基于修正的 Chihara 公式的密度泛函理论分子动力学模拟所得的 X射线汤姆孙散射光谱

Maximilian Sch¨orner,[1,*] Mandy Bethkenhagen,[2,3] Tilo D¨oppner,[4] Dominik Kraus,[1,5] Siegfried H. Glenzer,[6] 和 Ronald Redmer[1]

[1] *University of Rostock Institute of Physics 18051 Rostock Germany* ,,,,,

[2] *École Normale Supérieure de Lyon Laboratoire de Géologie de Lyon LGLTPE UMR 5276 Centre Blaise Pascal, 46 allée d'Italie Lyon 69364, France*

[3] *Institute of Science and Technology Austria, Am Campus 1, 3400 Klosterneuburg, Austria*

[4] *Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA*

[5] *Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, 01328 Dresden, Germany*

[6] *SLAC National Accelerator Laboratory, Menlo Park, CA 94025, USA*（日期：2023年1月5日）

我们研究了基于密度泛函理论分子动力学（DFT-MD）模拟、采用修正 Chihara 公式计算 X射线汤姆孙散射光谱的先进方法。该公式用介电函数表示非弹性贡献。我们比较了使用电子-离子碰撞频率 *ab initio* 通过 Mermin 介电函数计算得到的电子动态结构因子与在线性响应含时密度泛函理论（LR-TDDFT）框架下的计算结果，并针对氢和铍研究了自由-自由贡献与束缚-自由贡献在散射信号中的色散。对 Mermin 介电函数中这些贡献进行分别处理后，对于环境密度下的铍，其结果与 LR-TDDFT 结果高度一致；但对于高度压缩物质，当束缚态发生压致电离时，该方法会失效。我们采用 LR-TDDFT 重新分析了铍的 X射线汤姆孙散射实验，结果表明，在较小散射角下，实验结果与传统解析模型推断出的等离子体条件存在显著偏差。

arXiv:2301.01545v1 [physics.plasm-ph] 4 Jan 2023

I. 引言

X射线汤姆孙散射（XRTS）一直是暖稠密物质（WDM）实验中一项重要的诊断工具，可用于测量电子密度、温度和电离态 [1–3]。这些实验所达到的状态具有数电子伏特（eV）的温度和接近固体密度的密度特征，构成了简并性不可忽略的强关联等离子体。这使得理想等离子体理论不适用于分析此类实验，而需要在多体框架下进行量子力学处理。掌握暖稠密氢和铍的状态方程数据以及热输运和电输运性质，对于模拟天体物理对象 [4, 5]和惯性约束聚变 [6], 至关重要；在后者中，氢用作燃料，而铍通常用作烧蚀材料 [7, 8]。此外，氢和铍也是检验新理论方法的理想对象。完全电离氢等离子体在许多极限情况下的解析行为已为人所知，而铍可用于检验简单低-Z 材料中束缚态的处理。暖稠密物质在光学波段通常是不透明的，因为这些等离子体中的光频率低于等离子体频率 ω_{pl} 。因此，实验中必须采用充分理解其原理的诊断工具，既要在实验层面得到充分认识，也要在理论层面得到充分理解。

事实证明，XRTS能够克服探测暖稠密物质时遇到的许多实验挑战。高能X射线光子能够穿透致密等离子体；自自由电子激光器（FEL）问世以来，除仅能开展有限次数实验且需要复杂样品组件的激光等离子体源外，也有了亮度足以探测短寿命瞬态的高重复频率X射线源。自种子等新型FEL技术 [9, 10] 还使X射线源的带宽显著变窄，从而能够测量声子和离子声学模 [11, 12] ，并更好地分辨X射线汤姆孙散射光谱中对密度和温度敏感的区域。

随着收集到的光谱质量不断提高，对散射进行准确的理论建模至关重要。过去，XRTS谱的分辨率往往不足以区分不同的理论方法；如今，将实验光谱拟合到理论模型后，电子温度和密度的预测不确定度已可控制在几个百分点以内 [13–15]。因此，在采用X射线汤姆孙散射作为诊断工具的实验中，所用理论模型的保真度如今已成为正确确定等离子体参数的限制因素。大多数方法依赖于半经典千原分解 [16, 17], 将光谱分为三个不同的贡献；这种分解源于化学图像中对自由电子和束缚电子的区分。此外，也有人提出了相应的全量子力学描述 [18]。在 Chihara 描述中，对 XRTS谱进行建模的标准方法是结合多种理论，分别描述各个组成部分 [19]。离子的动

* maximilian.schoerner@uni-rostock.de

力学通常采用超网链近似描述，并使用不同形式的相互作用势；形状因子则通过屏蔽类氢近似描述波函数 [20] ，并采用 Debye-H¨uckel 近似描述屏蔽云。等离激元可用随机相位近似（RPA）或 Mermin 介电函数描述，后者还可纳入电子-离子碰撞，而这些碰撞也可按不同程度进行近似 [21]。局域场修正 [22]可用于考虑更多电子关联。与束缚-自由跃迁有关的贡献采用冲量近似 [23]处理，有时还会根据电离势降低进行修正，并按照不同的求和规则进行归一化。这些理论各自包含多种近似，在广泛的温度和密度范围内具有不同的保真度，因此误差来源难以评估。

此外，拟合过程中通常将电离度作为不受约束的参数，这可能导致过拟合，并忽略其对温度和密度的依赖。近年来，这种方法已部分被第一性原理 描述所取代，例如密度泛函理论分子动力学（密度泛函理论分子动力学）模拟，以及实时或线性响应含时密度泛函理论（实时/线性响应含时密度泛函理论）计算。Witte等人成功利用由密度泛函理论确定的电子-离子碰撞频率，准确模拟了铝等离子体中的等离激元 [24]。随后，Ramakrishna等人 将这一方法与线性响应含时密度泛函理论进行比较，研究了环境条件和极端条件下的铝 [25] 与碳 [26], ，并据此判别X射线汤姆孙散射实验中的互溶性 [13]。Baczewski等人 通过使用实时含时密度泛函理论模拟电子密度的实时演化，超越了Chihara分解 [27]。路径积分蒙特卡罗模拟为均匀电子气 [28] 和氢等离子体 [29], 提供了无近似结果，但目前还无法描述较重元素。

在本研究中，我们介绍如何在第一性原理框架下计算X射线汤姆孙散射谱，其中Chihara分解的各项贡献均从密度泛函理论分子动力学模拟中提取。该模拟基于明确的近似，并通过采用Bethkenhagen等人 [30]最近提出的一种新方法，根据每个原子的自由电子数进行约束，将自由参数限制为质量密度和温度。此前的研究 [31–33] 已展示并检验了密度泛函理论分子动力学计算离子动力学和形状因子的能力。因此，我们重点关注非弹性贡献，它可以通过采用久保-格林伍德公式或线性响应含时密度泛函理论的自洽密度泛函理论计算循环来计算。我们概述了如何基于具有动态复碰撞频率的Mermin介电函数计算电子动态结构因子的理论基础，并在第II A节和第II B节中应用这一框架提取基于密度泛函理论的碰撞频率。在第II D节中，我们详细介绍模拟方法。在第III节中，我们计算氢等离子体中基于密度泛函理论的碰撞频率，并将其与若干解析方法进行比较；在第IV A、IV B和IV C节中，我们研究这些碰撞频率对氢等离子体和铍等离子体动态结构因子的影响。在第V节中，我们将线性响应含时密度泛函理论应用于铍的X射线汤姆孙散射实验，以评估其对推断等离子体参数的影响。

II. 理论背景

A. 动态结构因子

电子动态结构因子（DSF） [1]

$$S_{ee}^{\mathrm{tot}}(\vec{k},\omega)=\frac{1}{2\pi N_e}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\langle n_{\vec{k}}^{e}(\tau)n_{-\vec{k}}^{e}(\tau+t)\rangle_{\tau}\,e^{i\omega t}\quad(1)$$

是表征电子系统空间分辨功率谱的核心量，描述其在由频率 ω 和波矢 k 分别确定的时间和空间周期下的动力学。考虑的电子数为 N_e ，电子密度的空间傅里叶分量表示为$n_{\vec{k}}^{e}$。时间由 t 和 τ 描述，其中 $\langle ...\rangle_{\tau}$ 表示对 τ 的时间平均。实验上，可利用 $S_{ee}^{\mathrm{tot}}(\vec{k},\ \omega)$ 来确定光子在给定能量转移和散射角 [1] 下与密度涨落耦合的强度。本文将采用 Chihara [16, 17] 引入的式（1）常用分解形式的一个小幅修正:

$$S_{ee}^{\mathrm{tot}}(\vec{k},\omega)=|f_{\mathrm{i}}(\vec{k})+q(\vec{k})|^2S_{\mathrm{ii}}(\vec{k},\omega)+ \\ +\underbrace{Z_{\mathrm{f}}S_{ee}^{0}(\vec{k},\omega)+Z_{\mathrm{b}}S_{\mathrm{bf}}(\vec{k},\omega)}_{Z\,S_{\mathrm{et}}(\vec{k},\omega)}.\quad(2)$$

第一项表示随离子运动的电子的弹性响应，该离子运动由离子-离子结构因子 $S_{\mathrm{ii}}(\vec{k},\ \omega)$ 描述。这里， $f_{\mathrm{i}}(\vec{k})$ 描述紧束缚电子的贡献，而 $q(\vec{k})$ 表示离子周围的弱束缚屏蔽云。第二项称为电子峰，源于系统中自由电子的集体行为，这些电子会跃迁到不同的自由电子态。每个原子的自由电子数记为 Z_{f} ，其动态结构因子记为 $S_{ee}^{0}(\vec{k},\ \omega)$。式（2）中的最后一项是束缚-自由贡献。在原始研究中，Chihara 明确区分了自由电子和束缚电子，并将这一项描述为芯层电子的动态结构因子与离子动态结构因子自项 [17] 的卷积。我们将束缚-自由贡献与自由电子贡献同等处理，并引入束缚-自由动态结构因子 $S_{\mathrm{bf}}(\vec{k},\ \omega)$ 以及每个原子的束缚电子数 Z_{b}。自由电子贡献和束缚-自由贡献均源于电子的非弹性跃迁

$\vec{}$，因此可以合并为一个动态结构因子 $S_{\rm et}(k,\ \omega)$，以描述所有电子跃迁。这样就避免了对电荷态 Z 和动态结构因子进行自由电子与束缚电子的人为区分。根据涨落耗散定理 [34]，，这一组合动态结构因子可与由介电函数 $\epsilon(\vec{k},\ \omega)$ 描述的介电响应相关联：

$$S_{\rm et}(\vec{k},\omega) = -\frac{\epsilon_0 \hbar \vec{k}^2}{\pi e^2 n_e} \frac{\mathrm{Im}\left[\epsilon^{-1}(\vec{k},\omega)\right]}{1-\exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_{\rm B}T_e}\right)}. \quad (3)$$

