



ИНСТИТУТ ФИЗИКИ
ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ
им. Л.Ф.ВЕРЕЩАГИНА
Российской
Академии Наук



XV Конференция (Школа) молодых ученых
ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ
пансионат МГУ "Буревестник" (Сочи, Вишневка)

Фазовые переходы флюид-флюид при высоких температурах

Саитов И.М., Норман Г.Э.



19 сентября
2016

Outline

1. APPROACH

2. VALIDATION OF THE APPROACH

- 2.1. Reflectivity from sharp wave front
- 2.2. Reflectivity from broadened shock wave front
- 2.3. Brewster angle
- 2.4. Conductivity
- 2.5. Plasma frequency

3. APPLICATION TO PHASE TRANSITIONS

- 3.1. Conductivity
- 3.2. Density of electronic states
- 3.3. Plasma frequency
- 3.4. Pair correlation function
- 3.5. Specific volume
- 3.6. Metastable states

1. APPROACH

Reflectivity with shock wave front



Dielectric function

$$\varepsilon_T(\omega, \mathbf{R}_I) = 1 - \frac{4\pi^2 e^2}{3\omega^2 \Omega} \sum_{n, n', \alpha, \mathbf{k}} \frac{2w_{\mathbf{k}} \cdot [f(E_{n'\mathbf{k}}) - f(E_{n\mathbf{k}})]}{E_{n\mathbf{k}} - E_{n'\mathbf{k}} - \hbar(\omega + i\eta)} \times \left| \langle \psi_{n'\mathbf{k}} | \hat{v}_\alpha | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle \right|^2$$

Non-Local potentials

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

Longitudinal expression

$$\varepsilon_L(\omega, \mathbf{R}_I) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\Omega} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \sum_{i, j, \mathbf{k}} \frac{2w_{\mathbf{k}} \cdot [f(E_{j, \mathbf{k}}) - f(E_{i, \mathbf{k}+\mathbf{q}})]}{E_{i, \mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{j, \mathbf{k}} - \hbar(\omega + i\eta)} \times \left| \langle \Psi_{i, \mathbf{k}+\mathbf{e}_\alpha \mathbf{q}} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \Psi_{j, \mathbf{k}} \rangle \right|^2$$

Reflectivity

Brewster angle

Plasma frequency

Conductivity

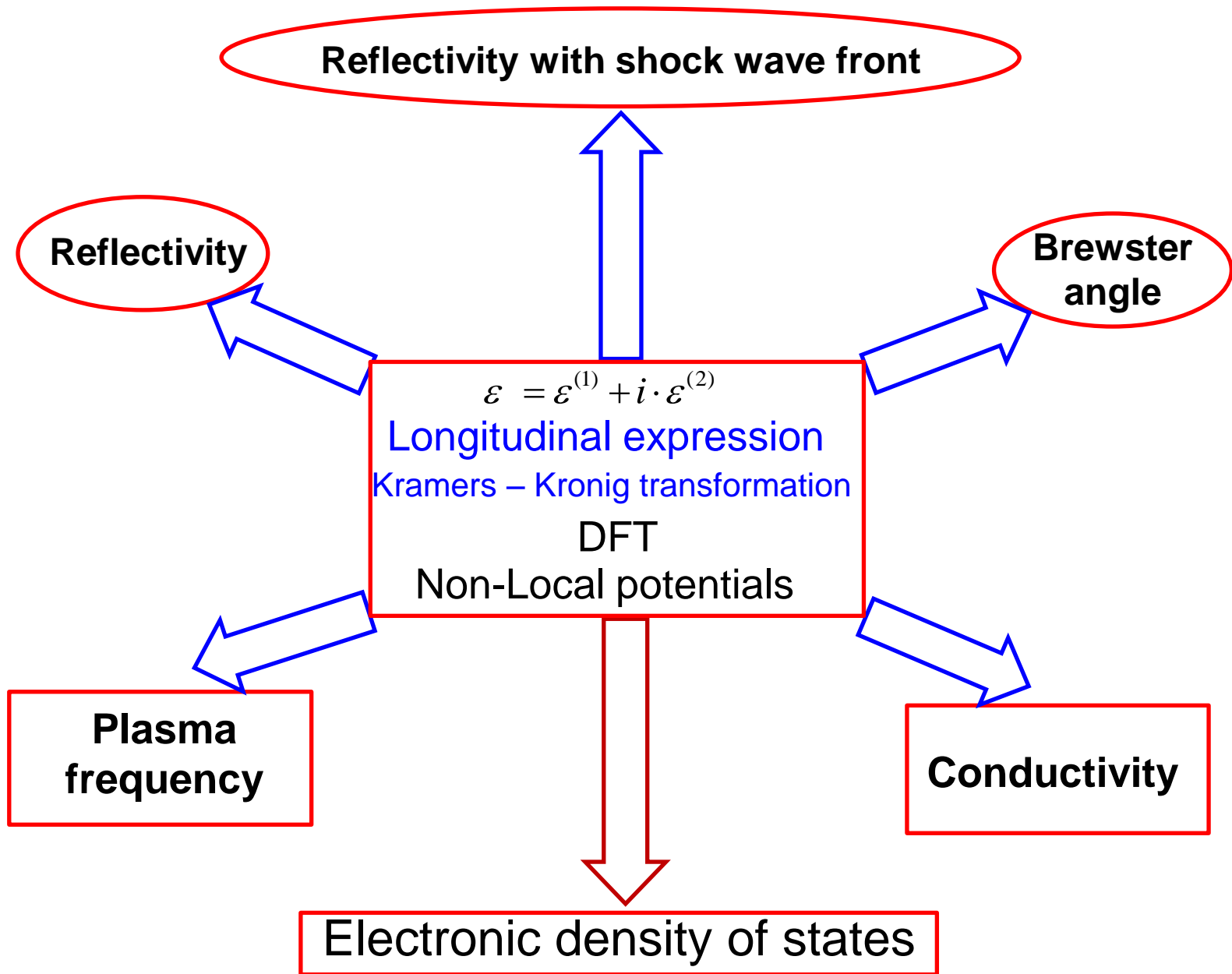
DFT Kohn-Sham + Molecular Dynamics

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{ext}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right) \Psi_i(\mathbf{r}) = E_i \Psi_i(\mathbf{r})$$

Pair distribution function

Equation of state

Electron density of states



2. VALIDATION OF THE APPROACH

2.1. Reflectivity from sharp shock wave front

Reflectivity

$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

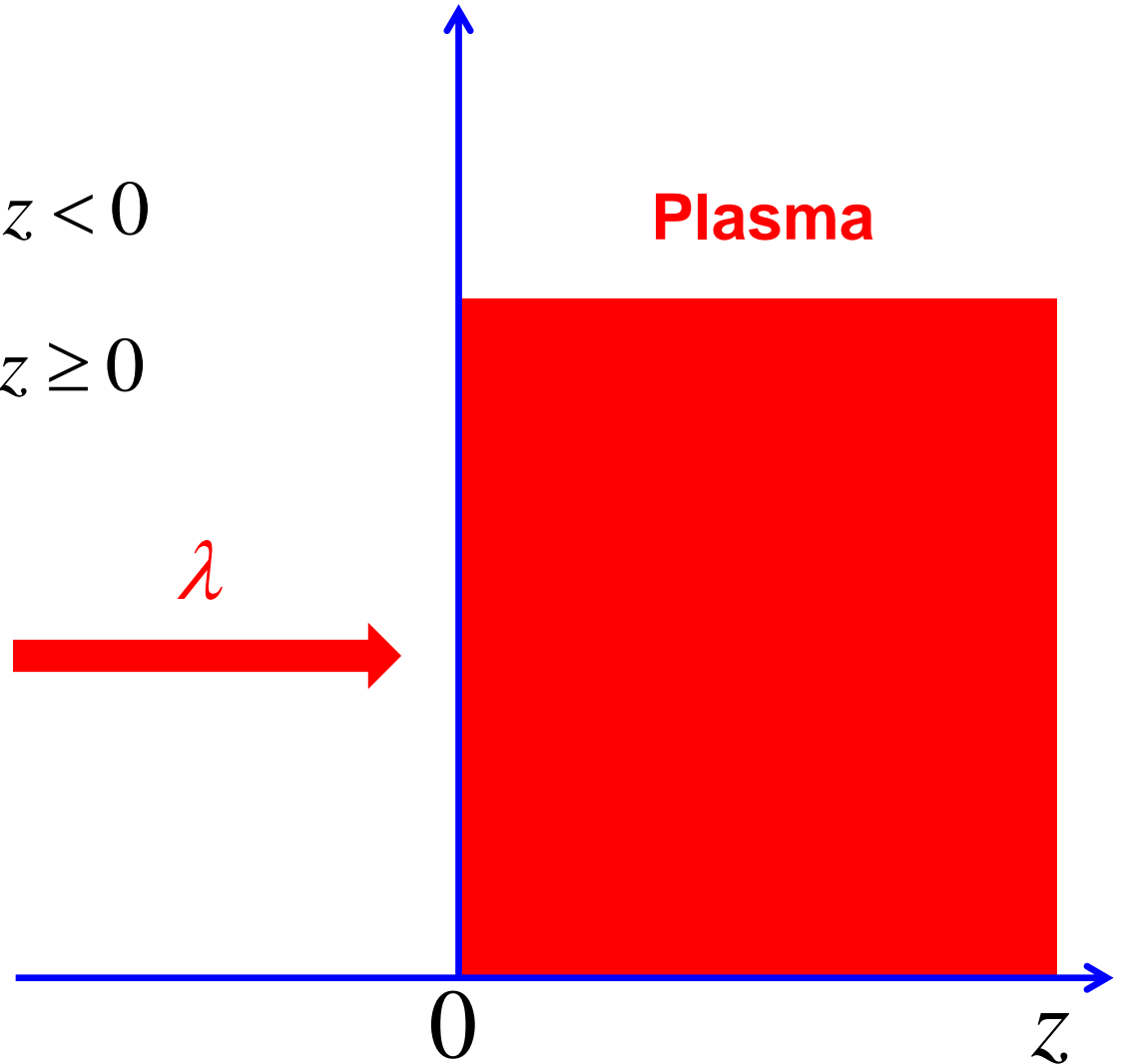
DFT

Non-Local potentials

Reflectivity from sharp shock wave front

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} 1 & z < 0 \\ \varepsilon_L^{DFT}(\lambda) & z \geq 0 \end{cases}$$

$$R = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon_L^{DFT}} - 1}{\sqrt{\varepsilon_L^{DFT}} + 1} \right|^2$$



Calculation parameters

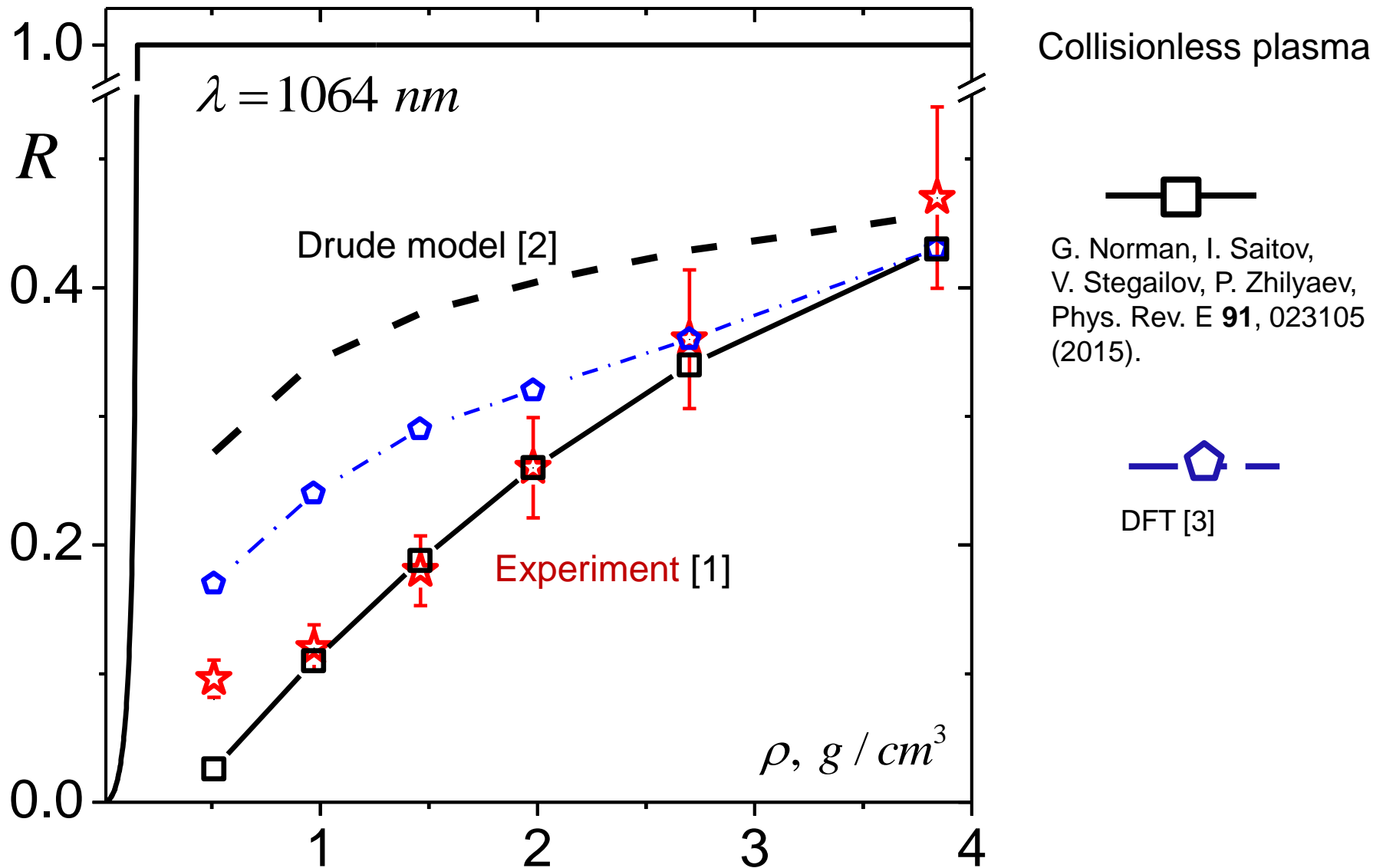
$\lambda = 1064 \text{ nm}$

$\rho, \text{g/cm}^3$	T, K
0.51	30050
0.97	29570
1.46	30260
1.98	29810
2.7	29250
3.84	28810

$\lambda = 694, 532 \text{ nm}$

$\rho, \text{g/cm}^3$	T, K
0.53	32900
1.1	33100
1.6	33120
2.2	32090
2.8	32020
3.4	31040

Motivation: shocked xenon plasma reflectivity



Collisionless plasma

G. Norman, I. Saitov,
V. Stegailov, P. Zhilyaev,
Phys. Rev. E **91**, 023105
(2015).

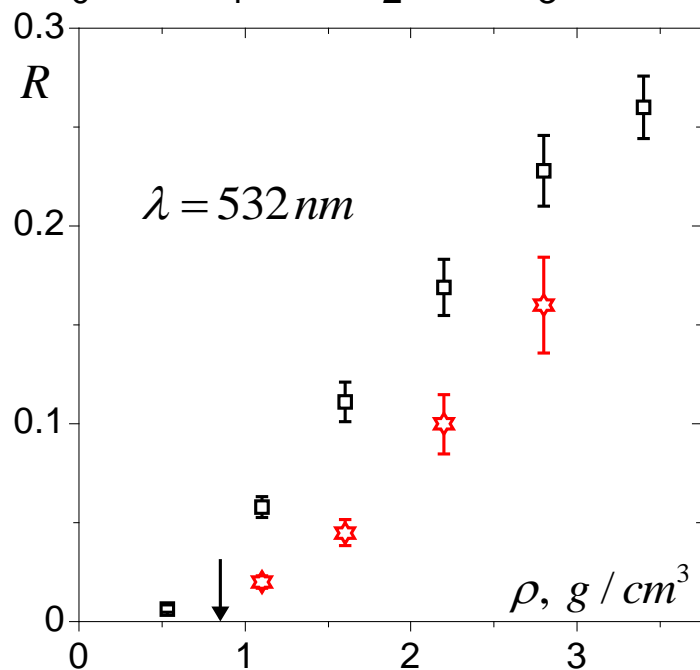
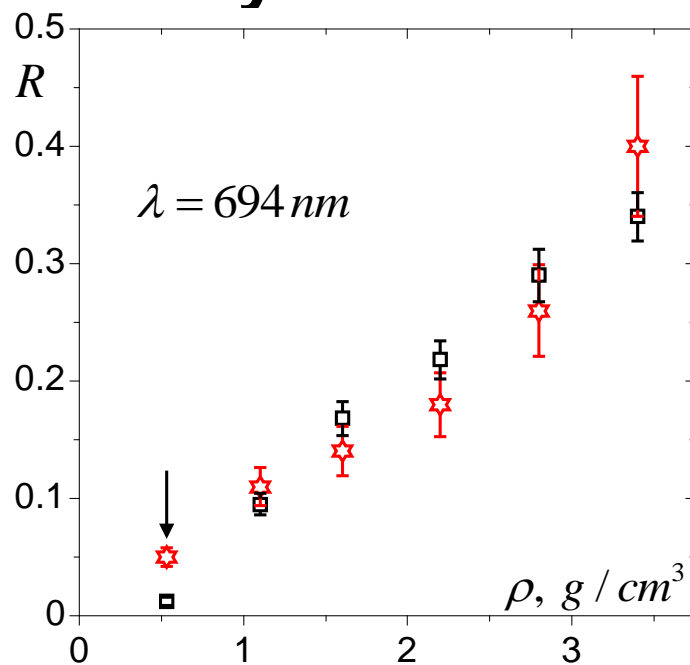
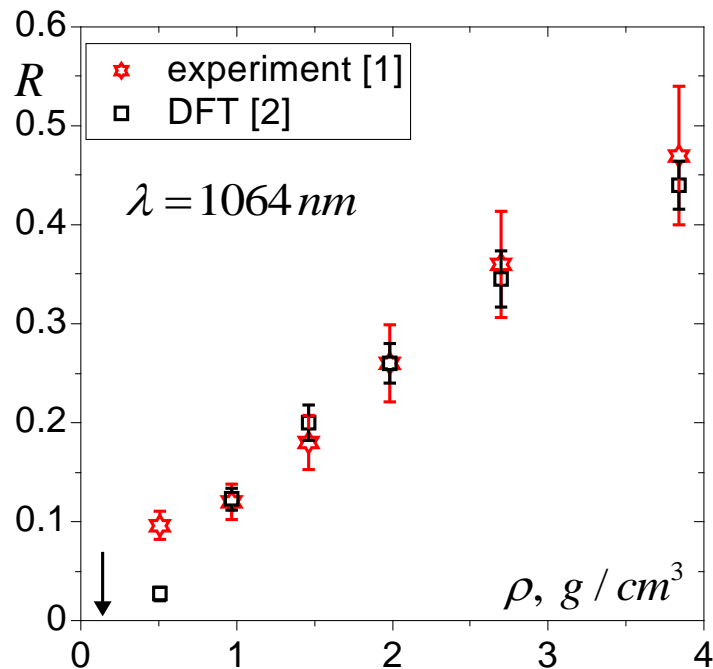
DFT [3]

[1] V.B. Mintsev, Yu.B. Zaporozhets, Contrib. Plasma Phys. **29**, 493 (1989).

