Письма в ЖЭТФ, том 123, вып. 10, с. 717 – 725 © 2026 г. 25 мая

Коэффициент отражения плотной плазмы криптона при $P = 63$ ГПа

Ю. Б. Запорожец[+1)], В. Б. Минцев[+], В. К. Грязнов[+], В. Б. Фокин[*], Д. В. Минаков[*], П. Р. Левашов[+*]

[+] Федеральный исследовательский центр химической физики и медицинской химии РАН, 142432 Черноголовка, Россия

[*] Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 февраля 2026 г.
После переработки 13 апреля 2026 г.
Принята к публикации 13 апреля 2026 г.

Представлены результаты измерения коэффициента отражения лазерного излучения с длинами волн 694 и 1064 нм от ударно-сжатого жидкого криптона при давлении 63 ГПа. Проведены расчеты отражательной способности плотной плазмы криптона по различным теоретическим моделям и выполнено сопоставление расчетных и экспериментальных данных в области реализованных параметров.

DOI: 10.7868/S3034576626050178

Исследование отражательных свойств неидеальной плазмы [1] – среды с сильным межчастичным взаимодействием, находящейся в экстремальных условиях при высоких динамических давлениях и температурах – имеет большое значение для определения истинной температуры вещества по его излучательной способности и позволяет получить важную информацию о диэлектрической проницаемости, а следовательно, об оптических и транспортных характеристиках такой среды [2]. Измерения такого рода позволяют прогнозировать реакцию среды на мощные импульсные воздействия, значительно расширяя возможности традиционных динамических методов исследования ударно-сжатых сред [1], дающих информацию лишь о ее равновесных свойствах. Простейшие по своей структуре криогенные жидкости благородных газов являются идеальными для изучения их свойств методом ударного сжатия [3]. Высокие начальные плотности позволяют в физических экспериментах сравнительно легко достичь малоизученной области гигапаскальных давлений и реализовать плотную ($\rho \sim 5{-}20$ г/см^3) неидеальную плазму с температурой несколько электронвольт [3].

В настоящей работе генерация неидеальной плазмы осуществлялась путем сжатия и необратимого разогрева мощной ионизирующей ударной волны жидкого криптона с начальными параметрами $P_0 = 0.1$ МПа, $T_0 = 120$ К, $\rho_0 = 2.41$ г/см^3. Эксперименты выполнялись с использованием взрывного генератора прямоугольных ударных волн [1] (позиция *9*, рис. 1), формируемых путем разгона металлического ударника до скоростей ~ 5 км/с. Взрывной генератор оснащен специальной кюветой, заполняемой исследуемым веществом. Сжижение криптона выполнялось непосредственно перед опытом. Для этого кювета имеет двойные коаксиальные стенки, зазор между которыми заполнялся жидким азотом. Учитывая то обстоятельство, что криптон в жидком виде существует в узком температурном диапазоне (~ 4 К) и при выходе за эти границы можно получить двухфазную среду, кювета термостатировалась, и выполнялся контроль однородности объекта исследования. Целям термостатирования служит наличие в каналах внутренней коаксиальной стенки кюветы керамических нагревателей цилиндрической формы и термопарных датчиков, являющихся элементами субсистемы, необходимой для поддержания оптимальной температуры криогенной жидкости перед опытом. В свою очередь, для контроля гомогенности криогенной жидкости, что важно для достижения необходимой точности измерения коэффициента отражения ударно-сжатой плазмы, перед экспериментом использовался He–Ne-лазер с асферической линзой для ввода излучения в световод (позиции *3*, *4*, рис. 1) и чувствительный фотодетектор (позиция *8*, рис. 1).

Исследование отражательной способности сильно коррелированной плазмы выполнялось с применением излучения ближнего инфракрасного диапазона с длиной волны $\lambda_{\text{las}} = 1064$ нм и в красной области оптического спектра при $\lambda_{\text{las}} = 694$ нм. Для этих целей использовался неодимовый лазер и $Al_2O_3 : Cr^{3+}$-лазер, работающие в режиме модуляции добротности резонатора (Q-режим) (позиции *13*–*21*, рис. 1). Сформированный импульс зондирующего излучения, имеющий длительность $\tau_{\text{las}} \sim 10^{-8}$ с с по-

