

# РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ОТРАЖЕНИЯ УДАРНО-СЖАТОГО КСЕНОНА ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Г. Э. Норман<sup>a,b</sup>, И. М. Саитов<sup>a\*</sup>, В. В. Стегайлов<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
125412, Москва, Россия

<sup>b</sup>Московский физико-технический институт  
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

<sup>c</sup>Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»  
101000, Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 мая 2014 г.,  
после переработки 11 ноября 2014 г.

В рамках теории функционала электронной плотности рассчитаны значения коэффициента отражения излучения от плазмы ударно-сжатого ксенона. Рассматриваются его зависимости от частоты падающего излучения и от плотности плазмы. Используется формула Френеля. Для расчета мнимой части диэлектрической проницаемости применяется выражение для продольной компоненты диэлектрического тензора в длинноволновом пределе. Действительная часть диэлектрической проницаемости определяется из преобразования Крамерса – Кронига. Проведено сопоставление с результатами эксперимента. Предложен подход для оценки плазменной частоты в ударно-сжатом ксеноне.

DOI: 10.7868/S0044451015050171

## 1. ВВЕДЕНИЕ

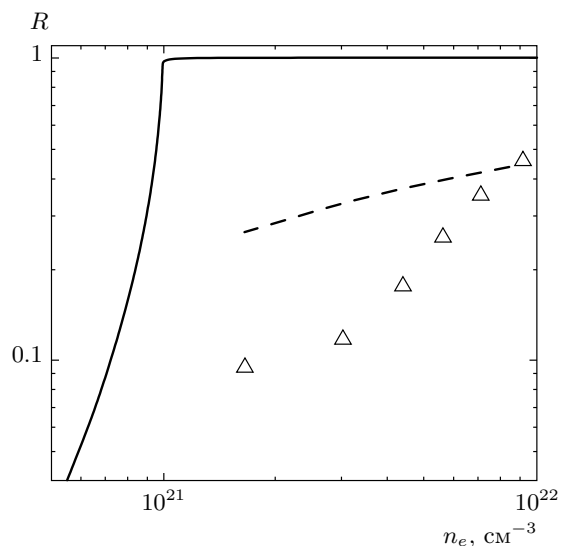
Измерения коэффициента отражения и теоретический анализ их результатов являются распространенными методами исследования фазовых диаграмм различных веществ [1–9]. В настоящей работе рассматривается плазма ударно-сжатого ксенона. Значения коэффициента отражения от ударно-сжатого ксенона были получены для длин волн лазерного излучения  $\lambda = 1064, 694, 532$  нм в уникальных экспериментах [10–13], в которых плазма генерировалась посредством динамического сжатия газообразного ксенона мощной ударной волной. Для этого применялась техника высокоскоростного соударения металлического ударника, разогнанного до скорости 6 км/с, и газовой кюветы с последующим необратимым нагревом газа во фронте ударной волны. Для создания в газе плоской конфигурации ударно-волнового фронта используется модифицированный генератор прямоугольных волн. Плотность плазмы варьируется за счет из-

менения начального давления газа. Начальные параметры газообразного ксенона: давление  $P_0 = 1.0\text{--}5.7$  МПа, плотность  $\rho_0 = 0.06\text{--}0.80$  г/см<sup>3</sup>, температура  $T = 270$  К. Параметры плазмы, возникающей при ударном сжатии: давление  $P = 1.6\text{--}17$  ГПа, плотность  $\rho_0 = 0.5\text{--}4.0$  г/см<sup>3</sup>, температура  $T \approx 30000$  К. Коэффициент отражения определяется на основе сигналов фотоприемников, регистрирующих отраженное излучение, и фотоприемника, фиксирующего зондирующий импульс. Удовлетворительного теоретического объяснения полученным результатам пока не было найдено.

На рис. 1 представлены зависимости коэффициента отражения от плотности зарядов в плазме ксенона: случай бесстолкновительной плазмы с отсечкой на плазменной частоте, экспериментальные данные [10] (значения  $n_e$  соответствуют оценкам, полученным в [10]) и аппроксимация результатов измерений формулой Друде [14].

Основной целью эксперимента [10] была попытка оценки плотности свободных носителей заряда и плазменной частоты для ударно-сжатого ксенона на основе данных измерения зависимости коэффициента отражения от плотности. Предполагалось, что

\*E-mail: saitoilnur@gmail.com



**Рис. 1.** Зависимость коэффициента отражения от плотности электронов  $n_e$ . Сплошная линия — случай бесстолкновительной плазмы с отсечкой на плазменной частоте. Треугольниками обозначены результаты эксперимента [10]. Штриховая линия соответствует аппроксимации результатов эксперимента с использованием модели Друде с частотой столкновений в приближении Борна [14]. Длина волны 1064 нм

профиль зависимости коэффициента отражения от плотности имеет схожий вид со случаем бесстолкновительной плазмы (сплошная линия на рис. 1). Тогда зависимость диэлектрической проницаемости (ДП) от частоты имела бы вид  $\varepsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ . При этом, если  $\omega_p > \omega$ , то происходит полное внутреннее отражение и  $R = 1$ .

Однако измеренная зависимость коэффициента отражения от плотности (треугольники на рис. 1) не содержит отсечки на плазменной частоте и плавно возрастает с увеличением плотности. Попытка учета частоты столкновений в приближении Борна в рамках модели Друде [14] (штриховая линия на рис. 1) также не привела к удовлетворительному описанию результатов эксперимента.

Дальнейшие попытки объяснить результаты измерений в рамках модели Друде были связаны с предположением об увеличенной ширине волнового фронта [14–16]. Несмотря на улучшение согласия с экспериментом, данный подход не позволил установить взаимно однозначное соответствие между значениями коэффициента отражения и плотностью свободных зарядов. Также на данный момент отсутствует независимое экспериментальное подтверждение предложенных ширин волнового фронта.

Ударно-сжатая плазма ксенона представляет собой пример разогретого плотного состояния вещества (warm dense matter), теоретическое описание которого представляет проблему, требующую нестандартных методов описания (см., например, работы [17–21]). Одним из эффективных методов изучения свойств разогретого плотного вещества из первых принципов является метод теории функционала электронной плотности (ТФП) [22–24]. Фундаментальность этого подхода позволяет применять его для изучения широкого спектра явлений (см., например, работы [25–28]) и, в частности, для расчета ДП веществ [4, 6, 8, 9, 29–34].

В работе [29] для расчета коэффициента отражения от плазмы ксенона был применен квантовый метод молекулярной динамики в рамках ТФП для конечных температур, основанный на формулировке ТФП, данной в работе [35]. Для расчета компоненты ДП использовалось выражение для поперечной компоненты ДП — формула Кубо–Гринвуда [36, 37] и преобразование Крамерса–Кронига. Результаты, полученные в работе [29], лучше согласуются с экспериментом [10] по сравнению с данными, рассчитанными в рамках модели Друде. При этом значения коэффициента отражения [29] все же заметно превышают данные измерений [10] в области малых плотностей. Введение поправок, увеличивающих ширину энергетической щели между связанными и свободными состояниями, улучшает согласие результатов [29] с экспериментом [10] при малых плотностях, но приводит к недооценке значений коэффициента отражения в области больших плотностей.