[2] H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling, V. Mintsev, V. Gryaznov, Contrib. Plasma Phys. **43**, 3 (2003)

[3] M.P. Desjarlais, Contrib. Plasma Phys. **45**, 300 (2005).

Normal reflectivity



[1] V. B. Mintsev, Yu. B. Zaporozhets, Contrib. Plasma Phys. **29**, 493 (1989).

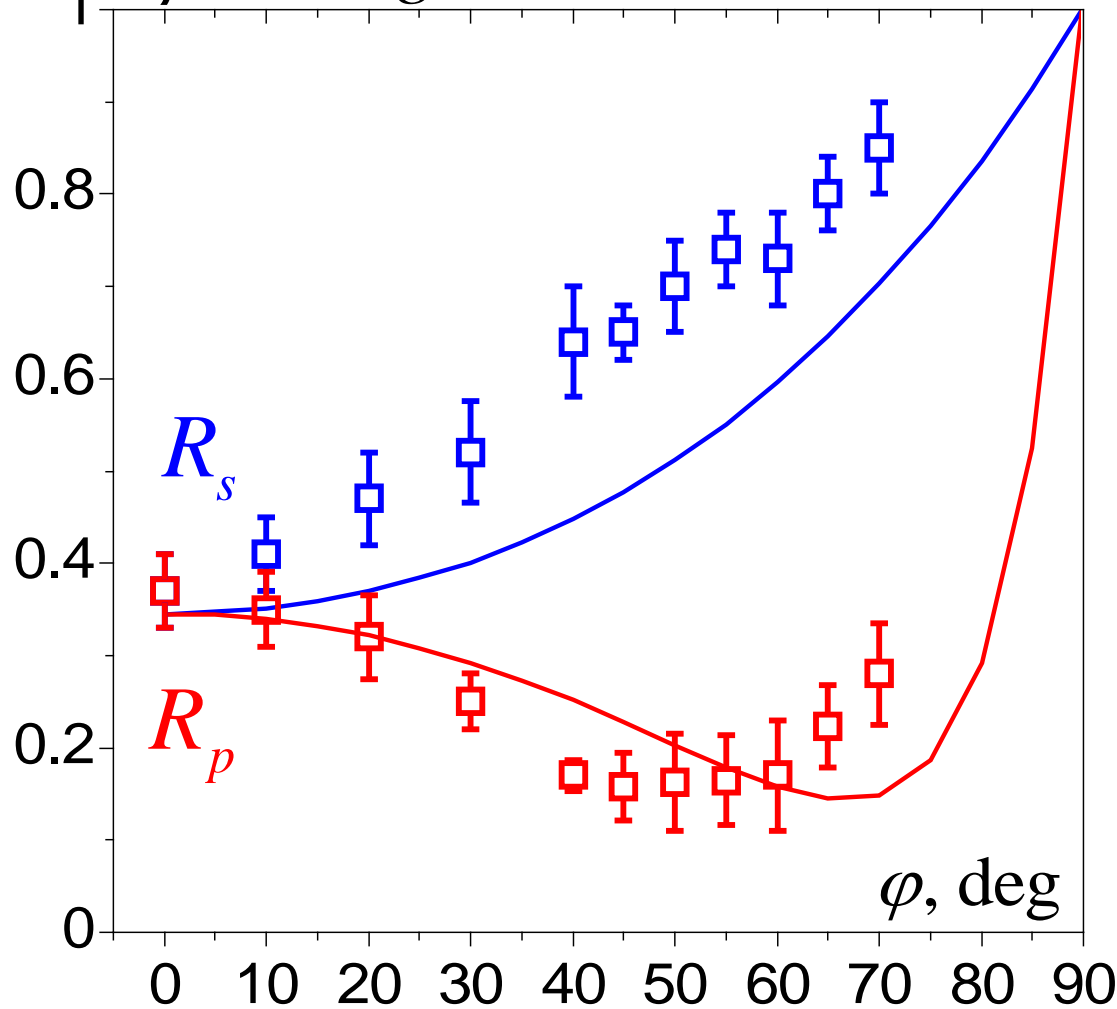
[2] G. Norman, I. Saitov, V. Stegailov, P. Zhilyaev, Phys. Rev. E **91**, 023105 (2015).

Polarized reflectivity

$$R_s(\varphi) = \left| \frac{\cos \varphi - \sqrt{\varepsilon_L^{DFT} - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{\varepsilon_L^{DFT} - \sin^2 \varphi}} \right|^2$$

$$R_p(\varphi) = \left| \frac{\varepsilon_L^{DFT} \cos \varphi - \sqrt{\varepsilon_L^{DFT} - \sin^2 \varphi}}{\varepsilon_L^{DFT} \cos \varphi + \sqrt{\varepsilon_L^{DFT} - \sin^2 \varphi}} \right|^2$$

$\rho = 2.7 \text{ g / cm}^3 \quad \lambda = 1064 \text{ nm}$



Experimental data
(**blue** and **red** squares
with error bars)

Yu. B. Zaporozhets,
V. B. Mintsev, V. K. Gryaznov,
H. Reinholz, G. Röpke,
Y. A. Omarbakiyeva,
V. E. Fortov, J. Phys.: Con. Ser.
653 012110 (2015)

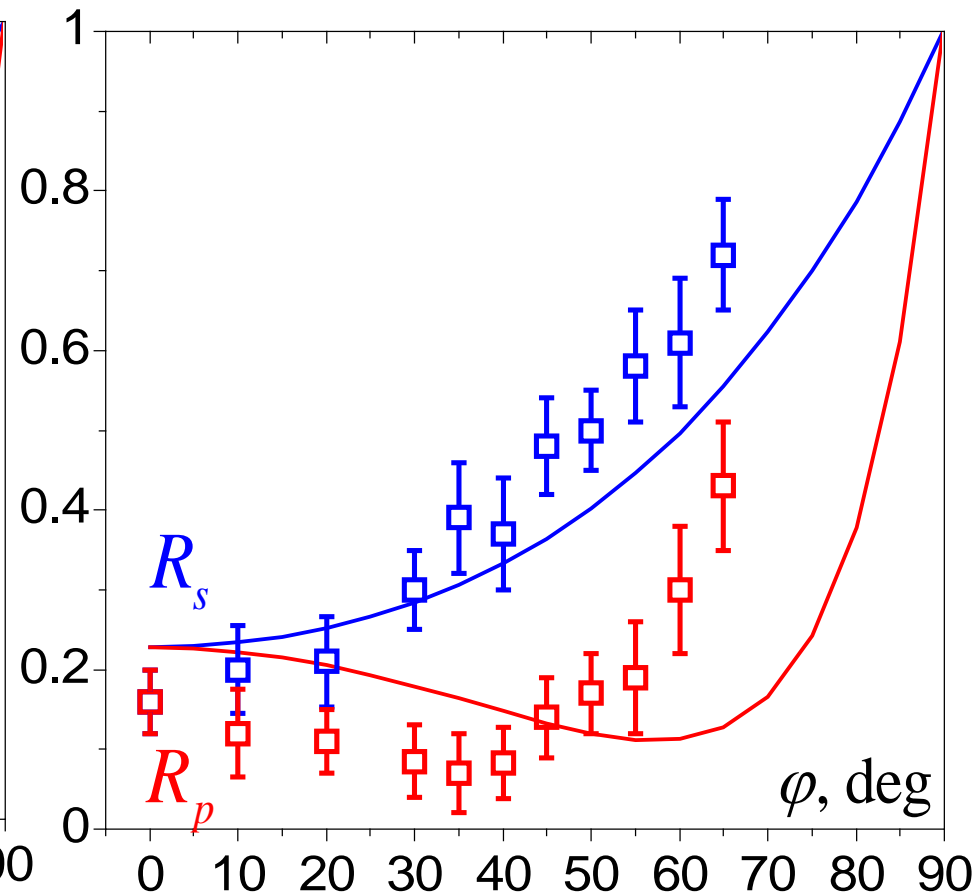
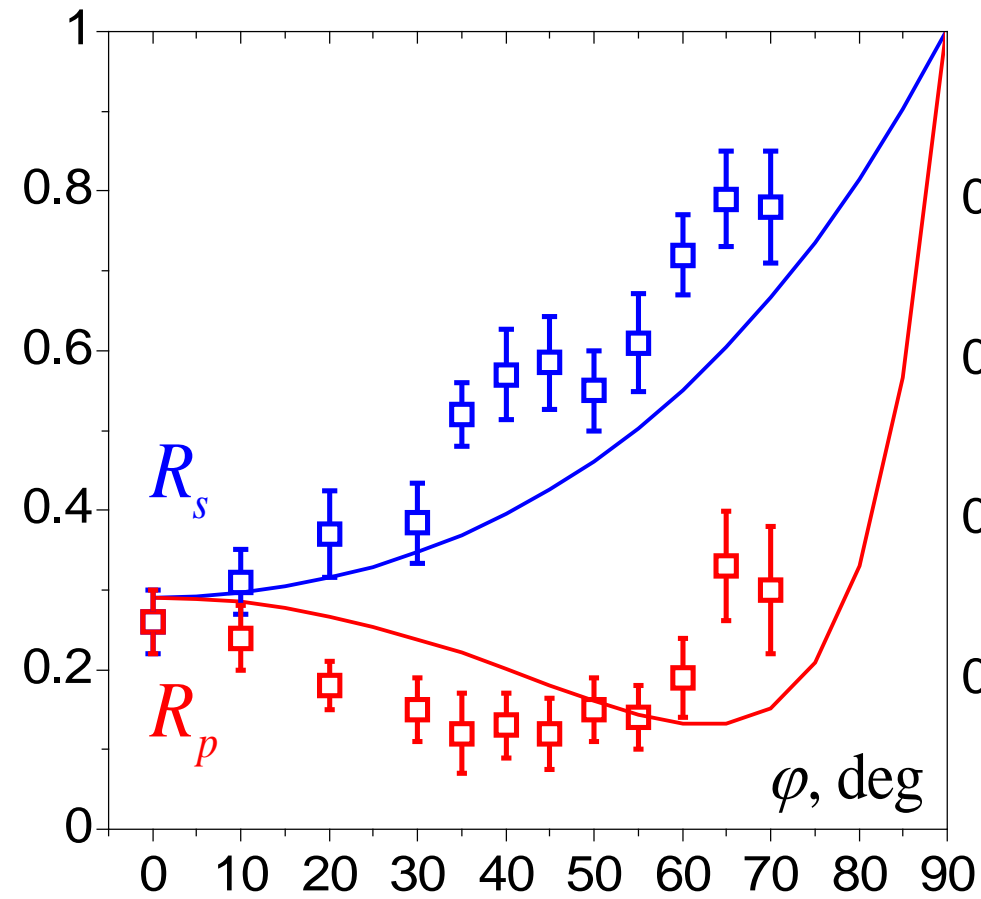
DFT: (**blue** and **red** solid lines)

G. E. Norman, I.M.Saitov, J.
Phys.: Con. Ser. **653** 012111
(2015)

2.2 Polarized reflectivity

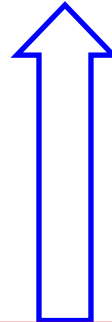
$\rho = 2.8 \text{ g / cm}^3$ $\lambda = 694 \text{ nm}$

$\rho = 2.8 \text{ g / cm}^3$ $\lambda = 532 \text{ nm}$



2.2. Reflectivity from broadened shock wave front

Reflectivity with shock wave front



$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

DFT

Non-Local potentials

Reflectivity from broadened shock wave front

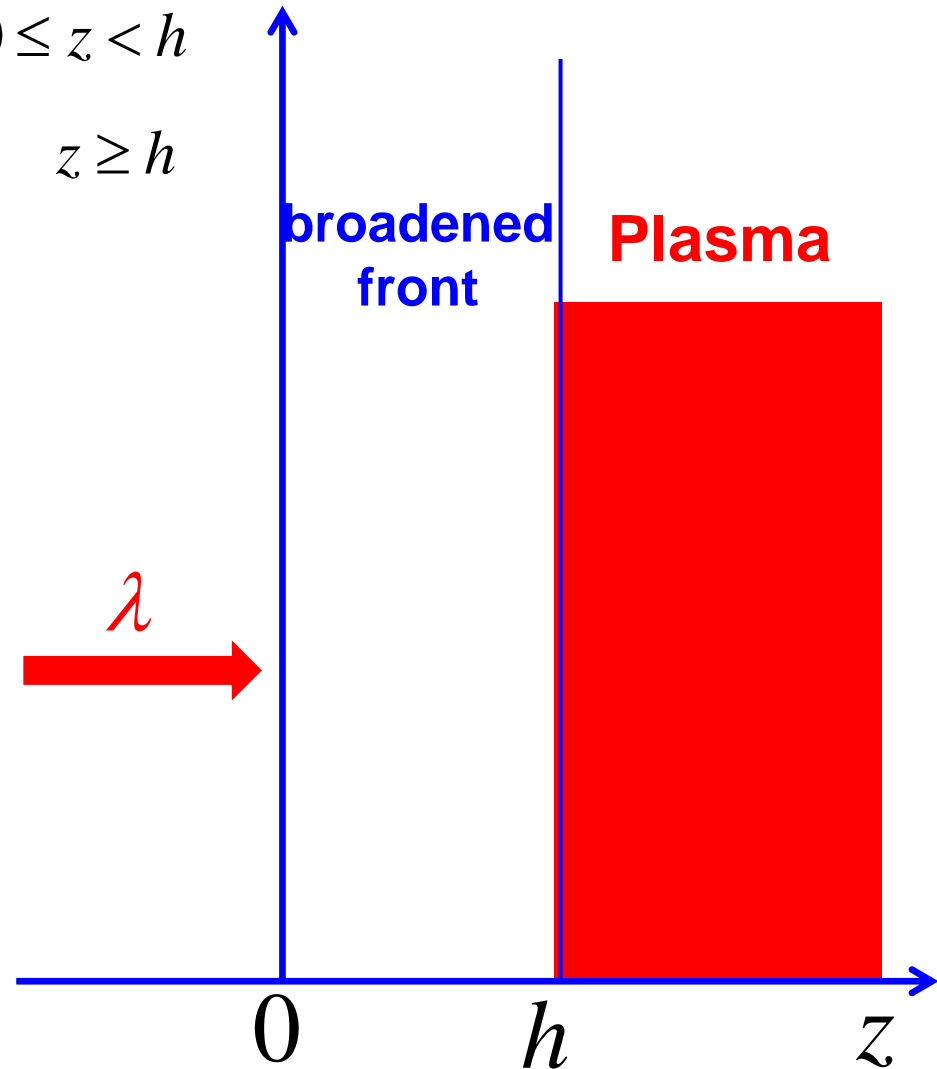
$$\varepsilon(z, \lambda) = \begin{cases} 1, & z < 0 \\ 1 + [\varepsilon_L^{DFT}(\lambda) - 1] \cdot (z/h), & 0 \leq z < h \\ \varepsilon_L^{DFT}(\lambda), & z \geq h \end{cases}$$

$$E''(z) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \varepsilon(z, \lambda) E(z) = 0$$

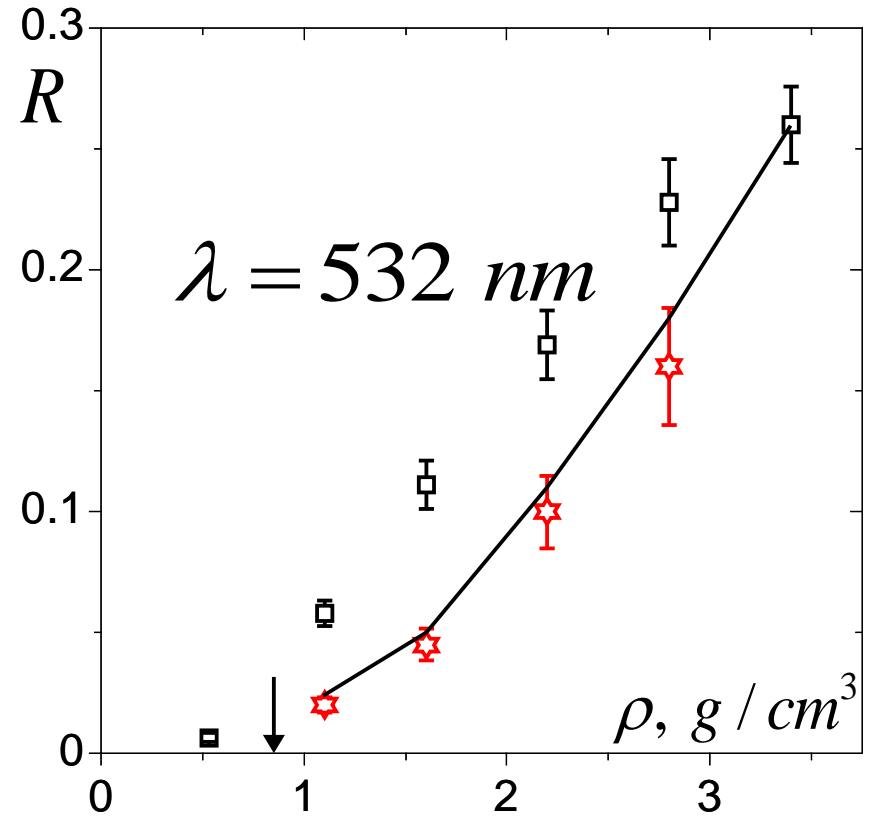
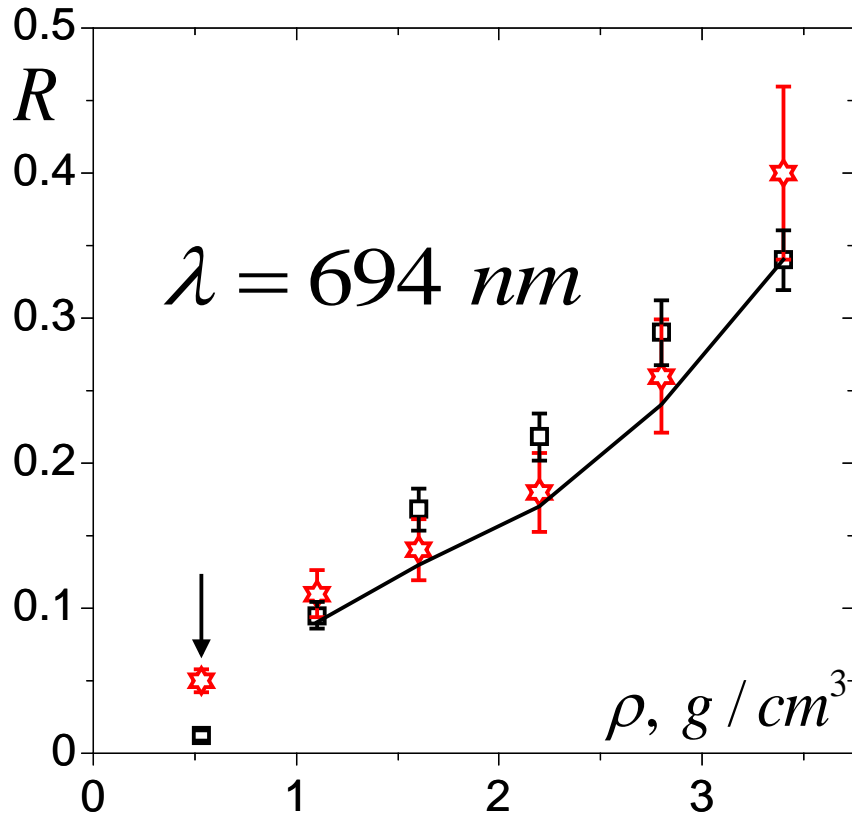
$$E(h) = \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{\varepsilon(h, \lambda)} h\right)$$

$$E'(h) = \frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{\varepsilon(h, \lambda)} \cdot E(h)$$

$$R = \left| \frac{2\pi i E(0) - \lambda E'(0)}{2\pi i E(0) + \lambda E'(0)} \right|^2$$