1)e-mail: yubz@icp.ac.ru

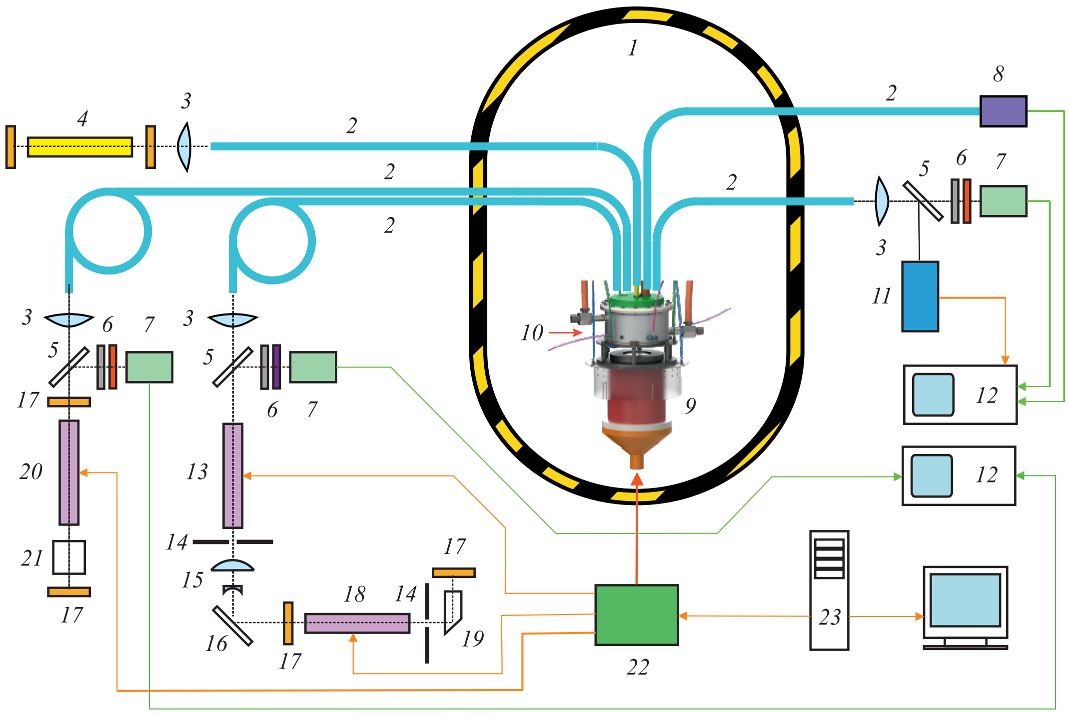

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема лазерной системы диагностики плотной плазмы. *1* – взрывная камера; *2* – оптоволокно; *3* – асферическая линза сопряжения; *4* – He–Ne-лазер; *5* – диэлектрический делитель; *6* – интерференционные фильтры; *7* – высокоскоростной фотодетектор; *8* – фотодетектор контроля однородности исследуемого вещества; *9* – взрывной генератор; *10* – кювета с исследуемым веществом; *11* – спектрограф; *12* – цифровой осциллограф; *13* – оптический усилительный каскад на $Y_3Al_5O_{12}:Nd^{3+}$; *14* – диафрагма; *15* – телескоп сопряжения; *16* – диэлектрическое зеркало; *17* – диэлектрические зеркала резонатора; *18* – $Y_3Al_5O_{12}:Nd^{3+}$-задающий каскад; *19* – четвертьволновый затвор Поккельса; *20* – $Al_2O_3:Cr^{3+}$-лазер; *21* – затвор Поккельса; *22* – высокоскоростной блок управления; *23* – управляющий компьютер

мощью линзы (позиция *3*, рис. 1) вводился в передающий световод (позиция *2*, рис. 1).

Измерение коэффициента отражения проводилось в соответствии со схемой, показанной на рис. 2. Передающий и приемный многомодовые световоды фирмы “FiberCore” типа MMSC (600/660) 0.22 вводились непосредственно в изучаемую криогенную жидкость и были оснащены микролинзами для корректировки индикатрис излучения и приема,соответственно. Кроме этого, кювета с исследуемым веществом (позиция *10*, рис. 1) была оснащена коаксиальным ионизационным датчиком, используемым для синхронизации прихода ударной волны в жидком криптоне в оптимальную, с точки зрения точности измерения, плоскость пространства и генерации зондирующего лазерного импульса. Расстояние между плоскостями торцов ионизационного датчика и световодов составляло ~ 2 мм. Ионизационный датчик отстоял от дна кюветы на ~ 0.5 мм. Регистрация коэффициента отражения сильнонеидеальной плазмы жидкого криптона выполнялась в прямой ударной волне.

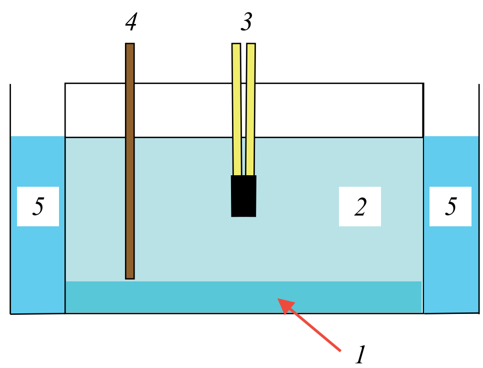

Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема измерения коэффициента отражения ударно-сжатого жидкого криптона. *1* – плазма в сильно коррелированном состоянии; *2* – жидкий криптон; *3* – передающий и приемный световоды; *4* – коаксиальный датчик положения фронта ударной волны; *5* – жидкий азот

Калибровка измерительного тракта системы лазерной диагностики плотной плазмы осуществлялась с использованием алюминиевой фольги, размещенной в кювете с изучаемой криогенной жидкостью в плоскости, соответствующей положению ионизационного датчика синхронизации. Предварительно измерялся коэффициент отражения фольги на воздухе на длине волны зондирования с использованием интегрирующей сферы. Для калибровки подбиралась фольга с индикатрисой отражения близкой к индикатрисе отражения плазмы, зафиксированной в опытах ранее. В процессе калибровки измерительного тракта системы диагностики учитывалось изменение оптических параметров фольги при охлаждении до криогенных температур. Общая динамическая ошибка измерения коэффициента отражения не превышает 20 %.

На рисунке 3 показана осциллограмма эксперимента. Отсчет относительного времени начинался в момент генерации служебного управляющего импульса, формируемого с некоторой задержкой после входа ударной волны в жидкий криптон. Смещение на осциллограмме (рис. 2) отраженного от плазмы лазерного импульса (позиция *2*, рис. 3) относительно зондирующего импульса (позиция *1*, рис. 3) соответствует времени распространения зондирующего излучения по передающему и приемному световодам. Использовались специальные аттенюаторы для работы всех фотодетекторов при близких значениях интенсивности светового потока.