Используемый в данной работе подход во многом схож с примененным в работе [29], однако предполагает использование продольного выражения для мнимой части ДП, более точного в рамках ТФП. В разд. 2 приведены основные формулы для расчета ДП и коэффициента отражения. Для мнимой части ДП приведено сопоставление выражений для различных компонент тензора ДП. В разд. 3 рассматривается метод расчета коэффициента отражения в рамках ТФП на основе формул, приведенных в разд. 2. В качестве тестового расчета приводится зависимость коэффициента отражения от плотности, рассчитанная с использованием формулы Кубо–Гринвуда для мнимой части ДП и сопоставленная с результатами работы [29]. В разд. 4 обсуждается применимость понятия «свободные электроны» для случая плотной плазмы. Предложен метод расчета плазменной частоты в рамках подхода ТФП, и приведены результаты расчета зависимости дан-

ного параметра от плотности. Также рассчитаны значения эффективных концентраций «свободных электронов» для различных плотностей плазмы. В разд. 5 представлены основные результаты: зависимости коэффициента отражения от плотности для разных длин волн падающего излучения, рассчитанные с использованием выражения для продольной компоненты ДП. Приводится также анализ сходимости и оценка точности полученных результатов. Раздел 6 посвящен обсуждению результатов. Проводится сопоставление результатов расчета, полученных в настоящей работе, с данными работы [29].

## 2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Расчеты ДП и коэффициента отражения лазерного излучения от ударно-сжатого ксенона проводятся в рамках ТФП. Из 54 электронов атома ксенона 46 электронов, находящихся на внутренних оболочках, рассматриваются посредством псевдопотенциала спроектированных присоединенных волн [38]. Для 8 электронов, находящихся на внешней оболочке (главное квантовое число 5), решается система уравнений Кона–Шэма, с псевдопотенциалом, который эффективно учитывает поле остальных 46 электронов.

Псевдопотенциалы могут быть локальными и нелокальными. Локальные потенциалы являются диагональными, и их матричные элементы представимы в виде

$$\langle \mathbf{r} | V | \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1)$$

Нелокальные потенциалы  $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  не являются диагональными, что приводит к тому, что их воздействие на волновые функции невозможно рассматривать как произведение, и необходимо вычислять интеграл:

$$\langle \mathbf{r} | V | \psi \rangle = \int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'. \quad (2)$$

Данное свойство, в частности, приводит к тому, что оператор потенциала  $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  не коммутирует с оператором координаты  $\mathbf{r}$ . Таким образом, это приближение накладывает определенные ограничения на формулу для ДП, которая обсуждается ниже.

Диэлектрическая проницаемость — величина комплексная и может быть представлена в виде  $\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i\varepsilon^{(2)}$ . Существуют два выражения для тензора ДП в зависимости от характера воздействия внешнего поля: продольное и поперечное.

В данной работе мы рассматриваем процесс отражения лазерного излучения от плазмы. В случае

воздействия электромагнитного (поперечного) излучения на вещество функцией отклика является поперечная ДП, зависимость мнимой части которой от частоты  $\omega$  при заданном значении температуры и конфигурации ионов  $\{\mathbf{R}_i\}$  в длинноволновом пределе имеет вид [39]

$$\varepsilon_T^{(2)}(\omega, \mathbf{R}_i) = \frac{1}{3} \frac{4\pi^2 e^2}{\omega^2 \Omega} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \sum_{n, n', \alpha, \mathbf{k}} 2w_{\mathbf{k}} \times \\ \times [f(E_{n', \mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(E_{n, \mathbf{k}})] \times \\ \times |\langle \psi_{n', \mathbf{k}} | \hat{v}_\alpha | \psi_{n, \mathbf{k}} \rangle|^2 \delta(E_{n', \mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{n, \mathbf{k}} - \hbar\omega), \quad (3)$$

где  $e$  — элементарный заряд,  $\Omega$  — объем системы,  $\mathbf{q}$  — волновой вектор падающего излучения. Суммирование проводится по всем состояниям  $n, n'$ . При этом учитываются вклады элементов суммы как с  $n = n'$  (внутризонные переходы), так и с  $n \neq n'$  (межзонные переходы). Суммирование проводится по всем  $\mathbf{k}$ -точкам в зоне Бриллюэна с учетом веса  $w_{\mathbf{k}}$   $\mathbf{k}$ -точки. Множитель 2, стоящий перед  $w_{\mathbf{k}}$ , учитывает вырождение по спину. Результат суммирования по индексу  $\alpha$ , умноженный на  $1/3$ , является усреднением по трем пространственным координатам. Таким образом учитывается предположение об изотропности рассматриваемой системы, что оправдано для случая плазмы.

В выражении (3)  $\hat{v}$  — оператор скорости,  $E_{n, \mathbf{k}}$  — соответствующие данным волновым функциям собственные значения (уровни энергии),  $f(E_{n, \mathbf{k}})$  — функция распределения Ферми–Дирака, определяющая заселенность уровней,  $\psi_{n, \mathbf{k}}$  — решение уравнения Шредингера (Кона–Шэма). В данной работе решение системы уравнений Кона–Шэма находится в виде суперпозиции плоских волн, поэтому его можно представить в виде функций Блоха  $\psi_{n, \mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n, \mathbf{k}}$ , где  $u_{n, \mathbf{k}}$  — периодическая часть волновой функции.

Оператор скорости  $\hat{v}$  можно выразить через коммутатор,

$$\hat{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{r}], \quad (4)$$

где  $H$  — гамильтониан. Если потенциал локальный, то, заменяя в выражении (3)  $\hat{v}$  на  $\mathbf{p}/m$  ( $m$  — масса электрона,  $\mathbf{p}$  — оператор его импульса), получаем формулу Кубо–Гринвуда [36, 37]:

$$\varepsilon_T^{(2)}(\omega) = \frac{1}{3} \frac{4\pi^2 e^2 \hbar^2}{m^2 \omega^2 \Omega} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \sum_{n, n', \alpha, \mathbf{k}} 2w_{\mathbf{k}} \times \\ \times [f(E_{n', \mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(E_{n, \mathbf{k}})] |\langle u_{n', \mathbf{k}} | \nabla_\alpha - i\mathbf{k}_\alpha | u_{n, \mathbf{k}} \rangle|^2 \times \\ \times \delta(E_{n', \mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{n, \mathbf{k}} - \hbar\omega), \quad (5)$$

где  $m$  — масса электрона. Однако, если потенциал нелокальный, операторы скорости и импульса различны и связаны соотношением [40]

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{p}}{m} + \frac{i}{\hbar} [V(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \mathbf{r}]. \quad (6)$$

Таким образом, в случае нелокальности потенциала формула Кубо–Гринвуда для расчета мнимой части ДП оказывается неприменимой.

Несмотря на то что рассматриваемая среда является изотропной, отклики системы зависят от вида возмущения (продольного или поперечного) и в общем случае не совпадают. Простейшей иллюстрацией данного утверждения является тензор проводимости, полученный в приближении гидродинамической модели плазмы [41]. Однако в длинноволновом пределе поперечная и продольная компоненты тензора ДП совпадают. Представим оператор скорости в виде [39]

$$\hat{\mathbf{v}} = \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} [H, \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})] / \hbar |\mathbf{q}|. \quad (7)$$

Подставляя формулу (7) в (3), получаем выражение для зависимости мнимой части ДП от частоты  $\omega$  при заданных значениях температуры и конфигурации ионов  $\{\mathbf{R}_i\}$  для продольного тензора ДП:

$$\begin{aligned} \varepsilon_L^{(2)}(\omega, \mathbf{R}_i) &= \frac{1}{3} \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \sum_{n, n', \alpha, \mathbf{k}} 2w_{\mathbf{k}} \times \\ &\times [f(E_{n', \mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(E_{n, \mathbf{k}})] |\langle u_{n', \mathbf{k}+\mathbf{e}_\alpha q} | u_{n, \mathbf{k}} \rangle|^2 \times \\ &\times \delta(E_{n', \mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{n, \mathbf{k}} - \hbar\omega), \quad (8) \end{aligned}$$

где  $\mathbf{e}_\alpha$  — единичный вектор, определяющий направление декартовой оси, соответствующей координате  $\alpha$ . Выражение (8) было получено в работах [42–44] в первом приближении теории возмущений в рамках приближения случайных фаз. Так как для получения (8) мы используем преобразование оператора скорости, а не импульса, полученное выражение (8) лишено недостатка формулы Кубо–Гринвуда и применимо для любых псевдопотенциалов. Следует заметить, что из (8) также можно получить формулу (5), воспользовавшись соотношением

$$\begin{aligned} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | u_{n'\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle}{|\mathbf{q}|} &= \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{\langle u_{n'\mathbf{k}} | (\nabla - i\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{E_{n'\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{n\mathbf{k}}}, \quad (9) \end{aligned}$$

которое верно только в случае локальности псевдопотенциала.

