккеля, тогда как для вырожденных электронных систем применяется потенциал Томаса–Ферми. Возрастающий интерес к исследованиям разогретого плотного вещества и ИТС стимулировал развитие различных аналитических подходов, в частности приближений, описывающих экранирование заряда в частично и слабо вырожденных режимах [15–19]. Многие свойства плотной плазмы были получены с помощью квантово-механических расчетов методом Монте-Карло [20–21], результаты которых впоследствии использовались как исходные данные в ряде прикладных задач [22]. Эти данные легли в основу построения теории функционала плотности (DFT) при описании свойств реальных материалов [23].

В работе рассматривается получение эффективного потенциала взаимодействия в результате использования поправки локального поля, полученного из моделирования методом

квантового Монте-Карло в диэлектрической проницаемости [24]. Далее данный потенциал используется для исследования влияния электронных обменно-корреляционных эффектов на транспортные и оптические свойства водорода при различных параметрах с применением метода молекулярной динамики. Исследование оптических и динамических свойств водородной плазмы проводилось с помощью метода молекулярной динамики. Динамика $N = 10^4$ одинаковых частиц была получена путем решения уравнения движения по алгоритму Бимана (NVT ансамбль). Чтобы устранить граничные эффекты, использовались периодические граничные условия для основной ячейки с длиной стороны $L = (4\pi N/3)^{1/3} a$. Единица времени представлена обратной плазменной частотой ионов ω_p^{-1} .

Согласно теории линейного отклика экранированный потенциал иона зарядом (Ze) может быть вычислен с помощью статической функции диэлектрической функции как

$$\Phi(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{Z^2 e^2}{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |\tilde{\phi}_{ei}(\vec{k})|^2 \chi_e(k) e^{ik(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} \quad (1)$$

где $\tilde{\phi}(k)$ – микропотенциал в пространстве Фурье и χ – функция отклика плотности, который связан с диэлектрической функцией плазмы следующим соотношением

$$\epsilon^{-1}(k, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \chi_e(k, \omega) \quad (2)$$

Диэлектрическую функцию плазмы возьмем в виде:

$$\epsilon(k, 0) = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \Pi, \quad \Pi(k) = \frac{\Pi_{RPA}(k, \omega=0)}{1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} G(k, \omega=0) \cdot \Pi_{RPA}(k, \omega=0)} \quad (3)$$

здесь $\Pi(k)$ – поляризационная функция электронов и $\Pi_{RPA}(k)$ – поляризационная функция квантовых электронов при фиксированной температуре [25]:

$$\Pi_{RPA}(k, \omega) = -\frac{k^2 \chi_0^2}{16\pi e^2 z^3} [g(u+z) - g(u-z)], \quad (4)$$

здесь $u = \frac{\omega}{kv_F}$, $z = \frac{k}{2k_F}$, $\chi_0^2 = \frac{3}{16} (\frac{\hbar\omega}{E_F})^2 = \frac{1}{\pi k_F a_B}$, $k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$, $\omega_p^2 = 3\pi n_e e^2 / m_e$, $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$ – первый радиус Бора, \hbar – постоянная Планка, v_F – скорость Ферми, и

$$g(x) = -g(-x) = \int \frac{y dy}{\exp(\frac{y^2}{\theta} - \eta) + 1} \ln \left| \frac{x+y}{x-y} \right| \quad (5)$$

здесь $\theta = \frac{k_B T}{E_F}$ – параметр вырождения, $\eta = \frac{\mu}{k_B T}$ – химический потенциал, зависящий от плотности через отношение $\frac{2}{3} \theta^{-\frac{3}{2}} = I_{\frac{1}{2}}(\eta)$, и I_v – Ферми интеграл порядком v .

Для учета обменно-корреляционных эффектов использовано эффективное статическое приближение (ESA), которое представлено в работе [26] в виде аналитической параметризации $G(k, \omega)$ на основе ab initio данных из моделирования методом квантового Монте-Карло (PIMC) для однородного электронного газа в условиях WDM. Если пренебречь электронными корреляциями, т.е. $G(k, \omega) = 0$, получаем приближение случайных фаз (RPA).

Таким образом, с увеличением плотности плазмы необходимо учитывать эффекты неидеальности путем введения функции локальных полей плазмы. Поправка $G(k, \omega)$ содержит полную информацию об обменно-корреляционных эффектах в диапазоне волн и частот.

Обратная диэлектрическая функция $\epsilon^{-1}(k)$ на основе данных квантового Монте-Карло вычисляется с помощью уравнения (3), с использованием $G(k, \omega)$ и длинноволнового предела G_{CSR} .

Эффективная статическая аппроксимация (ESA) поправки локального поля (LFC) электронного газа, которые получены из квантовых данных Монте-Карло, представлены в работе [27] в следующем виде:

$$\overline{G_{ESA}}(q, r_s, \theta) = G_{CSR}(q, r_s, \theta) \left[\frac{1+\alpha(r_s\theta)x+\beta(r_s\theta)\sqrt{x}}{1+\gamma(r_s\theta)x+\delta(r_s\theta)x^{1.25}+G_{CSR}(q, r_s, \theta)} \right] \quad (6)$$

здесь подгоночные параметры $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ и реализация в Python доступны в [28].

Таким образом, определяем ион-ионный потенциал взаимодействия как [29]:

$$\begin{aligned} \Phi(r) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi Ze}{k^2} \frac{e^{ikr}}{\varepsilon(k)} = \frac{Ze}{r} + \Phi_{ind}(r) \\ \Phi(r) &= \frac{1}{2\pi^2 r} \int k \cdot |\tilde{\varphi}_{ei}(k)|^2 \chi(k) \sin(kr) dk \end{aligned} \quad (7)$$

Выбирая в качестве микропотенциала электрона с ионами в форме

$$\tilde{\varphi}_{ei}(k) = \tilde{\varphi}_{ei}^C(k) + \delta_{ei}^Q(k), \quad (8)$$

где $\tilde{\varphi}_{ei}^C(k)$ – микропотенциала Кулона, $\delta_{ei}^Q(k)$ – разница микропотенциала Кулона и Дойча, $\varphi_{ei}^C(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2}$ – микропотенциал Кулона, $\varphi_{ei}^D(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2} \frac{1/\lambda_{ei}^2}{(k^2+1/\lambda_{ei}^2)}$ – микропотенциал Дойча [30].

