

专题: 原子分子和材料物性数据

温稠密和热稠密极端条件下的物质黏性 研究进展及数据评估*

程宇清¹⁾ 刘海风²⁾ 李琼^{2)†} 王帅创²⁾ 王丽芳²⁾ 方俊²⁾
高兴誉²⁾ 孙博²⁾ 宋海峰²⁾ 王建国²⁾

1) (北京科技大学数理学院, 北京 100083)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理国家重点实验室, 北京 100094)

(2025年7月1日收到; 2025年9月6日收到修改稿)

温稠密和热稠密极端条件下的物质黏性在诸多场景有着重要应用, 例如: 惯性约束聚变靶丸设计、天体结构演化研究、极端条件下界面不稳定性 and 混合发展规律研究等. 由于黏性实验技术能够达到的温压范围非常有限, 因而, 极端条件下物质黏性数据的获取方式主要是通过理论计算. 本文阐述了计算温稠密和热稠密极端条件下物质黏性的多种理论方法, 包括以量子分子动力学模拟 (QMD) 为代表的数值模拟方法和以随机游走屏蔽势黏性模型 (RWSP-VM) 为代表的解析公式. 通过评估从低原子序数到高原子序数的多种单质 (H, C, Al, Fe, Ge, W, U) 的黏性数据, 讨论了各种方法的适用条件, 评估了各种解析公式的可靠性和适用范围. 可以看到, 数值模拟方法获得的数据量以及覆盖范围仍然有限, 不同的数值模拟方法之间还存在一定分歧, 解析公式仍然是快速获取大量黏性数据的可靠方式. 基于物理建模和模拟数据的拟合公式, 例如单质等离子体 (OCP) 模型、集成的 Yukawa 黏性模型 (IYVM) 等, 兼顾了模拟数据的精度和解析计算的效率. 基于物理建模的 RWSP-VM, 不依赖于模拟数据, 却在较宽温压范围内具有与模拟数据相当的精度, 是获取温稠密和热稠密物质黏性数据的高效方法. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciedb.j00213.00180> 访问获取.

关键词: 黏性, 分子动力学, 第一性原理计算, 动力学理论**PACS:** 51.20.+d, 52.65.Yy, 31.15.A-, 05.20.Dd**DOI:** 10.7498/aps.74.20250861**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250861

1 引言

温稠密物质 (warm dense matter, WDM) 通常指温度和密度超过常态几个数量级情况下的物质^[1], 粗略估计对应温度为几到十几电子伏特 (electron volt, eV, $1 \text{ eV} \approx 1.16 \times 10^4 \text{ K}$), 压力为百万大气压或更高^[2]; 而热稠密物质 (hot dense matter, HDM) 则对应更高的温度, 通常为几百 eV 到几十万 eV^[3]. WDM 和 HDM 都处于高温高

压的极端条件, 该条件下物质的输运性质, 尤其是黏性 (又称黏滞系数) 数据对许多应用领域起着重要作用. 例如, 惯性约束聚变中的靶丸设计^[4]、天体结构演化的研究^[5]、极端条件界面不稳定性 and 混合的发展^[6].

极端条件物质的黏性数据获取在实验上较为困难, 数据量很稀少. 因此, 研究者们通过理论计算方法得到极端条件的黏性. 通常包括两类方法, 一类是分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟, 另一类是基于物理图像建立模型.

* 计算物理全国重点实验室基金资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li_qiong@iapcm.ac.cn