Действительная часть ДП определяется преобразованием Крамерса–Кронига:

$$\varepsilon^{(1)}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega' \frac{\varepsilon^{(2)}(\omega')\omega'}{(\omega')^2 - (\omega - i\eta)^2}, \quad (10)$$

где интеграл (10) находится в смысле главного значения в пределе  $\eta \rightarrow 0$ . В общем случае функцией отклика системы на внешнее воздействие является не ДП, а величина, обратная ей. Вследствие принципа причинности соотношения Крамерса–Кронига всегда верны для обратной ДП. При этом выражение (10) справедливо только в пределе, когда длина волны падающего излучения многократно превышает величину характерного размера системы, что имеет место в нашем случае.

Для рассматриваемого диапазона параметров плазмы все длины волн лазерного излучения для всех трех случаев по величине много больше как характерного размера атома, так и длины свободного пробега электрона. Однако в данном случае необходимо рассмотреть еще один характерный размер, который необходимо сравнить с величиной волнового вектора  $\mathbf{q}$ . Переход к длинноволновому пределу, в частности, означает, что  $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{k}|$ , где  $\mathbf{k}$  для периодических систем можно рассматривать как вектор обратной решетки. В данном случае система разупорядоченная, и поэтому можно взять  $|\mathbf{k}| \sim d$ , где  $d$  — макроскопический размер системы. Тогда из условия  $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{k}|$  следует, что  $\lambda \gg d$ . В данном случае, поскольку среда является поглощающей, в качестве  $d$  можно выбрать глубину проникновения поля в вещество, так как именно с этой глубины происходит большая часть отражения. Тогда отношение данного параметра к длине волны можно определить как  $d/\lambda = n_1/4\pi n_2$ , где  $n_2$  и  $n_1$  — соответственно мнимая и действительная компоненты показателя преломления.

Также следует заметить, что в данном случае отклик системы происходит на внешнее воздействие, источник которого находится вне системы. При этом в качестве функции отклика рассматривается диэлектрическая проницаемость (а не обратная ей величина), что применимо, только если длина волны много больше характерного размера рассматриваемой системы.

Значения ДП находятся для фиксированной конфигурации ионов. Для нахождения значения, соответствующего выбранной температуре и плотности, проводится усреднение ДП по набору равновесных конфигураций. Коэффициент отражения рассчиты-

вается по формуле Френеля для нормального падения:

$$R = \left| \frac{(\sqrt{\varepsilon} - 1)}{(\sqrt{\varepsilon} + 1)} \right|^2. \quad (11)$$

### 3. МЕТОД РАСЧЕТА

Для расчетов используется пакет VASP [45–47]. Как было показано в предыдущем разделе, выражение (5) для поперечной компоненты тензора ДП дает корректный результат только для случая локальности используемого псевдопотенциала. Если псевдопотенциал нелокальный (что верно практически для всех псевдопотенциалов, используемых в ТФП-кодах), необходимо использовать выражение (8) для продольной компоненты тензора ДП.

В расчетах используется приближение обобщенных градиентов для обменной и корреляционной части функционала электронной плотности. Используется функционал Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [48]. Волновые функции, являющиеся решением системы уравнений Кона–Шэма, и соответствующие им уровни энергии необходимы для расчета компонент ДП. Решение данной системы находится в виде суперпозиции плоских волн. Энергия обрезания базиса плоских волн выбиралась равной 180 эВ.

Ограниченность объема рассматриваемой системы приводит к дискретности спектра собственных значений. В качестве приближения для  $\delta$ -функции, входящей в формулы (5) и (8), используется функция Гаусса, ширина которой выбиралась равной 0.03 эВ. Проводились также расчеты ДП для значений  $\delta$  от 0.01 до 0.1 и было обнаружено, что результат при этом не изменяется.

Расчеты проводятся для канонического ансамбля. Температура ионов регулируется посредством термостата Ноэ–Хувера [49, 50]. Равная ей температура электронов задается распределением Ферми–Дирака для чисел заполнения  $f(E)$ . Температура рассматриваемой системы около 30000 К. Значения температур и плотностей, соответствующих условиям экспериментов [10–13], для которых проводился расчет, а также вычисленные в рамках ТФП при данных параметрах значения химического потенциала (энергии Ферми) приведены в таблице.

Значения ДП усредняются по набору конфигураций ионов. Этот набор находился методом квантовой молекулярной динамики. Траектории частиц рассчитываются интегрированием классических уравнений движения Ньютона с силами, найденными по теореме Гельмана–Фейнмана. В за-

**Таблица.** Параметры расчета (плотности и температуры) и вычисленные значения химического потенциала  $E_F$

$\lambda = 1064$ нм			$\lambda = 694$ нм, 532 нм		
$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	$T$ , К	$E_F$ , эВ	$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	$T$ , К	$E_F$ , эВ
0.51	30050	–8.26	0.53	32900	–8.84
0.97	29570	–6.5	1.1	33100	–6.8
1.46	30260	–5.37	1.6	33120	–5.5
1.98	29810	–4.2	2.2	32090	–4.08
2.7	29250	–1.75	2.8	32020	–2.96
3.84	28810	–0.92	3.4	31040	–1.84

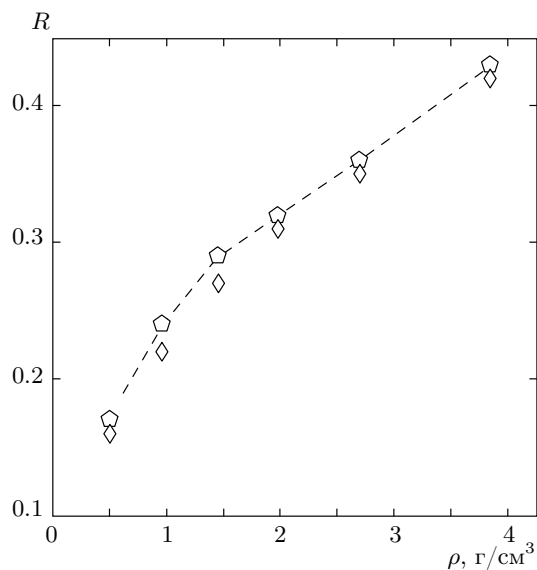
висимости от плотности частиц в расчетной ячейке траектории насчитывают от 4000 до 10000 шагов по 2 фс. На каждой траектории выделяется от 5 до 10 статистически-независимых конфигураций.