真空介电常数记为 ϵ_0，约化普朗克常数为 $\hbar$，e 是元电荷。电子密度记为 n_e，电子温度为 T_e，玻尔兹曼常数为 $k_{\rm B}$。在什么条件下，式（2）中将自由与束缚-自由部分分开是合理的，且能得到与合并处理相同的结果，将在第 IV B 节和第 IV C 节讨论。

B. 考虑电子-离子碰撞的介电函数

$\vec{}$介电函数 $\epsilon(k,\ \omega)$是材料的一项核心性质，与其他材料性质相关，例如长波长极限下的电导率 $\sigma(\omega)$，或通过式（3）的涨落耗散定理与动态结构因子相关。最早能够描述电子系统集体现象（如等离激元）的方法之一，是林德哈德介电函数 [35]

$$\epsilon^{\rm RPA}(\vec{k},\omega) = \lim_{\eta\to 0}\Bigg[1- \\ -\frac{2e^2}{\epsilon_0 k^2}\int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{f_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}} - f_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}}}{\hbar(\omega+i\eta)+E_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}}-E_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}}}\Bigg]. \quad (4)$$

该函数在随机相位近似（RPA）下考虑了电场屏蔽。参数 $\vec{k}$ 和 ω分别是波矢和角频率，而电子电荷记为 e。$E_{\vec{q}}$ 和$f_{\vec{q}}$ 分别是未受扰自由电子气中波矢为 $\vec{q}$ 的电子的动能和费米占据数。频率中的微小虚部 η 用于避免积分中的极点，随后趋于零。然而，对于简并且强关联的系统，为了准确描述介电函数，必须考虑式（4）中忽略的电子-离子相互作用。

研究表明，在 Mermin 介电函数框架中，可通过动态碰撞频率 $\nu(\omega)$ 纳入电子-离子碰撞 [36–39]

$$\epsilon^{\rm Mermin}(\vec{k},\omega;\nu(\omega)) = 1+ \\ +\frac{\left(1+i\frac{\nu(\omega)}{\omega}\right)\left(\epsilon^{\rm RPA}(\vec{k},\omega+i\nu(\omega))-1\right)}{1+i\frac{\nu(\omega)}{\omega}\frac{\epsilon^{\rm RPA}(\vec{k},\omega+i\nu(\omega))-1}{\epsilon^{\rm RPA}(\vec{k},0)-1}}. \quad (5)$$

人们已广泛研究不同解析碰撞频率和局域场修正的评估 [21, 22, 40]，，并初步尝试利用第一性原理 结果来确定碰撞频率 [41]。

附录 A 中给出了存在动态复碰撞频率时随机相位近似介电函数的推导。方程 (5)、(A7) 和 (A8) 是针对给定动态碰撞频率 $\nu(\omega)$ 计算 Mermin 介电函数的基础。下文中，由于我们处理的是各向同性系统，$\vec{}$因此我们只考虑波矢 k 的大小，并省略矢量记号。

碰撞频率最突出的一种近似是玻恩碰撞频率 [21]，，将其与方程 (5) 中的 Mermin 介电函数结合后称为玻恩-Mermin 近似（BMA）。该近似广泛用于暖稠密物质领域中 XRTS谱的分析。附录 B 中给出了本工作所使用的精确方程。然而，对于 第一性原理模拟中所考虑的复杂多粒子效应，该方法无法加以描述。

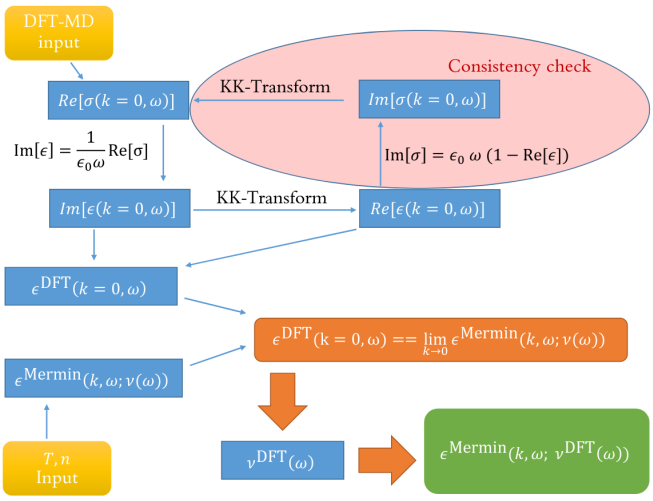

图1. 通过密度泛函理论确定动态碰撞频率和依赖于 k的介电函数的示意流程图。

在图 1 中，我们展示了如何根据光学极限下的电导率，计算基于 DFT 的碰撞频率的示意流程。其本质是构造一个复碰撞频率，使 Mermin 介电函数在光学极限下与 第一性原理 介电函数一致。对于 Mermin 介电函数，需要输入等离子体的温度和电子密度；而从模拟中需要获得电导率的实部。根据

久保-格林伍德公式 [42, 43] 电导率为

$$\mathrm{Re}\left[\sigma(k=0,\omega)\right] = \frac{2\pi e^2}{3\omega\Omega}\sum_{\vec{g}} w_{\vec{g}} \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\alpha=1}^{3} \times$$
$$\times \left[f(\epsilon_{j,\vec{g}}) - f(\epsilon_{i,\vec{g}})\right] |\langle\psi_{j,\vec{g}}|\hat{v}_\alpha|\psi_{i,\vec{g}}\rangle|^2 \delta(\epsilon_{i,\vec{g}} - \epsilon_{j,\vec{g}} - \hbar\omega). \quad (6)$$

指标 i 和 j 遍历本征态， α 遍历空间方向，而 $\vec{g}$ 表示布里渊区中的倒格矢，在这些位置计算波函数 $\psi_{i,\vec{g}}$。给定本征能量 $\epsilon_{j,\vec{g}}$ 时的费米-狄拉克占据由 $f(\epsilon_{j,\vec{g}})$描述，且 $\hat{v}_\alpha$ 是沿 α方向的速度算符。归一化体积记为 Ω，$w_{\vec{g}}$ 是每个k点的权重。我们通过以下关系将电导率转换为介电函数虚部

$$\mathrm{Im}\left[\epsilon(k=0,\omega)\right] = \frac{1}{\epsilon_0\omega}\mathrm{Re}\left[\sigma(k=0,\omega)\right] \quad (7)$$

并使用克拉默斯-克罗尼希变换计算相应的实部，从而得到复介电函数 $\epsilon^{\mathrm{DFT}}(k=0,\ \omega)$。若要求密度泛函理论的结果与光学极限下的 Mermin 介电函数等价

$$\epsilon^{\mathrm{DFT}}(k=0,\omega) \stackrel{!}{=} \lim_{k\to 0}\epsilon^{\mathrm{Mermin}}(k,\omega;\nu(\omega)), \quad (8)$$

实部和虚部必须同时相等。这可以通过调整输入到Mermin介电函数中的动态碰撞频率的实部和虚部来实现，从而形成一个二维优化问题。优化得到的碰撞频率为 ν^{DFT} ，此时解析Mermin介电函数在宏观极限下给出的结果与密度泛函理论相同。由于Mermin介电函数的理论框架中没有束缚态的概念，因此电导率只能来源于自由态或准自由态。为此，方程（6）中的电导率可以拆分为不同的贡献，详情请参阅参考文献 30。

图2展示了在 $\rho = 5$ g/cm^3 和$T = 100$ 电子伏特条件下，铍等离子体的Mermin介电函数和动态结构因子在光学极限下向密度泛函理论结果收敛的情况。由于这些条件下铍中存在束缚态，只有自由电子贡献的电导率可作为图1所示工作流程的输入，且图2中的所有量均为自由电子贡献。动态结构因子的密度泛函理论结果 S^{DFT} 和介电函数的密度泛函理论结果 ϵ^{DFT} 仅在 $k=0$ 处可得，因此在图2中将其作为各种 k 的恒定参考值。两个面板中都明显可见，采用正确的碰撞频率 ν^{DFT}后，Mermin结果收敛至所描述的光学极限
由密度泛函理论计算。实际上，只有在对应长度尺度远大于所研究系统的任何特征长度尺度的波数下，才会达到极限 $k\to 0$ 。在这些条件下，对于铍，

如图2所示，当波数小于或等于 10^{-4} $\mathrm{\AA}^{-1}$ 时，收敛已经达到。上图中的介电函数通过式（3）与下图中的动态结构因子相关联。然而，显而易见，图2上图中的动态介电函数对波数变化更为敏感，而下图所示的动态结构因子则由 $\epsilon^{-1}(k,\ \omega)$ 中的极点主导。

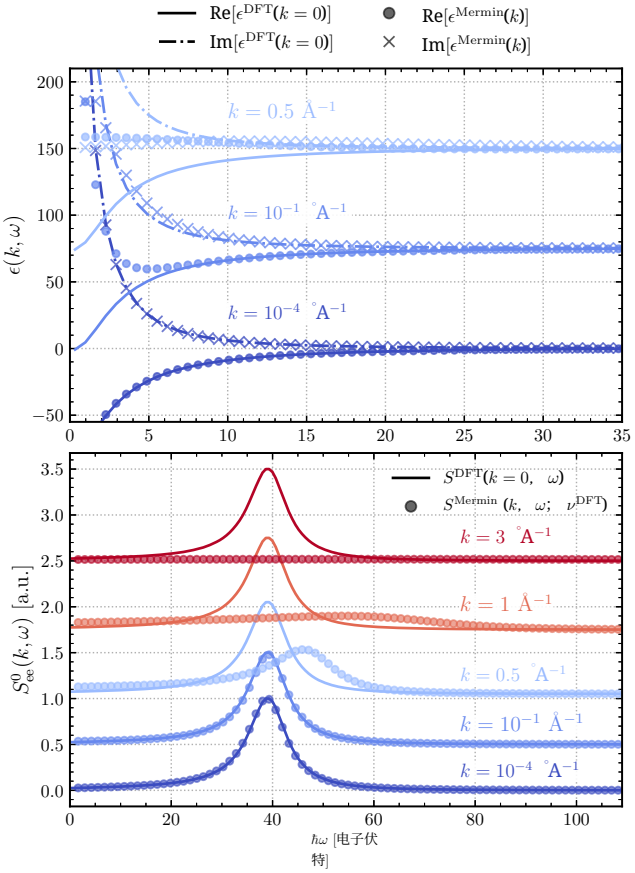

图2. 上图展示了在密度为 $\rho = 5$ g/cm^3 、温度为 $T = 100$ 电子伏特的铍等离子体中，自由电子部分的介电函数 $\epsilon(k,\ \omega)$。密度泛函理论的结果给出于 $k = 0$，其中实线表示实部，点划线表示虚部。方程（5）中的 Mermin介电函数采用 DFT碰撞频率 ν^{DFT}计算。不同颜色表示 k 的不同取值，圆圈和叉号分别表示实部和虚部。下图展示了由密度泛函理论计算的自由电子动态结构因子$S^0_{\mathrm{ee}}(k,\ \omega)$（ $k=0$ 处的实线），以及由Mermin介电函数计算的结果（不同 k 下的圆圈）。动态结构因子按相同幅值缩放；为便于阅读，介电函数和动态结构因子相对于下一个较低波数分别偏移 75 和 0.5 原子单位。