Для определения тепловой длины волны, характеризующей проявление характера электронной волны в парном потенциале взаимодействия λ_{ei} , используем конечное значение при $\lim_{r \rightarrow 0} \phi(r) = \frac{Ze^2}{\lambda_{ei}}$ квантового потенциал Келб-Дойча [31]:

$$\varphi_{ei}^{KD}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \left\{ 1 - e^{-\frac{r^2}{\lambda_{ei}^2}} + \sqrt{\pi} \frac{r}{\lambda_{ei} \gamma_{ei}} \left(1 - \operatorname{erf} \left[\gamma_{ei} \frac{r}{\lambda_{ei}} \right] \right) \right\}, \quad (9)$$

где γ_{ei} – дополнительный свободный параметр $\gamma_{ei} = \frac{x_1+x_2^2}{1+a_{ei}x_1+x_2^2}$.

Таким образом, уравнения (2) – (5) образуют замкнутый набор уравнений, которые можно решить самосогласованно, чтобы получить статическую диэлектрическую функцию.

Оптические свойства плотной водородной плазмы

Оптические характеристики, в частности отражательная способность, напрямую связаны с диэлектрической функцией, которая также определяет проводимость в статическом пределе. Эти параметры служат ключевыми для описания поведения теплого плотного водорода, особенно при высоких давлениях. Важную роль играет отклик среды на внешние возмущения, который в рамках теории линейного отклика описывается диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(k, \omega)$.

В данной работе представлены результаты по исследованию оптических свойств водорода, таких как коэффициенты отражения и преломления электромагнитных волн, диэлектрическая проницаемость которого описывается обобщенной моделью Друде-Лоренца:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega[\omega+i\nu(\omega)]}, \quad (10)$$

Используя вещественную и мнимую часть диэлектрической функции, можно получить коэффициент преломления $n(\omega)$ и коэффициент отражения $R(\omega)$ [32–33]:

$$n = \sqrt{\frac{Re\epsilon(\omega) + \sqrt{(Re\epsilon(\omega))^2 + (Im\epsilon(\omega))^2}}{2}}. \quad (11)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{1 - \sqrt{\epsilon(\omega)}}{1 + \sqrt{\epsilon(\omega)}} \right|^2. \quad (12)$$

В классической модели Друде электропроводимость $\sigma(\omega)$ записывается как

$$\sigma(\omega) = \frac{n e^2}{m} \frac{1}{v(\omega) - i\omega}. \quad (13)$$

В работе использована модель Друде [34] для изучения свойств проводимости теплого плотного водорода для понимания схожести WDM на металл

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad (14)$$

где электропроводность $\sigma_0 = \frac{1}{\rho}$ связана с электросопротивлением постоянного тока и временем релаксации $\tau = \frac{m_e}{n_e e^2 \rho}$.

Электрические сопротивления постоянного тока рассчитываются в рамках теории Займана [35], которая описывает рассеяние свободных электронов в веществе ионом. Формула Займана выражает электрическое сопротивление через сдвиги фаз рассеяния электронов и ион-ионный структурный фактор $S(q)$. Ион-ионный структурный фактор предоставляется из молекулярной динамики, а сечения рассеяния – из квантовой теории электрон-ионных столкновений.

Формулировка электрического сопротивления по Займану описывается в рамках теории линейного отклика следующей формулой [35]:

$$\rho = -\frac{\hbar}{3\pi^2 Z^2 n_i} \int_0^\infty \frac{\delta f}{\delta E}(E, \mu) I(E) dE. \quad (15)$$

Распределение Ферми-Дирака и его производная имеют вид:

$$f(E, \mu) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \quad (16)$$

$$\frac{\delta f}{\delta E}(E, \mu) = -f(E, \mu)(1 - f(E, \mu)), \quad (17)$$

где $n_i = n_e/Z$ – плотность ионов, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ и μ – химический потенциал.

Для вычисления функции $I(E)$ используем следующую формулу

$$I(E) = \int_0^{2k} q^3 S(q) \sigma(q) dq, \quad (18)$$

где $S(q)$ – ион-ионный структурный фактор; $\sigma(q)$ – транспортное сечение рассеяния.

Для расчета структурного фактора были использованы значения радиальной функции из молекулярной динамики:

$$S(q) = 1 + 4\pi \int [g(r) - 1] \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr. \quad (19)$$

Исследование характерных собственных мод колебаний ионов в водороде при высоких плотностях

Для анализа спектров продольных и поперечных коллективных возбуждений использовались уравнения, описывающие микроскопические токи в системе. В частности, спектральные плотности $L(k, \omega)$ и $T(k, \omega)$ были получены путем применения временного преобразования Фурье к рассчитанным токам, определяемым по следующим выражениям:

$$L(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N t_{meas}} |F_t[\lambda(k, t)]|^2, \quad (20)$$

$$T(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N t_{meas}} |F_t[\tau(k, t)]|^2, \quad (21)$$

где t_{meas} – время измерения, F_t – временное преобразование Фурье, $\lambda(k, t)$ и $\tau(k, t)$ – продольная и поперечная компоненты микроскопического тока соответственно.