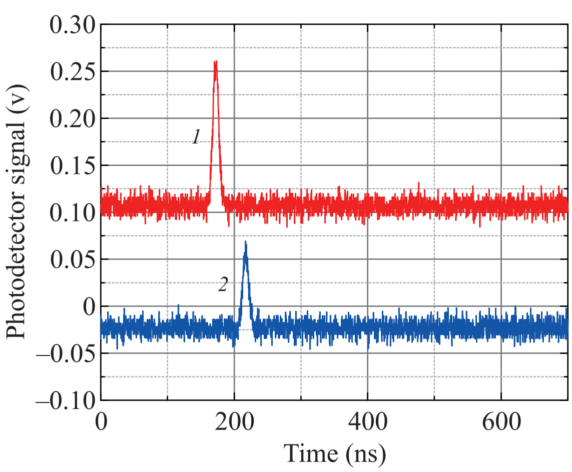

Рис. 3. (Цветной онлайн) Типичная осциллограмма эксперимента по регистрации коэффициента отражения плотной плазмы жидкого криптона. *1* – зондирующий лазерный импульс; *2* – отраженный от плазмы импульс

В настоящей работе для построения уравнения состояния и расчета термодинамических параметров ударно-сжатой плазмы криптона применена модифицированная модель семейства SAHA, основанная на квазихимическом представлении (химическая модель плазмы) [4, 5]. В рамках этого приближения считается, что плазма состоит из атомов Kr, однозарядных и многозарядных ионов с кратностью заряда вплоть до восьмой. В модели учитывалось кулоновское взаимодействие заряженных частиц в рамках псевдопотенциального подхода [5, 6] и короткодействующее отталкивание частиц, обладающих внутренней структурой (атомов и ионов) в рамках модифицированной модели мягких сфер [7, 8]. Учитывалось также Ван-дер-Ваальсово притяжение атомов [5, 9], наиболее существенное в области очень низких, близких к нормальным, температур. Вырождение свободных электронов, весьма существенное в интересующей нас области параметров, рассматривалось в приближении идеального ферми-газа [10], справедливом при любых степенях вырождения. Для ударно-сжатой плазмы сжиженных инертных газов выбор радиусов атомов осуществлялся из условия наилучшего в рамках модели мягких сфер [7, 8] описания расчетных данных с холодной кривой ($T = 0$ K) для плотностей экспериментального диапазона. Соотношения радиусов атомов и ионов различной кратности определялись из расчета их электронной структуры в приближении ограниченного атома методом Хартри–Фока в рамках применяемой ранее процедуры [8, 11]. Сравнение результатов эксперимента по ударному сжатию жидкого криптона [12–14] с расчетами в рамках модели SAHA [12, 15] и прямого численного моделирования методом квантовой молекулярной динамики [14] показало хорошее их согласие в условиях настоящего эксперимента. Термодинамические параметры генерируемой в настоящей работе криптоновой плазмы приведены в табл. 1.

Таблица 1. Термодинамические параметры исследуемой плазмы. P – давление, T – температура, ρ – массовая плотность, n_e – электронная плотность, N_a – плотность атомов

Material	P, GPa	T, K	ρ, g/cc	$n_e/1e^{22}$, cc^{-1}	$N_a/1e^{22}$, cc^{-1}
Kr	62.7	18000	6.27	1.1	3.4

Основываясь на компонентном составе (плотностях числа частиц каждого сорта), полученном при решении уравнения ударной адиабаты (уравнения Рэнкина–Гюгонио) для заданного давления ударносжатого вещества за фронтом ударной волны, был выполнен расчет коэффициента электронной проводимости, для чего использовалось интерполяционное выражение в рамках τ-приближения (модель Лоренца–Блоха) [8, 16], которое не имеет логарифмической расходимости в широком диапазоне параметров, включая область с сильным кулоновским взаимодействием, и где электроны могут подчиняться как статистике Больцмана, так и статистике Ферми

$$\sigma_0 = \frac{n_e e^2}{m}\tau_0;$$

$$\tau_0 = \frac{1}{v_0} = \frac{4(kT)^{-3/2}}{3\sqrt{\pi}}\frac{2}{n_e\lambda_e^3}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\tau(\varepsilon)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)d\varepsilon,$$

где λ_e – длина волны Де Бройля для электрона, f_0 – электронная функция распределения, τ – время релаксации:

$$\tau(\varepsilon)^{-1} = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}}\left[\Sigma_j\gamma_j n_j Q_{ej}(\varepsilon) + N_a Q_{ea}(\varepsilon)\right].$$

Q_{ea}, Q_{ei} – транспортные сечения рассеяния на атомах и ионах, γ_j – поправка на электрон-электронное рассеяние.

На рисунке 4 приведено сравнение экспериментальных данных по удельной электропроводности ударно-сжатого жидкого криптона [13] с расчетами по данной модели. Видно, что настоящие расчеты превышают в 2–3 раза данные экспериментов [13] при давлениях более 30 ГПа (кривая *2* на рис. 4). В условиях эксперимента электропроводность определяется, в основном, рассеянием электронов на атомах. Поэтому вероятной причиной такого расхождения является использование в расчетах сечений рассеяния для разреженных газов. Учет плотностных эффектов за счет сильного взаимодействия в системе приводит к значительному увеличению сечений [17–19], что качественно и количественно объясняет такое расхождение. Кривая *3* на рис. 4 получена при использовании сечений рассеяния из работы [19] при $T = 15$ кК и плотности $\rho \sim 6$ г/см^3. На рисунке 4 также представлен расчет коэффициента электропроводности в рамках теории линейного отклика из работы [19] (кривая *4* на рис. 4), который дает значения в 1.5–2 раза меньше экспериментальных величин.