通过 MD 模拟,可以得到给定条件下的系统内各粒子的运动状态,进而计算所需的物理量.对于黏性的计算,可以使用 Green-Kubo 公式^[7].在 MD 模拟中,量子分子动力学 (quantum molecular dynamics, QMD) 模拟是一个较为准确的方法.因为 QMD 的核心是基于第一性原理,这使得在计算动力学的过程中可以对粒子间的相互作用势不做任何人为的假设.考虑的主要是库仑势结合电子云的屏蔽效应.其中,电子结构可通过密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算,而离子的运动则可来自于离子和电子共同贡献的势计算. Alfé 和 Gillan^[8] 开创性地使用 QMD 计算了液态 Al 和 Fe-S 的黏性.王帅创等使用 QMD 分别计算了 Al (密度为 4.27 g/cm³, 温度为 0.5—1 eV)^[9] 和 Pu (密度为 15.7—20.1 g/cm³, 温度为 0.1—1 eV)^[10] 的黏性,均对应液态区域.王聪等使用 QMD 计算了 Be (密度为 5 g/cm³, 温度为 1—10 eV)^[11] 和 Fe (密度为 20 g/cm³, 温度为 1—15 eV)^[12] 的黏性,均对应于液态到 WDM 区域.李大芳等^[13] 使用 QMD 计算了 H—He 混合物 (密度为 0.3—2.3 g/cm³, 温度为 0.1—8 eV) 的黏性,对应液态到 WDM 区域.李治国等^[14] 使用 QMD 也计算了 H—He 混合物 (密度为 1 g/cm³, 温度为 0.4—1 eV) 的黏性,对应液态区域.王朝棋等^[15] 使用 QMD 计算了 Ne (密度为 0.9—10 g/cm³, 温度为 0.1—10 eV) 和 Kr (密度为 1.5—12 g/cm³, 温度为 0.1—10 eV) 的黏性,对应液态到 WDM 区域.程宇清等^[16] 通过结合 QMD 和深度学习方法构建了 Al 的深度势能 (deep potential, DP), 并利用 DP 通过 MD 模拟计算了 Al (密度为 2.35—4.27 g/cm³, 温度为 0.1—5 eV) 的黏性,对应液态到 WDM 区域.由于粒子间相互作用可以直接使用 DP 而不必在 MD 模拟时的每一步利用 DFT 等方法重新计算,使得大大降低了模拟时的计算耗时.

此外,侯永等^[17] 开发了平均原子超网链近似 (average atom model combined with the hypernetted chain approximation, AAHNC) 方法,通过结合平均原子 (average atom, AA) 模型^[18,19] 与超网链 (hypernetted chain, HNC)^[20–22],可以降低计算消耗,从而增加模拟时允许的原子数目. AA HNC 通常对于液态到 WDM 区域的计算效果较好.

对于更高温度或密度的物质,即 HDM,仅基于第一性原理的 QMD 不再是一个合适的方法.

原因主要有两个^[23].第一,当温度增加时,保证 QMD 模拟准确性的 Kohn-Sham 轨道^[24] 数目将迅速增加,从而大大增加了计算的消耗,使得温度高于 10 eV 以上的计算变得极为困难;第二, QMD 模拟采用的电子-离子相互作用通常用一个赝势描述,该赝势假设核电子和价电子之间有明确的分别.然而在高压情况下,所有的电子包括核电子迟早都会被电离,使得以上假设不再适用.因此,对于 HDM 需要采取更合适的方法,无轨道分子动力学 (orbital-free molecular dynamics, OFMD) 就是一种对 HDM 更适应的方法^[23,25].它主要针对需要计算轨道的电子动能自由能项做了 Thomas-Fermi 展开^[26],这样不需要计算轨道,同时大大降低了计算消耗.

尽管 MD 方法可以有效地计算极端条件的物质黏性,然而若需要大量的黏性数据,其计算消耗仍然较大.因此,针对极端条件开发合适的方法及模型计算黏性是非常有必要的.

Daligault 等^[27] 发展了一种无需分子动力学模拟即可计算极端条件黏性的方法.他们利用平均原子 (AA) 模型^[28,29] 计算关联函数,进而得到有效势;将该势代入有效势理论 (effective potential theory, EPT)^[30,31] 可直接计算出黏性.他们首先使用该方法 (简记为 EPT+AA) 计算了 H (密度 8 g/cm³, 温度 1—100 eV) 和 Fe (密度 7.85 g/cm³, 温度 10—500 eV) 的黏性.

Haxhimali 等^[32] 通过结合利用 Yukawa 势的 Chapman-Enskog 输运理论 (CEY)^[33] 和 Murillo 建立的 Yukawa 黏性模型 (Yukawa viscosity model, YVM)^[34] 建立了一个混合动力学黏性 (hybrid kinetics-molecular dynamics, KMD) 模型. KMD 模型可以计算从强耦合到弱耦合较大范围内的黏性,其中强耦合和弱耦合区域的准确性分别取决于 YVM 和 CEY 的准确性.