Normal reflectivity from broadened shock wave front

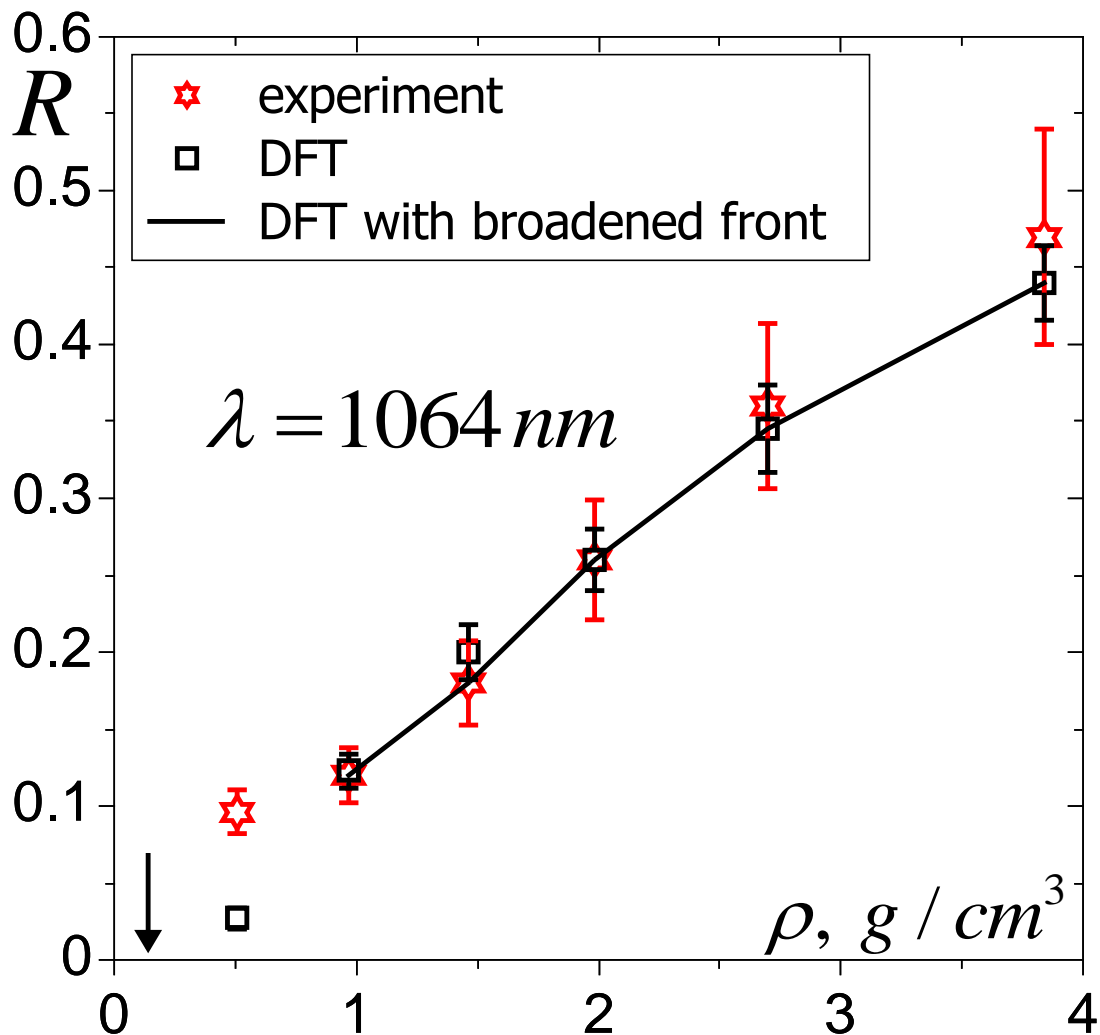


$\rho, \text{ g/cm}^3$	1,1	1,6	2,2	2,8	3,4
$\lambda = 532 \text{ nm}$	130 - 180	130 - 175	96 - 120	75 - 115	-

Optimal width of the wave front $h, \text{ nm}$

Experiment (**red stars**): Yu. B. Zaporozhets, V. B. Mintsev, V. K. Gryaznov, V. E. Fortov, H. Reinholz, T. Raitza, G. Röpke, J. Phys.: Con. Ser. **653** 012110 (2015)

Normal reflectivity from broadened shock wave front



Experiment (**red stars**):
 V. B. Mintsev, Yu. B. Zaporozhets,
 Contrib. Plasma Phys. **29**, 493
 (1989).

DFT (**black squares**):
 G. Norman, I. Saitov,
 V. Stegailov, P. Zhilyaev,
 Phys. Rev. E **91**, 023105 (2015).

$\rho, \text{ g/cm}^3$	0,97	1,46	1,98	2,7	3,84
$\lambda = 1064 \text{ nm}$	0 – 130	0 – 145	0 – 110	0 – 90	0 – 70

Optimal widths of the wave front h , nm

Polarized reflectivity

S - polarization

$$\frac{\partial^2 E(z, \varphi)}{\partial z^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} [\varepsilon(z, \lambda) - \sin^2 \varphi] E(z, \varphi) = 0$$

$$E(h) = \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{\varepsilon(h, \lambda) - \sin^2 \varphi} \cdot h\right) \quad R_s(\varphi) = \left| \frac{2\pi i E(0, \varphi) \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} - \lambda E'(0, \varphi)}{2\pi i E(0, \varphi) \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} + \lambda E'(0, \varphi)} \right|^2$$
$$E_z(h) = \frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{\varepsilon(h, \lambda) - \sin^2 \varphi} \cdot E(h)$$

P - polarization

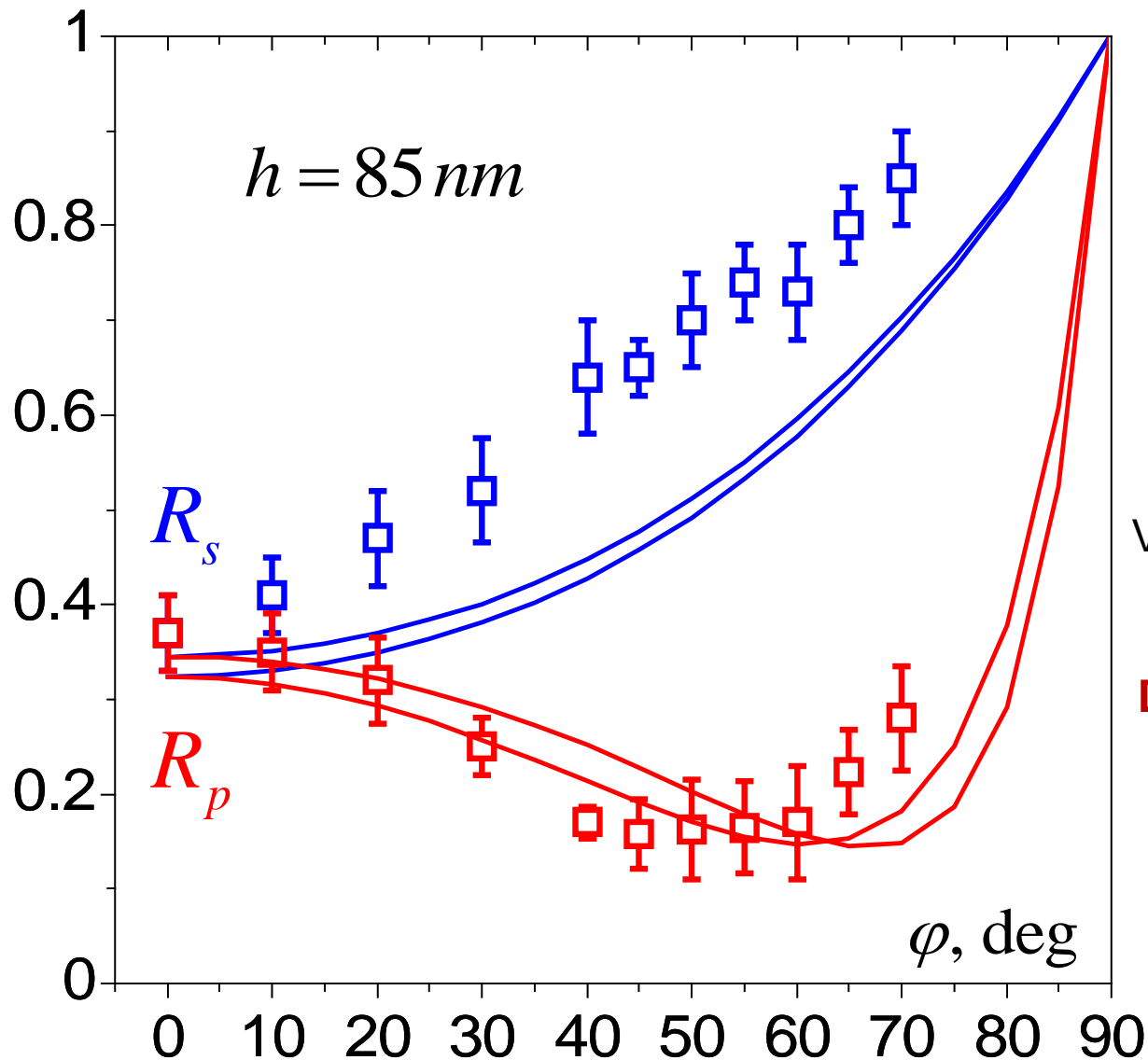
$$\frac{\partial^2 H(z, \varphi)}{\partial z^2} - \frac{\partial \ln(\varepsilon(z, \lambda))}{\partial z} \frac{\partial H(z, \varphi)}{\partial z} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} [\varepsilon(z, \lambda) - \sin^2 \varphi] H(z, \varphi) = 0$$

$$H(h) = \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{\varepsilon(h, \lambda) - \sin^2 \varphi} \cdot h\right) \quad R_p(\varphi) = \left| \frac{2\pi i H(0, \varphi) \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} - \lambda H_z(0, \varphi)}{2\pi i H(0, \varphi) \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} + \lambda H_z(0, \varphi)} \right|^2$$
$$H_z(h) = \frac{2\pi i}{\lambda} \sqrt{\varepsilon(h, \lambda) - \sin^2 \varphi} \cdot H(h)$$

Polarized reflectivity

$$\rho = 2.7 \text{ g / cm}^3 \quad \lambda = 1064 \text{ nm}$$

$$h = 85 \text{ nm}$$



Experimental data
(blue and red squares
with error bars)

Yu. B. Zaporozhets,
V. B. Mintsev, V. K. Gryaznov,
H. Reinholz, G. Röpke,
Y. A. Omarbakiyeva,
V. E. Fortov, J. Phys.: Con. Ser.
653 012110 (2015)

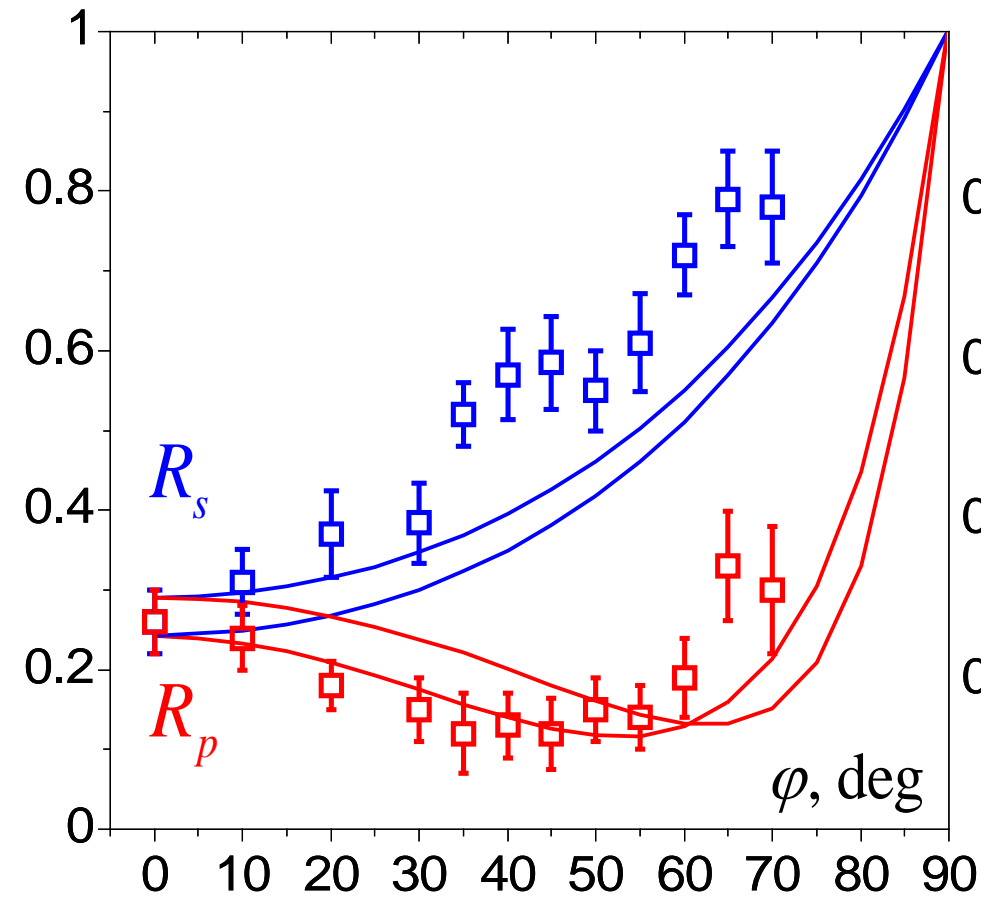
DFT: (blue and red solid lines)