Последний определяется как:

$$j(k, t) = \sum_{j=1}^N v_j(t) \exp(i k r_j(t)), \quad (22)$$

причем компоненты $\lambda(k, t)$ и $\tau(k, t)$ задаются выражениями:

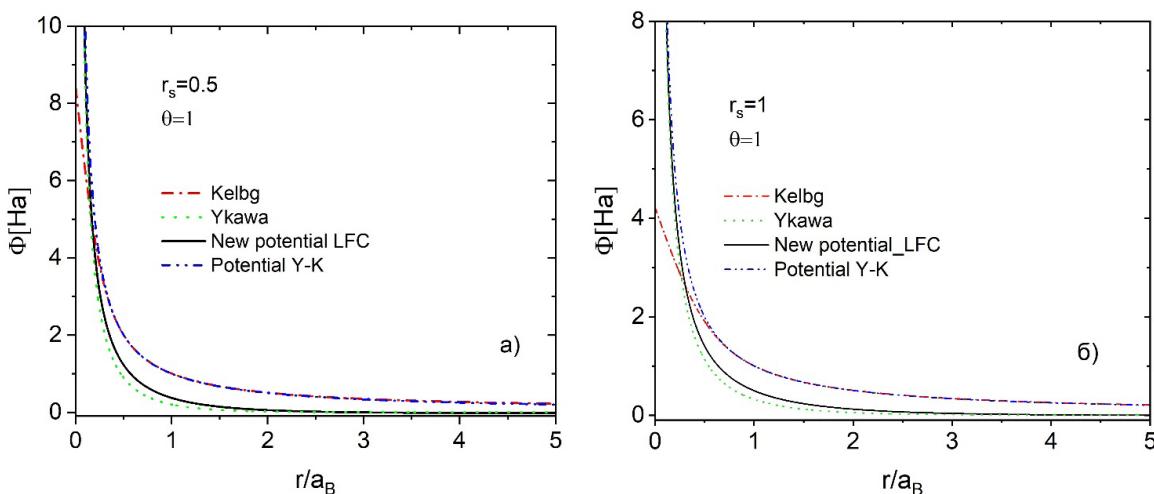
$$\lambda(k, t) = \sum_{j=1}^N v_{jx}(t) \exp(i k x_j(t)), \quad (23)$$

$$\tau(k, t) = \sum_{j=1}^N v_{jy}(t) \exp(i k x_j(t)), \quad (24)$$

где в уравнениях (23) и (24) компоненты векторов скорости $v_j(t)$ и положения $r_j(t)$ частицы j в момент времени t получены с помощью МД-моделирования, а k – волновое число, соответствующее волновому вектору, принятому параллельным оси x . Продольная и поперечная скорости звука s_L и s_T определялись в линноволновом режиме ($k \rightarrow 0$) по соотношению: режим ($k \rightarrow 0$) по уравнению $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\omega}{k} = s_{L/T}$, где s_L и s_T обозначают продольную и поперечную скорость звука соответственно.

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 (а-г) и 1.4 (а-г) представлены результаты для экранированного потенциала, вычисленного с использованием уравнения (9). В частности, потенциал на основе LFC сравнивается с потенциалом, вычисляемым без учета эффектов обменно-корреляционной связи на отклике плотности (Potential Y-K) и с потенциалами Келбг-Дойча (Kelbg) и Юкавы (Ykawa) для различных значений параметров плазмы. Экранированные потенциалы вычисляются для $Z = 1$, а значения потенциалов нормированы на [Ha], а также расстояния на a_B . Из рисунков видно, что эффективный потенциал взаимодействия ион-ион с использованием поправки локального поля также экранируется на больших расстояниях, но, как следствие, из-за волновой природы электронов экранирование немногого слабее, чем у потенциала Юкавы.



Продолжение рисунка 1.

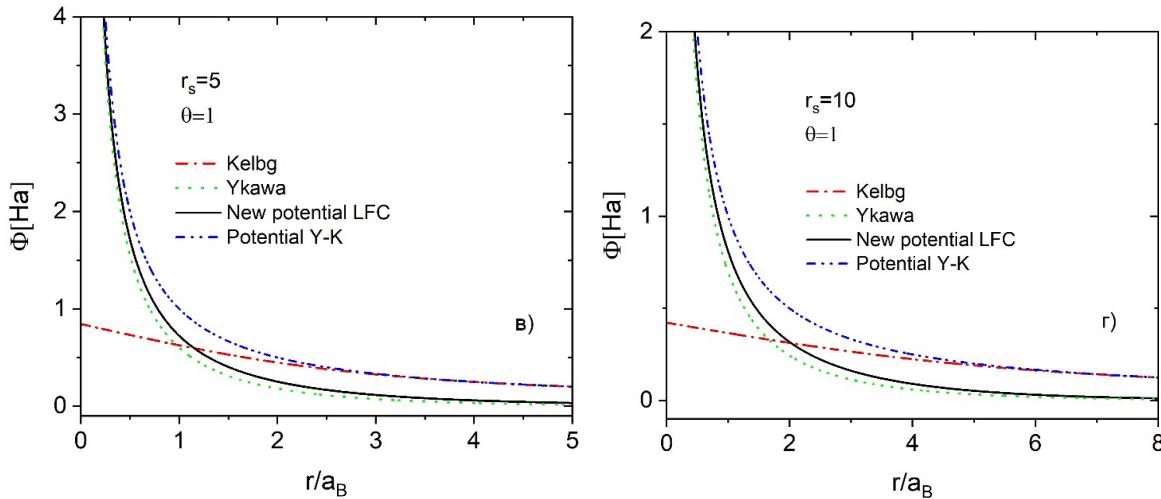


Рисунок 1 – Потенциал ион-ион взаимодействия при параметре вырождения $\theta = 1$
и разных значениях плотности r_s (а-г)

На рисунках 2–3 приведены значения коэффициента отражения при плотности 10^{24} cm^{-3} для различных значений параметра вырождения θ . Как видно из рисунка 2, увеличение параметра вырождения при постоянной плотности приводит к увеличению значения коэффициента отражения. Установлено, с увеличением температуры коэффициент отражения увеличивается при малых значениях длины волн излучения. Таким образом, при постоянной плотности увеличение температуры приводит к увеличению значения коэффициента отражения.