Johnson 等^[35] 建立了一个集成的 Yukawa 黏性模型 (integrated Yukawa viscosity model, IYVM). IYVM 是在 YVM^[34] 基础上的一个改进,通过更多的模拟数据,将 YVM 中几个固定的参数设定为可变的参数并进行更精确的拟合.因此, IYVM 相对于 YVM 适用范围更广,更加准确.

Stanton 和 Murillo^[36] 基于 Boltzmann 方程和库仑对数 (Coulomb logarithm), 并利用 Chapman-Enskog 输运理论^[33] 建立了一个输运模型 (Stanton-

Murillo transport, SMT). SMT 将若干相关的复杂函数通过参数拟合方式给出了相对简洁的表达式, 从而提供了可以计算黏性的解析表达式. SMT 的适用范围随着屏蔽参数 κ 的增加而增加.

Arnault^[37] 通过将束缚电子在每个原子核周围偏离均匀背景 (凝胶) 的自由电子密度部分组合, 进行了 MD 模拟. 结合模拟数据及几个其他人提出的黏性公式, 通过拟合参数给出了强耦合到弱耦合区的一个黏性表达式. 该方法可称为赝离子凝胶 (pseudo-ion in jellium, PIJ) 模型.

Daligault 等^[38] 给出了一个在 $\kappa = 0$ 条件下计算单质等离子体 (one component plasma, OCP) 的黏性公式, 其中的参数是用他们的 MD 模拟数据进行拟合. 该公式主要适用于弱耦合区, 因为当耦合参数 Γ 较大时, 会导致 $\kappa = 0$ 的近似不再适用, 从而使该公式不适用.

程宇清等^[39,40] 通过详细解析 WDM 和 HDM 的特性, 基于高速粒子随机运动以及由于屏蔽效应导致的屏蔽势假设, 给出了一个无需拟合参数的解析公式, 用于计算 WDM 和 HDM 的黏性. 本文将该模型及其扩展模型统称为随机游走屏蔽势黏性模型 (random-walk shielding-potential viscosity model, RWSP-VM). 经过研究验证^[39,40], RWSP-VM 具有普适性、准确性、解析性及高效性等特点. 换言之, 该模型可以使用解析公式实现绝大多数单质准确、迅速的计算, 从低原子序数 (低 Z) 到高原子序数 (高 Z).

总体而言, 极端条件物质的黏性可以通过 MD 模拟和物理建模的方式获得. 不同的方法其准确性、普适性、适用范围均有差异.

本文将详细介绍几种计算极端条件物质黏性的方法, 包括 OFMD, AAHNC, EPT+AA, KMD, YVM, IVYM, SMT, PIJ, OCP 以及 RWSP-VM. 由于 RWSP-VM 的普适性、准确性、解析性及高效性, 将它与各个方法对多种单质的黏性计算结果进行对比分析, 包括 H, C, Al, Fe, Ge, W 以及 U, 通过综合评估黏性数据, 最后给出对于黏性计算的合理建议. 本文使用的数据一部分来源于已发表文献的结果, 一部分来源于本文提到的模型公式计算的结果. 需要注意的是, 由于已发表文献中的黏性数据不能涵盖所有的元素, 所以, 针对每个元素, 本文并不能使用上述所有方法进行评估. 在尽可能使用多种方法时, 会因此忽略那些没有已知数据的方法.

2 黏性重要物理量

在进行 MD 模拟时, 经过长步数的计算后, 得到每步的应力张量等物理量, 然后需要使用 Green-Kubo 公式^[7] 进行计算得到黏性:

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle \sigma_{\alpha\beta}(0) \sigma_{\alpha\beta}(t) \rangle dt, \quad (1)$$

其中, V 是系统的体积; $\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left(\sum_i p_{i\alpha} p_{i\beta} / m_i + \sum_i r_{i\alpha} f_{i\beta} \right)$ 是应力张量的非对角元, 下标 i 表示粒子的序号, 下标 $\{\alpha, \beta\} = \{x, y, z\}$ 代表笛卡尔直角坐标系的方向分量, m 是质量, p 和 r 分别为动量和坐标, f 是受力. 计算黏性时, 通常使用这 5 个应力张量 σ_j 分别计算出黏性 η_j , $\sigma_1 = \sigma_{xy}$, $\sigma_2 = \sigma_{yz}$, $\sigma_3 = \sigma_{zx}$, $\sigma_4 = (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/2$, $\sigma_5 = (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})/2$, 并取平均值得到最终的黏性 $\eta = \frac{1}{5} \sum_{j=1}^5 \eta_j$.