Помимо химической модели плазмы, в настоящей работе были проведены расчеты параметров динамического сжатия плазмы криптона посредством метода КМД. Метод не использует экспериментальные данные для своей работы, за исключением фундаментальных физических констант, заряда ядра и массы атома криптона. Проведенные в настоящей работе подробные расчеты ударной адиабаты жидкого криптона с начальным состоянием при температуре 120 К и плотности 2.42 г/см^3 показывают отличное согласие с экспериментальными данными по ударному сжатию,включая эксперименты [12–14], до давлений около 1 ТПа (рис. 5).

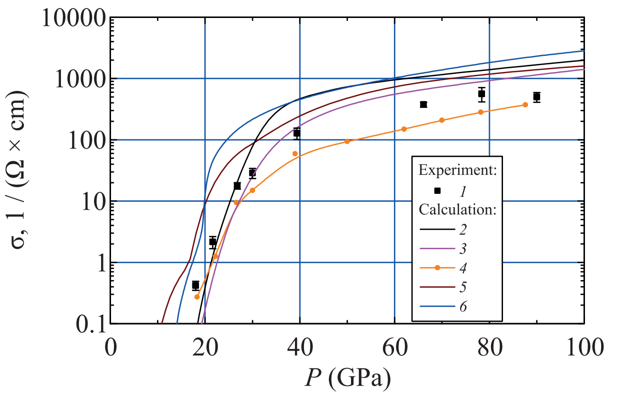

Рис. 4. (Цветной онлайн) Сравнение экспериментальных данных [13] по удельной электропроводности ударно сжатого жидкого криптона с расчетами данной работы и работ [19–21]. *1* – экспериментальные данные [13]; *2* – расчет по модели SAHA в рамках τ-приближения (модель Лоренца–Блоха) [8, 16]; *3* – расчет по модели SAHA в рамках τ-приближения с сечениями рассеяния электронов на атомах криптона из работы [19]; *4* – расчет электропроводности из работы [19]; *5* – расчет методом КМД, данная работа; *6* – расчет методом КМД из работ [20, 21]

Расчеты транспортных свойств требуют знания многочастичных уровней энергии и матричных элементов оператора градиента. Так, коэффициент электропроводности может быть рассчитан по формуле Кубо–Гринвуда [22, 23]:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2\hbar^3}{m_e\Omega}\times$$

$$\left\langle \sum_{i\neq j,\mathbf{k}} W(\mathbf{k}) D_{ij}^{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{i,\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{j,\mathbf{k}})}{\hbar\omega}\delta_{\Delta E}(\varepsilon_{j,\mathbf{k}} - \varepsilon_{i,\mathbf{k}} - \hbar\omega)\right\rangle,$$

где

$$D_{ij}^{\mathbf{k}} = \frac{1}{3}\sum_\alpha |\langle\Psi_{i,\mathbf{k}}|\nabla_\alpha|\Psi_{j,\mathbf{k}}\rangle|^2$$

представляет собой усредненный по направлениям квадрат дипольного матричного элемента оператора импульса. Здесь $\varepsilon_{i,\mathbf{k}}$ соответствует энергии i-й зоны в точке $\mathbf{k}$ зоны Бриллюэна, $W(k)$ – вес $\mathbf{k}$-точки, $f(\varepsilon)$ – распределение Ферми–Дирака; $\delta_{\Delta E}$ — δ-функция Дирака, которая в расчетах заменяется функцией Гаусса с характерной шириной ΔE. Уровни энергии и матричные элементы рассчитываются с помощью пакета VASP [24].

Для выполнения расчетов используется приближение локальной плотности (LDA) для обменно-корреляционного функционала, так как оно обеспечивает наилучшее согласие рассчитанного параметра решетки для кристаллического криптона при

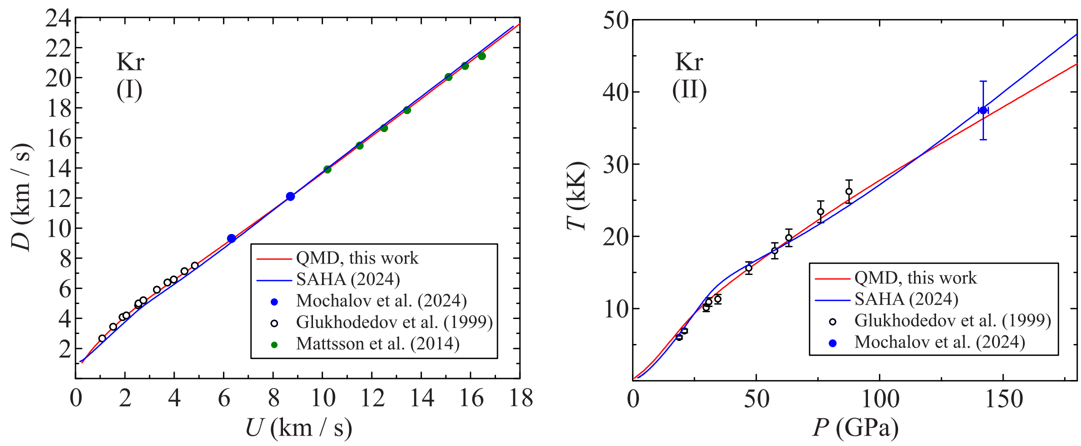

Рис. 5. (Цветной онлайн) Ударные адиабаты жидкого криптона с начальным состоянием при температуре 120 К и плотности 2.42 г/см^3. (I) – в координатах скорость ударной волны–массовая скорость, (II) – в координатах температура–давление; красная линия – настоящая работа, расчет методом КМД; синяя линия – SAHA – расчет из работы [12], закрашенные синие кружки – эксперимент [12]; открытые кружки – эксперимент [13]; закрашенные зеленые кружки – эксперимент [14]