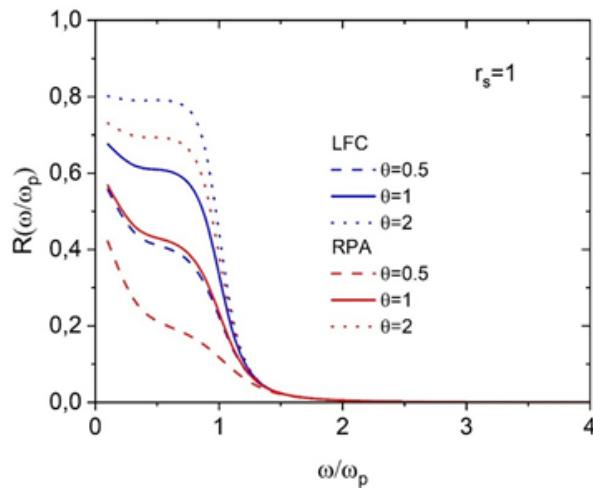


Рисунок 2 – Коэффициент отражения плазмы при $r_s = 1$
для различных параметров вырождения θ

На рисунках 4–5 приведены графики для коэффициента преломления на основе потенциала (1) и структурного фактора при различных значениях r_s, θ . Как видно из рисунков 4–5, с уменьшением параметра вырождения коэффициент преломления увеличивается. Когда длина волны излучения существенно превышает характерную плазменную длину, коэффициент преломления не меняется. Также из рисунков 4–5 можно видеть, что рассчитанные значения

коэффициента преломления имеют корректную асимптотику $n(\omega) = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$ и стремятся к единице.

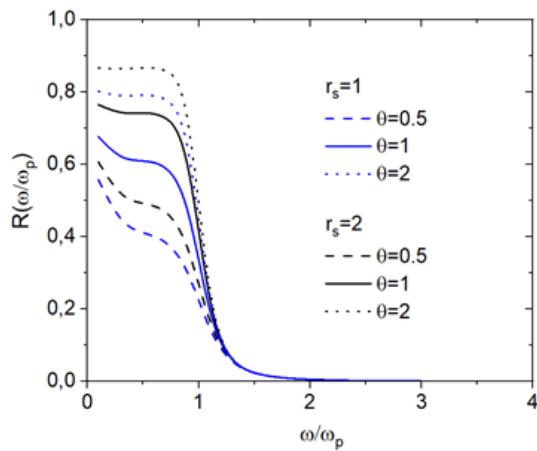


Рисунок 3 – Коэффициент отражения плазмы на основе псевдопотенциала (1)
при $r_s = 1$ и $r_s = 2$ для различных параметров вырождения θ

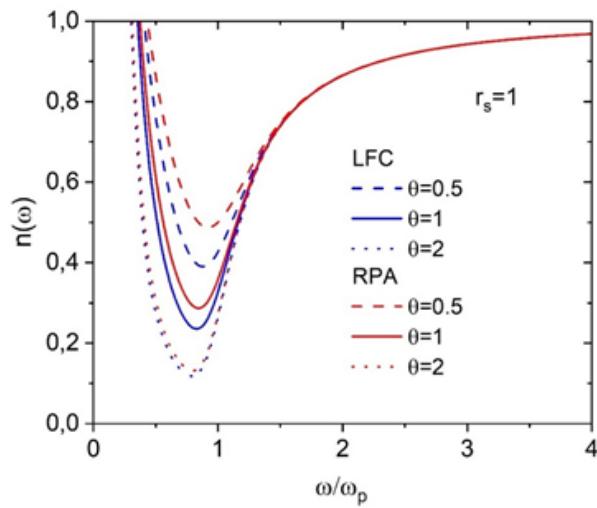


Рисунок 4 – Коэффициент преломления плазмы на основе псевдопотенциала (1)
при $r_s = 1$ для различных параметров вырождения θ

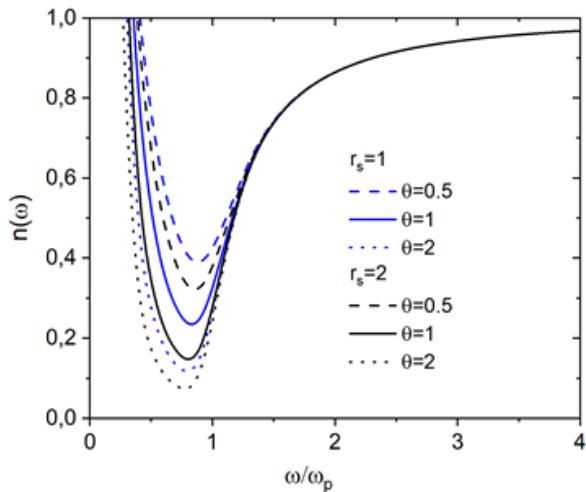


Рисунок 5 – Коэффициент преломления плазмы на основе псевдопотенциала (1)
при $r_s = 1$ и $r_s = 2$ для различных параметров вырождения θ

На рисунке 6 представлен коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ плотной электрон-ионной плазмы при $r_s = 1$ в зависимости от нормированной частоты ω/ω_p . Сравниваются расчеты в приближении случайных фаз (RPA, красные линии) и с учетом локальных полей (LFC, синие линии) для разных значений параметра вырождения. Учет обмен-корреляционных эффектов через поправку локальных полей приводит к заметному росту поглощения в окрестности плазменной частоты и лучше отражает усиление межчастичных корреляций в режиме $r_s = 1$, тогда как повышение θ подавляет поглощение, что согласуется с ослаблением квантовой вырожденности.