G. E. Norman, I.M.Saitov, J.
Phys.: Con. Ser. **653** 012111
(2015)

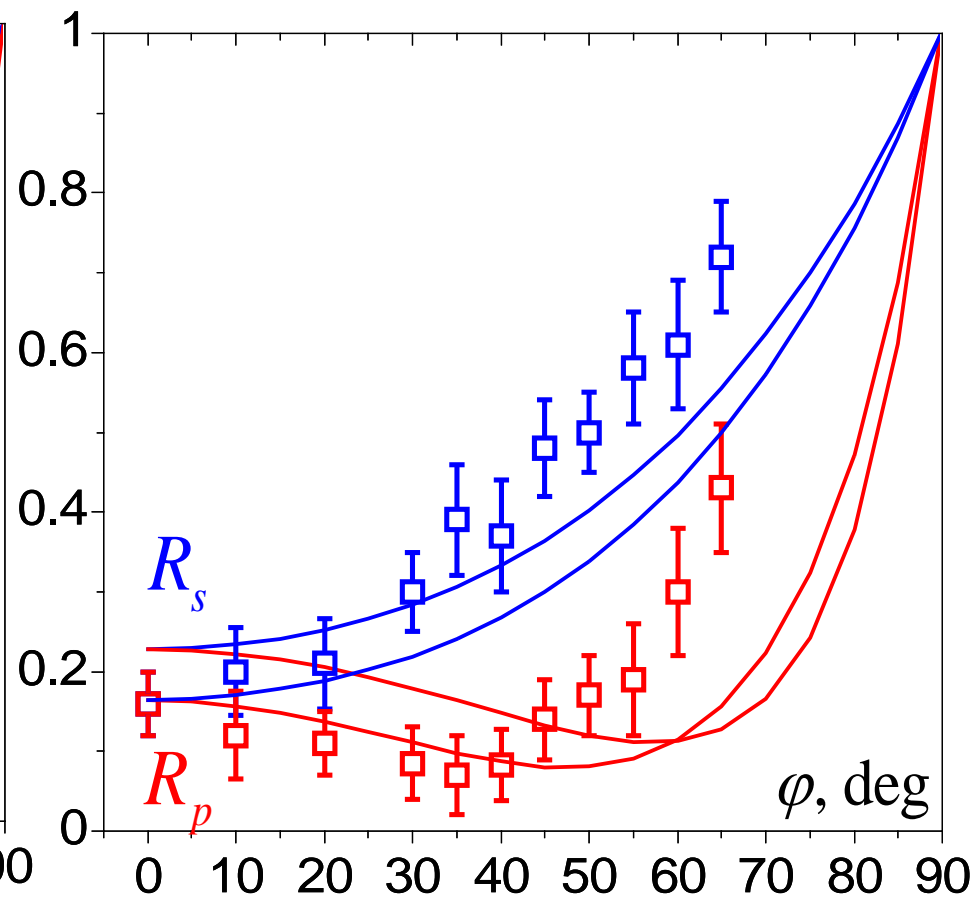
Polarized reflectivity

$\rho = 2.8 \text{ g / cm}^3$ $\lambda = 694 \text{ nm}$

$\rho = 2.8 \text{ g / cm}^3$ $\lambda = 532 \text{ nm}$



$h = 100 \text{ nm}$



$h = 100 \text{ nm}$

2.3. Brewster angle

$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

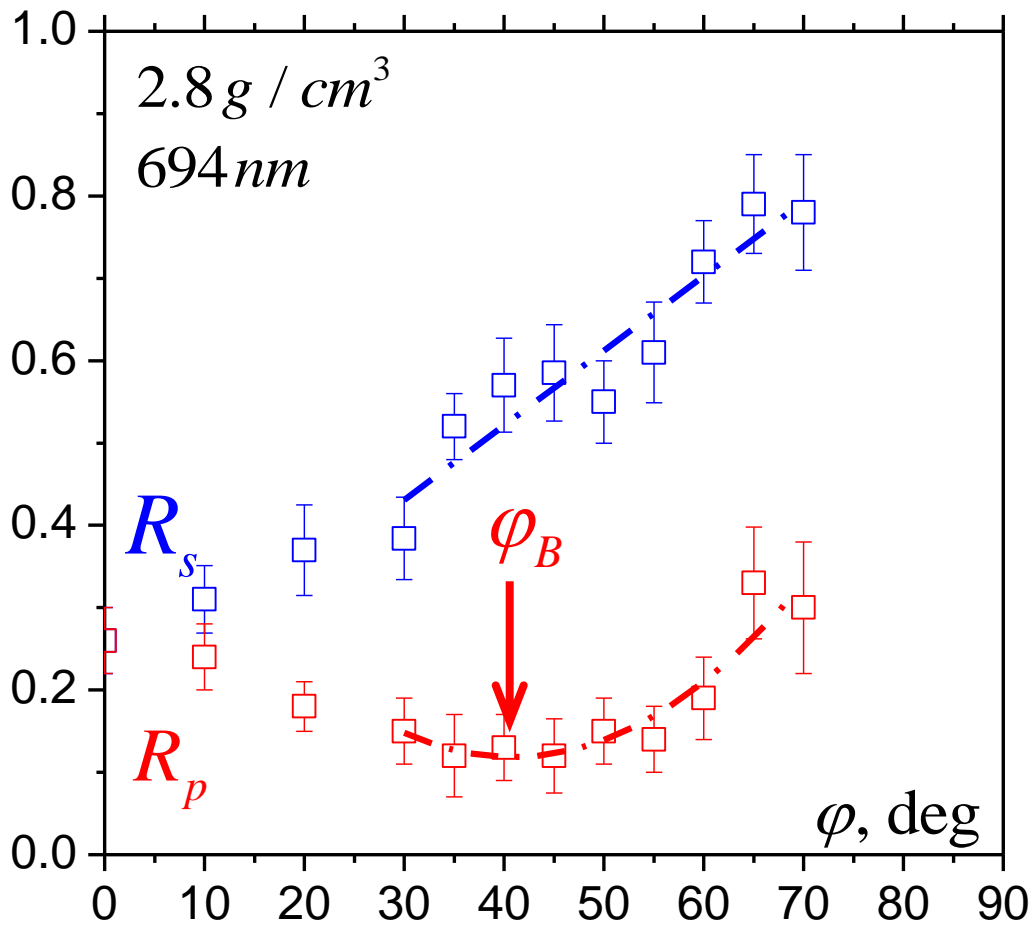
Kramers – Kronig transformation

DFT

Non-Local potentials



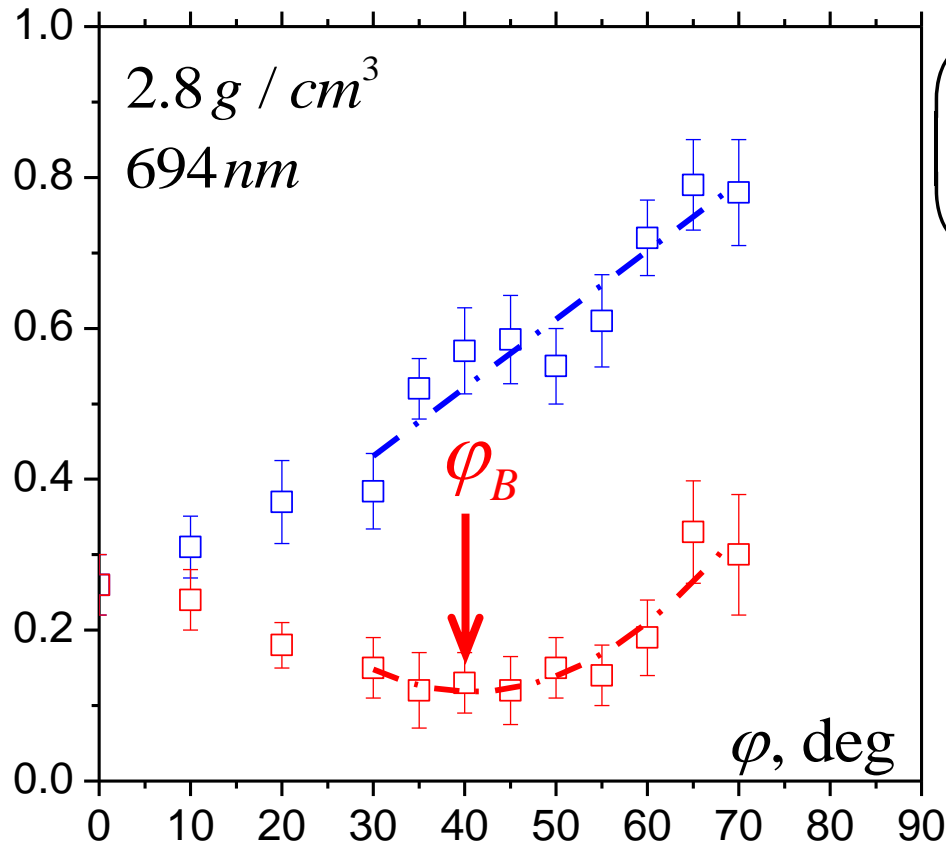
Brewster angle



$$R_p^{\min} = R_p(\varphi_B)$$

$\lambda(\text{nm}), \rho(\text{g/cc})$	experiment
1064, 2.7	50 ± 10
694, 2.8	45 ± 10
532, 2.8	35 ± 5

Drude theory.



$$\left(\frac{R_p}{R_s} \right)_{\varphi=\varphi_B} = \frac{\pi^2 \cdot h_D^2}{\lambda^2} \left| \frac{n^2 + 1}{(n^2 - 1)^2} \eta^2 \right|$$

$$\eta = \overline{N^2} + n^2 \left(\overline{1/N^2} \right) - 1 - n^2$$

$$N(z) = 1 + \frac{n-1}{h_D} z$$

$$h_D = \lambda \left[\left(\frac{3}{2\pi} \right) \left(\frac{R_p}{R_s} \right)^{1/2} \left(R \cdot |n^2 + 1| \right)^{-1/2} \right]$$

$\lambda(\text{nm}), \rho(\text{g/cc})$	h, nm
1064, 2.7	85
694, 2.8	100
532, 2.8	100

2.4. Conductivity

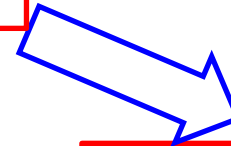
$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

DFT

Non-Local potentials

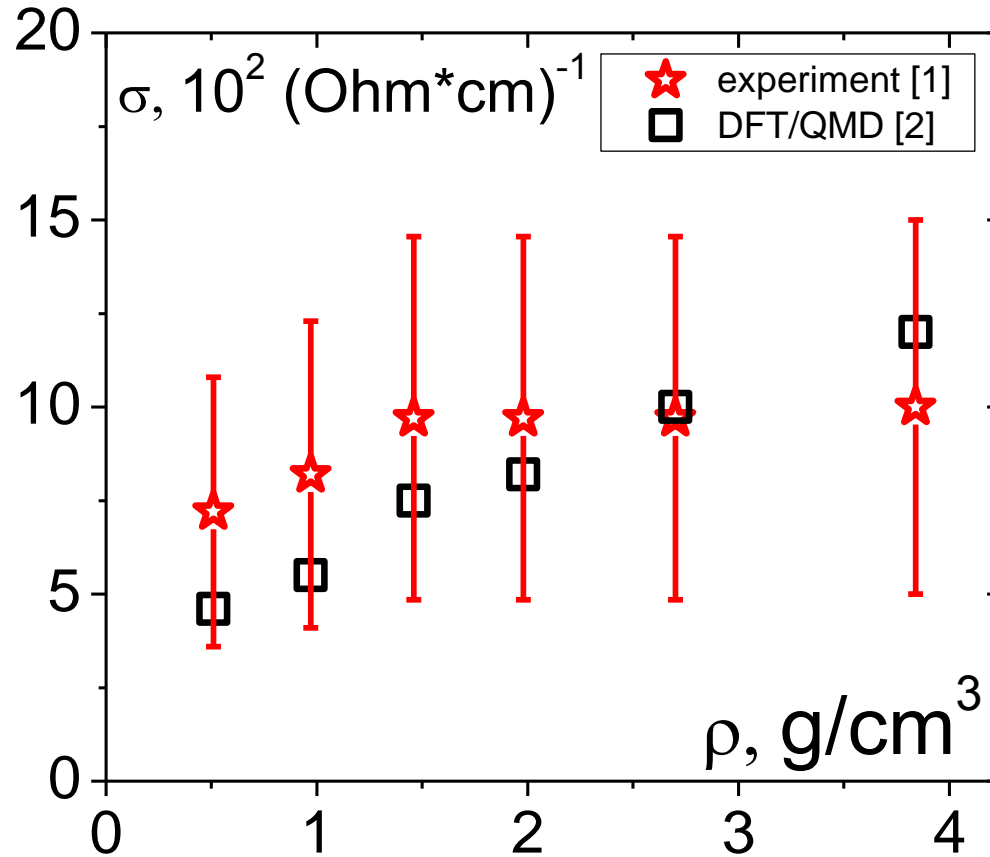


Conductivity

2.4. Conductivity

$$\sigma^{(1)}(\omega) = \omega \varepsilon^{(2)}(\omega) / 4\pi$$

Xenon



[1] H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling, V. Mintsev, and V. Gryaznov, *Contrib. Plasma Phys.* **43**, 3 (2003)

[2] G. Norman, I. Saitov, V. Stegailov, P. Zhilyaev, *Phys. Rev. E* **91**, 023105 (2015)

2.5. Plasma frequency

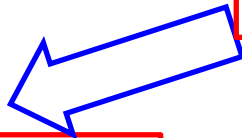
$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

DFT

Non-Local potentials



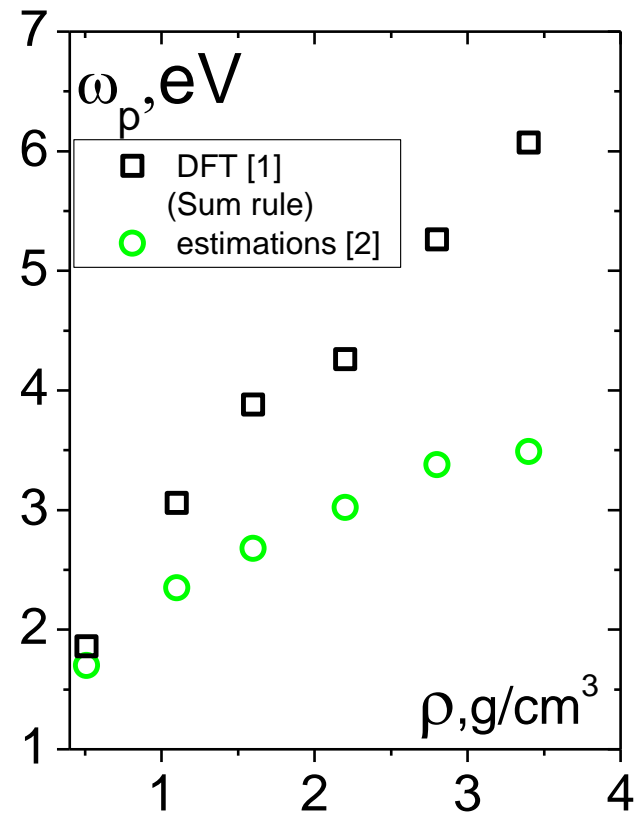
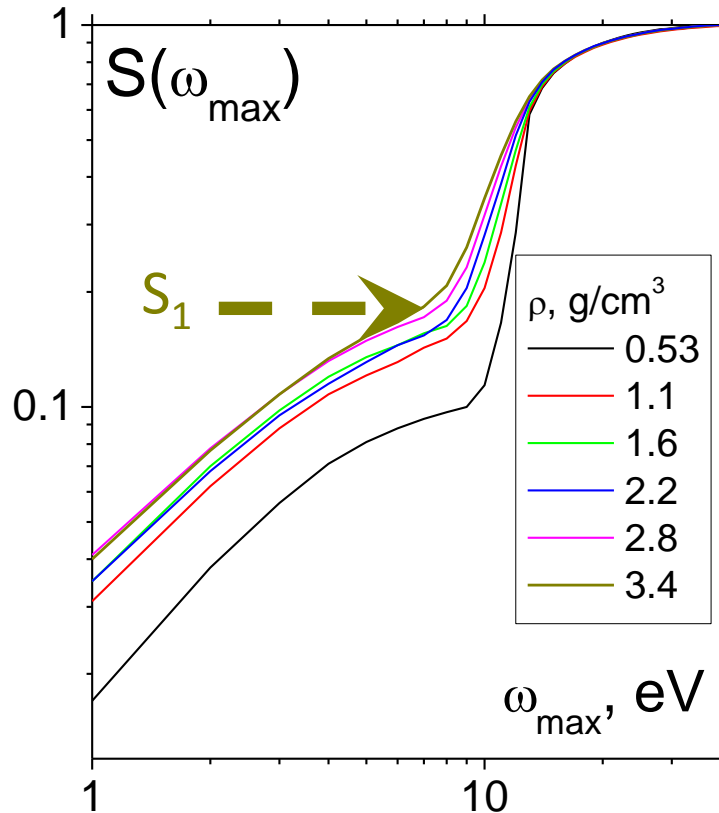
**Plasma
frequency**

2.5. Plasma frequency

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

$$\omega_p^2 = \left(N_e e^2 / m \Omega \varepsilon_0 \right) \cdot S_1$$

Xenon



[1] G.Norman, I.Saitov, V.Stegailov, P.Zhilyaev, Phys. Rev. E **91**, 023105 (2015)

[2] V.B. Mintsev, Yu.B. Zaporozhets, Contrib. Plasma Phys. **29**, 493 (1989).

Выводы I.

В рамках теории функционала плотности предложен подход для самосогласованного описания оптических и электронных свойств разогретого плотного вещества

1. Применение выражения для **продольного тензора диэлектрической проницаемости** в рамках теории функционала плотности заметно улучшает согласие с экспериментом.
2. **Применены поправки к расчету коэффициента отражения, учитывающие неоднородность профиля плотности на границе разогретого плотного вещества.**
3. **Проведен расчет коэффициента отражения как для нормального падения лазерного излучения, так и для случая падения под углом.**
4. **Предложен метод расчета плазменной частоты при высоких температурах с использованием правила сумм. Подход позволяет напрямую связать результаты расчета плазменной частоты и коэффициента отражения.**

3. APPLICATION TO PHASE TRANSITIONS

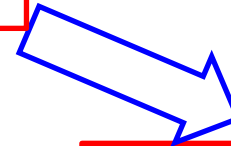
$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

DFT

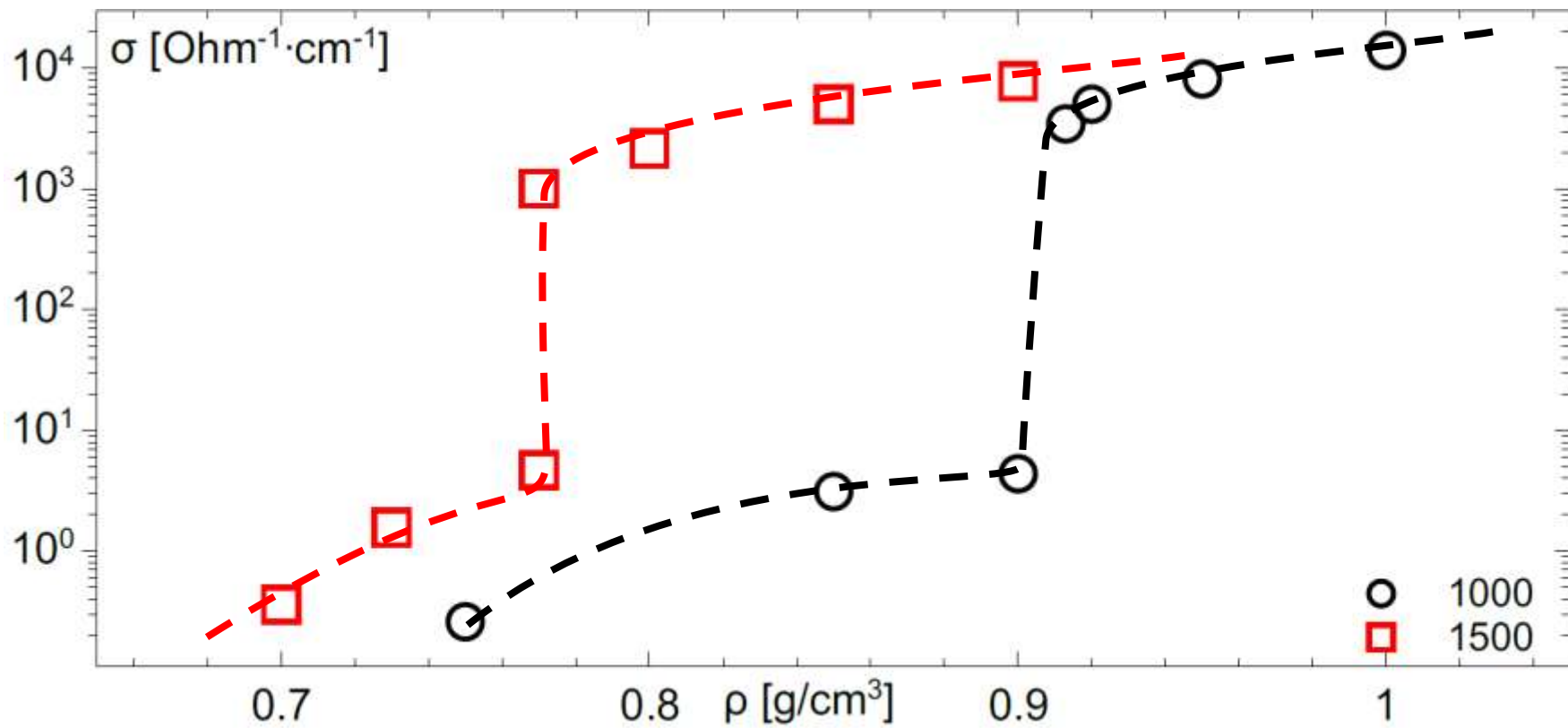
Non-Local potentials



Conductivity

3.1. Conductivity

$$\sigma^{(1)}(\omega) = \omega \varepsilon^{(2)}(\omega) / 4\pi$$



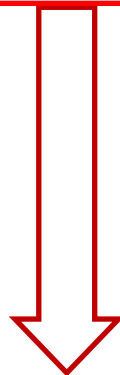
$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