C. 线性响应含时密度泛函理论

在线性响应含时密度泛函理论的框架下，非相互作用科恩-沈体系的密度响应可在有限动量转移下评估为 [44, 45]:

$$\chi_{\mathrm{KS}}(\vec{k},\omega)=\frac{1}{\Omega}\sum_{\vec{g},i,j}\frac{f(\epsilon_{i,\vec{g}})-f(\epsilon_{j,\vec{g}+\vec{k}})}{\omega+\epsilon_{i,\vec{g}}-\epsilon_{j,\vec{g}+\vec{k}}+i\eta}\times \\ \times\left\langle\psi_{i,\vec{g}}|e^{-i\vec{k}\vec{r}}|\psi_{j,\vec{g}+\vec{k}}\right\rangle\left\langle\psi_{i,\vec{g}}|e^{i\vec{k}\vec{r}}|\psi_{j,\vec{g}+\vec{k}}\right\rangle. \quad (9)$$

该方程中的各个量与式（6）中的久保-格林伍德公式类似定义。该响应函数可通过戴森方程 [44], 与完整的密度响应 χ 联系起来，并可对交换-相关核 f_{XC}采用不同层次的近似。其闭合表达式可写为

$$\chi(\vec{k},\omega)=\frac{\chi_{\mathrm{KS}}(\vec{k},\omega)}{1-\left[v(\vec{k})+f_{\mathrm{XC}}(\vec{k},\omega)\right]\chi_{\mathrm{KS}}(\vec{k},\omega)}, \quad (10)$$

其中， $v(\vec{k})$ 是库仑势的傅里叶变换。取 $f_{\mathrm{XC}}=0$ 时即可达到随机相位近似的层次，此时介电函数可计算为

$$\epsilon_{\mathrm{KS}}^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega)=1-\frac{4\pi}{|\vec{k}|^2}\chi_{\mathrm{KS}}(\vec{k},\omega). \quad (11)$$

由于 Mermin介电函数在随机相位近似层次上考虑了电子间相互作用，我们令 $f_{\mathrm{XC}}=0$，并在第 IVA、IVB 和 IV C 节中使用式（11），以便进行比较。在第 V 节中，我们采用绝热局域密度近似 [44, 46]。

D. 计算细节

本研究中的所有密度泛函理论分子动力学模拟均使用 Vienna第一性原理模拟软件包（VASP） [47–49]完成。电子部分与离子部分通过玻恩-奥本海默近似解耦；在离子位置固定的情况下，采用有限温度密度泛函理论方法求解电子问题 [50]。在 VASP 中，电子波函数通过平面波基组展开，能量截断值为 E_{cut}。每个时间步中自洽确定电子基态密度后，计算离子与其他离子及电子云之间库仑相互作用产生的离子受力，并根据牛顿第二定律移动离子。分子动力学模拟中的温度控制采用 Nos´e-Hoover 算法 [51, 52]，其质量参数对应的温度振荡周期为 40 个时间步。所有模拟均使用佩尔德、伯克和恩泽霍夫（PBE）的交换-相关泛函 [53]。对于铍，除所有模拟中均采用能量截断值为 800 eV 的 PAW_PBE Be_sv_GW 31Mar2010 势外，其余情况均如此；第 IVC 节中的压缩情形除外，该情形采用截断值为 10 000 eV 的库仑势。有关氢模拟参数的更多详情，请参阅参考文献 54。

图 1 所示方案所需的动态电导率，是根据独立密度泛函理论计算所得的本征函数和本征能量，通过久保-格林伍德公式（6）计算得到的；这些计算采用了更严格的能量收敛判据。这些模拟基于密度泛函理论分子动力学模拟中至少五个等时间间隔选取的快照进行。第 II B 节所述方案使用 NumPy 软件包 [55] 实现，用于存储动态性质的数组以及简单数值积分的计算。式（A7）和（A8）中的较复杂积分，则采用 SciPy 软件包 [56]中的高斯求积法计算。动态介电函数与电导率的实部和虚部之间的克拉默斯-克罗尼希变换，按照参考文献 57 中的麦克劳林公式进行。

线性响应含时密度泛函理论（LR-TDDFT）计算使用 GPAW 代码 [45, 58–60]完成。计算所用的快照与 Kubo-Greenwood 计算相同，计算 k依赖的介电函数时采用了 2x2x2 或 4x4x4 Monkhorst-Pack 网格 [61] 。对于所研究的条件，Kubo-Greenwood 计算中仅使用 Baldereschi 平均值点 [62]即可得到收敛的光学电导率。对于氢，计算介电函数时使用的平面波能量截断值至少为 50 电子伏特；对于铍，至少使用 250 电子伏特。

III. 动态碰撞频率

图 1 所示的工作流程得到了一个复杂的动态碰撞频率 $\nu^{\mathrm{DFT}}(\omega)$。为了研究该碰撞频率与不同层次解析近似的比较情况，我们计算了氢等容线上 $\rho=2$ g/cm^3 条件下 ν^{DFT} 的实部，温度范围为 5 至 100 电子伏特（数值细节见参考文献 54）。选择这一温度范围是为了展示从温稠密物质区间到理想等离子体区间的转变。在图 3 中，我们将这些碰撞频率与 Lenard-Balescu（LB）碰撞频率、 T-矩阵（TM）方法以及 Gould-DeWitt（GDW）方法进行比较。LB 方法通过纳入动态屏蔽，超越了玻恩碰撞频率；TM 方法则通过对微扰展开中的梯形图求和来考虑强二体碰撞 [63]。GDW 方案结合了 LB 方法的动态屏蔽与 TM 处理中的强碰撞，原则上应能给出最准确的结果。关于这些解析方法的更多细节，请参阅文献 21、63–66。上述方法仅描述电子-离子碰撞，但可以纳入电子-电子（e-e）碰撞

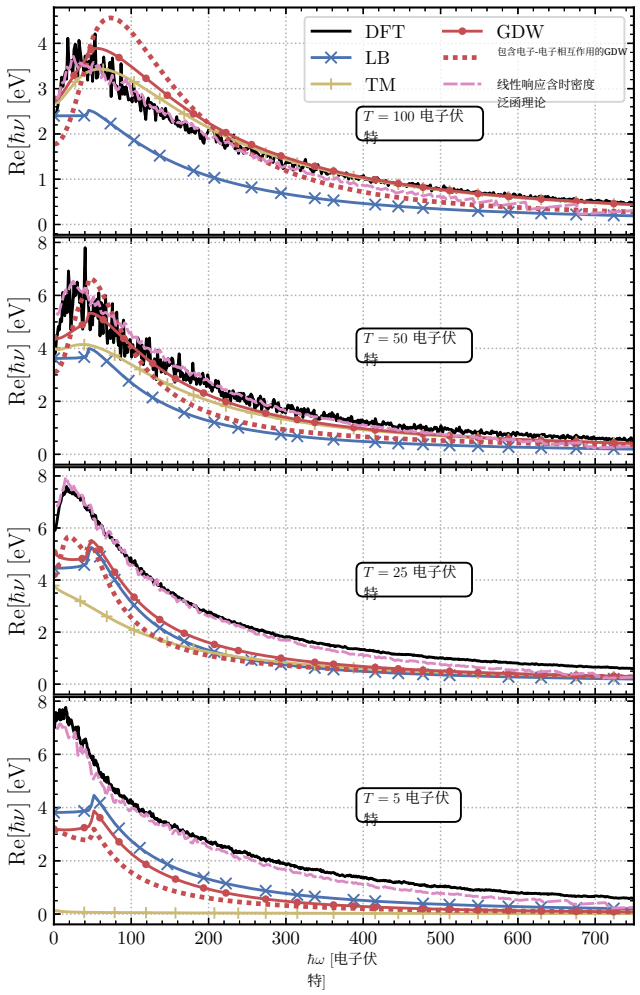

图 3. 温度范围为 5 至 100 电子伏特时，氢等离子体在 $\rho = 2$ g/cm^3 下的动态碰撞频率实部。通过各自的电导率，利用公式 (8) 得到的密度泛函理论和线性响应含时密度泛函理论碰撞频率分别以黑色和粉色表示。LB 碰撞频率以带叉号的蓝线表示， T-矩阵方法以带加号的黄线表示。考虑和不考虑电子-电子碰撞的 GDW 碰撞频率分别以红色点线和带实心圆的红色实线表示。

，方法是用重整化因子 [21]调节碰撞频率。图 3 中的红色点线也标出了纳入 e-e 碰撞后的 GDW 碰撞频率。显然，尽管密度泛函理论的预测在高温下与 TM 和 GDW 方法吻合良好，但在较低温度下则出现显著偏离，因为复杂的多体效应和量子效应在此时贡献很大。在 $T = 100$ 电子伏特时，碰撞频率主要由离子与电子之间的强碰撞决定。然而，通过重整化因子纳入 e-e 碰撞后，与密度泛函理论结果的吻合反而变差；这与近期的观察一致，即应用久保-格林伍德公式

与密度泛函理论相比，其缺少电子-电子碰撞 [54, 67]。此外，我们将图 1 所示的工作流程应用于线性响应含时密度泛函理论计算得到的光学极限电导率，以提取碰撞频率，并在图 3 中以粉色虚线表示。在所有温度下，其行为都与 Kubo-Greenwood 结果非常相似，这表明这种输运性质描述同样未包含电子-电子碰撞。值得注意的是，在高频下，对于所有考察的温度，线性响应含时密度泛函理论碰撞频率都显著低于 Kubo-Greenwood 结果。在我们的测试中，这一现象不能归因于能带数或截断能未收敛。