4.25 К [25] с экспериментально измеренной величиной, равной 5.646 А. Следует отметить, что в работах [14, 20, 21] вопрос воспроизведения плотности кристаллического криптона вообще не обсуждался, при этом в работе [21] обменно-корреляционные функционалы тестировались на ударно-волновых данных со значительно большей погрешностью. КМД-моделирование выполнялось для суперячеек, содержащих от 8 до 108 атомов криптона. При разложении волновых функций электронов по базису плоских волн в обратном пространстве было выбрано ограничение для предельной энергии $E_{\text{cut}} = 600$ эВ. Для аппроксимации зоны Бриллюэна при расчете электронных свойств криптона в ходе КМД-моделирования использовалась одна **k**-точка – особая точка Балдереши $\{1/4,\ 1/4,\ 1/4\}$. Все расчеты были выполнены в каноническом NVT-ансамбле с использованием термостата Нозе–Гувера для контролирования температуры ионов T_i. Температура электронов T_e задавалась с помощью функции Ферми–Дирака, $T = T_e = T_i$ для всех КМД-расчетов. Величина временного шага КМД-моделирования выбиралась в зависимости от температуры моделирования и варьировалась в расчетах в диапазоне 0.5–2 фс. Каждое КМД-моделирование воспроизводило динамику движения ионов в течение не менее 3 пс после выхода системы на равновесие, величина статистической погрешности вычисляемых средних значений термодинамических свойств контролировалась и была значительно ниже 1 %.

Формула Кубо–Гринвуда может применяться для расчетов $\sigma_1(\omega)$ при любых ненулевых ω. Вычисление переносных свойств является более трудоемким и ресурсозатратным, чем термодинамических свойств, поэтому оно выполняется не для каждой ионной конфигурации, а лишь для некоторых выбранных (обычно около 10 равномерно распределенных на равновесном участке конфигураций, статистическая ошибка такого расчета при этом составляет менее 1 %). В расчетах для криптона было выбрано уширение δ-функции 0.05 эВ. Величина статической электропроводности σ_{DC} оценивалась путем экстраполяции зависимости $\sigma_1(\omega)$ к нулевой частоте. Результаты расчета приведены на рис. 4 – кривая *5*. Видно, что значения электропроводности, полученные по формуле Кубо–Гринвуда, существенно завышены по сравнению с экспериментальными данными [13]. Такое же завышение наблюдается и в аналогичных расчетах из работы [20], выполненных с обменно-корреляционным функционалом PBE [26] (кривая *6* на рис. 4). Более высокие значения электропроводности в расчетах КМД могут быть связаны с существенным занижением ширины запрещенной зоны криптона (аналогичное занижение для ряда обменно-корреляционных функционалов наблюдается и для неона [27]). Этот эффект оказывает влияние на плотность состояний и при высоких температурах (выше 10 кК, согласно расчетам из статьи [20]), когда запрещенная зона исчезает.

Полученные в настоящей работе экспериментальные данные по отражательной способности ударно-сжатого жидкого криптона приведены на рис. 6, где представлены зависимости коэффициента отражения от длины волны при давлении 63 ГПа.

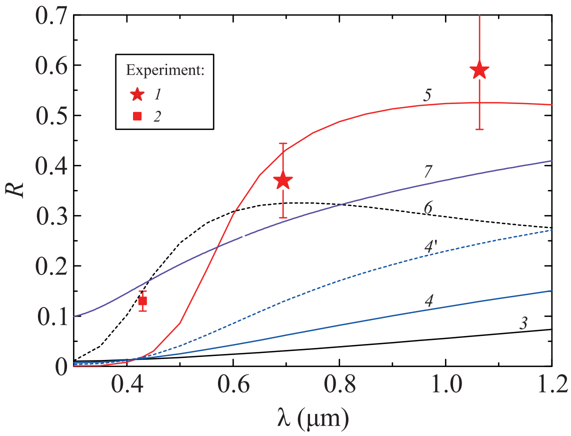

Рис. 6. (Цветной онлайн) Коэффициент отражения ударно-сжатого жидкого криптона при $P = 63$ ГПа. Эксперимент: *1* – настоящая работа; *2* – [13] при $P = 76$ ГПа. Расчет: *3* – по формуле Друде–Лоренца с экспериментальными значениями проводимости по [13]; *4* – по формуле Друде–Лоренца с расчетной проводимостью по [8, 16] и *4′* – с сечением рассеяния для плотных газов [19]; *5* – по формуле Друде–Смита с $C = -0.91$ [28]; *6* – по формуле Друде–Смита с $C = -0.91$ [28] при $P = 76$ ГПа; *7* – метод КМД

Точка *2* – значение коэффициента отражения, полученное в прямых экспериментах [13] при давлении $P = 76$ ГПа. Отметим, что плотная плазма, реализующаяся в экспериментах, сильно неидеальная ($\Gamma = e^2kT/r_D \sim 15$) и вырожденная ($n_e\lambda\!\!\!^{-3} \sim 2$).