在进行物理建模时, 会涉及离子间的相互作用, 主要为库仑相互作用, 因此不可避免地会使用平均电离度 \bar{Z} , 计算 \bar{Z} 的准确性将影响到最终黏性计算的准确性. 尽管平均电离度 \bar{Z} 并没有统一的定义^[23], 但是通常可以被定义为离子被电离出的电子数的平均值, 即 $\bar{Z} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^Z j n_j$, 其中 n_j 是系统里电离 j 个电子 (或净电荷数为 j) 的离子数密度, n 是总离子数密度.

对于 WDM 和 HDM, 我们已在文献^[39] 的图 2 中对多种计算 \bar{Z} 的方法进行了对比评估, 得到的结论是, Thomas-Fermi (TF) 模型^[41] 由于其准确性和使用时的便捷性, 是一个合适的计算 \bar{Z} 的方法. 本文产生黏性数据使用的 \bar{Z} 均由 TF 型计算得到. More^[42] 给出了由 TF 模型计算 \bar{Z} 的拟合公式, 详细见附录 A.

其余重要的参数以及本文使用符号所表示的物理量均已列在附录 B 的表 B1 中. 其中耦合参数 Γ 描述系统的耦合强度, Γ 越小, 耦合越弱, 对应更高的温度或 (和) 更低的密度. 屏蔽参数 κ 描述系统的屏蔽效果, κ 越小, 屏蔽效果越小, 对应更高的温度. 电子简并参数 θ 描述系统的电子简并程度, θ 越大, 简并越弱, 对应更高的温度.

尽管对 WDM 没有一个严格的定义, 但是可以用 θ 对 WDM 作一个粗略的估计, 即 WDM 对应 θ 数量级接近 1 的情况^[4]. 由此, HDM 则对应温度比 WDM 更高的区域. 更具体地, 在本文中,

不妨粗略定义 $0.1 < \theta < 10$ 为 WDM, 而 $\theta < 0.1$ 和 $\theta > 10$ 分别定义为液态区和 HDM 区.

值得强调的是, 尽管本文对于几种方法在液态区的黏性也给予了少量分析和评价, 但是本文的侧重点仍是对极端条件即 WDM 和 HDM 黏性的评估, 因此最后给出对于黏性计算的建议也只针对 WDM 和 HDM.

3 分子动力学方法

本节内容将主要介绍 3 种 MD 方法, 从基于第一性原理的 QMD 出发, 到改进的分别适用于 HDM 和 WDM 高效计算的 OFMD 和 AAHNC.

3.1 量子分子动力学 (QMD)

量子分子动力学 (QMD), 也可称为第一性原理分子动力学. 在 Alfe 和 Gillan 的工作中^[8], 他们的模拟是基于 DFT、赝势以及平面波基组, 其中的电子-离子相互作用由超软 Vanderbilt 赝势描述^[43]. 通常, QMD 模拟可以使用 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 软件包, 每一步 MD 都会计算电子基态, 这样可以在每个时间步上提供一个不错的电子电荷密度, 从而减少达到自洽所需要的循环次数. 通过如此的 MD 模拟, 得到每一个时间步的应力张量, 而后代入 Green-Kubo 公式, 即 (1) 式, 即可获得黏性数据. 一般而言, QMD 模拟对大部分液态区的表现都较为准确, 且计算消耗在可接受范围. 但是, 正如引言所述, 当温度增加时, 其计算消耗将迅速增加, 且所使用的赝势假设不再成立, 导致当过渡到 WDM 特别是 HDM 区域, 传统的 QMD 逐渐变得难以适用. 因此, 在这些区域需要对 QMD 进行改进.

3.2 无轨道分子动力学 (OFMD)

无轨道分子动力学 (OFMD)^[23,25] 是其中一种针对 QMD 的改进方法, 可用于模拟 HDM. 在此区域, 由于高温高压条件下的 DFT 计算瓶颈在于轨道的计算, OFMD 提供了一种不需要计算轨道的方法, 其具体思路如下. 电子系统的自由能 $F(n, T)$ 通过其密度的隐函数表示:

$$F(n_e) = U_{ee}(n_e) + U_{ei}(n_e) + F_{xc}(n_e) + F_e(n_e), \quad (2)$$

其中, U_{ee} 是 Hartree 电子-电子相互作用, U_{ei} 是电

子-离子相互作用, F_{xc} 是交换关联项, F_e 是电子动能自由能. 电子密度 n_e 可以表示为

$$n_e(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} n_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (3)$$

其中 n_i 是量子态 i 的 Fermi-Dirac 分布, ψ_i 是量子态 i 的波函数.