Рассматривался диапазон плотностей плазмы  $\rho = 0.51\text{--}3.84$  г/см<sup>3</sup>. Количество частиц в расчетной ячейке варьировалось от 16 при наименьшей плотности до 128 при наибольшей. Время расчета ДП для заданной конфигурации частиц при наименьшей плотности на кластере К-100 составляло около 15 ч на 36 ядрах. При увеличении плотности при заданном количестве частиц в расчетной ячейке время расчета уменьшалось.

Как было упомянуто во Введении, расчет коэффициента отражения от плазмы ударно-сжатого ксенона был проведен в работе [29], где для нахождения мнимой части ДП применялась формула Кубо–Гринвуда (5). Мы также провели расчет по методу, предложенному в [29]. Как видно из рис. 2, наши результаты достаточно хорошо согласуются с данными работы [29], несмотря на то что в ней использовалась более ранняя версия обменно-корреляционного функционала PBE [51].

### 4. СВОБОДНЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ И ПЛАЗМЕННАЯ ЧАСТОТА

Низкотемпературная атомарная плазма состоит из электронов, ионов и атомов, находящихся в основном и возбужденных состояниях. В случае разреженной плазмы электроны можно условно разделить на связанные, характеризующиеся дискретным спектром, и свободные с непрерывным спектром. При этом электрон в атоме может находиться как



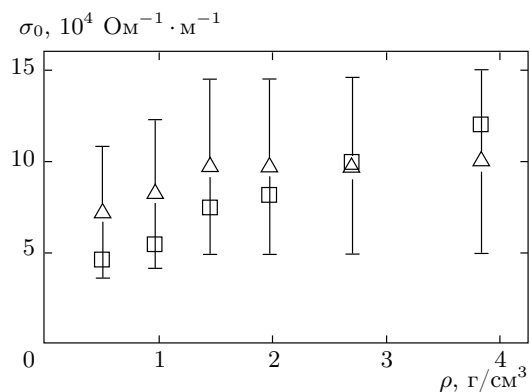
**Рис. 2.** Зависимость коэффициента отражения от плотности для длины волны 1064 нм. Результаты расчета в рамках ТФП с формулой Кубо–Гринвуда для мнимой части ДП: пятиугольники, соединенные штрихами — результаты работы [29], ромбы — результаты данной работы

в основном состоянии, так и на возбужденных уровнях.

Возбужденные уровни уширяются вследствие эффекта Штарка, и верхние уровни сливаются, образуя квазинепрерывный спектр, начало которого определяется формулой Инглиса–Теллера. Происходит и более сильное преобразование парных возбужденных состояний, поскольку время их жизни уменьшается с ростом возбуждения вследствие кулоновских столкновений. Это время обращается в нуль еще при энергиях ниже границы ионизации на некоторую величину  $\Delta E$ , которая может быть меньше снижения Инглиса–Теллера. Состояния электронов и ионов в интервале  $\Delta E$  можно отнести к квазинепрерывным коллективным многочастичным состояниям [52].

Как снижение Инглиса–Теллера, так и  $\Delta E$  увеличиваются с ростом концентрации зарядов. Поэтому выделение свободных состояний в спектре электронных состояний становится все более условным и приближенным, что затрудняет вычисление плазменной частоты по стандартной формуле.

В настоящей работе предложены два метода оценки плазменной частоты на основе рассчитанных зависимостей мнимой части ДП от частоты. Первый метод основан на расчете динамической проводимости,



**Рис. 3.** Зависимость статической проводимости от плотности. Треугольники — результаты измерений [14], квадраты — результаты расчета

сти, действительная часть которой связана с мнимой частью ДП соотношением  $\sigma(\omega) = \varepsilon_0 \omega \varepsilon^{(2)}(\omega)$ , где  $\varepsilon_0$  — диэлектрическая постоянная. Полученную зависимость  $\sigma(\omega)$  в области малых частот аппроксимируем формулой Друде [53, 54]:

$$\sigma(\omega) = \frac{\varepsilon_0 \omega_p^2 \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}. \tag{12}$$

Параметрами данной аппроксимации являются время релаксации  $\tau$  и искомая плазменная частота  $\omega_p$ . На рис. 3 приведено сопоставление экспериментальной [14] и рассчитанной зависимостей статической проводимости от плотности. Видно, что результаты расчета достаточно хорошо согласуются с экспериментом.

Второй способ основан на использовании правила сумм [55]:

$$\int_0^\infty \omega \varepsilon^{(2)}(\omega) d\omega = \frac{\pi}{2} \omega_p^2. \tag{13}$$

Учитывая необходимость использования численных методов для расчета интеграла (13), рассмотрим следующую функцию, зависящую от верхнего предела  $\omega_{max}$ :

$$S(\omega_{max}) = \frac{2m\varepsilon_0\Omega}{\pi N_e e^2} \int_0^{\omega_{max}} \varepsilon^{(2)}(\omega) \omega d\omega. \tag{14}$$

Выражение (14) выводится из (13) заменой бесконечности в верхнем пределе интеграла (13) на  $\omega_{max}$  и с учетом выражения для плазменной частоты

$$\omega_p^2 = N_e e^2 / m \varepsilon_0 \Omega. \tag{15}$$

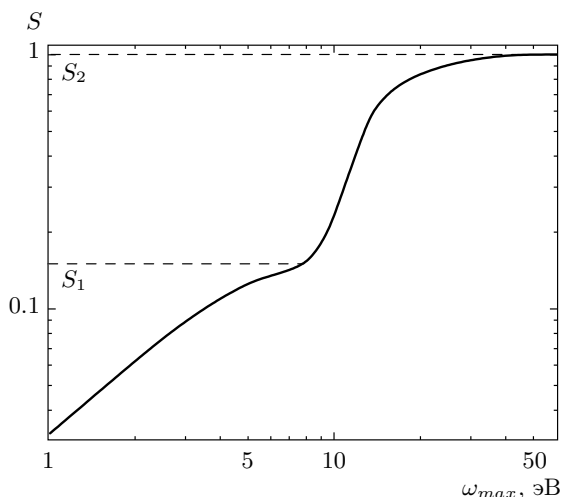


Рис. 4. Зависимость функции  $S$  от верхнего предела  $\omega_{max}$

Для ксенона количество электронов в рамках подхода ТФП  $N_e = 8N$ , где  $N$  — количество тяжелых частиц в расчетной ячейке объемом  $\Omega$ . На рис. 4 изображена зависимость  $S(\omega_{max})$  при значении плотности ксенона  $\rho = 2.2 \text{ г/см}^3$ . Видно, что функция  $S$  имеет два стационарных значения; обозначим их как  $S_1$  и  $S_2$ . Значение  $S_2 = 1$  соответствует восьми электронам, что указывает на правильность проведенного расчета.

В выражении для мнимой части ДП, определяемой формулой (8) и входящей в (14), в рамках подхода ТФП учитываются все возможные переходы между электронными уровнями. Данные переходы можно разбить на два типа: межзонные и внутризонные. Межзонные переходы в плазме возможны между различными дискретными связанными состояниями (переходы между состояниями с различным главным квантовым числом) и между связанными и свободными состояниями (фотоионизация). Внутризонные переходы возможны как в непрерывном спектре, так и внутри связанного состояния (переходы между состояниями с одинаковым главным квантовым, но с разным орбитальным числом).