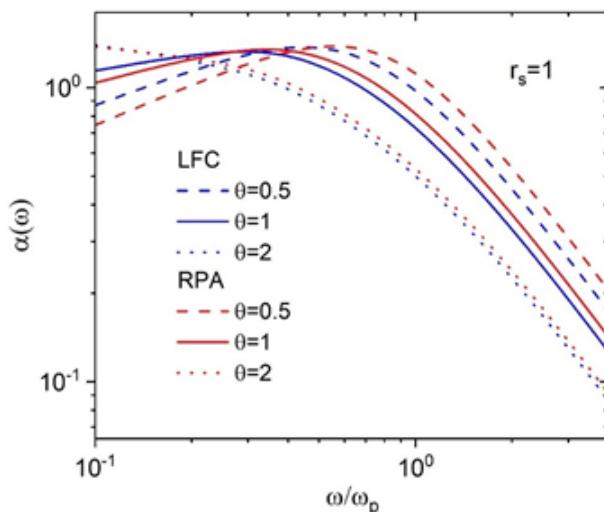


Рисунок 6 – Коэффициент поглощения плазмы при $r_s = 1$
для различных параметров вырождения θ

На рисунке 7 представлен графический анализ отражательной способности плазмы электромагнитного излучения с длинами волн 532 нм и 808 нм соответственно. Как видно из рисунка, значения коэффициента отражения и экспериментальные данные [36] качественно хорошо коррелируют между собой и наблюдается хорошее согласие при меньших значениях длины волны падающего излучения.

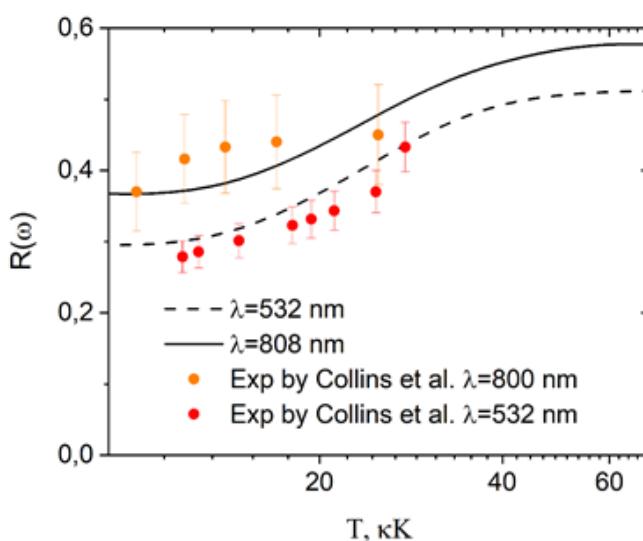


Рисунок 7 – Коэффициент отражения в зависимости от температуры
плазмы для различной длины волны излучения

Микроскопические токи были рассчитаны на основе уравнений (23) и (24), после чего к ним было применено преобразование Фурье по времени с целью получения спектральных характеристик продольных $L(k, \omega)$ и поперечных $T(k, \omega)$ флуктуаций тока. Для повышения статистической надежности и уменьшения влияния шумов результаты усреднялись по десяти независимым моделированиям, проведенным при идентичных параметрах системы. Результаты соответствующих дисперсионных соотношений (т.е. зависимость частоты коллективного колебания волны ω от волнового числа k) приведены на рисунках 8 и 9. Для более детального анализа изменений в дисперсионных характеристиках, обусловленных электронными обменно-корреляционными эффектами, из спектров продольных коллективных возбуждений были извлечены положения пиков в зависимости от частоты ω и волнового числа k (см. рисунок 10). Из рисунка 10 можно заметить небольшое увеличение дисперсионной кривой. В результате этого сдвига дисперсионных кривых $L(k, \omega)$ происходит изменение значений скоростей звука. При малых параметрах связи Γ кинетическая энергия частиц сравнима с потенциальной, и частоты продольных коллективных возбуждений ω/ω_p растут почти линейно. С увеличением параметра связи $\Gamma > 10$ доминируют силы отталкивания, и разница в частотах уменьшается. Было выявлено, что с увеличением параметра связи скорость звука уменьшается на 20% при $\Gamma = 10.317$.