在 (2) 式中, 只有 F_e 需要计算轨道, 其他的几项只需要涉及电子密度 $n_e(\mathbf{r})$. 如果将 F_e 用 Thomas-Fermi 展开^[26], 那么将不需要计算轨道. 到此, (2) 式的所有项都可以严格地通过实密度泛函方法得到. 涉及 OFMD 相关物理量的具体计算可以参考文献^[23]. 当在局部密度近似中考虑交换关联项的贡献, 并使用 Thomas-Fermi 近似来表示动态电子自由能, 则一般认为 OFMD 是处于 Thomas-Fermi-Dirac 水平的, 并由此产生出了 Thomas-Fermi-Dirac 分子动力学 (TFDMD); 如果忽略交换关联项的贡献, 则可称为 Thomas-Fermi 分子动力学 (TFMD)^[44].

3.3 平均原子超网链近似 (AAHNC)

平均原子超网链近似 (AAHNC)^[17] 是另一个针对 QMD 的改进方法, 可用于模拟 WDM. 在此区域多种效应同时存在, 需要一致妥善处理, 如部分电离、电子简并、束缚态能级位移、压致电离、离子-离子强耦合, 尤其是对于电子-离子耦合系统的精确描述. AAHNC 是平均原子 (AA) 模型^[18,19] 和超网链 (HNC) 近似方法^[20-22] 的结合. 在计算电子结构时使用 AA 模型, 同时其他离子对电子结构的影响使用 HNC. 由于 WDM 不再适用弱耦合近似, 关联函数不能再热运动的小微扰处理, 需要考虑更高阶的关联项. 这可以使用流体理论的积分方程得到: 引入直接关联函数 $c_{\alpha\beta}(r)$, 其与总关联函数 $h_{\alpha\beta}$ 关系可通过 Ornstein-Zernike 方程表示为^[20]

$$h_{\alpha\beta}(r) = c_{\alpha\beta}(r) + \sum_{\gamma} \int dr' c_{\alpha\gamma}(r') h_{\gamma\beta}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|). \quad (4)$$

然后使用 HNC 闭合关系得到关联函数 $g_{\alpha\beta}(r)$:

$$g_{\alpha\beta}(r) = \exp \left[-\frac{\phi_{\alpha\beta}(r)}{k_B T} + h_{\alpha\beta}(r) - c_{\alpha\beta}(r) \right]. \quad (5)$$

AAHNC 具体计算步骤如下.

- 1) 首先给定一个初始的关联函数;
- 2) 计算初始的电子势;
- 3) 基于该电子势求解狄拉克方程 (Dirac equation), 并且得到化学势及电子密度;
- 4) 用旧的关联函数计算新的电子势;
- 5) 判断电子

结构是否自洽, 若否, 则重复 3)—4) 步骤, 直到自洽; 6) 基于该电子结构并根据改进的 Gordon-Kim 方法^[45,46] 计算离子-离子对势; 7) 使用 HNC 近似计算新的关联函数, 并与旧的关联函数对比, 判断离子结构的结果是否收敛, 若否, 则从步骤 2) 开始按照顺序再算一次, 直到收敛. 最后得到的是自洽 (收敛) 的电子和离子结构. 利用电子和离子结构, 即可进行 MD 模拟.

由于 AAHNC 电子结构的计算考虑了离子对电子结构的影响, 这种处理方式能够更准确地计算电子和离子之间的相互作用.

此外, 侯永等利用 AAHNC 方法, 分别结合经典分子动力学 (classical molecular dynamics, 简记为 CMD) 和 Langevin 分子动力学 (Langevin molecular dynamic, 简记为 LMD) 模拟计算了 Al, Fe, U 的黏性^[39,47,48]. CMD 在计算每步时对于每个离子的牛顿方程只考虑离子间的相互作用力, LMD 则在此基础上加入了由于电子-离子相互作用而导致离子额外受到的摩擦力. 对于 HDM, 由于存在大量电离的电子, 电子对离子的动力学影响将变得重要, 因此 LMD 的考虑将会更合理一些.