DFT

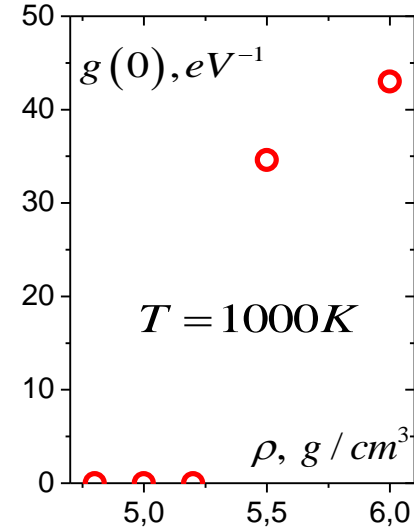
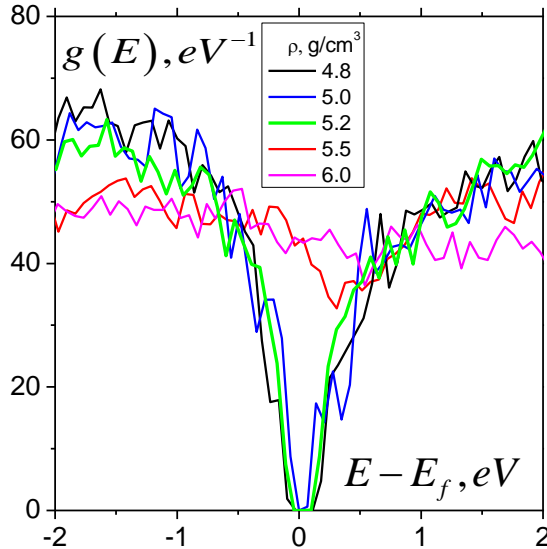
Non-Local potentials



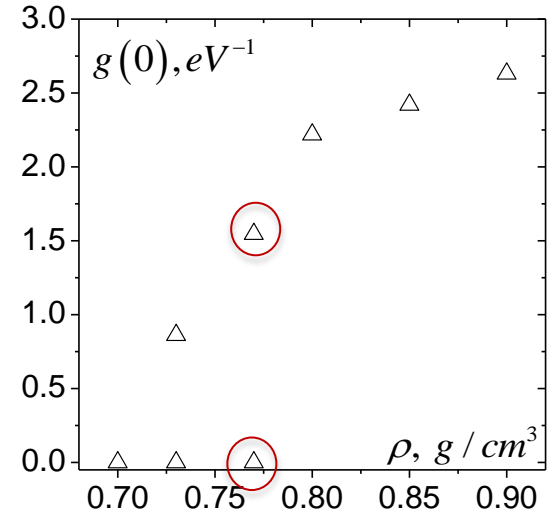
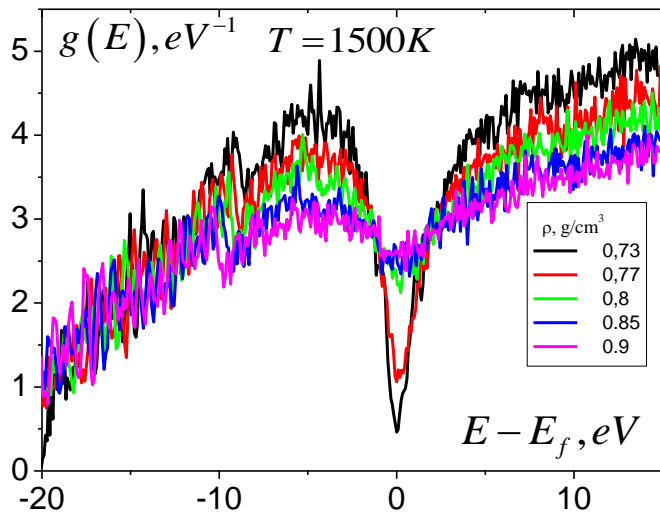
Electronic density of states

3.2 Electronic density of states

Semiconductor- metal transition [7] in liquid Se
Gap formation investigation



Hydrogen



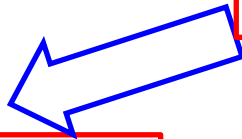
$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