Первое стационарное значение  $S_1$  функции  $S(\omega_{max})$  является вкладом низкочастотных переходов и соответствует вкладу внутризонных переходов. Таким образом, это значение можно использовать для оценки плазменной частоты, определяемой внутризонными переходами в непрерывном спектре, применив формулу

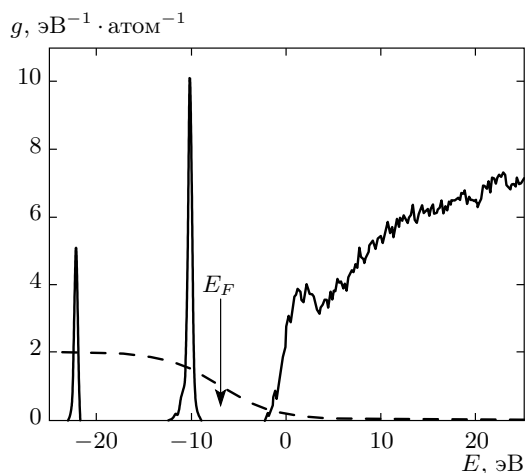


Рис. 5. Плотность электронных состояний при значении плотности плазмы  $\rho = 1.1 \text{ г/см}^3$ . Пунктирная линия — заселенность уровней  $f(E)$ . Стрелкой указан уровень Ферми

$$\omega_p^2 = \frac{N_e e^2}{m \Omega \epsilon_0} S_1. \tag{16}$$

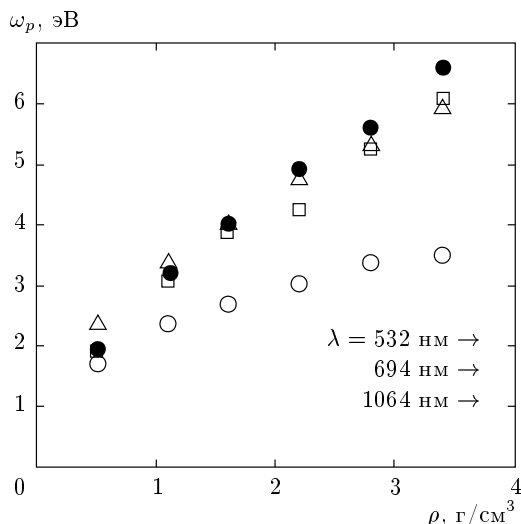
Полученное подобным образом значение  $\omega_p$  может быть несколько завышено ввиду учета вклада внутризонных переходов в дискретном спектре. Однако анализ плотности электронных состояний в плазме ударно-сжатого ксенона показал, что для рассматриваемого диапазона плотностей и температур вклад таких переходов пренебрежимо мал.

Помимо двух перечисленных способов сделаем оценку плазменной частоты, рассматривая электроны с энергией, большей энергии Ферми  $E_F$ , как свободные. Тогда концентрацию  $n_e$  свободных носителей заряда можно вычислить по формуле

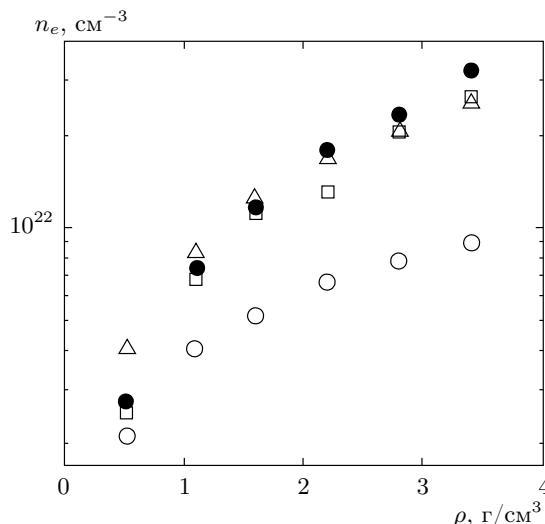
$$n_e/n = 2 \int_{E_F}^{\infty} f(E)g(E) dE, \tag{17}$$

где  $n = N/\Omega$  — суммарная концентрация ионов и атомов,  $g(E)$  — плотность электронных состояний. На рис. 5 приведен пример функции  $g(E)$  для плотности  $\rho = 1.1 \text{ г/см}^3$ .

На рис. 6 показаны результаты расчета зависимости плазменной частоты от плотности плазмы для всех трех способов. Значения  $\omega_p$ , полученные в настоящей работе, практически совпадают с оценками работ [10, 14] в области малой плотности. Далее с ростом  $\rho$  возникает заметное расхождение значений  $\omega_p$ . При этом зависимости плазменной частоты от плотности, рассчитанные с использованием



**Рис. 6.** Зависимость плазменной частоты от плотности плазмы ксенона: темные кружки — значения плазменной частоты, рассчитанные с использованием формулы Друде (12); квадраты — результаты расчета по формуле (16); светлые кружки — оценки значений плазменной частоты, полученные в работах [10, 14]; треугольники — значения плазменной частоты, рассчитанные с использованием формулы (17) для концентрации свободных носителей заряда. Стрелками указаны значения частот излучения, соответствующие длинам волн 1064, 694 и 532 нм



**Рис. 7.** Зависимость концентрации электронов  $n_e$  от плотности плазмы  $\rho$ : темные кружки — значения  $n_e$ , рассчитанные с использованием формул (12) и (15); квадраты — результаты расчета с использованием формул (16) и (15); светлые кружки — оценки значений  $n_e$ , полученные в работах [10, 14]; треугольники — значения  $n_e$ , рассчитанные с использованием формулы (17)

формулы Друде, полученной в рамках модели свободных электронов, и формулы (16) практически совпадают, что в определенной степени является подтверждением того, что первое стационарное значение функции  $S(\omega_{max})$  определяет вклад переходов в спектре свободных электронов. Значения плазменной частоты, рассчитанные с использованием формулы (17), также достаточно хорошо согласуются с результатами расчета по формуле (16).

Зная значения плазменной частоты, по формуле (15) можно рассчитать значения эффективной концентрации  $n_e$  свободных носителей заряда в плазме. На рис. 7 приведены зависимости  $n_e$  от плотности плазмы.

Значения концентрации свободных электронов и соответствующие им значения плазменной частоты в работах [10, 14] были получены в рамках химической модели плазмы [56]. При этом использовалось уравнение Саха с учетом эффектов кулоновского притяжения в виде дебаевской поправки и короткодействующего отталкивания в приближении твердых сфер [57, 58]. Таким образом, полученные оцен-

ки  $n_e$  и  $\omega_p$  связаны лишь с параметрами плазмы, образующейся при ударном сжатии ксенона, и никак не связаны с данными по зависимости коэффициента отражения от плотности.

В нашем случае мнимая часть ДП  $\epsilon^{(2)}$  входит в выражения как коэффициента отражения, так и плазменной частоты, однозначным образом определяя их значения. Таким образом, в рамках подхода, используемого в данной работе, рассчитанные значения плазменной частоты согласованы и напрямую связаны с полученной зависимостью коэффициента отражения от плотности. Использование плазменной частоты вместо концентрации свободных электронов согласуется с представлениями работы [59].