4 物理建模

当对黏性数据有大量需求时, MD 模拟将不是一个高效的方法. 本节将介绍若干种模型方法, 可以快速地计算相应范围的黏性.

4.1 有效势理论结合平均原子模型 (EPT+AA)

通过使用有效势理论 (EPT)^[30,31] 结合平均原子 (AA) 模型, 以及由经典离子和量子电子流体混合 (即双组分等离子体, two-component plasma, TCP)^[28,29] 所满足的液体理论的积分方程 (即 Ornstein-Zernike 方程), 可以不需要进行 MD 模拟的方法即可计算物质的黏性^[27]. EPT+AA 主要分为两个部分, 一个是 EPT, 核心物理量为有效势 $\phi_{\alpha\beta}(r)$, 将其代入 Chapman-Enskog 的输运理论可以得到包括黏性在内的各种输运系数; 另一个是 AA-TCP, 输出的核心物理量为径向分布函数 $g_{\alpha\beta}(r)$ (又称关联函数), 使用它即可迅速得到 $\phi_{\alpha\beta}(r)$. 接下来将详细介绍各个物理量的计算方法.

在 AA-TCP 方法中, 等离子体被看成是全同的、球对称的赝原子, 即一个带有电荷 Z 的原子核以及它的 Z 个电子, 电子是束缚或自由的. 一个赝原子的电子结构可由 DFT 的 AA 模型确定. TCP 的物理描述为: 离子使用经典方法描述, 电子流体使用量子方法描述, 其中, 离子定义为原子核及其束缚的电子组成的实体, 它带有电荷 Z , 用于中和离子电荷的屏蔽电子组成了电子流体. 对于赝原子分子动力学 (pseudo-atom molecular dynamics, PAMD) 模拟, 其势函数记为 $V_{\alpha\beta}(r)$. 通过解带有 $V_{\alpha\beta}(r)$ 和 $g_{\alpha\beta}(r)$ 的 Ornstein-Zernike 方程^[49,50], 可以得到 $g_{\alpha\beta}(r)$. 详细可见文献^[50] 的 (1)—(6) 式.

在 EPT 方法中, 有效势可由上述得到的径向分布函数表示为

$$\phi_{\alpha\beta}(r) = -k_B T \ln [g_{\alpha\beta}(r)]. \quad (6)$$

获得 $\phi_{\alpha\beta}(r)$ 后, 将其作为 Chapman-Enskog 输运理论的输入物理量代入, 详见下文.

二体碰撞的散射角可以表示为

$$\Theta(b, u) = \int_{r_0}^{\infty} \frac{b}{\sqrt{1 - b^2/r^2 - 2\phi_{\alpha\beta}(r)/(\mu_{\alpha\beta}u^2)}} \frac{dr}{r^2}, \quad (7)$$

其中, α 和 β 用于标记粒子种类, 对于单质可取 $\alpha = \beta$; $\mu_{\alpha\beta} = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta)$ 是约化质量; $u = |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta|$ 是两个碰撞粒子的相对速度 (若 $\alpha = \beta$ 则 $u = |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}'_\alpha|$); b 是碰撞参数; r_0 是最近距离, 可由 (7) 式分母的最大根计算得到, 即 $1 - \frac{b^2}{r_0^2} - \frac{2\phi_{\alpha\beta}(r_0)}{\mu_{\alpha\beta}u^2} = 0$. 于是, l 阶动量转移散射截面可以表示为

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(l)}(u) = 2\pi \int_0^\infty [1 - \cos^l(\pi - 2\Theta)] b db. \quad (8)$$

并且记 $\sigma_0 = \frac{\pi q_\alpha^2 q_\beta^2}{\mu_{\alpha\beta}^2 v_{\alpha\beta}^4}$ 作为参考散射截面, q_α 和 q_β 分别为粒子 α 和 β 的电荷量, 热速度平方 $v_{\alpha\beta}^2 = 2E_\alpha^{(k)}/m_\alpha + 2E_\beta^{(k)}/m_\beta = 2k_B T/\mu_{\alpha\beta}$, $E_\alpha^{(k)}$ 为第 α 种粒子的动能. 进而, (l, k) 阶的“广义库仑对数”可以表示为

$$\Xi_{\alpha\beta}^{(l,k)} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\sigma_{\alpha\beta}^{(l)}}{\sigma_0} \xi^{2k+3} \exp(-\xi^2) d\xi, \quad (9)$$