Kramers – Kronig transformation

DFT

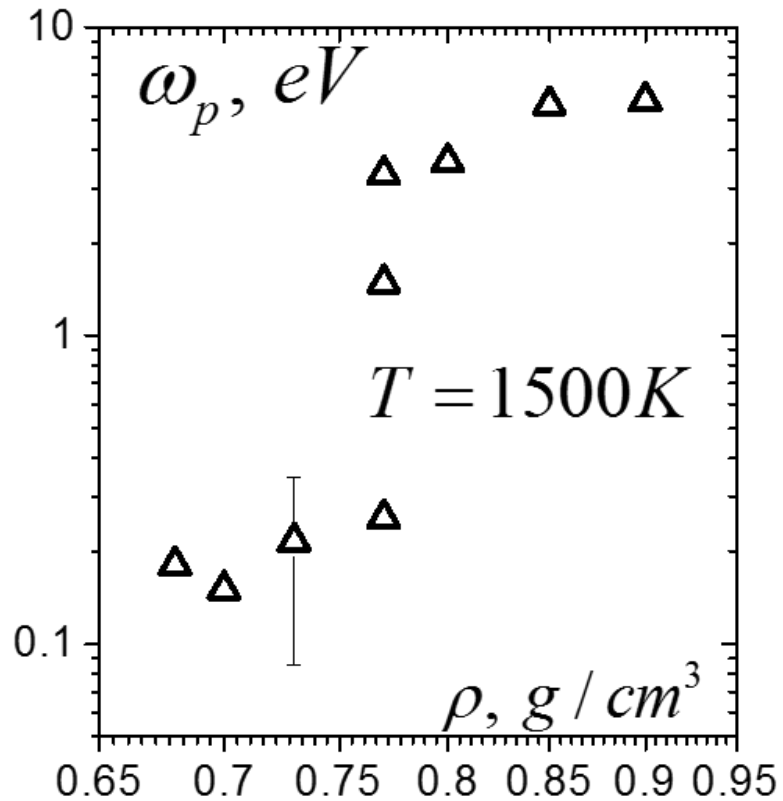
Non-Local potentials



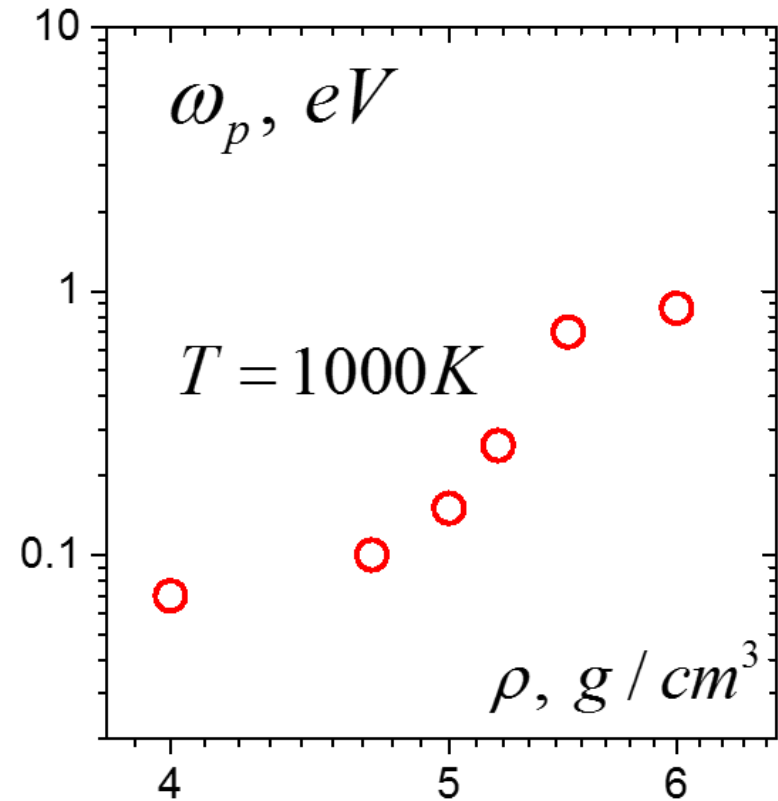
**Plasma
frequency**

3.3. Plasma frequency

Hydrogen



Selenium



$$\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$$

Longitudinal expression

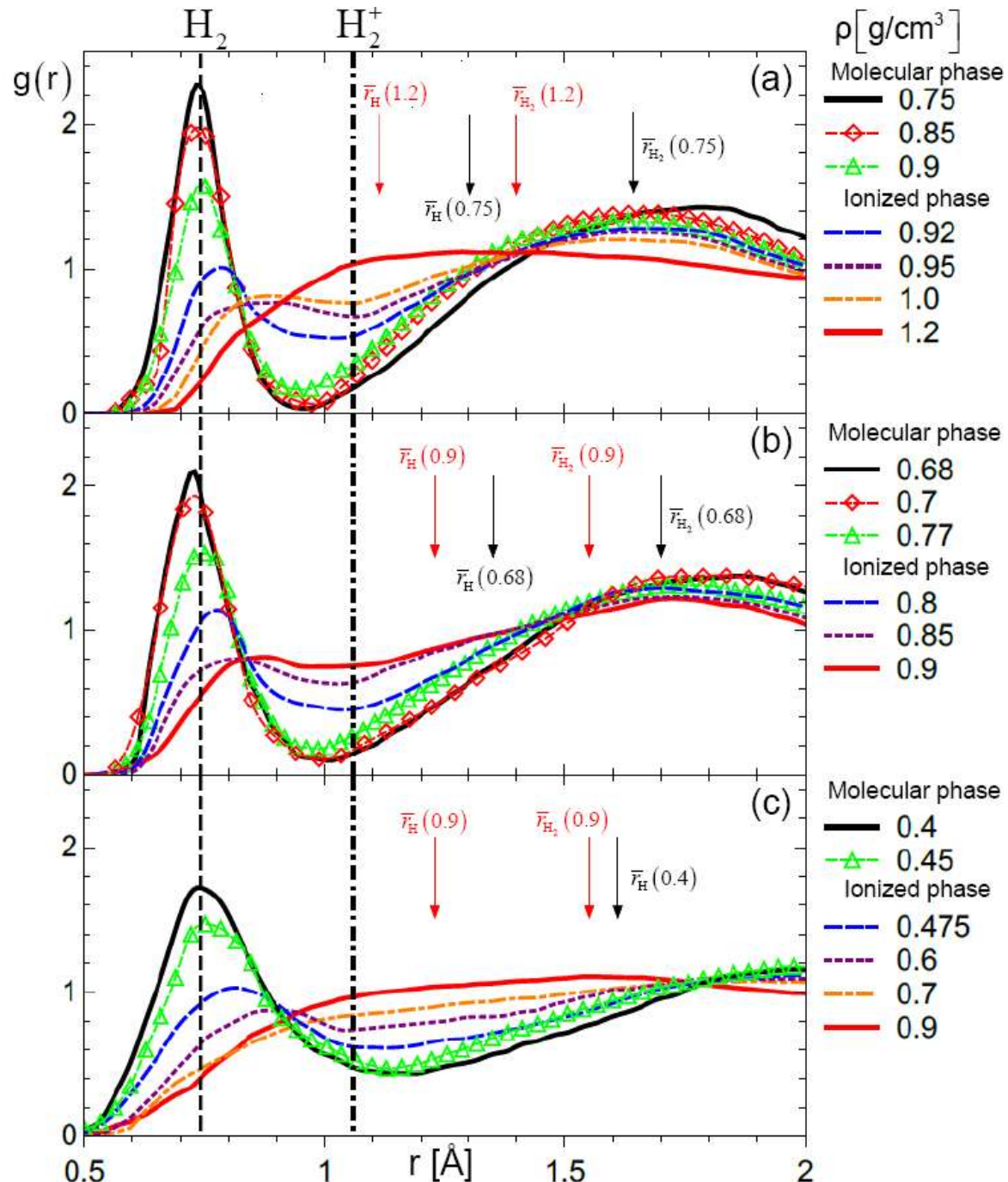
Kramers – Kronig transformation

DFT +

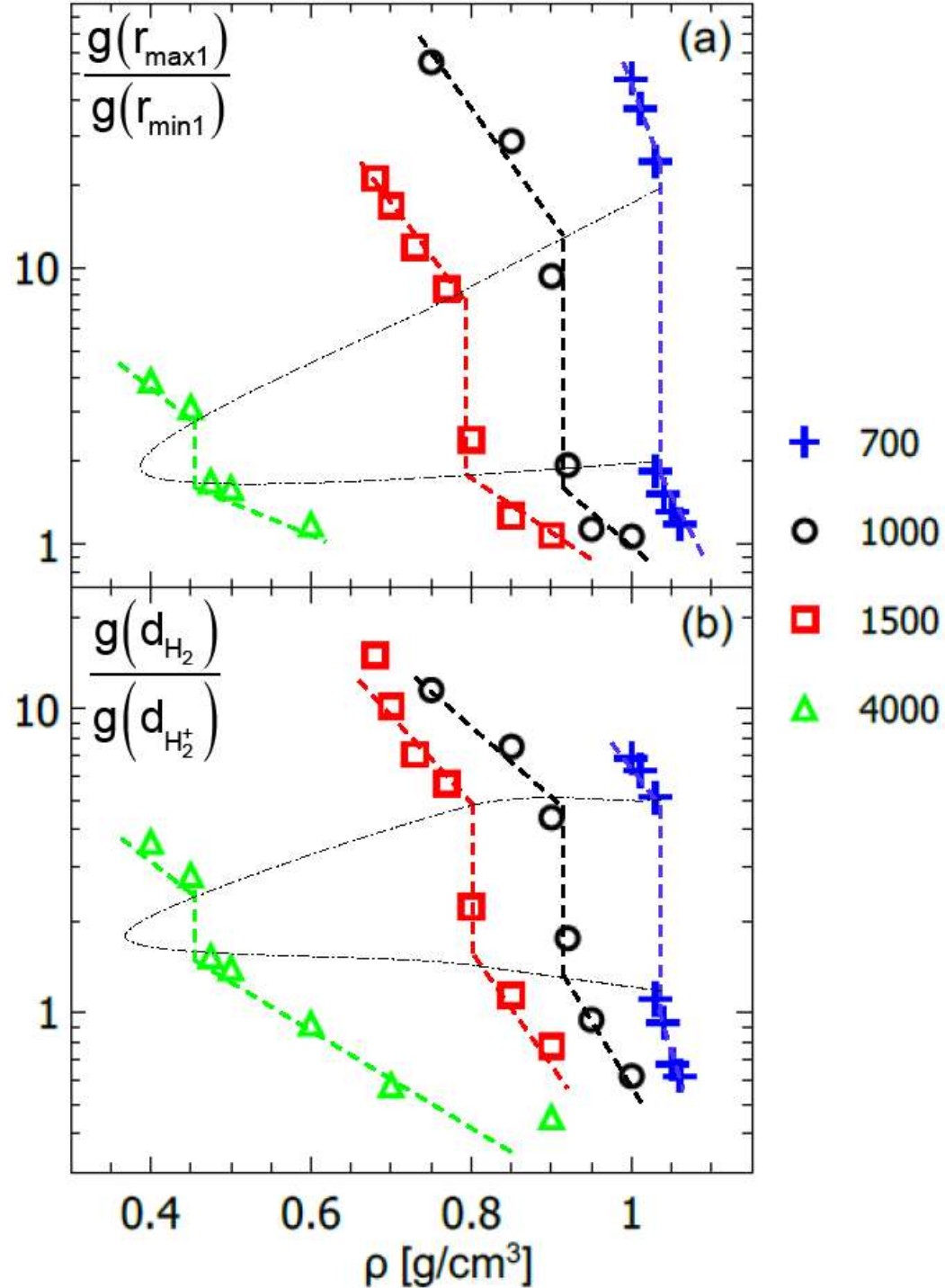
Molecular dynamics

Non-Local potentials

3.4. Pair correlation function

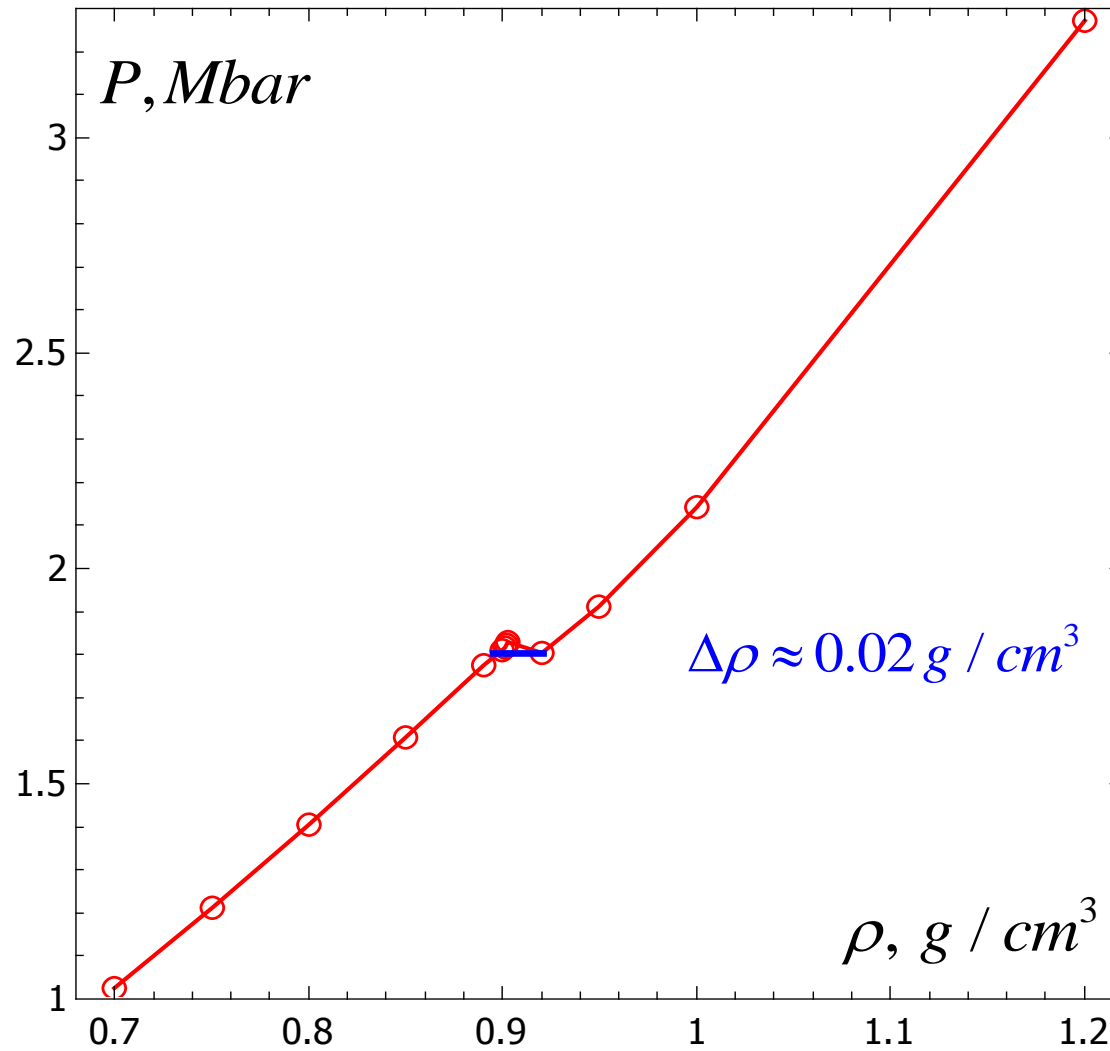


3.4. Pair correlation function

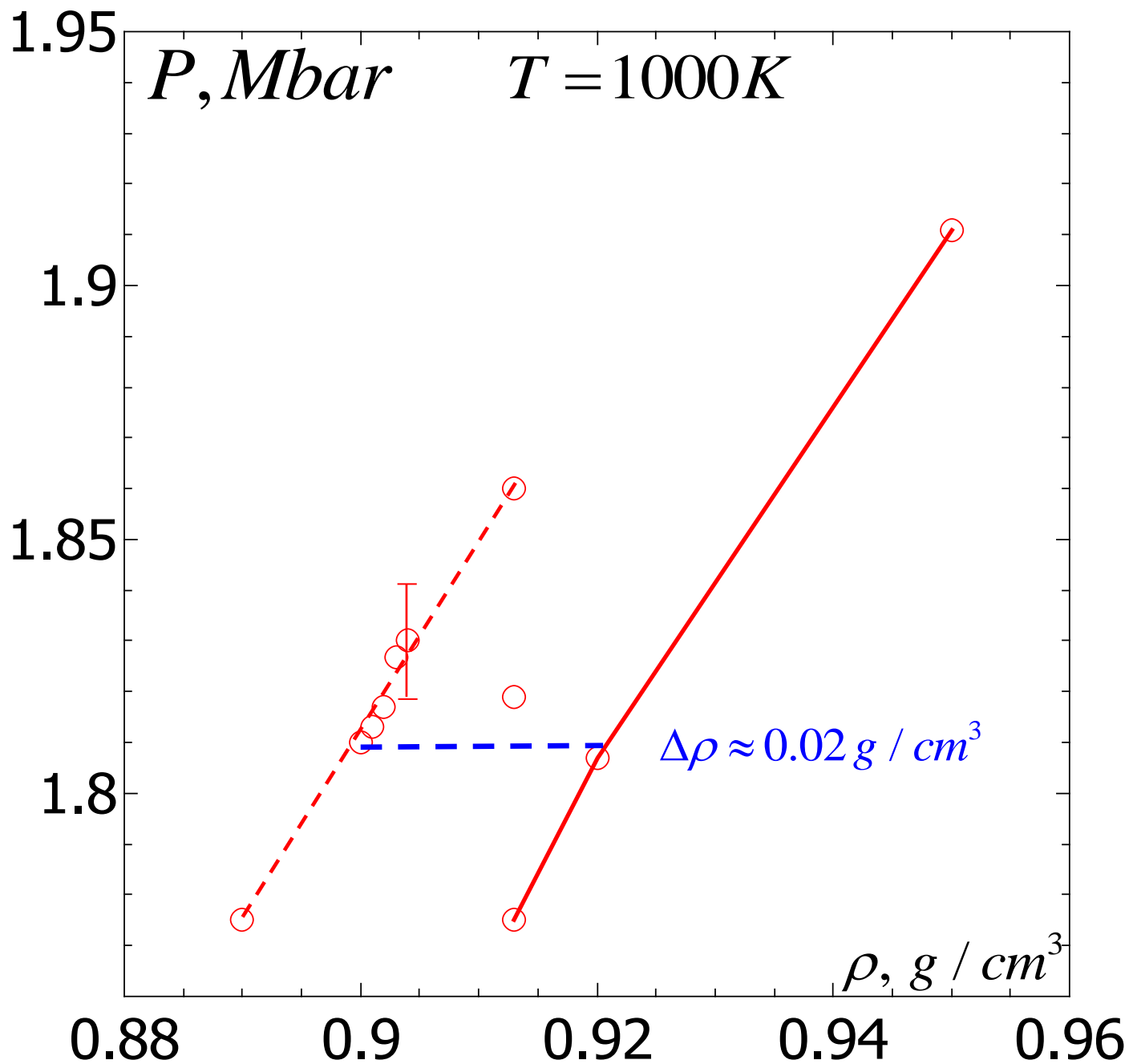


3.5. Drop of the specific volume

$$T = 1000K$$



3.6 Metastable states



Выводы.

Фазовые переходы первого рода в жидком селене и водороде рассматриваются в рамках самосогласованного подхода для описания оптических и электронных свойств. **Обнаружены:**

1) скачки электропроводности и плазменной частоты в плотном разогретом водороде в области фазового перехода.

2) закрытие щели между связанными и свободными состояниями в узком диапазоне плотностей в жидком селене и водороде.

3) заметное изменение структуры в водороде; при фазовом переходе происходит ионизация



4) скачок плотности и области метастабильности на изотермах 1000 и 1500К в водороде.

Publications

1. Norman G., Saitov I., Stegailov V., Zhilyaev P. Atomistic Modelling and Simulation of Warm Dense Matter. Conductivity and Reflectivity // Contrib. Plasma Phys. **53**, No. 4-5, 300 – 310 (2013)
2. Norman G., Saitov I., Stegailov V., Zhilyaev P. Ab initio calculation of shocked xenon reflectivity // Phys. Rev. E **91**, 023105 (2015)
3. Norman G., Saitov I., Stegailov V. First-Principles Calculation of the Reflectance of Shock Compressed Xenon // J. Exp. Theor. Phys. **120**, No. 5, 894 – 904 (2015)
4. Norman G., Saitov I., Stegailov V. Plasma-Plasma and Liquid-Liquid First-Order Phase Transitions // Contrib. Plasma Phys. **55**, No. 2-3, 215 – 221 (2015)
5. Norman G., Saitov I. Brewster angle of shock-compressed xenon plasmas // J. Phys.: Conf. Ser., **653**, 012111 (2015)
6. Saitov I. Density functional theory for dielectric properties of warm dense matter // Mol. Phys. **114**, No. 3-4, 446 – 452 (2016)

Convergence (summary)

in number of k-points in the Brillouin zone

in number of particles in the supercell

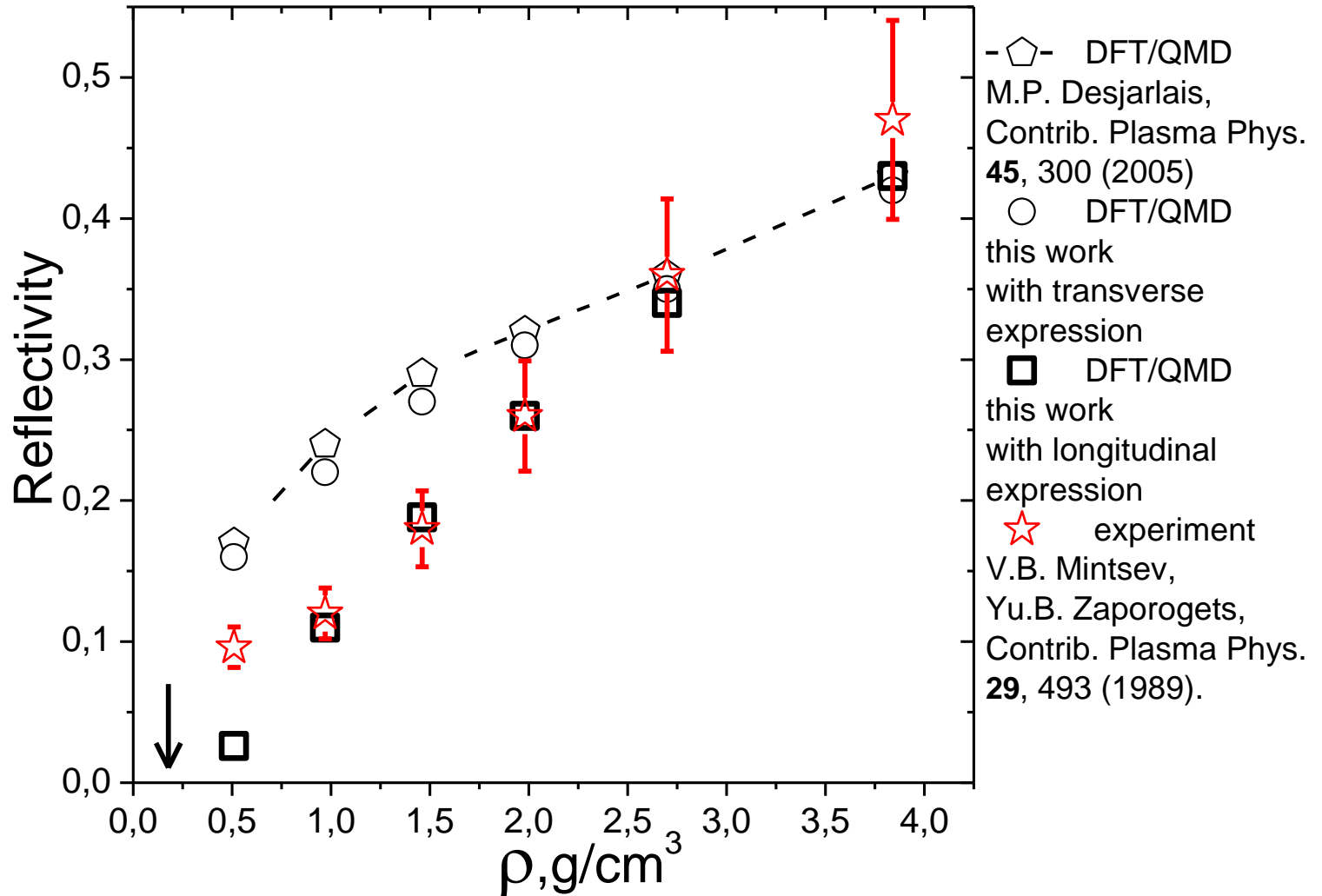
in frequency range

in number of ionic configurations

Relative error is $\sim 5\% - 30\%$
depending on density

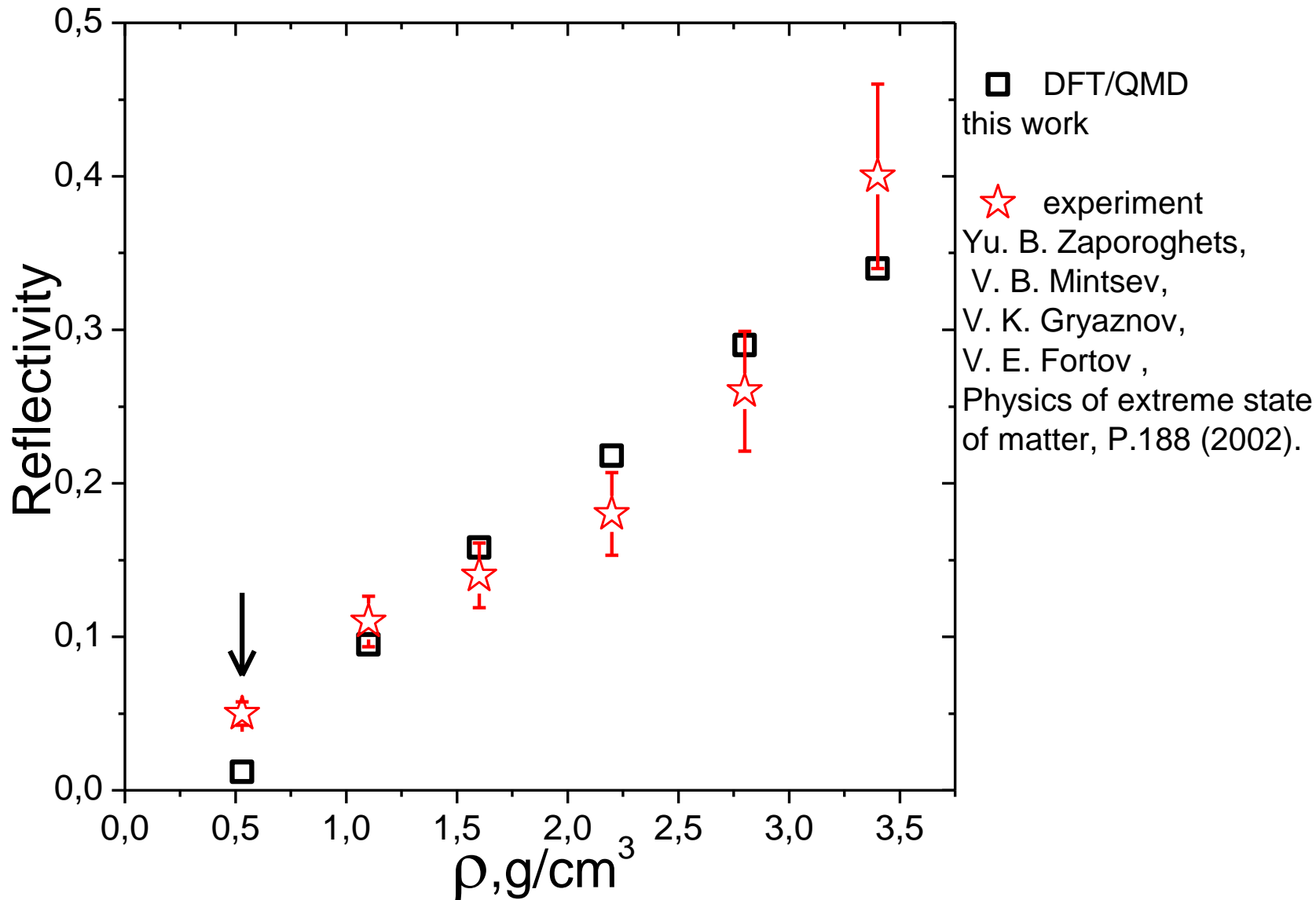
Dependence of reflectivity of shocked xenon on density

$$\lambda = 1064 \text{ nm}$$



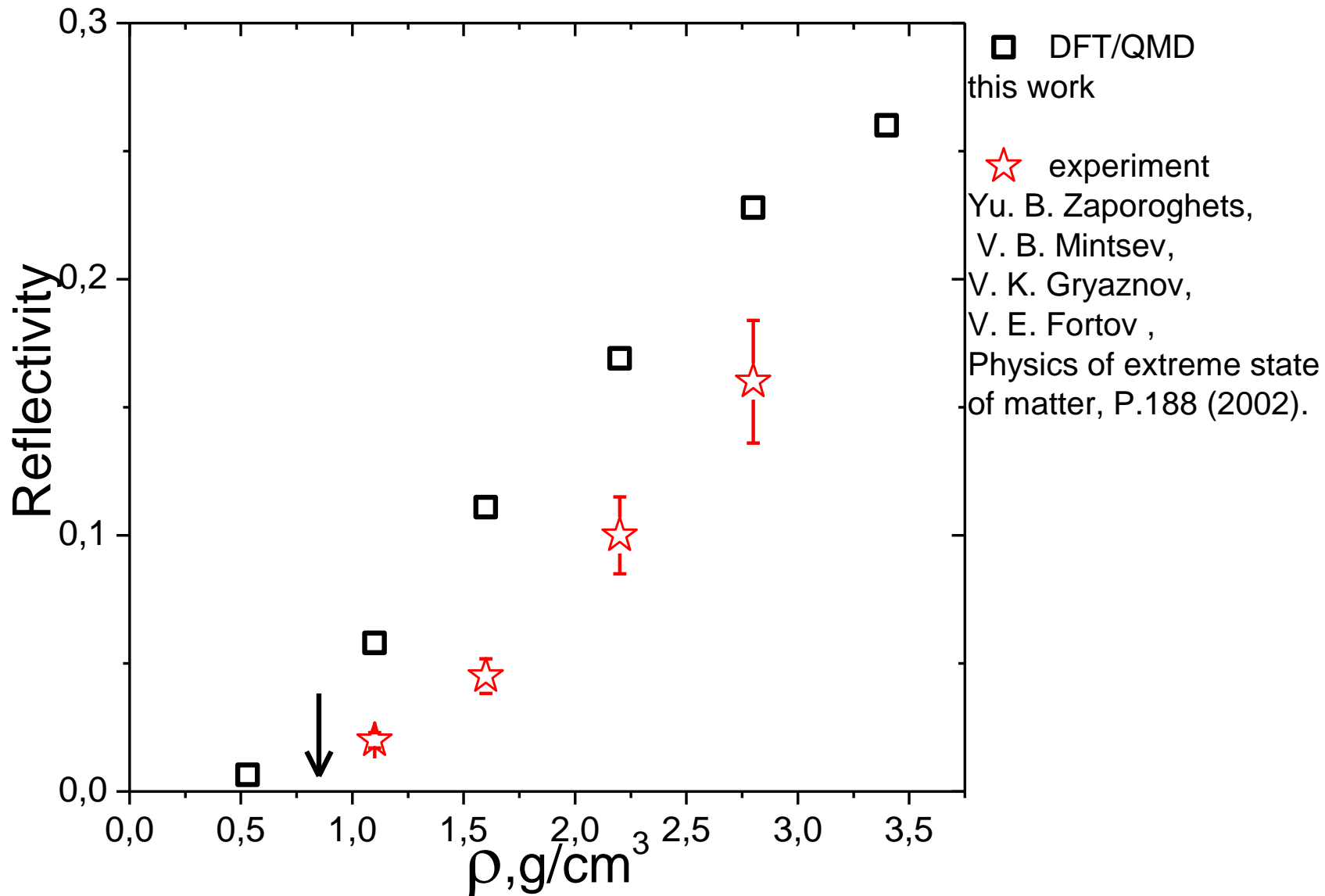
Dependence of reflectivity of shocked xenon on density

$$\lambda = 694 \text{ nm}$$



Dependence of reflectivity of shocked xenon on density

$$\lambda = 532 \text{ nm}$$



Calculation parameters

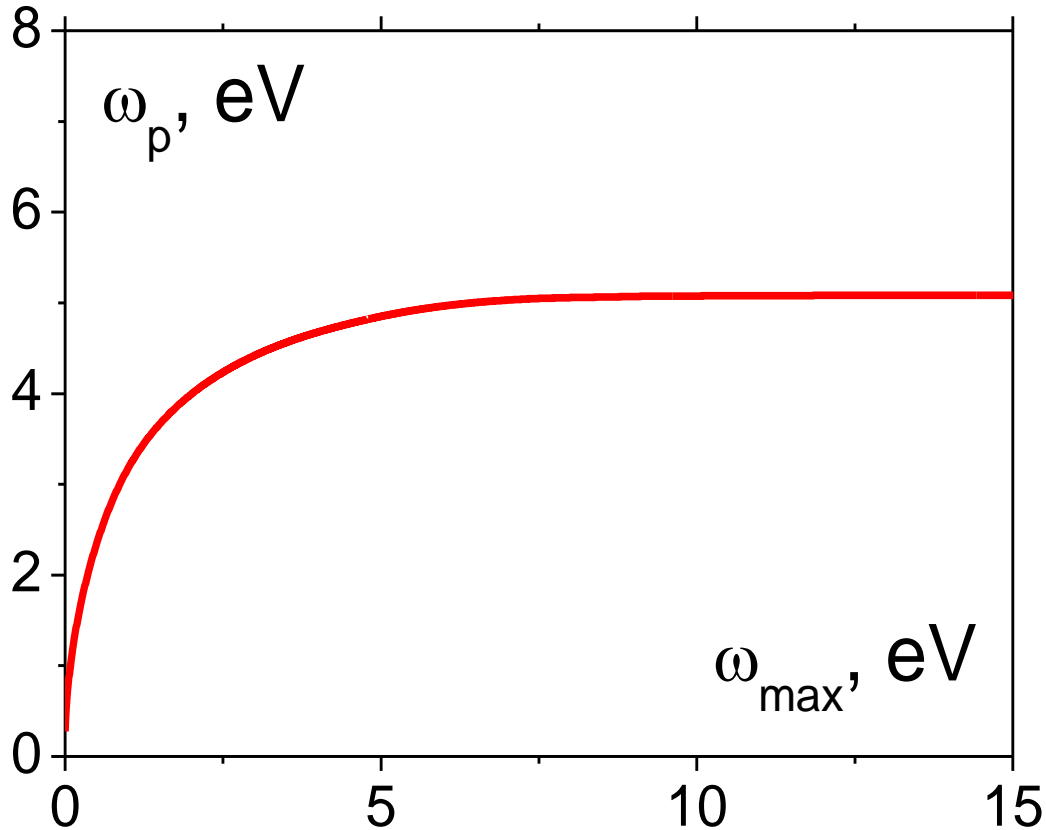
$\lambda = 1064 \text{ nm}$

$\rho, \text{g/cm}^3$	T, K
0.51	30050
0.97	29570
1.46	30260
1.98	29810
2.7	29250
3.84	28810