IV. 动态结构因子

A. 氢

给定动态碰撞频率 $\nu(\omega)$，可利用方程 (3) 和 (5) 计算电子动态结构因子 $S_{ee}(k,\ \omega)$

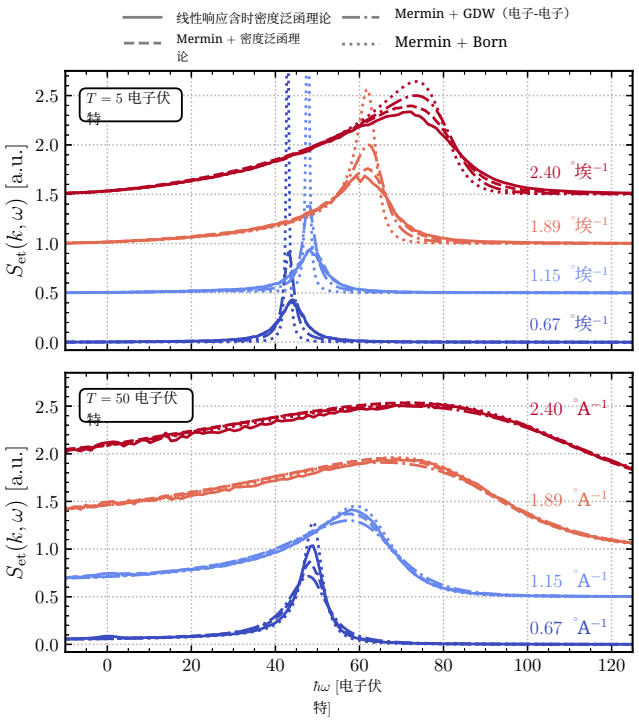

图4. 氢等离子体在 $\rho = 2$ $T = 5$ $T =$ g/cm^3 and eV（上图）和 eV（下图）下，从 A 到 A 的非弹性电子动态结构因子 $S_{et}(k,\ \omega)$。实线表示在相应波数下通过线性响应含时密度泛函理论直接计算得到的结果；其他线条表示使用 Mermin介电函数计算得到的动态结构因子，其中采用了 DFT碰撞频率（虚线）、包含电子-电子碰撞的 GDW碰撞频率（点划线）和 玻恩碰撞频率（点线）。为便于阅读，各动态结构因子相对于下一个较低波数的曲线平移了 0.5。 50 $k = 0.67$ $^{\circ -1}$ $k = 2.40$ $^{\circ -1}$

其中，k 依赖性仅通过 Mermin介电函数体现。线性响应含时密度泛函理论方法可以直接获得有限 k 下的介电函数，方法是计算不同 k 点处 Kohn-Sham态之间的跃迁矩阵元 [45]。图4展示了 $\rho = 2$ g/cm^3 、温度为 $T = 50$ 电子伏特（下图）和 $T = 5$ 电子伏特（上图）时氢等离子体的电子动态结构因子。实线表示通过线性响应含时密度泛函理论直接计算的结果；我们还展示了结合密度泛函理论和 GDW 碰撞频率的 Mermin介电函数所计算的动态结构因子，分别以虚线和点划线表示，这些碰撞频率见图3。此外，我们还展示了采用玻恩碰撞频率（见方程 (B1)）的 Mermin介电函数计算结果，以点线表示；这就是常用的 Born-Mermin方法。在图4所示的最低波数处，$k = 0.67$ $^{\circ}$A^{-1}，我们考察的是碰撞效应十分重要的集体行为，这一点可从无量纲散射参数 α（定义见参考文献 1）看出：在 $T = 5$ 和 $T = 50$ 电子伏特时，该参数分别为 4.17 和 2.84。

正如完全电离氢等离子体的预期，Mermin介电函数所描述的k 依赖性，在两种条件下的所有考察碰撞频率中，均与通过线性响应含时密度泛函理论直接计算的结果吻合良好。然而，在 $T = 5$ 电子伏特时，只有采用 DFT 碰撞频率，才能捕捉到线性响应含时密度泛函理论预测的等离激元阻尼，尤其是在 k较小时。对于低于 2.4 $^{\circ}$A^{-1} 的 k ，玻恩碰撞频率会大幅高估等离激元的幅值；而采用重整化的 GDW 方法，对于低于 1.15 $^{\circ}$A^{-1}的 k ，也会将幅值高估 2 倍。随着波数增加，碰撞的影响减弱，所有碰撞频率对应的动态结构因子开始趋于相同结果。在 $T = 50$ 电子伏特时，碰撞的作用较小；当 k 高于 1.15 $^{\circ}$A^{-1}时，所有碰撞频率给出的预测基本相同，这证明了这一点。值得注意的是，尽管纳入电子-电子碰撞会导致图 3 中动态碰撞频率之间出现显著差异，但由于数值噪声，这些差异在动态结构因子中无法观察到。在线性响应含时密度泛函理论的数据中，$\hbar\omega = 0$ 电子伏特处出现了一个微小的额外贡献，这一现象近期也在路径积分蒙特卡洛模拟中被观察到 [68]。Mermin形式体系未包含这一凸起；它在温度较高、密度较低时更加明显（另见第 IV B 和 IV C 节），因此我们推测它与无能量转移的束缚-束缚跃迁有关。

B. 等容加热的铍

为研究紧束缚态对所提出流程的影响，我们考察了密度为 $\rho = 1.8$ g/cm^3 、温度为 $T = 12$ 电子伏特的铍等离子体；参考文献 30 中的方法预测其电荷态为 $Z = 2.1$。束缚 1s 态在能量上与自由电子明显分离。碰撞频率既可以根据包含束缚 1s 态到导带跃迁的完整动态电导率确定，也可以根据自由-自由电导率确定；后一种方法将式（6）中的跃迁矩阵元限制为起始态和终止态均位于导带的跃迁（有关这种分解的详情，见参考文献 30）。在后一种情况下，Mermin介电函数中仅考虑 DSF 的自由-自由贡献，而束缚-自由贡献则必须根据其在 $k \to 0$ 处的行为进行近似。在图 5 中，我们比较了这两种方法与采用线性响应含时密度泛函理论直接计算电子动态结构因子的结果。如上图所示，在最低波数 $k = 0.49$ $^{\circ}$A^{-1} 处，所有方法的结果均吻合良好，这符合预期，因为碰撞频率的构造要求在小 k 极限下保持等价（见式（8））。将电导率分解为自由-自由贡献和束缚-自由贡献后，我们便能在 DSF 中清楚地辨认出 Chihara 公式（2）的不同项。点线表示束缚-自由贡献，在 $\sim$ 90 电子伏特以上与线性响应含时密度泛函理论数据完全吻合；虚线表示自由-自由贡献（等离激元），在 $\sim$ 90 电子伏特以下与线性响应含时密度泛函理论的结果相符。值得注意的是，式（2）中分别表征这两种特征权重的前因子 Z_{f} 和 Z_{b} ，是由参考文献 30 所述电荷态的定义推导得出的，并且与采用线性响应含时密度泛函理论直接计算、包含所有跃迁的结果几乎完全一致。

在图 5 中间面板的 $k = 1.47$ $^{\circ}$A^{-1} 处，采用完整碰撞频率的方法与其他方法之间的偏差变得明显。在 ~ 90 电子伏特以上，以束缚-自由特征为主的动态结构因子仍可由完整碰撞频率和 $k \to 0$处的束缚-自由特征很好地近似。然而，在 $\sim$ 90 电子伏特以下，采用完整碰撞频率的方法（以点划线表示）与线性响应含时密度泛函理论的结果有显著偏差（注意对数刻度）。仅依据自由-自由跃迁对应的碰撞频率计算得到的自由-自由特征（以虚线表示），在此能量范围内仍与线性响应含时密度泛函理论的计算结果高度吻合。

图 5 底部面板显示了$k = 3.42$ $^{\circ}$A^{-1}处的动态结构因子，突显出采用完整碰撞频率的方法彻底失效。虽然在 ~ 90 电子伏特以上，动态结构因子仍能得到充分描述，但在该能量以下，其形状与线性响应含时密度泛函理论的结果截然不同。另一方面，分别描述自由-自由贡献和束缚-自由贡献，再次能够准确地描述动态结构因子，与线性响应含时密度泛函理论数据相符。然而，在此波数下，用其 $k \to 0$ 极限近似束缚-自由特征的方法开始失效。在图 5 所示的最高能量转移处，该近似得出的数值比线性响应含时密度泛函理论的结果低近一半。此外，在约 100 电子伏特处束缚-自由特征开始出现时，该近似高估了动态结构因子，

与线性响应含时密度泛函理论结果相比，正如图 6 的线性刻度动态结构因子所示。采用完整碰撞频率的方法在超过 $k \to 0$ 极限后迅速失效，这是意料之中的，因为Mermin介电函数的框架虽然编码了 k 依赖性，却不包含束缚态的存在。因此，通过碰撞频率人为引入的任何此类状态，都无法在 k 依赖性中得到正确处理。

此外，图 6 展示了使用具有 Born 碰撞频率的 Mermin 介电函数计算得到的等离子体动态结构因子，该等离子体的电荷态为 $Z = 2$ 且$Z = 4$。对于 $Z = 2$，等离激元峰的位置与密度泛函理论光谱吻合良好；而对于 $Z = 4$ 等离子体，峰位始终处于过高的能量处，这与自由电子密度较高的情况相符。然而，在低 k 时，Born碰撞频率导致的等离激元峰阻尼相较于密度泛函理论数据过低，这与图4中氢的情况类似。在较高波数下，密度泛函理论结果中的等离激元峰位置与使用 $Z = 2$ 处 Born 碰撞频率的 Mermin 函数吻合良好，这清楚地表明束缚 1s 态对这一特征没有贡献。

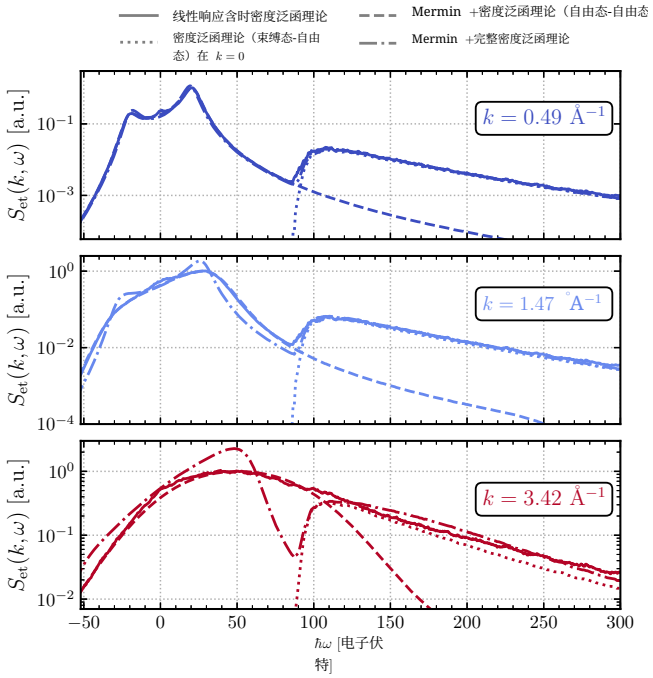

图 5. 对数刻度下，铍等离子体在 $\rho = 1.8$ g/cm^3 和 $T = 12$ 电子伏特时，不同 k 值对应的非弹性电子动态结构因子 $S_{et}(k, \omega)$。实线表示在给定 k 下使用线性响应含时密度泛函理论进行的直接计算结果。点划线和虚线分别表示根据 Mermin介电函数计算得到的动态结构因子，所用碰撞频率分别为包含束缚-自由跃迁的电导率所确定的完整 DFT碰撞频率，以及仅包含自由-自由跃迁的电导率所确定的自由-自由碰撞频率。点线表示在 $k = 0$ ˚A^{-1}处直接根据束缚-自由电导率计算得到的动态结构因子。