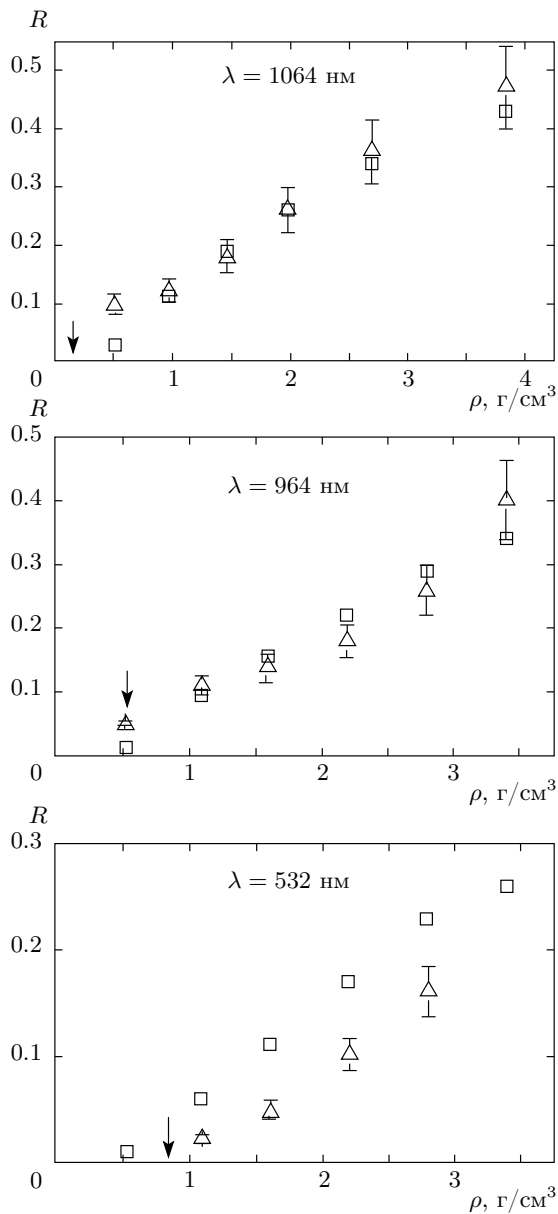
## 5. КОЭФФИЦИЕНТ ОТРАЖЕНИЯ

### 5.1. Результаты

На рис. 8 представлены результаты расчета зависимости коэффициента отражения от плотности для различных длин волн лазерного излучения и данные экспериментов [10–13]. Для расчета мнимой части ДП использовалось выражение (8).

Для длин волн 1064 нм и 694 нм результаты, полученные в настоящей работе, находятся в со-





**Рис. 8.** Коэффициент отражения от плазмы ударно-сжатого ксенона в зависимости от плотности для различных длин волн падающего излучения: треугольники — экспериментальные данные [10–13]; квадраты — результаты расчета. Стрелками указаны плотности, при которых значения плазменной частоты совпадают с частотами падающего излучения

гласии с экспериментом как по абсолютному значению, так и по зависимости от плотности в области  $\rho \geq 1 \text{ г/см}^3$ . Выпадает только одна точка в области низких плотностей при  $\rho = 0.5 \text{ г/см}^3$ . Данное расхождение в области малых плотностей может быть

связано, в частности, с тем, что при  $\rho = 0.5 \text{ г/см}^3$  отношение глубины проникновения  $d$  поля к длине волны  $\lambda$  становится равным приблизительно 0.3 и при дальнейшем уменьшении плотности возрастает. Данный факт указывает на ограниченность применимости используемого подхода в области малых плотностей. При больших плотностях параметр  $d/\lambda < 0.1$ , что обеспечивает применимость данного подхода в области  $\rho > 1 \text{ г/см}^3$ .

Для длины волны 532 нм при плотности  $\rho = 1 \text{ г/см}^3$  отношение  $d/\lambda = 0.16$ , что, в отличие от случая длин волн 1064 нм и 694 нм, указывает на ограниченность применимости длинноволнового приближения для данной плотности. При больших  $\rho$ , так же как и для 1064 нм и 694 нм, отношение  $d/\lambda < 0.1$ . Теоретические значения коэффициента отражения для данной длины волны несколько завышены в сравнении с экспериментальными. Однако относительная зависимость коэффициента отражения от плотности воспроизводится.

На рис. 8 стрелками указаны значения плотности  $\rho$ , при которой частота падающего излучения совпадает с плазменной частотой, найденной в разд. 4. Таким образом, расчет показал отсутствие отсечки на плазменной частоте, что в определенной степени решает проблему, поставленную во Введении.

### 5.2. Погрешности

Проведен анализ по четырем параметрам расчета: верхнему пределу интегрирования в формуле (10), числу частиц в расчетной ячейке, количеству  $\mathbf{k}$ -точек в зоне Бриллюэна и количеству конфигураций ионов.

Исследование зависимости значений коэффициента отражения от верхнего предела интегрирования в (10) показало, что достаточно выбрать  $\omega_{max} = 40 \text{ эВ}$ .

Анализ зависимости результатов от количества частиц  $N$  показал, что при малой плотности результаты слабо зависят от  $N$ , начиная с  $N = 16$  частиц. Увеличение количества частиц приводит к заметному возрастанию времени расчета. Поэтому, в особенности для малых плотностей, важно определить минимальное количество частиц в расчетной ячейке, при котором достигается сходимость полученных результатов. В то же время при увеличении плотности увеличивать объем расчетной ячейки необходимо. Для больших плотностей расчеты проводились для 64 частиц. Для проверки сходимости по данному параметру также были проведены расчеты для 128 частиц.

Значения ДП для заданной плотности усреднялись по различным конфигурациям, чем определялось значение относительной погрешности найденной величины. Как было упомянуто ранее, количество конфигураций было не менее пяти.

Рассчитанные значения коэффициента отражения, представленные на рис. 8, получены для одной Г-точки в зоне Бриллюэна. Для проверки сходимости результатов по данному параметру были проведены расчеты для различного количества **k**-точек от 1 до 64. Анализ полученных результатов показал, что увеличение количества **k**-точек не влияет на значения коэффициента отражения при рассмотренных температурах.

Рассмотрим влияние погрешности вычисления компонент ДП на коэффициент отражения. Ошибка определения коэффициента отражения рассчитывается по стандартной формуле:

$$\Delta R = \sqrt{\left(\frac{\partial R}{\partial \varepsilon^{(1)}} \Delta \varepsilon^{(1)}\right)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial \varepsilon^{(2)}} \Delta \varepsilon^{(2)}\right)^2}. \quad (18)$$

Погрешность  $\Delta \varepsilon^{(2)}$  определения мнимой части ДП есть среднеквадратичное отклонение значений  $\varepsilon^{(2)}$  при усреднении по различным конфигурациям. При увеличении числа конфигураций значения  $\Delta \varepsilon^{(2)}$  уменьшаются. Погрешности определения мнимой  $\Delta \varepsilon^{(2)}$  и действительной  $\Delta \varepsilon^{(1)}$  частей ДП связаны соотношением

$$\begin{aligned} \Delta \varepsilon^{(1)}(\omega) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Delta \varepsilon^{(2)}(\omega') \omega'}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\gamma \varepsilon^{(2)}(\omega') \omega'}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (19) \end{aligned}$$

где  $\gamma$  — относительная погрешность определения мнимой части ДП, которая предполагается не зависящей от частоты.

В области малых плотностей относительная ошибка определения мнимой части ДП была наибольшей и не превышала 15%. При наименьшем значении  $\rho$  относительная погрешность  $\Delta \varepsilon^{(1)}/\varepsilon^{(1)}$  составила около 1.5%, при этом отношение производных  $(\partial R/\partial \varepsilon^{(1)})/(\partial R/\partial \varepsilon^{(2)}) \ll 1$ . Таким образом, при малой плотности мнимая часть ДП вносит определяющий вклад в погрешность определения коэффициента отражения, которая при этом составляет около 30%.

При увеличении плотности до  $\rho = 3.84 \text{ г/см}^3$  производные коэффициента отражения по компонентам ДП, как и относительные погрешности  $\varepsilon^{(1)}$

и  $\varepsilon^{(2)}$ , сравниваются друг с другом. Таким образом, мнимая и действительная части ДП вносят равный вклад в  $\Delta R$ . Абсолютное значение  $\Delta R$  растет, однако относительная погрешность заметно убывает до значения менее чем 5%. Поэтому для больших значений плотности нет необходимости увеличивать точность определения мнимой части ДП.