Расчеты отражательной способности криптона проводились по формулам Френеля с использованием связи динамической $\sigma(\omega)$ и статической σ_0 электропроводности по различным физическим моделям [2]

$$R(\omega) = \left|\frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)}-1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)}+1}\right|^2 = \frac{[n(\omega)-1]^2+k(\omega)^2}{[n(\omega)+1]^2+k(\omega)^2}.$$

Связь комплексной диэлектрической проницаемости и динамической проводимостью определяется соотношением [2]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_a(\omega) + 4\pi i\sigma(\omega)/\omega.$$

Действительная $\varepsilon_r(\omega)$ и мнимая $\varepsilon_i(\omega)$ части диэлектрической проницаемости связаны с показателем преломления $n(\omega)$ и показателем поглощения $k(\omega)$ соотношениями [2]:

$$\varepsilon_r(\omega) = n(\omega)^2 - k(\omega)^2; \quad \varepsilon_i(\omega) = 2n(\omega)k(\omega).$$

Тогда

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}(\varepsilon_r(\omega) + \sqrt{(\varepsilon_r^2(\omega)+\varepsilon_i^2(\omega))})};$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}(-\varepsilon_r(\omega) + \sqrt{(\varepsilon_r^2(\omega)+\varepsilon_i^2(\omega))})}.$$

Наряду с электронной компонентой диэлектрической проницаемости, определяемой рассеянием электронов на ионах и атомах частично ионизованной плазмы, необходимо учесть вклад нейтральной компоненты за счет поляризации атомов [29]. Связь поляризуемости атома α и диэлектрической проницаемости ε_a в плотной плазме определяется формулой Клаузиуса–Моссотти [30]:

$$\varepsilon_a - 1 = 3\frac{\frac{4\pi}{3}\alpha N_a}{1-\frac{4\pi}{3}\alpha N_a}.$$

Здесь N_a – концентрация атомов, поляризуемость атома криптона $\alpha_{\rm Kr} = 16.74a_0^3$ (a_0 – радиус Бора) [31].

Формула для статической проводимости σ_0 газа свободных электронов в τ-приближении имеет вид [30]:

$$\sigma_0 = \frac{n_e e^2}{m}\tau_0 = \frac{1}{4\pi}\frac{\omega_p^2}{v_0}.$$

Здесь n_e – концентрация электронов, e и m – заряд и масса электрона, τ_0 – время релаксации момента импульса электронов при $\omega \to 0$, $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m}}$ – плазменная частота, $v_0 = 1/\tau_0$ – частота соударений электронов.

Для связи динамической и статической проводимости в простейшем случае мы использовали формулу Друде–Лоренца [30],

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1-i\frac{\omega}{v_0}} = \frac{\omega_p^2}{4\pi(v_0-i\omega)},$$

которая хорошо работает в пределе низких частот и условии $\omega_p \gg v_0$ и удовлетворительно описывает экспериментальные данные в разреженной плазме [32]. В области высоких частот теория Друде–Лоренца неплохо согласуется с экспериментами по определению порога прозрачности щелочных металлов [30].

Расчеты отражательной способности криптона по формуле Друде–Лоренца для связи динамической и статической электропроводности [30] с экспериментальными значениями статической проводимости из [13] (кривая *3* на рис. 6) указывают на значительное расхождение с экспериментальными данными. Обнаруженное завышение полученных в настоящей работе экспериментальных значений коэффициента отражения по сравнению с расчетом с использованием формулы Друде–Лоренца (~ 5 раз) оказалось совершенно неожиданным. Кстати, в многочисленных экспериментах по ударному сжатию изначально газообразного ксенона [29, 33, 34] наблюдалась обратная тенденция – экспериментальные значения коэффициента отражения лежали ниже расчетных данных. Этот факт удалось объяснить наличием широкого переходного слоя (~ 200 нм) во фронте ударной волны [29], затрудняющего использование формул Френеля и требующего численного решения уравнений Максвелла для распространения электромагнитной волны. Причем толщина переходного слоя уменьшалась с увеличением плотности плазмы [33], так что для случая ударного сжатия сжиженных газов экстраполяция в область больших плотностей показала незначительную его величину ~ 2 нм, что и оправдывает использование формул Френеля в наших условиях.

Использование формулы Друде–Лоренца для расчета коэффициента отражения по значениям электропроводности, полученным в рамках термодинамики SAHA, демонстрирует значительное занижение такого расчета по сравнению с экспериментальными данными настоящей работы. Учет плотностных эффектов за счет сильного взаимодействия в системе [17–19] все равно дает значительно заниженные значения коэффициента отражения в случае использования сечений рассеяния как для разреженных, так и плотных газов (кривые *4* и *4′* на рис. 6).

Расхождение расчетных и экспериментальных данных по электропроводности приводит к выводу о невозможности применения простых соотношений Друде–Лоренца в условиях настоящего эксперимента. Простое классическое обобщение формулы Друде–Лоренца получено в работе [28] на основе подхода теории линейного отклика и статистики Пуассона. Далее мы будем называть это соотношение формулой Друде–Смита. При таком подходе появляется параметр C, который является мерой постоянства скорости. Этот коэффициент представляет ту часть первоначальной скорости электрона, которая сохраняется после столкновения. Электронный ток в этом случае меняет направление, прежде чем упасть до нуля. При отрицательных значениях C удается воспроизвести экспериментальные данные по динамической проводимости "плохих" металлов [28], аргона и водорода в области перехода металл–диэлектрик [35].

Запишем формулы Друде–Смита для динамической проводимости в виде [28]:

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_p^2}{1 - i\frac{\omega}{v}} \left(1 + \frac{C}{1 - i\frac{\omega}{v}}\right).$$

При $C = 0$ полученные соотношения совпадают с хорошо известной формулой Друде–Лоренца [30]. Для веществ с металлической проводимостью значения C оказываются близкими к $C = -1$. Для упругих столкновений отрицательные значения C подразумевают преобладание обратного рассеяния, так что чистый ток, переносимый электронной системой, фактически меняет направление, прежде чем релаксировать до своего равновесного значения, равного нулю.