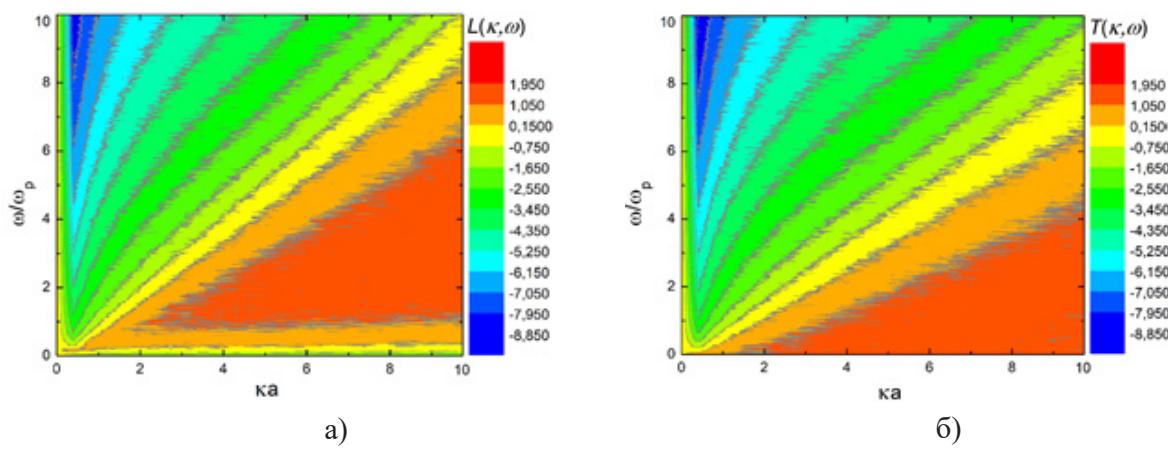


Рисунок 8 – Продольные (а) и поперечные (б) дисперсионные соотношения

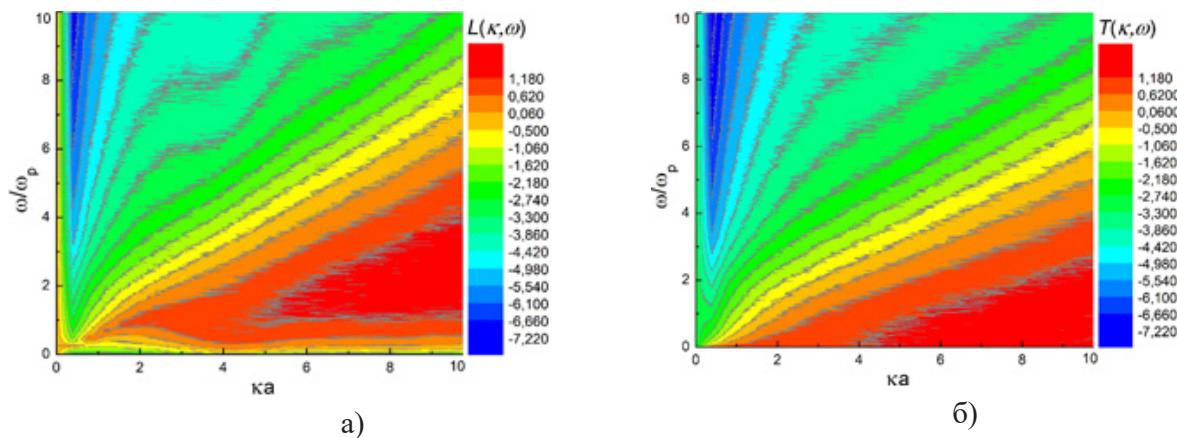


Рисунок 9 – Продольные (а) и поперечные (б) дисперсионные соотношения

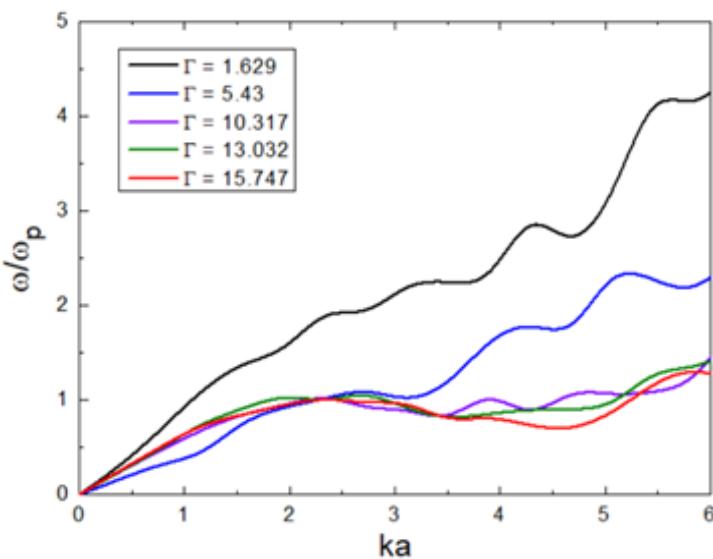


Рисунок 10 – Пики дисперсионного соотношения
при различных значениях параметра связи

Заключение

Таким образом было проведено исследование оптических свойств плотной водородной плазмы при высоких температурах на основе эффективного потенциала взаимодействия с учетом коррекции локального поля, полученного из моделирования методом квантового Монте-Карло. Оптическая отражательная способность разогретого плотного водорода (WDM) была сопоставлена с экспериментальными данными для длин волн 532 нм и 808 нм. Полученное хорошее совпадение между рассчитанными значениями коэффициента отражения электромагнитного излучения от плазменного слоя и экспериментальными результатами подтверждает корректность примененного в данной работе математического подхода и адекватность используемой физической модели.

Были проведены исследования продольных и поперечных спектров колебаний микроскопического ионного тока в водороде при различных температурах и плотностях, а также проанализировано влияние электронных обменных и корреляционных эффектов. Для изучения спектров продольных и поперечных коллективных возбуждений использовались уравнения, описывающие микроскопическую динамику токов в системе. В результате были получены спектры продольных и поперечных флуктуаций ионного тока водорода при разных значениях параметра связи. Дополнительно рассчитаны и исследованы продольные и поперечные скорости звука в системе. Установлено, что частоты продольных коллективных возбуждений возрастают почти линейно, что связано с тем, что при малых значениях параметра связи кинетическая энергия частиц становится сопоставимой с потенциальной.

В целом влияние обменно-корреляционных эффектов на свойства плотной плазмы связано с поведением электронов в плотных и высокотемпературных системах. Учет точных моделей локального поля приводит к существенным изменениям в расчетах коэффициентов переноса, что критически важно для моделирования горячего плотного вещества, металлизированной плазмы и вырожденных электронных систем. Кроме того, это имеет фундаментальное значение для теоретического объяснения наблюдаемых спектров излучения, а также для интерпретации экспериментов по сжатию вещества мощными лазерными импульсами и ударами.