### 6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 9 представлены зависимости коэффициента отражения лазерного излучения с длиной волны 1064 нм от плотности. Сплошная жирная линия соответствует случаю бесстолкновительной плазмы, при котором наблюдалась бы отсечка на плазменной частоте; треугольники — экспериментальные дан-

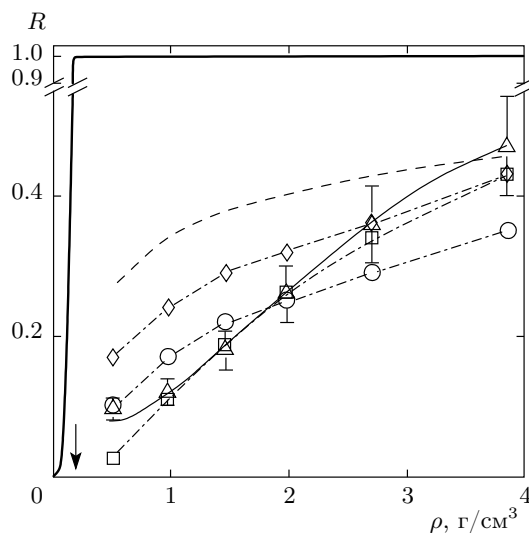


Рис. 9. Зависимость коэффициента отражения от плотности для длины волны 1064 нм: сплошная жирная линия — случай бесстолкновительной плазмы, для которой наблюдается отсечка на плазменной частоте; штриховая линия — аппроксимация результатов эксперимента с использованием модели Друде с частотой столкновений в приближении Борна [14]; тонкая линия — модель Друде с учетом ширины фронта [14–16]; треугольники — экспериментальные данные работы [10]; ромбы — результаты работы [29]; кружки — результаты [29], полученные с введением поправок на ширину энергетической щели между свободными и связанными состояниями; квадраты — результаты данной работы. Экспериментальные точки соединены штрихпунктиром для наглядности. Стрелкой указано значение плотности плазмы, при котором частота падающего излучения совпадает с плазменной

ные [10]; штриховая линия — аппроксимация данных эксперимента [10] с частотой столкновений в приближении Борна [14]. Эти линии и точки аналогичны представленным на рис. 1. Исходя из данных эксперимента, видно, что отсечка на плазменной частоте отсутствует. Использование формулы Друде с отличной от нуля частотой столкновений также не позволяет объяснить данные эксперимента.

В работах [14–16] предполагается, что при ударно-волновом сжатии ксенона плотность возрастает не скачком, а существует некоторая область конечной ширины, в которой плотность плавным образом увеличивается до заданного значения. Таким образом, волновой фронт имеет некоторую конечную ширину и лазерное излучение отражается не только непосредственно от плазмы ксенона, но и от фронта. Ширина фронта составляет около 1 мкм, что сопоставимо с длиной волны падающего излучения. Данное предположение заметно улучшает согласие с экспериментом в сравнении с предположением о резком фронте. Из рис. 9 видно, что результаты аппроксимации экспериментальных данных в рамках модели с таким широким фронтом позволяют практически точно описать зависимость коэффициента отражения от плотности для длины волны 1064 нм (однако для других длин волн согласие при этом несколько хуже). При этом, как было упомянуто ранее, предположение об уширении фронта не имеет независимого экспериментального подтверждения.

Ромбы, соединенные штрихпунктирной линией, соответствуют результатам расчета [29]. Видно, что результаты работы [29] заметно лучше согласуются с экспериментом по сравнению со случаем использования формулы Друде. Однако при этом также наблюдается заметное расхождение с экспериментом в области малых плотностей. Для улучшения согласия с экспериментом [10] в работе [29] дополнительно вводится предположение об увеличении величины энергетической щели между свободными и связанными состояниями. Проводится аналогия со спектром полупроводников, где эффект недооценки ширины запрещенной зоны наблюдался при расчете плотности электронных состояний в рамках ТФП. Как было показано в работе [39], данные поправки следующим образом входят в выражение для мнимой части ДП:

$$\varepsilon_{gap}^{(2)}(\omega) = \left[ \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega - \Delta} \right]^2 \varepsilon^{(2)}(\omega), \quad (20)$$

где  $\Delta$  — величина поправки, увеличивающая щель между связанными и свободными состояниями. В работе [29] было предложено искусственно увели-

чить щель на величину  $\Delta = 2.5$  эВ. При этом посредством выражения (20) можно достаточно приближенно учесть вклады в ДП и коэффициент отражения, которые не учитываются в рамках приближения случайных фаз.

Результаты расчета коэффициента отражения с учетом данной поправки представлены на рис. 9 в виде кружков, соединенных штрихпунктирной линией. Это приводит к некоторому улучшению согласия результатов расчета [29] с экспериментом в области малых плотностей. При этом занижаются значения коэффициента отражения в области больших плотностей. Зависимости коэффициента отражения от плотности [29] с учетом и без учета поправки практически параллельны. Таким образом, введение поправки влияет только на абсолютные значения и не отражается на характере зависимости коэффициента отражения от плотности.

Выше на рис. 5 показана плотность электронных состояний при значении плотности плазмы ксенона  $\rho = 1.1$  г/см<sup>3</sup>, рассчитанная в рамках подхода ТФП. Видно, что между «свободными» состояниями ( $E - E_F > 0$ ) и дискретным уровнем  $E \approx -10$  эВ возникает энергетическая щель.

В общем случае, как было показано в работе [52], представление об электронном спектре в плотной плазме как о совокупности непрерывного спектра свободных состояний и дискретного спектра связанных электронов, разделенных энергетической щелью, не является корректным. Таким образом, обоснованность вводимых в [29] поправок в случае расчетов свойств разогретого плотного вещества требует дальнейшего анализа и уточнения.

Результаты работы [29] были получены в предположении о резком фронте ударной волны и при этом достаточно неплохо согласуются с экспериментом. Таким образом, несмотря на то что в общем случае фронт не бывает идеальным и имеет отличную от нуля ширину, влияние эффекта уширения фронта на отражательную способность ударно-сжатого ксенона в работах [14–16] явно завышено, так как результаты проведенных расчетов из первых принципов согласуются с экспериментальными данными с той же точностью без привлечения гипотезы об уширении фронта.

Результаты расчета, полученные в данной работе заметно лучше (в сравнении с [29]) согласуются с экспериментом как по абсолютному значению, так и по зависимости от плотности, причем без введения поправок на ширину запрещенной зоны. Наклон кривой зависимости коэффициента отражения от плотности при ее увеличении, полученной в данной

работе, заметно больше по сравнению с приведенной в [29]. При этом абсолютные значения, приведенные в работе [29], значительно превышают результаты, рассчитанные в данной работе в области  $\rho < 3 \text{ г/см}^3$  (в 8 раз при наименьшем значении плотности) и в 2 раза превосходят измеренные значения [10]. Как было упомянуто ранее, основным отличием применяемого в настоящей работе подхода от подхода работы [29] является использование выражения (8) для продольной компоненты тензора вместо поперечного выражения (5), которое дает более корректный результат в сравнении с формулой Кубо–Гринвуда в рамках ТФП.

В настоящей работе не рассматривалось влияние реальной ширины волнового фронта в ксеноне. Однако нельзя исключить, что для граничных областей рассмотренного диапазона параметров этот фактор может внести определенный вклад в отражательную способность плазмы ударно-сжатого ксенона, хотя и в заметно меньшей степени, чем предполагалось в работах [14–16].