$\lambda = 694, 532 \text{ nm}$

$\rho, \text{g/cm}^3$	T, K
0.53	32900
1.1	33100
1.6	33120
2.2	32090
2.8	32020
3.4	31040

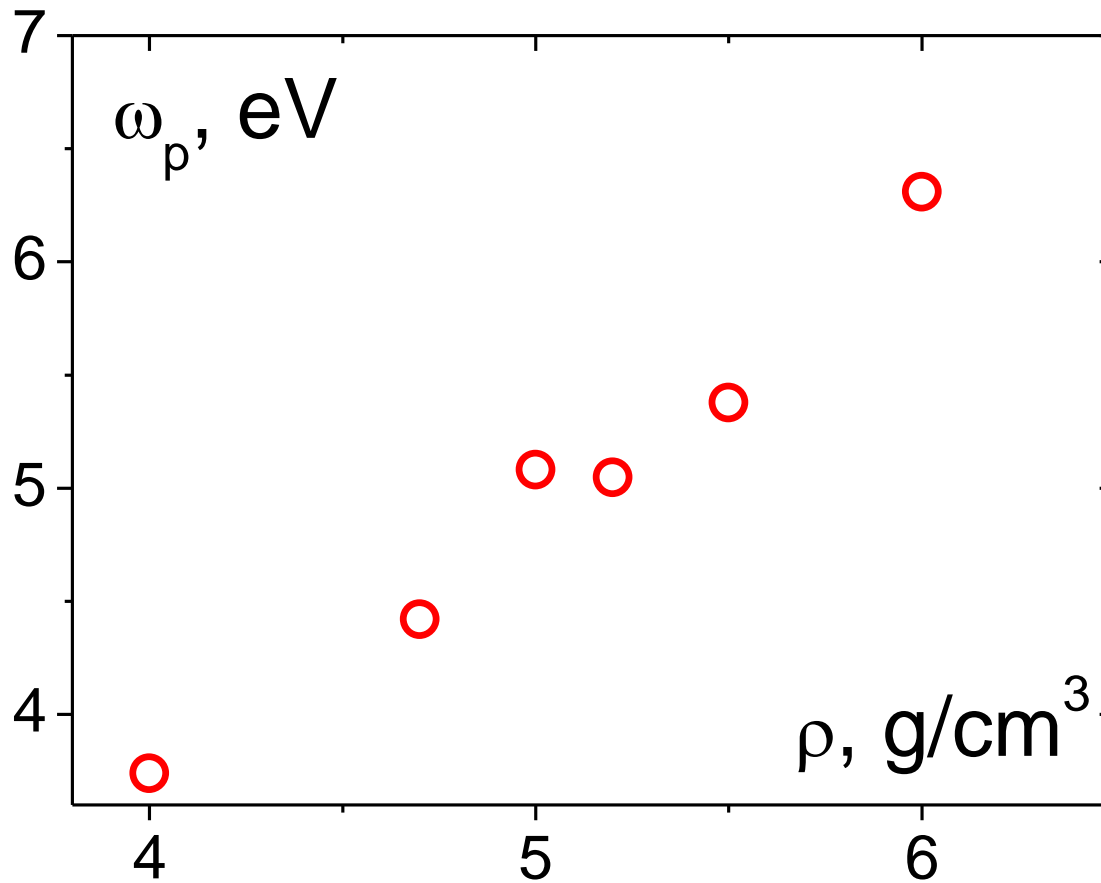
Plasma frequency of liquid selenium at $\rho=5\text{g/cm}^3$



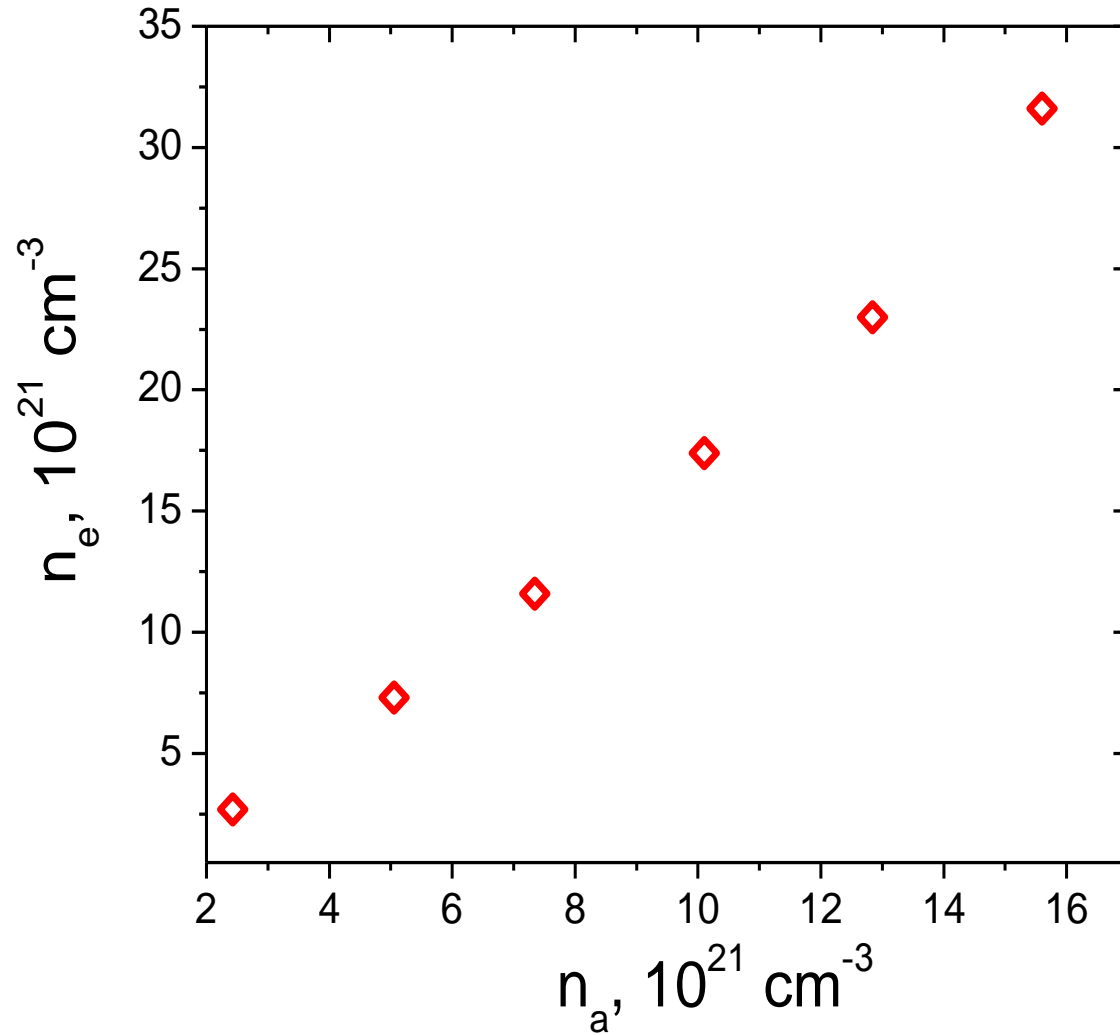
$$\int_0^{\infty} \omega \varepsilon^{(2)}(\omega) d\omega = \frac{\pi}{2} \omega_p^2$$

$$\int_0^{\omega_{\text{max}}} \omega \varepsilon^{(2)}(\omega) d\omega = \frac{\pi}{2} \omega_p^2(\omega_{\text{max}})$$

Dependence of plasma frequency on density in the liquid selenium

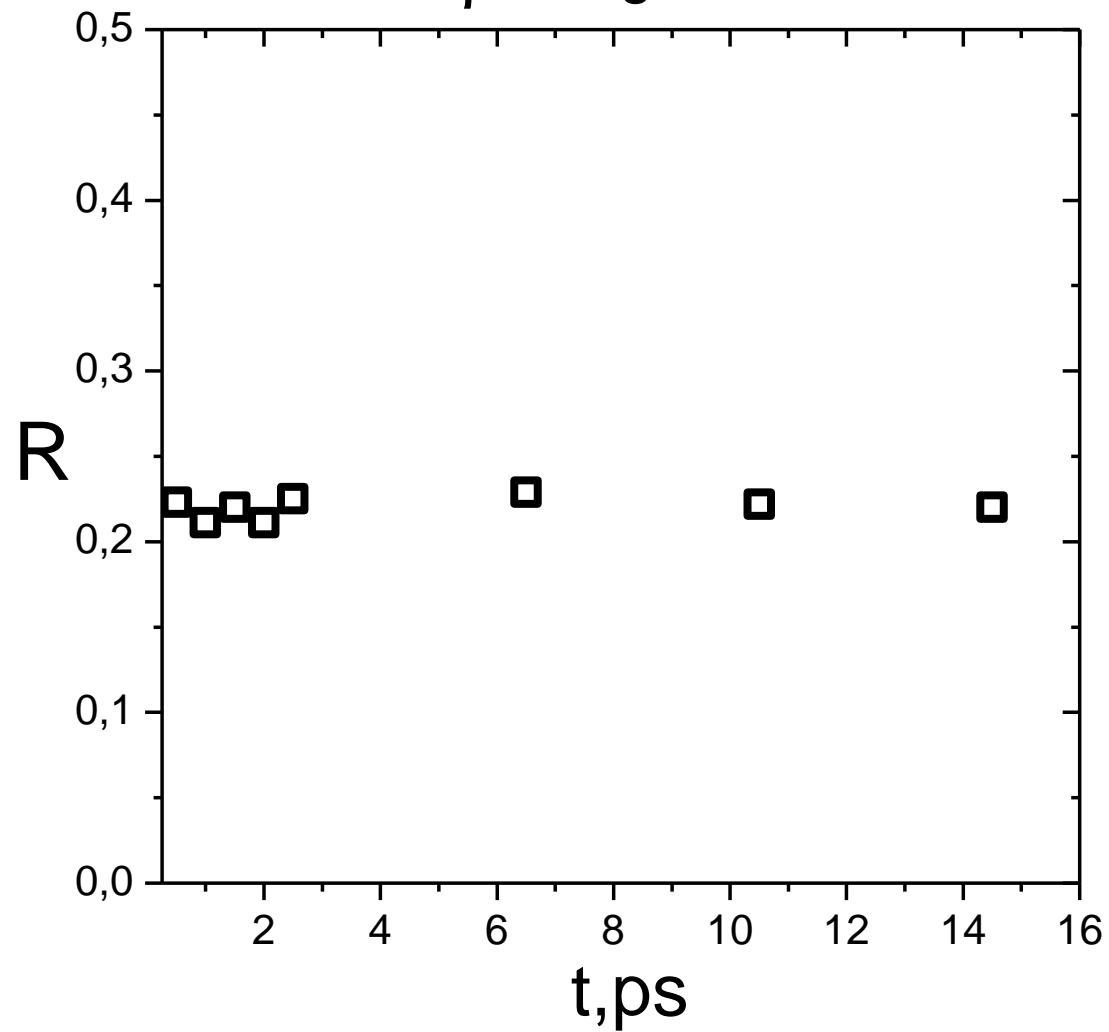


Dependence of charge density in plasma of shocked xenon on concentration of neutral atoms