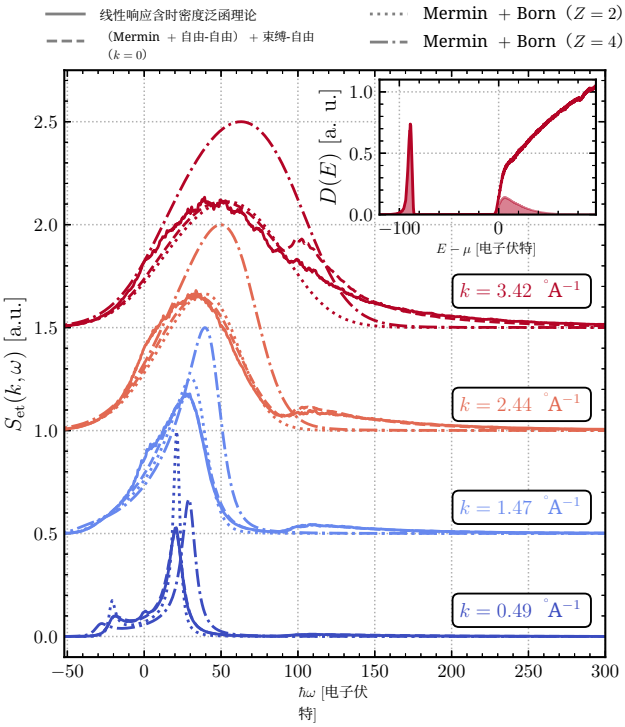

图 6. 铍等离子体在 $\rho = 1.8$ g/cm^3 和 $T = 12$ 电子伏特时，不同 k 值对应的非弹性电子动态结构因子 $S_{et}(k, \omega)$。实线表示在给定 k 下使用线性响应含时密度泛函理论进行的直接计算结果；点线和点划线分别表示使用电荷态为 $Z = 2$ 和 $Z = 4$的等离子体的 Born碰撞频率、基于 Mermin介电函数计算得到的动态结构因子。虚线表示使用自由-自由碰撞频率通过 Mermin介电函数计算得到的动态结构因子与 $k = 0$ ˚A^{-1}处的束缚-自由动态结构因子之和。为便于观察，各动态结构因子相对于下一个较低波数的曲线偏移 0.5。插图中，实线表示态密度，阴影区域表示占据态密度。

图 6 的插图显示了铍等离子体的态密度（DOS），其中窄的、完全占据的 1s 能带与导带之间有明显的分隔。这种明确的区分正是分别处理自由-自由和束缚-自由贡献能够奏效的原因。束缚-自由特征在较高的 k 值下也不会呈现出对 k 的强烈依赖 [23, 69]，而且等离激元在动态结构因子（DSF）中出现在与之能量分离的位置。

C. 压缩铍

随着密度和温度升高，暖稠密物质中的束缚态概念变得难以明确定义。图 7 中的插图显示了温度为 $T = 50$ 电子伏特、密度为 $\rho = 40$ g/cm^3 的铍等离子体态密度，表明与图 6 的插图相比，带隙正在闭合。此外，原先的 1s态显著展宽

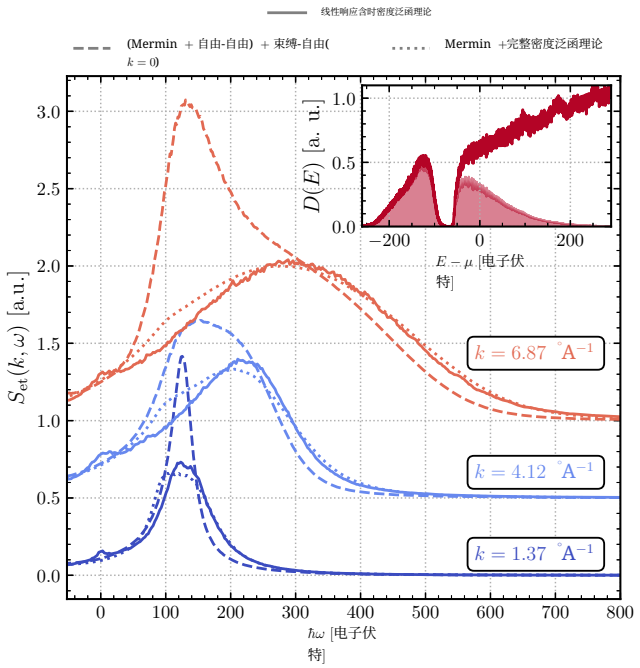

图 7. 在 $\rho = 40$ g/cm^3 、 $T = 50$ 电子伏特条件下，铍等离子体在不同 k 波数下的非弹性电子动态结构因子 $S_{\rm et}(k, \omega)$。实线表示在给定 k下使用线性响应含时密度泛函理论直接计算的结果；虚线表示使用自由-自由碰撞频率通过 Mermin介电函数计算的动态结构因子与 $k = 0$ Å^{-1}处的束缚-自由动态结构因子之和。点线表示使用完整碰撞频率通过 Mermin介电函数计算的动态结构因子。为便于阅读，各动态结构因子相对于下一个较低波数的曲线偏移了 0.5。插图中，实线表示态密度，阴影区域表示占据态密度。

并形成能带，态密度则逐渐趋近于自由电子气的 $\sqrt{E}$ 行为。由于带隙仍清晰可辨，上一节介绍的将动态结构因子中的束缚-自由贡献与自由-自由贡献分开处理的方法，也可用于这些条件。图 7 展示了这种分开处理的结果，以及使用线性响应含时密度泛函理论直接计算的结果和采用完整碰撞频率的 Mermin介电函数所得的动态结构因子。对于图 5 中接近常压密度的情况，分开处理束缚-自由贡献与自由-自由贡献得到了出色的结果；但对于图 7 所示的强压缩铍，这种方法对线性响应含时密度泛函理论结果的近似效果较差。由于碰撞频率中缺少束缚-自由跃迁（在这些条件下，它们与自由-自由跃迁处于相同能量范围），$k = 1.37$ Å^{-1} 处的等离激元峰受到的阻尼严重不足。以 Born碰撞频率替代自由-自由 DFT碰撞频率，会使等离激元峰的幅度增大一倍（图 7 未显示）。对于 $k = 4.12$ 和 $k = 6.87$ Å^{-1}，约在 $\sim$130电子伏特处出现的较宽峰，是由于对束缚-自由特征的近似不足所致

通过其在 $k = 0$ Å^{-1}处的值。由线性响应含时密度泛函理论数据可见，束缚-自由特征与自由-自由特征合并，形成一个均匀特征。在这些条件下，在 Mermin介电函数中使用完整碰撞频率能得到更好的结果，这符合预期，因为随着压缩程度和温度升高，原先的 1s态失去了束缚特性。对于所有考虑的波数，这种方法在$\sim$ 200 电子伏特以上与线性响应含时密度泛函理论数据吻合良好，并能近似描述该能量以下的变化趋势

相当吻合。只有在 $\sim$ 100 电子伏特处，这种方法预测出一个特征，而该特征在所考虑的 k 范围内的线性响应含时密度泛函理论模拟结果中并未出现。

V. 实验应用

我们使用 LR-TDDFT 重新分析 D¨oppner等人 [70] 和 Kritcher 等人 [71] 此前的 X射线汤姆孙散射实验，以评估先进方法对最初推断的等离子体参数的影响。一般而言，必须同时考虑靶的温度和密度。不过，由于 D¨oppner等人在其前向散射实验中利用详细平衡确定了温度为 $T = 18$ 电子伏特，我们采用这一数值，并改变密度，以寻找与实验数据最佳吻合的结果。为说明这种做法的合理性，我们在附录C中展示了近期提出的一种无模型温度诊断方法的结果 [72]。对于

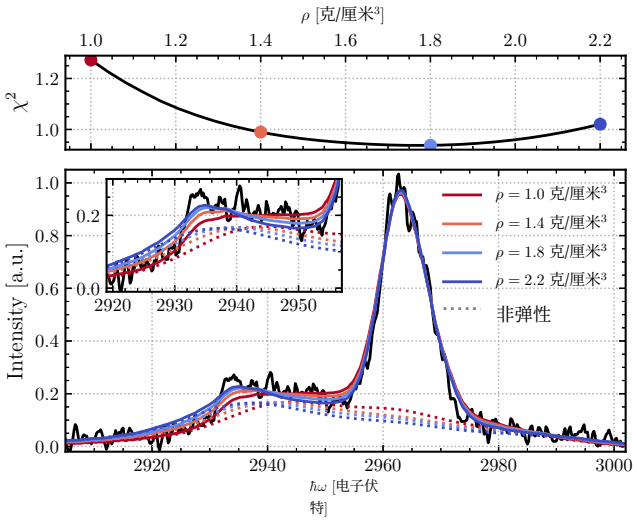

图8. 下图显示了文献70中等容加热铍靶在 $T = 18$ 电子伏特下的散射强度。实线的颜色表示线性响应含时密度泛函理论模拟中采用的不同密度。点线表示非弹性贡献。上图显示了随模拟所用密度变化的 χ^2偏差，其中彩色圆点对应下图所示的光谱，黑色曲线则是通过在这些光谱对应的密度之间插值至40个等间距密度得到的。

另一项实验，我们在分析中将温度纳入考虑。

首先，在图8中，我们展示了密度范围为1.0至2.2 g/cm^3、电子温度为 $T = 18$ 电子伏特时的模拟 XRTS 谱，并与 D¨oppner 等人 [70], 记录的前向 XRTS 光谱进行比较。该光谱是在罗切斯特大学激光能量实验室的 Omega 激光设施上采集的。实验探测的散射矢量约为 $k = 1$ $\mathring{\text{A}}^{-1}$，因此能够观测到等离子体的集体行为。在该实验的原始分析中，D¨oppner 等人 [70]确定的密度为1.17 g/cm^3 。电子峰采用随机相位近似处理，未考虑电子-离子碰撞，并假设电离为 $Z_{\text{f}} = 2.3$。我们利用线性响应含时密度泛函理论计算不同密度下的电子峰，并通过绝热局域密度近似 [44, 46]纳入局域场修正。在 χ^2 最小化过程中，离子特征的幅度作为自由参数处理。尽管所计算的光谱均未能完美再现2930 eV处的等离激元，但密度为 $\rho = 1.8$ g/cm^3 时的光谱，其 χ^2 偏差比其他所有考虑的密度低5%。该密度下的电离态为$Z = 2.14$，由托马斯-赖歇-库恩求和规则确定 [30], ，比 D¨oppner 等人 [70]采用的数值低约7%。此外，此处计算得到的样品密度比原先确定的数值高出50%以上，这表明在前向散射实验中需要采用先进方法，才能获得可靠结果。