Информация о финансировании

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан в рамках гранта АР19678033.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Lindl, J. Development of the indirect- drive approach to inertial confinement fusion and the target physics basis for ignition and gain. *Phys. Plasmas*, 2, 3933–4024 (1995). <https://doi.org/10.1063/1.871025>.
- 2 Haan, S. W. et al. Design and modeling of ignition targets for the National Ignition Facility. *Phys. Plasmas*, 2, 2480–2487 (1995). <https://doi.org/10.1063/1.871209>.
- 3 Magro, W.R., Ceperley, D.M., Pierleoni, C., and Bernu, B. Molecular Dissociation in Hot, Dense Hydrogen. *Phys. Rev. Lett.*, 76, 1240–1243 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.1240>.
- 4 Weir, S.T., Mitchell, A.C., and Nellis, W.J. Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar). *Phys. Rev. Lett.*, 76, 1860–1863 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.1860>.
- 5 Celliers, P.M. et al. Shock-Induced Transformation of Liquid Deuterium into a Metallic Fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 84, 5564 (2000). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.5564>.
- 6 Hu, S. X., Militzer, B., Goncharov, V.N., Skupsky, S. First-principles equation-of-state table of deuterium for inertial confinement fusion applications. *Phys. Rev. B.*, 84, 224109 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.224109>.
- 7 Loubeyre, P., Brygoo, S., et. al. Extended data set for the equation of state of warm dense hydrogen isotopes. *Phys. Rev. B.*, 86, 144115 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.144115>.
- 8 Holst, B., Redmer, R., Desjarlais, M.P. Thermophysical properties of warm dense hydrogen using quantum molecular dynamics simulations. *Phys. Rev. B.*, 77, 184201 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.184201>.
- 9 Lambert, F., Recoules, V., Decoster, A., Clérouin, J., Desjarlais, M. On the transport coefficients of hydrogen in the inertial confinement fusion regime. *Phys. Plasmas*, 18, 056306 (2011). <https://doi.org/10.1063/1.3574902>.
- 10 Li, D., Ping, Zh., Jun, Y. Quantum molecular dynamics simulations of the thermophysical properties of shocked liquid ammonia for pressures up to 1.3 TPa. *The Journal of Chemical Physics*, 139, 134505 (2013). <https://doi.org/10.1063/1.4823744>.
- 11 Dharma-wardana M.W.C. Electron-ion and ion-ion potentials for modeling warm dense matter: Applications to laser-heated or shock-compressed Al and Si. *Physical Review E*, 86, 036407 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.036407>.
- 12 Hu, S.X., Colins, L.S., et.al. First-principles opacity table of warm dense deuterium for inertial-confinement-fusion applications. *Physical Review E*, 102, 053209 (2014). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.033111>.
- 13 Moldabekov, Zh. A., Groth, S., Dornheim, T., Bonitz, M., Ramazanov, T.S. Ion potential in non-ideal dense quantum plasmas. *Contrib. Plasma Phys.*, 57(10), 532 (2017). <https://doi.org/10.1002/ctpp.201700109>.
- 14 Moldabekov, Z., Schoof, T., Ludwig, P., Bonitz, M., Ramazanov, T. Statically screened ion potential and Bohm potential in a quantum plasma. *Phys. Plasmas*, 22(10), 102104 (2015). <https://doi.org/10.1063/1.4932051>.
- 15 Moldabekov, Zh. A., Ludwig, P., Joost, J.-P., Bonitz, M., Ramazanov, T.S. Dynamical Screening and Wake Effects in Classical, Quantum, and Ultrarelativistic Plasmas. *Contrib. Plasma Phys.*, 55(2–3), 186 (2015). <https://doi.org/10.1002/ctpp.201400105>.
- 16 Moldabekov, Zh.A., Ludwig, P., Bonitz, M., Ramazanov, T.S. Theoretical foundations of quantum hydrodynamics for plasmas. *Contrib. Plasma Phys.*, 56(5), 442 (2016). <https://doi.org/10.1063/1.5003910>.
- 17 Moldabekov, Zh.A., Amirov, S.M., Ludwig, P., Bonitz, M., Ramazanov, T.S. Effect of the dynamical collision frequency on quantum wakefields. *Contrib. Plasma Phys.*, 59(4–5), e201800161 (2019). <https://doi.org/10.1002/ctpp.201800161>.
- 18 Bowen, C., Sugiyama, G. and Alder, B.J. Static dielectric response of the electron gas, *Phys. Rev.*, 50, 14838 (1994). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.14838>.
- 19 Moroni, S., Ceperley, D.M. and Senatore, G. Static response from quantum Monte Carlo calculations, *Phys. Rev.*, 69, 1837 (1992). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.69.1837>.
- 20 Perdew, J.P. and Wang, Y. Pair-distribution function and its coupling-constant average for the spin-polarized electron gas, *Phys. Rev.*, 46, 12947 (1992). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.12947>.

- 21 Ramazanov, T.S., Moldabekov, Zh.A., Gabdullin, M.T. Effective potentials of interactions and thermodynamic properties of a nonideal two-temperature dense plasma. *Phys. Rev.*, 92, 023104 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.023104>.
- 22 Ramazanov, T.S., Moldabekov, Zh.A., Gabdullin, M.T. Multipole expansion in plasmas: Effective interaction potentials between compound particles. *Phys. Rev.*, 93, 053204 (2016). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.053204>.
- 23 Moldabekov, Zh.A., Groth, S., Dornheim, T., Kähler, H., Bonitz, M., Ramazanov, T.S. Structural characteristics of strongly coupled ions in a dense quantum plasma. *Phys. Rev.*, 98, 023207 (2018). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.023207>.
- 24 Moldabekov, Z.A., Dornheim, T., Bonitz, M. Screening of a test charge in a free-electron gas at warm dense matter and dense non-ideal plasma conditions. *Contrib. Plasma Phys.*, e202000176 (2021). <https://doi.org/10.1002/ctpp.202000176>.
- 25 Arista, N.R. and Brandt W. Dielectric response of quantum plasmas in thermal equilibrium. *Phys. Rev. A.*, 29, 1471–1480 (1984). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.29.1471>.
- 26 Dornheim, T., Vorberger, J., Groth, S., Hoffmann, N., Moldabekov, Zh.A., Bonitz, M. The static local field correction of the warm dense electron gas: An ab initio path integral Monte Carlo study and machine learning representation. *The Journal of Chemical Physics.*, 151, P. 194104 (2019). <https://doi.org/10.1063/1.5123013>.
- 27 Dornheim, T., Moldabekov, Zh.A., and Tolias, P. Analytical representation of the local field correction of the uniform electron gas within the effective static approximation. *Phys. Rev. B.*, 103, 165102 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165102>.
- 28 URL: <https://github.com/ToDor90/LFC>.
- 29 Moldabekov, Zh. A., and Dornheim, T., Bonitz, M. Screening of a test charge in a free-electron gas at warm dense matter and dense non-ideal plasma conditions. *Contributions to Plasma Physics*, 62, e202000176 (2022). <https://doi.org/10.1002/ctpp.202000176>.
- 30 Filinov, A.V., Bonitz, M., Ebeling, W.O. Improved Kelbg potential for correlated Coulomb systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 36(22), 5957 (2003). <https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/22/317>.
- 31 Nadine Wetta N., Pain, J. Consistent approach for electrical resistivity within Ziman's theory from solid state to hot dense plasma: Application to aluminum. *Physical Review E*, 90, 033111 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.053209>.
- 32 Lorazo, P., Lewis, L.J., Meunier, M. Short-Pulse Laser Ablation of Solids: From Phase Explosion to Fragmentation. *Phys.Rev.Lett.*, 91, 225502 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.225502>.
- 33 Faussurier, G., Blancard, C. Resistivity saturation in warm dense matter. *Phys Rev E. Stat Nonlin Soft Matter Phys.*, 91(1), 013105 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.013105>.
- 34 Pain, J.C., Dejongh, G. Electrical Resistivity in Warm Dense Plasmas Beyond the Average-Atom Model. *Contrib. Plasma Phys.*, 50, 39–45 (2010). <https://doi.org/10.1002/ctpp.201010010>.
- 35 Ziman, J.M. A theory of the electrical properties of liquid metals. I: The monovalent metals. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 6(68), 1013–1034 (1961). <https://doi.org/10.1080/14786436108243361>.
- 36 Collins, L.A., Bickham, S.R., Kress, J.D., Mazeved, S., Lenosky, T.J., Troullier, N.J., and Windl W. Dynamical and optical properties of warm dense hydrogen. *Phys. Rev. B*, 63, 184110 (2001). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.184110>.