## 7. ВЫВОДЫ

В рамках теории функционала плотности рассчитан коэффициент отражения от плазмы ударно-сжатого ксенона в зависимости от плотности для различных значений длин волн. На основе полученных результатов можно сделать два основных вывода.

1. Использование выражения для продольной компоненты тензора диэлектрической проницаемости дает заметно лучшее согласие с экспериментом как в сравнении с использованием модели Друде с частотой столкновений в приближении Борна, так и с подходом теории функционала плотности с использованием формулы для поперечной компоненты тензора диэлектрической проницаемости (формулы Кубо–Гринвуда). Рассматривались длинноволновые пределы.

2. Предложен метод расчета плазменной частоты в рамках теории функционала плотности, основанный на использовании правила сумм. Этот подход позволяет получить из одного и того же выражения для тензора диэлектрической проницаемости как плазменную частоту, так и коэффициенты отражения и проводимость. Таким образом, найденные для этих величин зависимости от плотности оказываются самосогласованными, внутренне увязанными друг с другом.

Авторы признательны В. Б. Минцеву и Ю. Б. Запорожцу за постоянную информацию о результатах измерений, а также М. Desjarlais за полезные обсуждения и замечания. Расчеты проведены: на кластере К-100 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН и кластере МСЦ РАН. Работа выполнена при частичной поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 43 «Фундаментальные проблемы математического моделирования» и грантов РФФИ 14-08-31694-мол\_а (И. М. С.) и 13-01-12070-офи-м. Работа В. В. С. была поддержана Программой фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. G. W. Collins, P. M. Celliers, D. M. Gold et al., *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 13 (1999).
2. P. M. Celliers, G. W. Collins, L. B. Da Silva et al., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5564 (2000).
3. P. Loubeyre, P. M. Celliers, D. G. Hicks et al., *High Press. Res.* **24**, 25 (2004).
4. P. M. Kowalski, S. Mazevet, D. Saumon, and M. Challacombe, *Phys. Rev. B* **76**, 075112 (2007).
5. P. M. Celliers, P. Loubeyre, J. H. Eggert et al., *Phys. Rev. Lett.* **104**, 184503 (2010).
6. F. Soubiran, S. Mazevet, C. Winisdoerffer, and G. Chabrier, *Phys. Rev. B* **86**, 115102 (2012).
7. G. Huser, N. Ozaki, T. Sano et al., *Phys. Plasmas* **20**, 122703 (2013).
8. M. A. Morales, J. M. McMahon, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 065702 (2013).
9. F. Soubiran, S. Mazevet, C. Winisdoerffer, and G. Chabrier, *Phys. Rev. B* **87**, 165114 (2013).
10. V. B. Mintsev and I. B. Zaporozhets, *Contrib. Plasma Phys.* **29**, 493 (1989).
11. Ю. Б. Запорожец, В. Б. Минцев, В. К. Грязнов и др., в сб. *Физика экстремальных состояний вещества*, под ред. В. Е. Фортва (ИПХФ РАН, Черноголовка, 2002), с. 188.
12. Ю. Б. Запорожец, В. Б. Минцев, В. К. Грязнов и др., в сб. *Физика экстремальных состояний вещества*, под ред. В. Е. Фортва (ИПХФ РАН, Черноголовка, 2004), с. 140.
13. Y. Zaporozhets, V. Mintsev, V. Gryaznov et al., *J. Phys. A* **39**, 4329 (2006).

14. H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling et al., *Contrib. Plasma Phys.* **43**, 3 (2003).
15. H. Reinholz, G. Röpke, I. Morozov et al., *J. Phys. A* **36**, 5991 (2003).
16. H. Reinholz, Y. Zaporoghets, V. Mintsev et al., *Phys. Rev. E* **68**, 036403 (2003).
17. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 316 (2012).
18. Г. Э. Норман, С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, *ЖЭТФ* **141**, 910 (2012).
19. N. A. Medvedev, A. E. Volkov, K. Schwartz, and C. Trautmann, *Phys. Rev. B* **87**, 104103 (2013).
20. B. Rethfeld, A. Rämmer, N. Brouwer et al., *Nuclear Instrum. and Meth. in Phys. Res. B* **327**, 78 (2014).
21. F. C. Kabeer, E. S. Zijlstra, and M. E. Garcia, *Phys. Rev. B* **89**, 100301 (2014).
22. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
23. В. Кон, *УФН* **172**, 335 (2002).
24. П. А. Жилиев, В. В. Стегайлов, *Вычислительные методы и программирование* **13**, 37 (2012).
25. Н. А. Скориков, М. А. Коротин, Э. З. Курмаев, С. О. Чолах, *ЖЭТФ* **142**, 1196 (2012).
26. М. Г. Костенко, А. А. Ремпель, А. В. Лукоянов, *ЖЭТФ* **143**, 1097 (2013).
27. Т. В. Перевалов, А. В. Шапошников, *ЖЭТФ* **143**, 1153 (2013).
28. И. П. Русинов, И. А. Нечаев, Е. В. Чулков, *ЖЭТФ* **143**, 1166 (2013).
29. M. P. Desjarlais, *Contrib. Plasma Phys.* **45**, 300 (2005).
30. M. Gajdoš, K. Hummer, G. Kresse et al., *Phys. Rev. B* **73**, 045112 (2006).
31. M. French and R. Redmer, *Phys. Plasmas* **18**, 043301 (2011).
32. M. E. Povarnitsyn, D. V. Knyazev, and P. R. Levashov, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 145 (2012).
33. Y. Ping, D. Rocca, and G. Galli, *Phys. Rev. B* **87**, 165203 (2013).
34. П. А. Жилиев, Г. Э. Норман, И. М. Сайтов, В. В. Стегайлов, *ДАН* **451**, 151 (2013).
35. N. D. Mermin, *Phys. Rev.* **137**, A1441 (1965).
36. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
37. D. A. Greenwood, *Proc. Phys. Soc.* **71**, 585 (1958).
38. T. R. Mattsson and R. J. Magyar, *AIP Conf. Proc.* **1195**, 797 (2009).
39. R. Del Sole and R. Girlanda, *Phys. Rev. B* **48**, 11789 (1993).
40. A. Starace, *Phys. Rev. A* **3**, 1242 (1971).
41. Д. А. Франк-Каменецкий, *Лекции по физике плазмы*, Атомиздат, Москва (1968).
42. H. Ehrenreich and M. H. Cohen, *Phys. Rev.* **115**, 786 (1959).
43. S. L. Adler, *Phys. Rev.* **126**, 413 (1962).
44. N. Wiser, *Phys. Rev.* **129**, 62 (1963).
45. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993).
46. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **49**, 14251 (1994).
47. G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
48. J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136406 (2008).
49. S. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
50. W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
51. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
52. A. V. Lankin and G. E. Norman, *J. Phys. A* **42**, 214032 (2009).
53. P. Drude, *Ann. Phys.* **306**, 566 (1900).
54. P. Drude, *Ann. Phys.* **308**, 369 (1900).
55. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).
56. W. Ebeling, *Physica* **43**, 293 (1969).
57. V. Fortov, V. Gryaznov, V. Mintsev et al., *Contrib. Plasma Phys.* **41**, 215 (2001).
58. В. Е. Фортов, В. Терновой, М. В. Жерноклетов и др., *ЖЭТФ* **124**, 288 (2003).
59. M. S. Murillo, J. Weisheit, S. B. Hansen, and M. W. C. Dharma-wardana, *Phys. Rev. E* **87**, 063113 (2013).