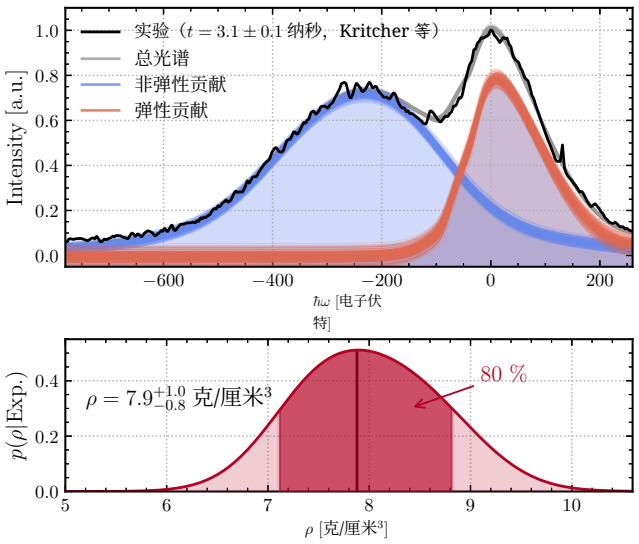

图9. 参考文献71中的内爆铍壳散射强度。上图显示了延迟时间为 $t = 3.1 \pm 0.1$ 纳秒时的实验数据，以及基于线性响应含时密度泛函理论模拟对弹性和非弹性贡献的后验预测。细线表示根据后验概率分布随机抽取参数后计算出的100条光谱。阴影区域表示低于后验预测平均值的区域。下图显示了密度参数 ρ 的缩减后验概率分布，其中曲线下方深色阴影区域表示 80% 的最高后验密度区间。

对于 Kritcher 等人 [71], 开展的实验，无法根据细致平衡关系可靠地推断温度，因此必须将温度纳入分析。此外，实验中未提供仪器函数和源函数，因此必须在分析中对其进行显式建模。为分析这些实验，我们在足够宽的温度和密度网格上模拟光谱，并在网格点之间插值 [73] ，以模拟该范围内任意 $\rho - T$ 组合。鉴于这类分析涉及的参数数量众多，我们采用贝叶斯推断 [74], 通过 PyMC3 软件包 [75] 实现，并使用序贯蒙特卡洛算法 [76, 77] 对参数空间进行采样。在图9中，我们考察了 Kritcher 等人 [71], 针对内爆铍壳在 $k = 8.42$ $\mathring{\text{A}}^{-1}$ 开展的后向X射线汤姆孙散射实验，该实验也在

Omega 激光设施。为分析该实验，我们在从 2 到 32 g/cm^3 、从 0.1 到 25 电子伏特的网格上模拟光谱。参考文献71未提供仪器或光源函数。因此，我们采用参考文献14中给出的锌源参数化形式，并在贝叶斯分析中纳入仪器响应函数的所有参数。此外，我们将描述光源展宽的高斯函数替换为偏斜高斯函数，以反映离子特征中观察到的不对称性。因此，共有十个参数决定光谱的形状，其中包括描述样品密度和温度以及.....大小的物理参数

离子特征的幅度，以及描述实验装置的7个参数。图9上图显示了在延迟 $t = 3.1 \pm 0.1$ ns时从内爆铍壳采集的X射线汤姆孙散射光谱，以及弹性贡献和非弹性贡献对模拟散射光谱的后验预测。通过依据后验概率分布对参数进行抽样，并使用这些参数模拟光谱，得到后验预测。模拟光谱与实验数据符合得非常好。图9下图显示了密度参数 ρ的约化后验概率分布，即对所有其他参数积分后得到的完整概率分布。推断出的密度 $\rho = 7.9^{+1.0}_{-0.8}$ g/cm^3 对应于最大后验概率，不确定度则根据80%的最高后验密度区间确定。在假定电离态为 $Z = 2$的情况下，Kritcher等人 [71] 的原始分析得出的估计值为 $\rho = 8.23 \pm 2.24$ g/cm^3 和 $T = 14 \pm 3$ 电子伏特。在这些条件下，密度是对康普顿特征最敏感的等离子体参数，其结果与我们当前的研究非常吻合。然而，Kritcher等人还对离子特征采用了温度相关模型，而我们将离子特征作为自由参数。因此，推断出的温度主要取决于离子特征与康普

顿特征的相对幅度。由于在这些条件下，康普顿特征的形状对温度并不十分敏感，因此我们无法可靠地确定电子温度。

VI. 结论

本文阐述了使用具有动态复碰撞频率的 Mermin 介电函数计算动态结构因子的理论基础，并展示了如何利用这一框架从密度泛函理论模拟中提取碰撞频率。我们将这些碰撞频率与针对 $\rho = 2$ g/cm^3 氢等离子体的几种解析方法进行了比较，并发现，对于温度接近理想等离子体极限的情形，结果与纳入强碰撞效应的模型吻合良好。此外，我们研究了不同碰撞频率对根据 Mermin 介电函数计算的动态结构因子的影响，并将这些结果与使用线性响应含时密度泛函理论在给定波数处直接计算的动态结构因子进行了比较。对于氢，在高 k 时，各种碰撞频率所得结果均吻合良好；而在较小 k 时，尤其是常用的玻恩近似，会导致等离激元峰阻尼不足。对于铍，我们表明，将动态结构因子中的自由-自由和束缚-自由贡献分开处理，在近常压密度下直至中等波数（$k = 3.42$ $^\circ$A^{-1}）时，与线性响应含时密度泛函理论的结果高度吻合；但对于高度压缩的铍，两者存在显著差异，因为束缚-自由跃迁会与自由-自由跃迁相互作用，从而使等离激元受到阻尼。因此，要在极端条件下获得涵盖宽波数范围的准确动态结构因子，必须采用线性响应含时密度泛函理论或路径积分蒙特卡罗模拟等第一性原理方法。我们将线性响应含时密度泛函理论应用于铍的X射线汤姆孙散射实验，发现对于 D¨oppner等 [70]的小 k，推断出的密度偏差超过 50%；而对于 Kritcher 等 [71]，在大 k 的反向散射情形下，结果与解析方法吻合良好。

致谢

我们谨向 P. Sperling、B. Witte、M. French、G. R¨opke、H. J. Lee 和 A. Cangi 致谢，感谢他们提供的许多有益讨论。M. S. 和 R. R. 感谢德国研究联合会（DFG）通过研究组FOR 2440提供支持。所有模拟和分析均在北德超级计算联盟（HLRN）和罗斯托克大学的 ITMZ 完成。M. B. 衷心感谢欧盟“地平线2020”计划通过玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里行动（xICE资助项目894725）以及NOMIS基金会提供支持。T. D. 的工作由美国能源部资助，并由劳伦斯利弗莫尔国家实验室根据合同编号 DE-AC52-07NA27344 开展。

附录 A：RPA介电函数实部和虚部的推导

碰撞频率通常是一个复数

$$\nu(\omega) = \nu_1(\omega) + i\,\nu_2(\omega), \tag{A1}$$

这意味着，其虚部相当于对式 (5) 中代入 ϵ^{RPA} 的频率进行偏移，而其实部则起到式 (4) 中引入的人工阻尼 η 的作用。然而，在这种情况下，积分后阻尼并未设为零。

现在，我们将式 (4) 拆分为实部和虚部，并考虑由式 (A1) 中的复频率对输入频率 ω 的调制，其中为便于阅读省略了 ν 的自变量：

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega+i\,\nu)\right] &= 1 - \frac{2e^2}{\epsilon_0 k^2}\int \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\times \\ &\times \frac{\left(f_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}} - f_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}}\right)\left(\hbar\tilde{\omega} - \left[E_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}} - E_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}}\right]\right)}{\left(\hbar\tilde{\omega} - \left[E_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}} - E_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}}\right]\right)^2 + \hbar^2\nu_1^2},\end{aligned} \tag{A2}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega+i\,\nu)\right] &= \frac{2e^2}{\epsilon_0 k^2}\int \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3}\times \\ &\times \hbar\nu_1 \frac{f_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}} - f_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}}}{\left(\hbar\tilde{\omega} - \left[E_{\vec{q}+\frac{\vec{k}}{2}} - E_{\vec{q}-\frac{\vec{k}}{2}}\right]\right)^2 + \hbar^2\nu_1^2}.\end{aligned} \tag{A3}$$

这里引入了偏移后的频率 $\tilde{\omega} = \omega - \nu_2$。

这些积分是在整个动量空间上进行的，因此可以通过任意矢量 $\vec{y}$ 进行平移，因为对于函数 $G(\vec{x})$ 的积分，当 $|\vec{x}| \to \infty$ 时该函数趋于 0，满足：

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\, G(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\, G(\vec{x} - \vec{y}), \quad \text{with } |\vec{y}| < \infty. \tag{A4}$$

因此，我们可以将方程（A2）和（A3）中的被积函数分解为两项，分别包含动量向上平移和向下平移后的费米占据数。进一步利用方程（A4）将费米占据数自变量中的动量平移至 $\vec{q}$，从而使 $f_{\vec{q}}$ 成为两项的公因子。能量下标中的动量也必须相应地进行平移。由此得到

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega+i\,\nu)\right] &= 1- \\ &- \frac{2e^2}{\epsilon_0 k^2} 2\pi \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}q}{(2\pi)^3} q^2 f_q \frac{m_e}{\hbar^2 k}\times \\ &\times \int_{-1}^{1} \mathrm{d}z \left(\frac{\kappa - \frac{1}{2}(k + 2qz)}{\left(\kappa - \frac{1}{2}(k+2qz)\right)^2 + \Delta^2} - \right. \\ &\left. - \frac{\kappa - \frac{1}{2}(-k + 2qz)}{\left(\kappa - \frac{1}{2}(-k+2qz)\right)^2 + \Delta^2} \right)\end{aligned} \tag{A5}$$

用于实部

$$\mathrm{Im}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega+i\,\nu)\right]= 4\pi\frac{e^2}{\epsilon_0 k^2}\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}q}{(2\pi)^3}\frac{\nu_1 m_e^2}{\hbar^3 k^2}q^2 f_q\times \times\int_{-1}^{1}\mathrm{d}z\left(\frac{1}{\left(\kappa-\frac{1}{2}\left(k+2qz\right)\right)^2+\Delta^2}- -\frac{1}{\left(\kappa-\frac{1}{2}\left(-k+2qz\right)\right)^2+\Delta^2}\right) \quad \text{(A6)}$$

对应虚部。在此，k 固定在 q_3方向，并且 $z=\cos\theta$，其中 θ 是$\vec{q}$与 k之间的角度。引入了简写符号$\kappa=\frac{\omega m_e}{\hbar k}$和 $\Delta=\frac{m_e\nu_1}{\hbar k}$，其中电子质量为 m_e。由于费米占据数仅取决于动量的大小，因此可以将其从角度积分中提出。方程（A5）和（A6）中的角度积分可以解析地完成，得到

$$\mathrm{Re}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega+i\,\nu)\right]=1+2\pi\frac{m_e e^2}{\epsilon_0\hbar^2 k^3}\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}q}{(2\pi)^3}q f_q\times \times\ln\frac{\left(\Delta^2+\left(\kappa-\frac{k}{2}-q\right)^2\right)\left(\Delta^2+\left(\kappa+\frac{k}{2}+q\right)^2\right)}{\left(\Delta^2+\left(\kappa-\frac{k}{2}+q\right)^2\right)\left(\Delta^2+\left(\kappa+\frac{k}{2}-q\right)^2\right)} \quad \text{(A7)}$$