¹**Коданова С.К.,**

ф.-м.ғ.к., профессор, ORCID ID: 0000-0001-7098-471X,

e-mail: kodanova@physics.kz

^{1*}**Исанова М.К.,**

PhD, қауымдастырылған профессор, ORCID ID: 0000-0002-0264-2694,

*e-mail: issanova@physics.kz

¹**Бастыкова Н.Х.,**

PhD, қауымдастырылған профессор, ORCID ID: 0000-0002-8400-7183,

e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz

¹**Кенжебекова А.И.,**

PhD, аға оқытушы, ORCID ID: 0000-0003-0223-0216,

e-mail: kenzhebekova.a@kaznu.kz

²**Хоффманн Д.,**

ғылым докторы, профессор, ORCID ID: 0000-0003-0922-7802,

e-mail: hoffmann@physik.tu-darmstadt.de

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан

²Дармштадт техникалық университеті, Дармштадт қ., Германия

ЖОҒАРЫ ТЫҒЫЗДЫҚТАҒЫ СУТЕГІ ПЛАЗМАСЫНЫң ОПТИКАЛЫҚ ЖӘНЕ ДИНАМИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Аннотация

Бұл жұмыста сутегінің оптикалық қасиеттерін, атап айтқанда электромагниттік толқындардың шағынысу және сыну коэффициенттерін, жалпыланған Друде–Лоренц үлгісімен сипатталатын заттың өткізгіштігі арқылы зерттеу нәтижелері ұсынылған. Зерттеуде сутегінің әртүрлі температуралар мен тығыздықтағы микроскопиялық иондық ток тербелістерінің бойлық және көлденен спектрлері қарастырылып, электрон алмасу мен корреляциялық әсерлердің ықпалы талданы. Есептеу кванттық Монте-Карло модельдеуі негізінде алғынан локальді өріс түзетулерін ескеретін эффективті өзара әрекеттесу потенциалын қолдану арқылы жүргізілді. Кванттық статистикалық есептеулерге негізделген дәл жуықтауларды қамтитын локальді өріс модельдерін қолдану тығыз электрондық жүйелердің көліктік және оптикалық қасиеттерін сенімді сипаттауға мүмкіндік береді. Атап айтқанда, локальді өріс функциясын ескеру оптикалық және динамикалық қасиеттерді есептеуде айтарлықтай түзетулер енгізеді, бұл ыстық тығыз затты, металданған плазманы және азғындалған электрондық жүйелерді модельдеу үшін аса маңызды. Сондай-ақ локальді өріс функциясының нақты формасының болуы плазманың оптикалық және динамикалық қасиеттерін, оның ішінде шағылу және жұтылу коэффициенттерін, сондай-ақ өзіндік тербеліс режимдерін дәл сипаттауға мүмкіндік береді.

Тірек сөздер: тығыз плазма, эффективті потенциал, оптикалық қасиеттер, шағылу коэффициенті, жұтылу коэффициенті, өзіндік тербеліс режимдері.

¹Kodanova S.,

Cand. Phys.-Math. Sc., Professor, ORCID ID: 0000-0001-7098-471X,
e-mail: kodanova@physics.kz

^{1*}Issanova M.,

PhD, Associate Professor, ORCID ID: 0000-0002-0264-2694,
*e-mail: issanova@physics.kz

¹Bastykova N.,

PhD, Associate Professor, ORCID ID: 0000-0002-8400-7183,
e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz

¹Kenzhebekova A.,

PhD, Senior Lecturer, ORCID ID: 0000-0003-0223-0216,
e-mail: kenzhebekova.a@kaznu.kz

²Hoffmann D.,

D.Sc., Professor, ORCID ID: 0000-0003-0922-7802,
e-mail: hoffmann@physik.tu-darmstadt.de

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²Technical University of Darmstadt, Darmstadt, Germany

STUDY OF OPTICAL AND DYNAMIC PROPERTIES OF HYDROGEN PLASMA AT HIGH DENSITIES

Abstract

This paper presents the results of a study of the optical properties of hydrogen, specifically the reflection and refraction coefficients of electromagnetic waves, with the permittivity of the substance described by the generalized Drude–Lorentz model. This paper examines the longitudinal and transverse spectra of microscopic ion current oscillations in hydrogen at various temperatures and densities, and analyzes the influence of electron exchange and correlation effects. The study was conducted using the effective interaction potential, taking into account a local field correction obtained from quantum Monte Carlo simulations. The use of accurate local field models, such as approximations based on quantum statistical calculations, allows for the reliable reproduction of the transport and optical properties of dense electron systems. In particular, taking into account the local field function leads to significant corrections in the calculations of optical and dynamic properties, which is critical for modeling hot dense matter, metallized plasma, and degenerate electron systems. In addition, the presence of an exact form of the local field function allows us to correctly describe the optical and dynamic properties of the plasma, including the reflection and absorption coefficients and natural oscillation modes.

Keywords: dense plasma, effective potential, optical properties, reflection coefficient, absorption coefficient, natural oscillation modes.

Дата поступления статьи в редакцию: 17.11.2025