Отметим, что в статическом пределе эффективная частота ν не совпадает с частотой столкновений электронов, определяемой по значениям статической проводимости. Дело в том, что время релаксации момента импульса в теории Друде–Лоренца отличается от среднего времени жизни между соударениями, используемого в модели Друде–Смита, так что $\nu = \nu_0(1 + C)$.

Использование обобщенной формулы Друде–Смита дает для криптона удовлетворительное согласие с экспериментом при $C = -0.91$ (кривая *5* на рис. 6). Точка, полученная прямыми измерениями в работе [13] при более высоком давлении $P = 76$ ГПа, также хорошо описывается формулой Друде–Смита с $C = -0.91$ (кривая *6* на рис. 6). Отметим, как видно на рис. 6, приближение серого тела не работает в условиях нашего эксперимента. Результаты расчетов коэффициента отражения из комплексной электропроводности, рассчитанной на основе моделирования методом КМД с помощью формулы Кубо–Гринвуда и преобразования Крамерса–Кронига,приведены на рис. 6 – кривая *7*. Занижение расчетного коэффициента отражения в методе КМД по сравнению с экспериментальными данными настоящей работы может быть связано с занижением ширины запрещенной зоны для кристаллического криптона в КМД-моделировании, однако последовательный анализ этого эффекта существенно более сложен, чем в случае коэффициента электропроводности.

Таким образом, проведенные измерения коэффициента отражения ударно-сжатого жидкого криптона в условиях сильного межчастичного взаимодействия при давлениях 63 ГПа продемонстрировали значительное расхождение экспериментальных данных с традиционным расчетом, использующим формулы Друде–Лоренца для связи динамической и статической проводимости. Использование обобщенных соотношений Друде–Смита позволяет устранить такое расхождение при наличии всего лишь одного полуэмпирического подгоночного параметра.

Расчет коэффициента отражения методом КМД также не дает идеального совпадения с экспериментальными данными, качественно верно описывая его зависимость от длины волны.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках Госзадания Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук – регистрационный номер 124020600049-8 и в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление # 3 "Газодинамика и физика взрыва".

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

---

1. В. Е. Фортов, *Мощные ударные волны на земле и в космосе* (Физматлит, М., 2019) [V. E. Fortov, *Moshchnye udarnye volny na zemle i v kosmose* (Fizmatlit, Moscow, 2019)] [in Russian].
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред* (Физматлит, М., 2003) [in Russian] [L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media* (Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 1984)].
3. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, "Свойства неидеальной плазмы ударно-сжатых благородных газов и азота до 1 ТРа", УФН **195**(9), 939 (2025) [M. A. Mochalov and R. I. Ilkaev, "Properties of nonideal plasma of noble gases and nitrogen shock compressed to 1 TPa", Phys.-Uspekhi **68**, 883 (2025)].
4. W. Ebeling, "Coulomb Interaction and Ionization Equilibrium in Partially Ionized Plasmas", Physica **43**(2), 293 (1969).
5. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, "Thermodynamic properties of hydrogen plasma to megabars", Contributions to Plasma Physics **56**(3/4), 352 (2016).
6. И. Л. Иосилевский, "Об уравнении состояния неидеальной плазмы", ТВТ **18**(3), 447 (1980) [I. L. Iosilevskiy, "Equations of state of nonideal plasma", High Temperature **18**(3), 355 (1980)].
7. D. A.Young, "Soft-sphere model for liquid metals", California University, # UCRL, 52352 (1977).
8. В. Е. Фортов, В. Я. Терновой, М. В. Жерноклетов, М. А. Мочалов, А. Л. Михайлов, А. С. Филимонов, А. А. Пяллинг, В. Б. Минцев, В. К. Грязнов, И. Л. Иоселевский, "Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений", ЖЭТФ **124**, 288 (2003) [V. E. Fortov, V. Ya. Ternovoi, M. V. Zhernokletov, M. A. Mochalov, A. L. Mikhailov, A. S. Filimonov, A. A. Pyalling, V. B. Mintsev, V. K. Gryaznov, and I. L. Iosilevskii, "Pressure-produced ionization of nonideal plasma in a megabar range of dynamic pressures", JETP **97**(2), 259 (2003)].
9. B. Holst, R. Redmer, V. K. Gryaznov, V. E. Fortov, and I. L. Iosilevskiy, "Hydrogen and deuterium in shock wave experiments, ab initio simulations and chemical picture modeling", The European Physical Journal D **66**, 1 (2012).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, М., 1964) [in Russian] [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, Oxford, UK, 1966)].
11. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова (Наука, М., 2000) [V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskii, and V. E. Fortov, *Udarnye volny i ekstremal'nye sostoyaniya veshchestva*, ed. by V. E. Fortov, L. V. Altshuler, R. F. Trunin, and A. I. Funtikov (Nauka, Moscow, 2000)] [in Russian].
12. М. А. Мочалов, Р. И. Илькаев, С. В. Ерунов, А. О. Бликов, В. А. Огородников, С. Е. Елфимов, В. А. Аринин, В. А. Комраков, М. И. Лихутов, И. П. Максимкин, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, П. Р. Левашов, Д. Г. Минаков, М. А. Парамонов, "Свойства криптона при ударно-волновом и квазиизэнтропическом сжатиях в области давлений до 2700 ГПа", Письма ЖЭТФ **119**(11), 854 (2024) [M. A. Mochalov, R. I. Il'kaev, S. V. Erunov, A. O. Blikov, V. A. Ogorodnikov, S. E. Elfimov, V. A. Arinin, V. A. Komrakov, M. I. Likhutov, I. P. Maksimkin, V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, P. R. Levashov, D. G. Minakov, and M. A. Paramonov, "Properties of krypton under shock-wave and quasi-isentropic compressions at pressures up to 2700 GPa", JETP Lett. **119**(11), 885 (2024)].
13. В. Д. Глуходедов, С. И. Киршанов, Т. С. Лебедева, М. А. Мочалов, "Свойства ударно-сжатого жидкого криптона при давлениях до 90 ГПа", ЖЭТФ **116**(2(8)), 551 (1999) [V. D. Glukhodedov, S. I. Kirshanov, T. S. Lebedeva, and M. A. Mochalov, "Properties of shock-compressed liquid krypton at pressures of up to 90 GPa", JETP **89**, 292 (1999)].
14. T. R. Mattsson, S. Root, A. E. Mattsson, L. Shulenburger, R. J. Magyar, and D. G. Flicker, "Validating density-functional theory simulations at high energy-density conditions with liquid krypton shock experiments to 850 GPa on Sandia's Z machine", Phys. Rev. B **90**(18), 184105 (2014).
15. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, "Thermodynamics of hydrogen and helium plasmas in megabar and multi-megabar pressure range under strong shock and isentropic compression", Plasma Phys. Control. Fusion **58**, 014012 (2015).
16. В. К. Грязнов, Ю. В. Иванов, А. Н. Старостин, В. Е. Фортов, "Теплофизические свойства ударно-сжатого аргона и ксенона", ТВТ **14**(3), 643 (1976) [V. K. Gryaznov, Yu. V. Ivanov, A. N. Starostin, and