用于实部，且

$$\mathrm{Im}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(\vec{k},\omega+i\,\nu)\right]=-4\pi\frac{m_e e^2}{\epsilon_0\hbar^2 k^3}\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}q}{(2\pi)^3}q f_q\times \times\left[\arctan\left(\frac{\kappa-\frac{k}{2}-q}{\Delta}\right)+\arctan\left(\frac{\kappa+\frac{k}{2}+q}{\Delta}\right)- -\arctan\left(\frac{\kappa-\frac{k}{2}+q}{\Delta}\right)-\arctan\left(\frac{\kappa+\frac{k}{2}-q}{\Delta}\right)\right] \quad \text{(A8)}$$

用于复频率调制的 RPA介电函数的虚部。剩余关于 q 的积分必须通过数值方法完成。

附录B：玻恩碰撞频率的表达式

最常用的碰撞频率近似之一是玻恩碰撞频率 [21]

$$\nu^{\mathrm{Born}}(\omega)=-i\frac{\epsilon_0 n_{\mathrm{i}}\Omega^2}{6\pi^2 e^2 n_e m_e}\int_0^\infty\mathrm{d}q\,q^6\times \times V_{\mathrm{ei}}^2(q)S_{\mathrm{ii}}(q)\frac{1}{\omega}\left[\epsilon^{\mathrm{RPA}}(q,\omega)-\epsilon^{\mathrm{RPA}}(q,0)\right], \quad \text{(B1)}$$

其中，离子密度为 n_{i}，电子密度为 n_e，归一化体积为 Ω。对于电子-离子势 V_{ei}，存在不同的近似方法，以及

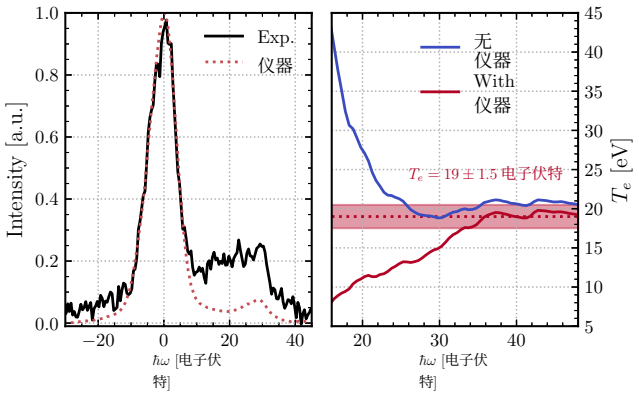

图10。左图显示了参考文献70中的散射强度和仪器函数。右图显示了根据参考文献72推断的电子温度。

静态结构因子 S_{ii}。根据所考虑的密度和温度范围，势可近似为采用德拜-休克尔或托马斯-费米屏蔽参数的屏蔽库仑势。结构因子的求解方法包括假设为均匀电子气（$S_{\mathrm{ii}}(q)=1$）、采用德拜-休克尔理论等解析模型，以及更复杂的方法，如超网链（HNC）方程或分子动力学模拟。这里，我们采用该势

$$V_{\mathrm{ei}}(q)=\frac{V_{\mathrm{ei}}^{\mathrm{Coulomb}}(q)}{\epsilon^{\mathrm{RPA}}(q,0)}=-\frac{e_e e_{\mathrm{i}}}{\epsilon_0\Omega}\frac{1}{q^2\,\epsilon^{\mathrm{RPA}}(q,0)} \quad \text{(B2)}$$

以及根据密度泛函理论分子动力学模拟计算得到的静态结构因子。方程（B1）通过直接计算其实部，并随后进行克拉默斯-克罗尼希 [78, 79]变换以求得虚部。

附录C：通过拉普拉斯变换确定温度

我们采用最近提出的基于双边拉普拉斯变换的温度诊断方法 [72]，根据 D¨oppner等人进行的实验推断温度。图 10 左图显示了散射数据和仪器函数，右图则显示了根据参考文献 72 所述过程推断出的温度。横轴表示进行双边拉普拉斯变换时所取的能量上限。当能量超过 40 电子伏特时，结果趋于收敛，测得的电子温度为 19 ± 1.5 电子伏特。该数值与 D¨oppner等人最初测定的 18 电子伏特电子温度在误差范围内一致。因此，我们在该实验的拟合过程中不纳入电子温度。

[1] S. H. Glenzer 和 R. Redmer, 《现代物理评论》**81**, 1625（2009年）。[2] L. B. Fletcher, H. J. Lee, T. D¨oppner, E. Galtier, B. Na- gler, P. Heimann, C. Fortmann, S. LePape, T. Ma, M. Millot, A. Pak, D. Turnbull, D. A. Chapman, D. O. Gericke, J. Vorberger, T. White, G. Gregori, M. Wei, B. Barbrel, R. W. Falcone, C.-C. Kao, H. Nuhn, J. Welch, U. Zastrau, P. Neumayer, J. B. Hastings 和 S. H. Glen-zer, 《自然光子学》**9**, 274（2015年）。[3] R. R. F¨austlin, T. Bornath, T. D¨oppner, S. D¨usterer, E. F¨orster, C. Fortmann, S. H. Glenzer, S. G¨ode, G. Gre-gori, R. Irsig, T. Laarmann, H. J. Lee, B. Li, K.-H. Meiwes-Broer, J. Mithen, B. Nagler, A. Przystawik, H. Redlin, R. Redmer, H. Reinholz, G. R¨opke, F. Tavella, R. Thiele, J. Tiggesb¨aumker, S. Toleikis, I. Uschmann, S. M. Vinko, T. Whitcher, U. Zastrau, B. Ziaja 和 T. Tschentscher, 《物理评论快报》**104**, 125002（2010年）。[4] T. Guillot, 《地球与行星科学年度评论》**33**, 493（2005年）。[5] R. Helled, J. D. Anderson, M. Podolak 和 G. Schubert, 《天体物理学杂志》**726**, 15（2010年）。[6] J. D. Lindl, P. Amendt, R. L. Berger, S. G. Glendin-ning, S. H. Glenzer, S. W. Haan, R. L. Kauffman, O. L. Landen 和 L. J. Suter, 《等离子体物理学》**11**, 339（2004年）。[7] H. W. Xu, C. S. Alford, J. C. Cooley, L. A. Dixon, R. E. Hackenberg, S. A. Letts, K. A. Moreno, A. Nikroo, J. R. Wall 和 K. P. Youngblood, Fusion Sci. Technol. **51**, 547（2007年）。[8] A. N. Simakov, D. C. Wilson, S. A. Yi, J. L. Kline, D. S. Clark, J. L. Milovich, J. D. Salmonson 和 S. H. Batha, 《等离子体物理学》**21**, 022701（2014年）。[9] J. Amann, W. Berg, V. Blank, F. J. Decker, Y. Ding, P. Emma, Y. Feng, J. Frisch, D. Fritz, J. Hastings, Z. Huang, J. Krzywinski, R. Lindberg, H. Loos, A. Lut-man, H. D. Nuhn, D. Ratner, J. Rzepiela, D. Shu, Y. Shvyd'Ko, S. Spampinati, S. Stoupin, S. Terentyev, E. Trakhtenberg, D. Walz, J. Welch, J. Wu, A. Zholents 和 D. Zhu, 《自然光子学》**6**, 693（2012年）。[10] E. E. McBride, T. G. White, A. Descamps, L. B. Fletcher, K. Appel, F. P. Condamine, C. B. Curry, F. Dallari, S. Funk, E. Galtier, M. Gauthier, S. Goede, J. B. Kim, H. J. Lee, B. K. Ofori-Okai, M. Oliver, A. Rigby, C. Schoenwaelder, P. Sun, T. Tschentscher, B. B. L. Witte, U. Zastrau, G. Gregori, B. Nagler, J. Hastings, S. H. Glenzer 和 G. Monaco, 《科学仪器评论》**89**, 10F104（2018年）。[11] A. Descamps, B. K. Ofori-Okai, K. Appel, V. Ceran-tola, A. Comley, J. H. Eggert, L. B. Fletcher, D. O. Gericke, S. G¨ode, O. Humphries, O. Karnbach, A. Laz-icki, R. Loetzsch, D. McGonegle, C. A. J. Palmer, C. Plueckthun, T. R. Preston, R. Redmer, D. G. Senesky, C. Strohm, I. Uschmann, T. G. White, L. Wollenwe-ber, G. Monaco, J. S. Wark, J. B. Hastings, U. Zastrau, G. Gregori, S. H. Glenzer 和 E. E. McBride, 《科学报告》**10**, 14564（2020年）。[12] L. Wollenweber, T. R. Preston, A. Descamps, V. Ceran-tola, A. Comley, J. H. Eggert, L. B. Fletcher, G. Geloni, D. O. Gericke, S. H. Glenzer, S. G¨ode, J. Hastings, O. S. Humphries, A. Jenei, O. Karnbach, Z. Konop-kova, R. Loetzsch, B. Marx-Glowna, E. E. McBride, D. McGonegle, G. Monaco, B. K. Ofori-Okai, C. A. J. Palmer, C. Pl¨uckthun, R. Redmer, C. Strohm, I. Thorpe, T. Tschentscher, I. Uschmann, J. S. Wark, T. G. White, K. Appel, G. Gregori, 和 U. Zastrau, 《科学仪器评论》92, 013101（2021年）。[13] S. Frydrych, J. Vorberger, N. J. Hartley, A. K. Schuster, K. Ramakrishna, A. M. Saunders, T. van Driel, R. W. Falcone, L. B. Fletcher, E. Galtier, E. J. Gamboa, S. H. Glenzer, E. Granados, M. J. MacDonald, A. J. MacK- innon, E. E. McBride, I. Nam, P. Neumayer, A. Pak, K. Voigt, M. Roth, P. Sun, D. O. Gericke, T. D¨oppner, 和 D. Kraus, 《自然·通讯》11, 2620（2020年）。[14] M. J. MacDonald, A. M. Saunders, B. Bachmann, M. Bethkenhagen, L. Divol, M. D. Doyle, L. B. Fletcher, S. H. Glenzer, D. Kraus, O. L. Landen, H. J. LeFevre, S. R. Klein, P. Neumayer, R. Redmer, M. Sch¨orner, N. Whiting, R. W. Falcone, 和 T. D¨oppner, 《等离子体物理学》28, 032708（2021年）。[15] L. B. Fletcher, J. Vorberger, W. Schumaker, C. Ruyer, S. Goede, E. Galtier, U. Zastrau, E. P. Alves, S. D. Baal- rud, R. A. Baggott, B. Barbrel, Z. Chen, T. D¨oppner, M. Gauthier, E. Granados, J. B. Kim, D. Kraus, H. J. Lee, M. J. MacDonald, R. Mishra, A. Pelka, A. Rava- sio, C. Roedel, A. R. Fry, R. Redmer, F. Fiuza, D. O. Gericke, 和 S. H. Glenzer, 《物理学前沿》10（2022年）。[16] J. Chihara, 《物理学杂志F：金属物理》17, 295（1987年）。[17] J. Chihara, 《凝聚态物理学杂志》12, 231（2000年）。[18] B. Crowley 和 G. Gregori, 《高能量密度物理学》13, 55（2014年）。[19] D. A. Chapman, D. Kraus, A. L. Kritcher, B. Bachmann, G. W. Collins, R. W. Falcone, J. A. Gaffney, D. O. Ger- icke, S. H. Glenzer, T. M. Guymer, J. A. Hawreliak, O. L. Landen, S. Le Pape, T. Ma, P. Neumayer, J. Nilsen, A. Pak, R. Redmer, D. C. Swift, J. Vorberger, 和 T. D¨oppner, 《等离子体物理学》21, 082709（2014年）。[20] L. Pauling 和 J. Sherman, 《结晶学杂志——晶体材料》81, 1（1932年12月1日）。[21] H. Reinholz, R. Redmer, G. R¨opke, 和 A. Wierling, 《物理评论E》62, 5648（2000年）。[22] C. Fortmann, A. Wierling, 和 G. R¨opke, 《物理评论E》81, 026405（2010年）。[23] P. Eisenberger 和 P. M. Platzman, 《物理评论A》2, 415（1970年）。[24] B. B. L. Witte, L. B. Fletcher, E. Galtier, E. Gamboa, H. J. Lee, U. Zastrau, R. Redmer, S. H. Glenzer, 和 P. Sperling, 《物理评论快报》118, 225001（2017年）。[25] K. Ramakrishna, A. Cangi, T. Dornheim, A. Baczewski, 和 J. Vorberger, 《物理评论B》103, 125118（2021年）。[26] K. Ramakrishna 和 J. Vorberger, 《凝聚态物理学杂志》32, 095401（2019年）。[27] A. D. Baczewski, L. Shulenburger, M. P. Desjarlais, S. B. Hansen, 和 R. J. Magyar, 《物理评论快报》116, 115004（2016年）。[28] T. Dornheim, S. Groth, 和 M. Bonitz, 《物理学报告》744, 1（2018年）。[29] M. B¨ohme, Z. A. Moldabekov, J. Vorberger, 和 T. Dornheim, 《物理评论快报》129, 066402（2022年）。[30] M. Bethkenhagen, B. B. L. Witte, M. Sch¨orner, G. R¨opke, T. D¨oppner, D. Kraus, S. H. Glenzer, P. A. Sterne, 和 R. Redmer, 《物理评论：研究》2, 023260（2020年）。[31] H. R. R¨**112**, uter 和 145007 2014 R. Redmer, 《物理评论快报》 ()。