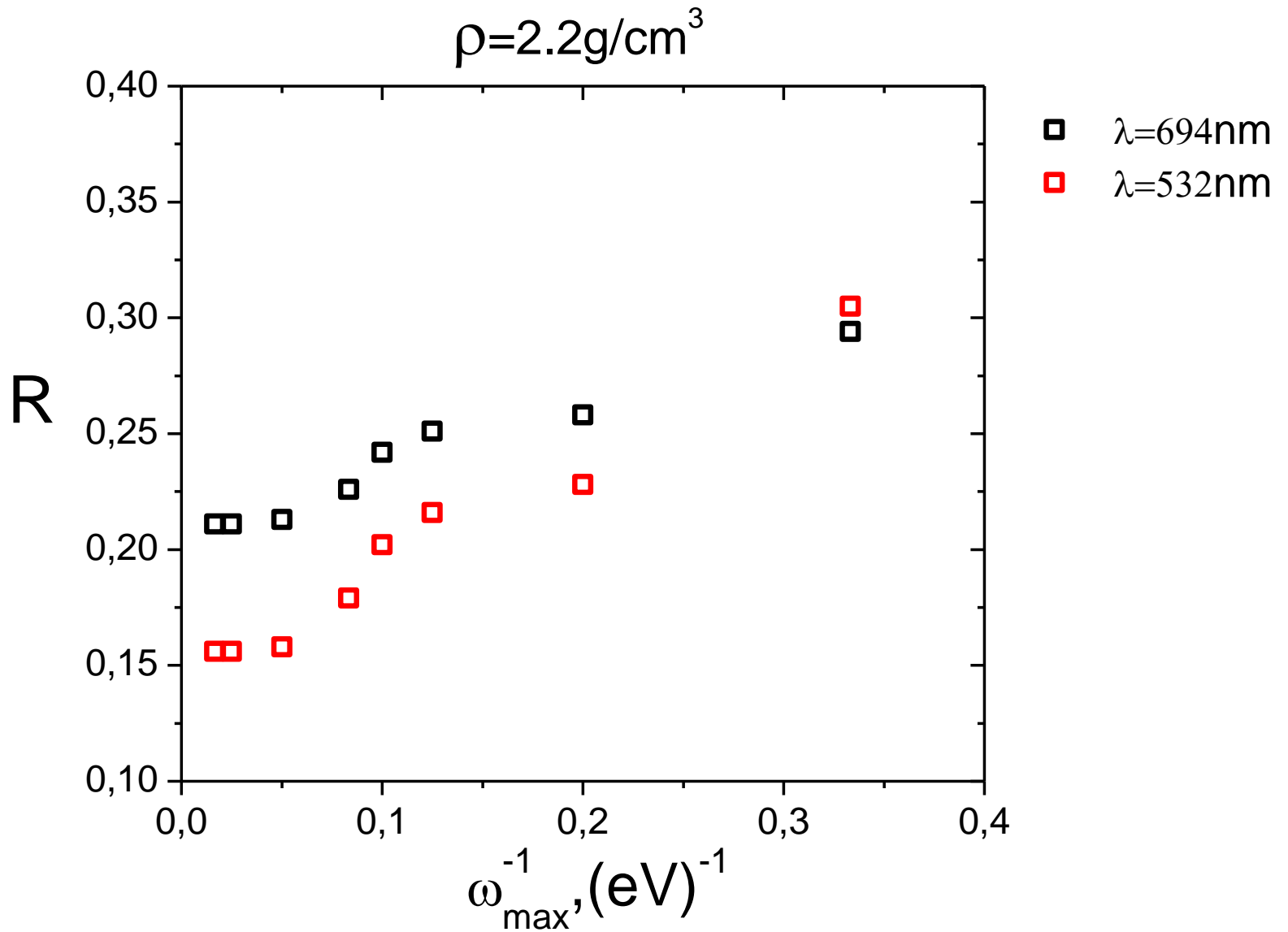


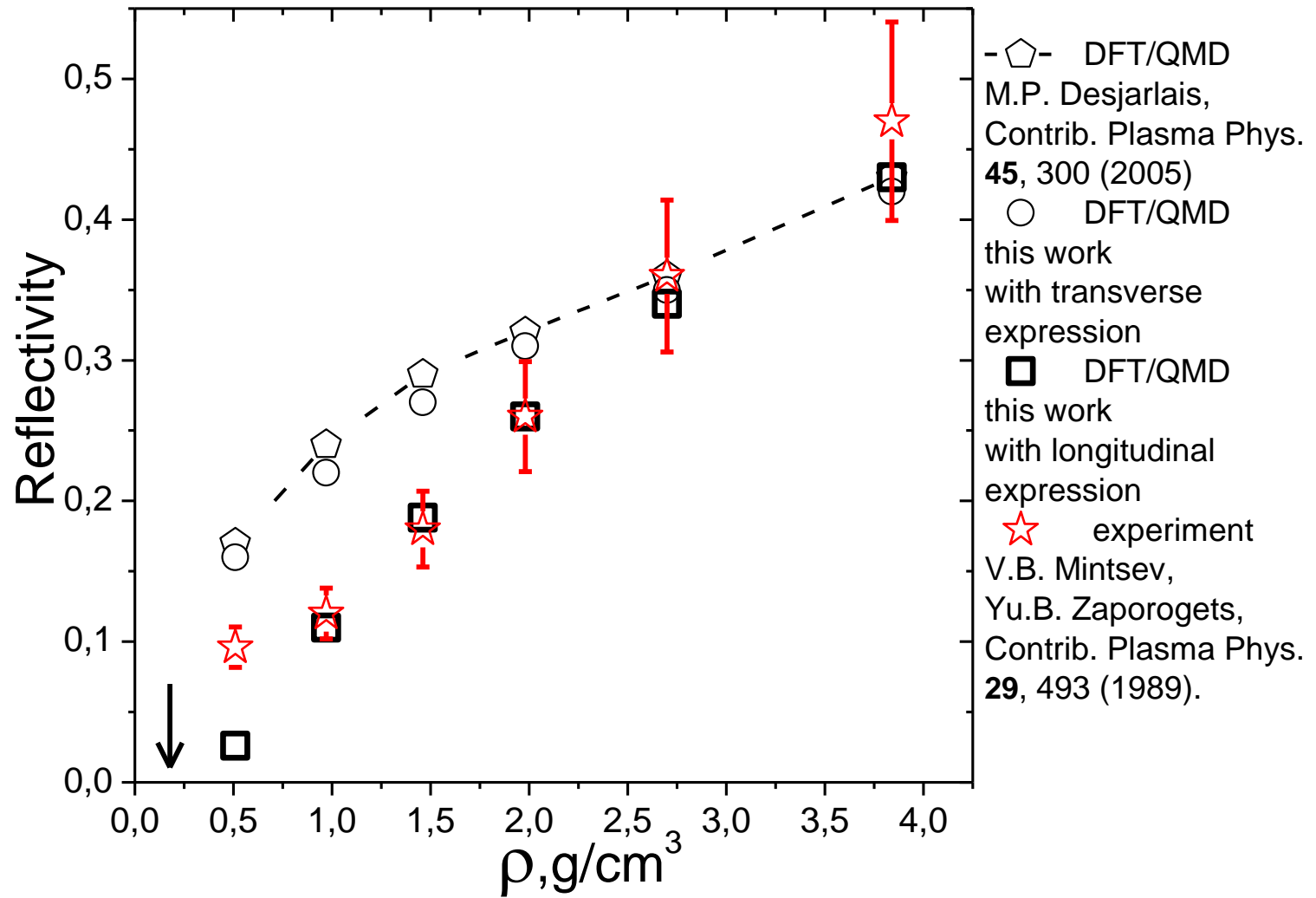
Сходимость по конфигурациям

$$\rho = 2.2 \text{g/cm}^3$$

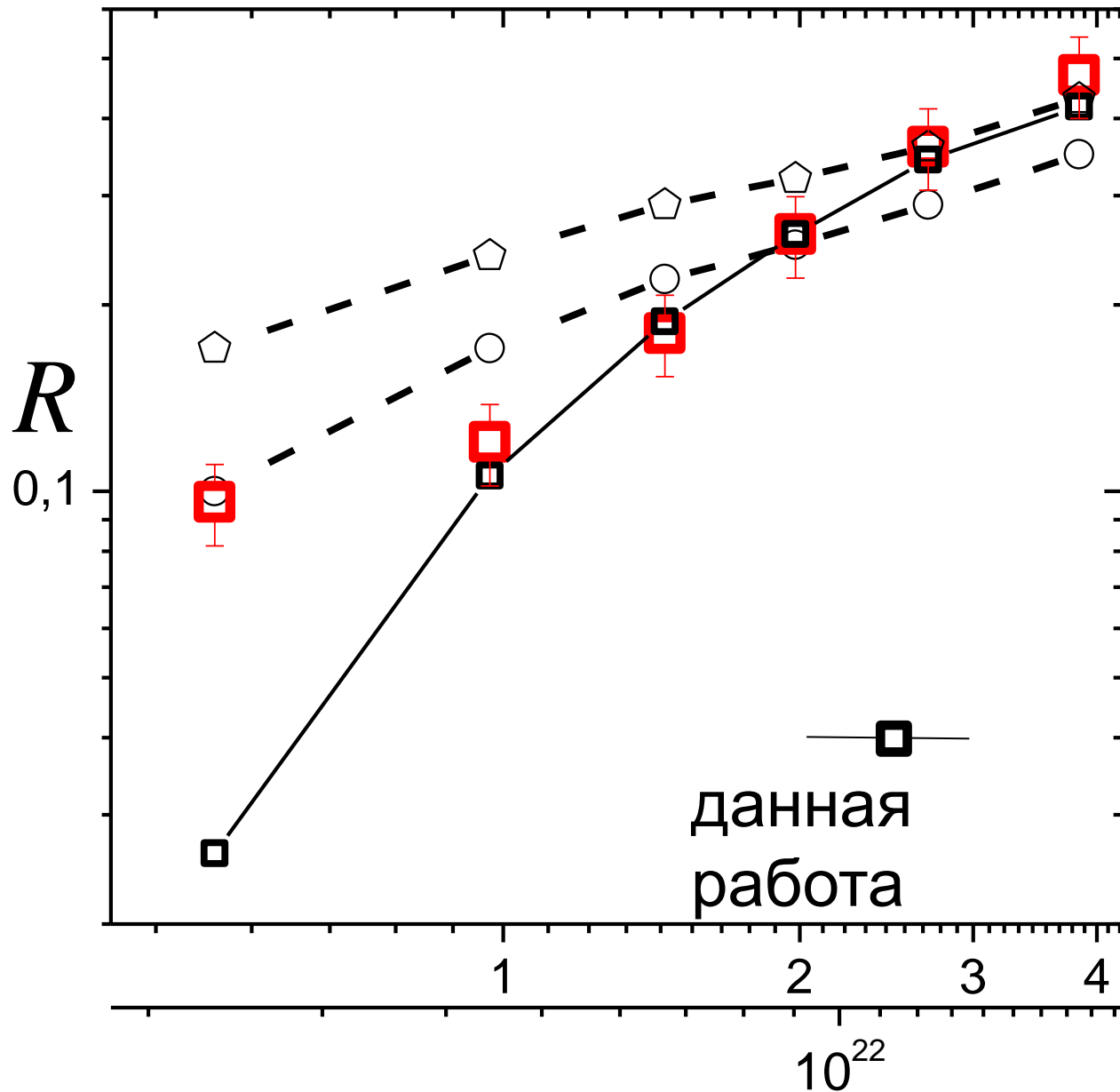


Сходимость по интервалу интегрирования





$\lambda = 1064 \text{ nm}$



□ эксперимент
V.B. Mintsev,
Yu.B. Zaporozhets,
Contrib. Plasma Phys.
29, 493 (1989).

— ◻ — DFT/QMD

— ○ — DFT/QMD
with «band gap»
corrections

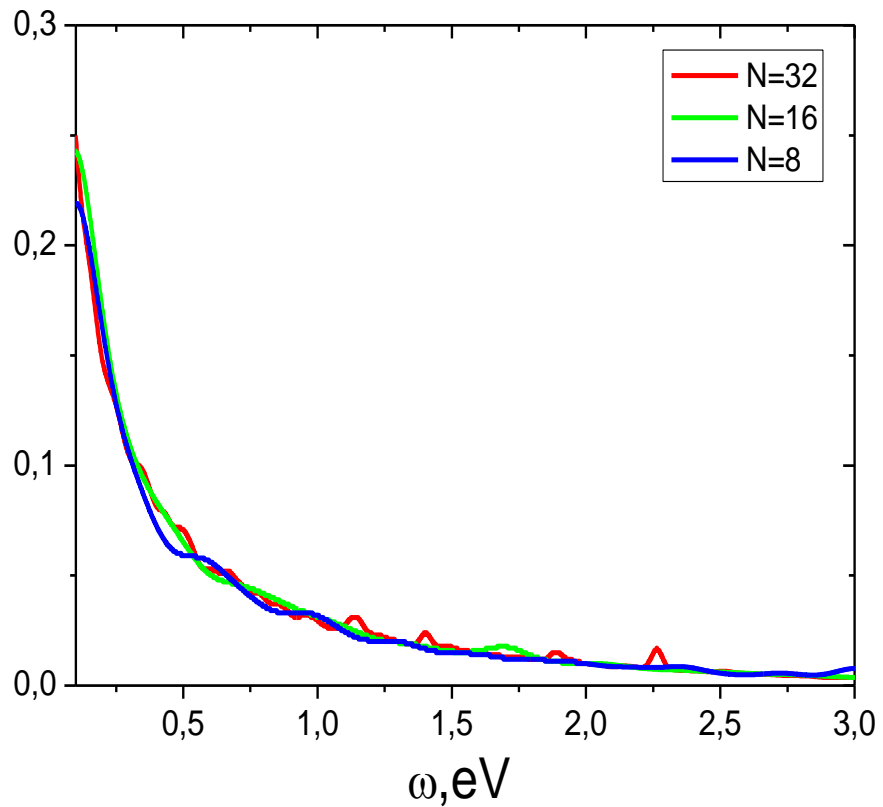
M.P. Desjarlais,
Contrib. Plasma Phys.
45, 300 (2005)

$\rho, \text{g} / \text{cm}^3$

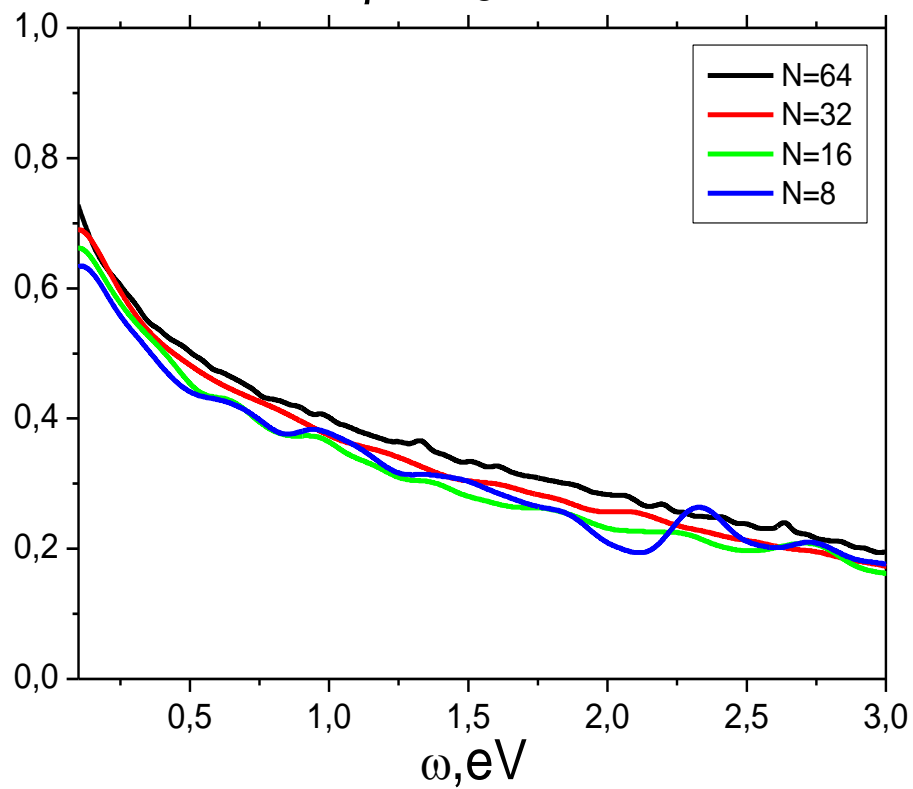
n_a, cm^{-3}

Сходимость по числу частиц

$\rho=0.53\text{g/cm}^3$

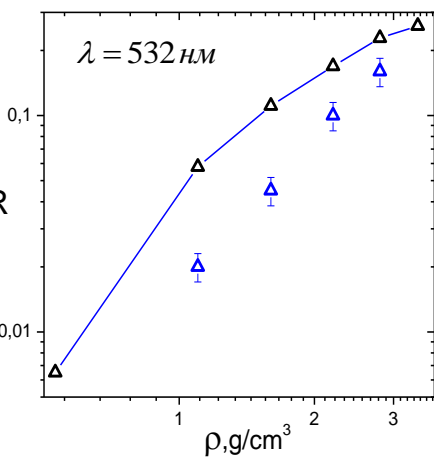
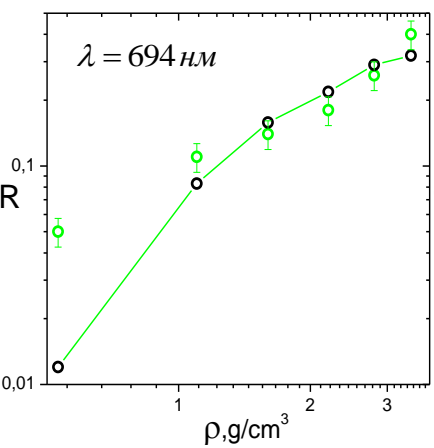
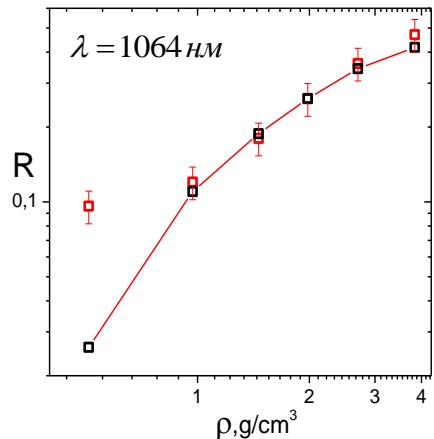


$\rho=2.8\text{g/cm}^3$



Коэффициент отражения R от ударно сжатого ксенона.

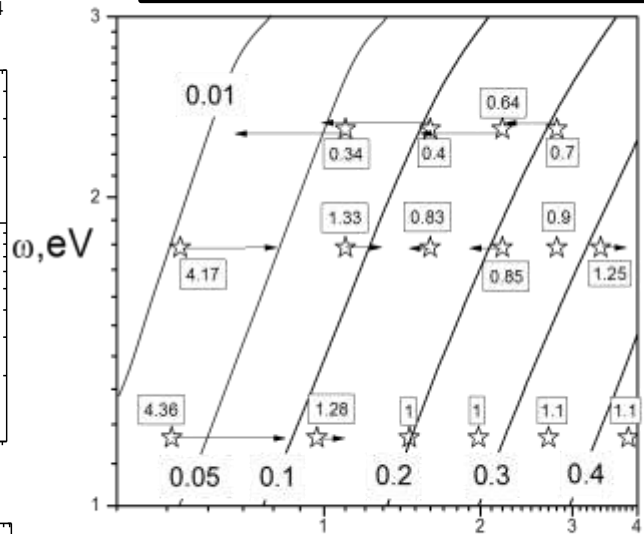
Эксперимент – точки с погрешностями; Ю.Б. Запорожец, Б.В. Минцев, В.К. Грязнов, В.Е. Фортов, 1989,2002,2012
 Теория – линии; П.А. Жилыев, Г.Э. Норман, И.М. Саитов, В.В. Стегайлов, 2012



Диэлектрическая проницаемость: $\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$ $\varepsilon^{(1)}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{(2)}(\omega') \omega'}{\omega'^2 - (\omega - i\eta)^2} d\omega'$

$\varepsilon^{(2)}(\omega) = \frac{1}{3} \cdot \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{|q| \rightarrow 0} \frac{1}{|q|^2} \sum_{i,j,\alpha,k} 2W_k \cdot [f(\varepsilon_{i,k+\alpha q}) - f(\varepsilon_{j,k})] \cdot \left| \langle \Psi_{i,k+\alpha q} | \Psi_{j,k} \rangle \right|^2 \cdot \delta(\varepsilon_{i,k+\alpha q} - \varepsilon_{j,k} - \hbar\omega)$

Коэффициент отражения: $R = \left| \frac{(\sqrt{\varepsilon} - 1)}{(\sqrt{\varepsilon} + 1)} \right|^2$ $R_s = \left| \frac{\cos \varphi - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}} \right|^2$ $R_p = \left| \frac{\varepsilon \cos \varphi - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}}{\varepsilon \cos \varphi + \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \varphi}} \right|^2$



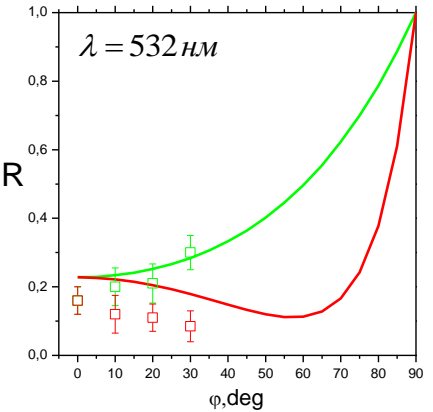
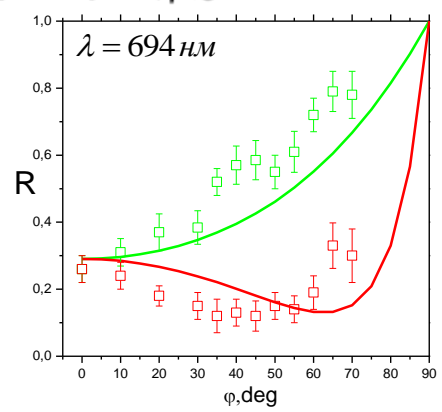
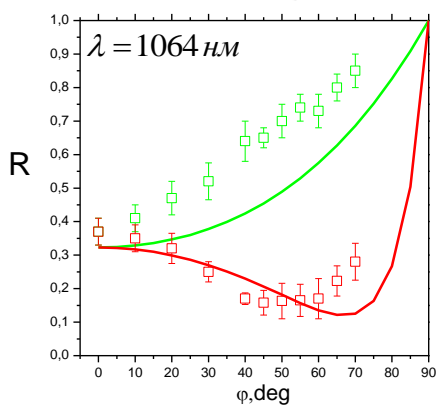
Сопоставление рассчитанных и измеренных значений R на плоскости плотность ρ – частота ω .

Линии равных теоретических значений R проведены для R от R=0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4.

Звездочками обозначены плотности и частоты, при которых проводились измерения.

Числа в рамках, расположенные рядом со звездочками - отношения измеренного значения R к теоретическому при заданных значениях частоты и плотности.

Звездочки соединены стрелками с точками на плоскости, при которых измеренные значения совпадают с рассчитанными.



Зависимость коэффициента отражения s- и p-поляризованных компонент излучения от угла падения.

Саитов И.М. Диэлектрические свойства разогретого плотного вещества (Warm Dense Matter)

$$\varepsilon^{(2)}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \sum_{i,j,k} 2W_{\mathbf{k}} \cdot [f(E_{i,\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(E_{j,\mathbf{k}})] \left| \langle \Psi_{i,\mathbf{k}+\mathbf{q}} | \Psi_{j,\mathbf{k}} \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_{i,\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{j,\mathbf{k}} - \hbar\omega)$$

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

Dielectric function $\varepsilon = \varepsilon^{(1)} + i \cdot \varepsilon^{(2)}$

Reflectivity
Absorbtion
Trasmission

Plasma frequency
Effective free
electron density

Conductivity
.....

Electronic density of states

DFT

Kohn-Sham