V. E. Fortov, "Thermophysical properties of shock-compressed argon and xenon", High Temperature **14**(3), 569 (1976)].

17. S. Rosmej, H. Reinholz, and G. Röpke, "Contribution of electron-atom collisions to the plasma conductivity of noble gases", Phys. Rev. E **95**, 063208 (2017).
18. S. Rosmej, Quantenstatistische Analyse der Korrelationen dichter Plasmasysteme. Dissertation, Rostock, 22.02.2018; www.ub.uni-rostock.de.
19. Y. J. Gu, W. L. Quan, G. Yang, M. J. Tan, L. Liu, and Q. F. Chen, "Transport properties of warm dense neon and krypton at high pressures", Phys. Rev. E **102**, 043214 (2020).
20. Z.-Q. Wang, Z.-G. Li, Y.-F. Wang, L. Liu,Y.-J. Gu, Q.-F. Chen, and X.-R. Chen, "Equation of state,ionic structure, and phase diagram of warm dense krypton", Phys. Rev. E **100**, 033214 (2019).
21. Z.-Q. Wang, Y.-J. Gu, Q.-F. Chen, Z.-G. Li, L. Liu, G.-J. Li, Y.-S. Lan, and X.-R. Chen, "Equation of state measurements of dense krypton up to the insulator-metal transition regime: Evaluating the exchange-correlation functionals", Phys. Rev. B **103**, 014109 (2021).
22. G. S. Demyanov, D. V. Knyazev, and P. R. Levashov, "Continuous Kubo-Greenwood formula: Theory and numerical implementation", Phys. Rev. E **105**, 035307 (2022).
23. D. V. Minakov, V. B. Fokin, G. S. Demyanov, and P. R. Levashov, "High pressure-high temperature equation of state and metallization of neon by shock waves from quantum molecular dynamics", Phys. Rev. B **112**, 245107 (2025).
24. G. Kresse and J. Hafner, "*Ab initio* molecular dynamics for liquid metals", Phys. Rev. B **47**(1), 558 (1993).
25. D. L. Losee and R. O. Simmons, "Thermal-expansion measurements and thermodynamics of solid krypton", Phys. Rev. **172**(3), 944 (1968).
26. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
27. J. Tang, B. Ao, L. Huang, X. Ye, Y. Gu, and Q. Chen, "Metallization and positive pressure dependency of bandgap in solid neon", J. Chem. Phys. **150**, 111103 (2019).
28. N. V. Smith, "Classical generalization of the Drude formula for the optical conductivity", Phys. Rev. B **64**, 155106 (2001).
29. H. Reinholz, Y. Zaporozhets, V. Mintsev, V. Fortov, I. Morozov, and G. Ropke, "Frequency-dependent reflectivity of shock-compressed xenon plasmas", Phys. Rev. E **68**, 036403 (2003).
30. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела* (Мир, М., 1979) [N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Rinehart and Winston, Holt, 1976)].
31. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Справочник по атомной и молекулярной физике* (Атомиздат, М., 1980) [A. A. Radtsig and B. M. Smirnov, *Spravochnik po atomnoy i molekulyarnoy fizike* (Atomizdat, Moscow, 1980)].
32. И. Шкаровский, Т. Джонстон, М. Бочинский, *Кинетика частиц плазмы* (Атомиздат, М., 1969) [J. P. Shkarofsky, T. W. Johnston, and M. P. Bachynski, *The Particle Kinetics of Plasmas* (Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, USA, 1966)].
33. Y. Zaporozhets, V. Mintsev, V. Fortov, H. Reinholz, G. Ropke, S. Rosmej, and Y. Omarbakiyeva, "Polarized angular-dependent reflectivity and density-dependent profiles of shock-compressed xenon plasmas", Phys. Rev. E **99**(4), 043202 (2019).
34. V. B. Mintsev and Yu. B. Zaporoghets, "Reflectivity of dense plasma", Contrib. Plasma Phys. **29**(4/5), 493 (1989).
35. R. S. McWilliams, D. A. Dalton, Z. Konopkova, M. F. Mahmood, and A. F. Goncharov, "Opacity and conductivity measurements in noble gases at conditions of planetary and stellar interiors", Proc. Nat. Acad. Sci. USA **112**, 7925 (2015).