[32] K.-U. Plagemann, H. R. R¨uter, T. Bornath, M. Shi- hab, M. P. Desjarlais, C. Fortmann, S. H. Glenzer, 和 R. Redmer, 《物理评论E》92, 013103（2015年）。[33] B. B. L. Witte, M. Shihab, S. H. Glenzer, 和 R. Red- mer, 《物理评论B》95, 144105（2017年）。[34] R. Kubo, 《物理进展报告》29, 255（1966年）。[35] J. Lindhard, 丹麦皇家科学院数学与物理通讯28（1954年）。[36] N. D. Mermin, 《物理评论B》1, 2362（1970年）。[37] A. Selchow 和 K. Morawetz, 《物理评论 E 》 59, 1015 （ 1999 年）。[38] G. R¨opke, A. Selchow, A. Wierling, 和 H. Reinholz, 《物理快报A》260, 365（1999年）。[39] T. Millat, A. Selchow, A. Wierling, H. Reinholz, R. Red- mer, 和 G. R¨opke, 《物理学杂志A：数学与一般》36, 6259（2003年）。[40] R. Thiele, T. Bornath, C. Fortmann, A. H¨oll, R. Redmer, H. Reinholz, G. R¨opke, A. Wierling, S. H. Glenzer, 和 G. Gregori, 《物理评论E》78, 026411（2008年）。[41] K.-U. Plagemann, P. Sperling, R. Thiele, M. P. Desjar- lais, C. Fortmann, T. D¨oppner, H. J. Lee, S. H. Glenzer, 和 R. Redmer, 《新物理学杂志》14, 055020（2012年）。[42] M. French 和 R. Redmer, 《等离子体物理学》24, 092306（2017年）。[43] M. Gajdo˘s, K. Hummer, G. Kresse, J. Furthm¨uller, 和 F. Bechstedt, 《物理评论B》73, 045112（2006年）。[44] E. Engel 和 R. M. Dreizler, *Density Functional Theory*（施普林格，柏林，海德堡，2011年）。[45] J. Yan, J. J. Mortensen, K. W. Jacobsen, 和 K. S. Thygesen, 《物理评论B》83, 245122（2011年）。[46] A. Zangwill 和 P. Soven, 《物理评论A》21, 1561（1980年）。[47] G. Kresse 和 J. Hafner, 《物理评论B》47, 558（1993年）。[48] G. Kresse 和 J. Hafner, 《物理评论B》49, 14251（1994年）。[49] G. Kresse 和 J. Furthm¨uller, 《物理评论B》54, 11169（1996年）。[50] N. D. Mermin, 《物理评论》137, A1441（1965年）。[51] S. Nos´e, 《化学物理学杂志》81, 511（1984年）。[52] W. G. Hoover, 《物理评论A》31, 1695（1985年）。[53] J. P. Perdew, K. Burke, 和 M. Ernzerhof, 《物理评论快报》77, 3865（1996年）。[54] G. R¨opke, M. Sch¨orner, R. Redmer, 和 M. Bethken- hagen, 《物理评论E》104, 045204（2021年）。[55] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus, S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. Fern´andez del R´ıo, M. Wiebe, P. Peterson, P. G´erard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser, H. Ab- basi, C. Gohlke, 和 T. E. Oliphant, 《自然》585, 357–362（2020年）。[56] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haber- land, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Pe- terson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, ˙I. Po- lat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pe- dregosa, P. van Mulbregt, 和 SciPy 1.0 贡献者, 《自然·方法》17, 261（2020年）。[57] K. Ohta 和 H. Ishida, 《应用光谱学》42, 952（1988年）。[58] J. J. Mortensen、L. B. Hansen 和 K. W. Jacobsen, 《物理评论B》71，035109（2005年）。[59] J. Enkovaara、C. Rostgaard、J. J. Mortensen、J. Chen、M. Du-lak、L. Ferrighi、J. Gavnholt、C. Glinsvad、V. Haikola、H. A. Hansen、H. H. Kristoffersen、M. Kuisma、A. H. Larsen、L. Lehtovaara、M. Ljung- berg、O. Lopez-Acevedo、P. G. Moses、J. Ojanen、T. Olsen、V. Petzold、N. A. Romero、J. Stausholm- Møller、M. Strange、G. A. Tritsaris、M. Vanin、M. Walter、B. Hammer、H. H¨akkinen、G. K. H. Madsen、R. M. Niem- inen、J. K. Nørskov、M. Puska、T. T. Rantala、J. Schiøtz、K. S. Thygesen 和 K. W. Jacobsen, 《凝聚态物理学杂志》22，253202（2010年）。[60] A. H. Larsen、J. J. Mortensen、J. Blomqvist、I. E. Castelli、R. Christensen、M. Du-lak、J. Friis、M. N. Groves、B. Hammer、C. Hargus、E. D. Hermes、P. C. Jennings、P. B. Jensen、J. Kermode、J. R. Kitchin、E. L. Kolsbjerg、J. Kubal、K. Kaasbjerg、S. Lysgaard、J. B. Maronsson、T. Maxson、T. Olsen、L. Pastewka、A. Pe- terson、C. Rostgaard、J. Schiøtz、O. Sch¨utt、M. Strange、K. S. Thygesen、T. Vegge、L. Vilhelmsen、M. Walter、Z. Zeng 和 K. W. Jacobsen, 《凝聚态物理学杂志》29，273002（2017年）。[61] H. J. Monkhorst 和 J. D. Pack, 《物理评论B》13，5188（1976年）。[62] A. Baldereschi, 《物理评论B》7，5212（1973年）。[63] Reinholz，H.，《法国物理年刊》30，1（2005年）。[64] R. T hiele、R. Redmer、H. Reinholz 和 G. R¨opke, 《物理学杂志A：数学与一般》39，4365（2006年）。[65] H. A. Gould 和 H. E. DeWitt, 《物理评论》155，68（1967年）。[66] G. R¨opke 和 R. Redmer, 《物理评论A》39，907（1989年）。[67] M. French、G. R¨opke、M. Sch¨orner、M. Bethkenhagen、M. P. Desjarlais 和 R. Redmer, 《物理评论E》105，065204 2022( )。[68] T. Dornheim、Z. A. Moldabekov、J. Vorberger 和 B. Militzer, 《科学报告》12，708（2022年）。[69] B. A. Mattern 和 G. T. Seidler, 《等离子体物理学》20，022706 2013( )。[70] T. D¨oppner、O. Landen、H. Lee、P. Neumayer、S. Regan 和 S. Glenzer, 《高能量密度物理学》5，182（2009年）。[71] A. L. Kritcher、T. D¨oppner、C. Fortmann、T. Ma、O. L. Landen、R. Wallace 和 S. H. Glenzer, 《物理评论快报》107，015002（2011年）。[72] T. Dornheim、M. B¨ohme、D. Kraus、T. D¨oppner、T. R. Preston、Z. A. Moldabekov 和 J. Vorberger, 《自然通讯》13，7911（2022年）。[73] H.-C. Weissker、R. Hambach、V. Olevano 和 L. Rein- ing, 《物理评论B》79，094102（2009年）。[74] M. F. Kasim、T. P. Galligan、J. Topp-Mugglestone、G. Gregori 和 S. M. Vinko, 《等离子体物理学》26，112706（2019年）。[75] J. Salvatier、T. V. Wiecki 和 C. Fonnesbeck, 《PeerJ计算机科学》2，e55（2016年）。[76] P. Del Moral、A. Doucet 和 A. Jasra, 《英国皇家统计学会杂志：B辑（统计方法）》68，411（2006年）。[77] S. A. Sisson、Y. Fan 和 M. M. Tanaka, 《美国国家科学院院刊》104，1760（2007年）。[78] R. de L. Kronig, 《美国光学学会杂志》12，547（1926年）。[79] H. A. Kramers, 《国际物理学家大会论文集》2，545（1927年）。