其中, $\xi \equiv u/v_{\alpha\beta}$. 并且, 记 $\Xi_{\alpha\beta} = \Xi_{\alpha\beta}^{(1,1)}$ 为最低阶项. 然后, 参考碰撞频率可以表示为

$$\nu_{\alpha\beta} \equiv \frac{16\sqrt{\pi}q_{\alpha}^2q_{\beta}^2n_{\beta}}{3m_{\alpha}\mu_{\alpha\beta}v_{\alpha\beta}^3}\Xi_{\alpha\beta}, \quad (10)$$

其中, n_{β} 是第 β 种粒子的数密度. 最后, (l, k) 阶的碰撞积分可以表示为

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(l,k)} = \frac{3}{16} \frac{m_{\alpha}}{\mu_{\alpha\beta}} \frac{\nu_{\alpha\beta}}{n_{\beta}} \frac{\Xi_{\alpha\beta}^{(l,k)}}{\Xi_{\alpha\beta}}. \quad (11)$$

上述 (7)—(11) 式可在文献 [30] 的 (6)—(11) 式或文献 [33] 中找到.

最终, 将 (11) 式代入 Chapman-Enskog 输运理论, 黏性的 1 阶近似公式可由文献 [33] 的 (9.84) 式或文献 [32] 的 (25) 式表示为

$$\eta_{\text{EPT}} = [\eta_{\text{CE}}]_1 = \frac{5}{8} \frac{k_{\text{B}}T}{\Omega_{\alpha\beta}^{(2,2)}}, \quad (12)$$

式中, $\alpha = \beta$ 表示该公式适用于计算单质的黏性.

Daligault 等 [27] 利用 EPT+AA 方法计算了 H 和 Fe 的黏性. 根据计算结果, 该方法在 WDM 和 HDM 区域与 QMD 和 OFMD 的结果符合很好. 但是, 当温度继续降低时, 相对 MD 的计算结果, 该方法计算的黏性偏小. 这是因为, 系统所有粒子的动能及势能均对黏性有贡献, 而 EPT+AA 使用了 Chapman-Enskog 输运理论的公式, 该公式考虑的主要是动能对黏性的贡献. 当温度较高时, 动能的贡献远大于势能, 占主导地位, 这使得 EPT+AA 在较高温度对黏性的估计较为准确. 当温度较低时, 势能的贡献将变得不能忽略, 甚至会起主导作用, 这使得仅考虑了动能贡献的 Chapman-Enskog 理论对黏性有所低估, 即 EPT+AA 在较低温度会低估黏性. 根据 Daligault 的对比结果, EPT+AA 的适用范围估计为 $\Gamma < 30$.

4.2 混合动力学黏性模型 (KMD)

混合动力学黏性模型 (KMD) [32] 是一种结合了 2 种黏性模型的混合模型. 其中一种是 Chapman-Enskog 输运理论 [33] 结合 Yukawa 势, 另一种是由 Murillo 建立的 Yukawa 黏性模型 [34]. 尽管原文对于该模型的简称为 KMD, 但是 MD 模拟是为了分析弱耦合和强耦合分别适合哪个模型, 从而将两个模型混合后得到的最终模型. 因此, 在该模型建立后实际上不需要 MD 模拟. 故本文将该方法放在模型部分.

Haxhimali 等 [32] 采用 MD 模拟, 计算了温度在 100—500 eV, 离子数密度在 10^{25} cm^{-3} , Ar 粒子

数百分比在 0—50% 的氘-氩 (D-Ar) 混合物的黏性. 其中, 离子间的相互作用势使用屏蔽的库仑势, 即 Yukawa 势:

$$\phi(r) = \frac{q^2}{r} \exp(-r/\lambda), \quad (13)$$

其中, λ 为屏蔽距离. 在此, 给出几个可能用到的取值: 电子导致的屏蔽距离 λ_{e} , 离子导致的屏蔽距离 λ_{i} , 总屏蔽距离 λ_{tot} , 有效德拜屏蔽距离 λ_{effD} , 分别表示如下:

$$\lambda_{\text{e}} \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \sqrt{(k_{\text{B}}T)^2 + \left(\frac{2}{3}E_{\text{F}}\right)^2}}{n_{\text{e}}e^2}}, \quad (14a)$$

$$\lambda_{\text{i}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_{\text{B}}T}{nZ^2e^2}}, \quad (14b)$$

$$\lambda_{\text{tot}} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{\text{i}}^{-2} + \lambda_{\text{e}}^{-2}}}, \quad (14c)$$

$$\lambda_{\text{effD}} = \sqrt{\lambda_{\text{tot}}^2 + a_{\text{ws}}^2}, \quad (14d)$$

其中 MD 模拟使用了 $\lambda = \lambda_{\text{e}}$.

4.2.1 CEY

KMD 的第 1 种模型 CEY [32,33] 使用公式已由 (12) 式给出 $\eta_1 = [\eta_{\text{CE}}]_1$, 但是, 在计算 $\Omega_{\alpha\beta}^{(l,k)}$ 时, 使用的势函数为 Yukawa 势 (13) 式 (而不是 EPT+AA 通过相关函数给出的势), 且 $\lambda = \lambda_{\text{effD}}$.

Haxhimali 等 [32] 将 KMD 的 MD 模拟数据和 CEY 的结果对比发现, 温度越高, 两者符合越好; 温度越低, 两者相差越大. 这是因为 MD 模拟考虑了动能和势能的贡献, 而 CEY 来源于 Boltzmann 方程只考虑了动能的贡献, 所以会比 MD 模拟数据偏低. 当温度较高时, 动能占主导作用, 势能影响较小, 所以两者相差不大; 当温度较低时, 势能的影响变得可观, 所以两者相差较大.

4.2.2 YVM

KMD 的第 2 个模型为 YVM [34], 定义屏蔽参数 κ 为

$$\kappa = a_{\text{ws}}/\lambda_{\text{e}}. \quad (15)$$

于是, 黏性由 Γ 和 κ 这 2 个参数决定, 可以表示为

$$\eta_{\text{YVM}} = \eta_0 \left(0.0051 \frac{\Gamma_m}{\Gamma} + 0.374 \frac{\Gamma}{\Gamma_m} + 0.022 \right), \quad (16)$$

式中的 3 个系数均由 $\kappa = 2$ 和 3 的 MD 数据拟合,

尽管它们的值依赖 κ , 但由于变化较小, 所以此处给出一个固定的平均值. 引入 Einstein 频率 ω_E :

$$\omega_E = \frac{1}{\sqrt{3}}\omega_p \exp(-0.2\kappa^{1.62}), \quad (17)$$

(16) 式的 η_0 可表示为

$$\begin{aligned} \eta_0 &= \sqrt{3}\omega_E m n a_{ws}^2 \\ &= \sqrt{3m\Gamma k_B T} n a_{ws} \exp(-0.2\kappa^{1.62}); \end{aligned} \quad (18)$$

Γ_m 为 Γ - κ 平面的熔化边界, 可表示为

$$\Gamma_m = 171.8 + 82.8 [\exp(0.565\kappa^{1.38}) - 1]. \quad (19)$$

YVM 的适用范围取决于使用的 MD 数据的范围, 大致为 $2 < \Gamma < 1000$ 及 $0.1 < \kappa < 3$, 对应 WDM 和液态区. 这意味着, 在弱耦合区 $\Gamma < 1$ (通常对应 HDM), YVM 将会偏差较大.

4.2.3 混合 CEY 和 YVM

根据 4.2.1 节和 4.2.2 节的分析可知, CEY 在弱耦合区表现较好, 而 YVM 在强耦合区表现较好. 因此, KMD 将两者结合给出一个计算黏性的公式, 可表示为

$$\eta_{KMD} \approx ([\eta_{CEY}]_1^2 + \eta_{YVM}^2)^{1/2}, \quad (20)$$

在弱耦合区和强耦合区, 该公式计算的结果与 D-Ar 混合物的黏性数据符合较好. 综合 CEY 和 YVM 的适用范围, 可以估计 KMD 的适用范围大致为 $\Gamma < 1000$ 且 $\kappa < 3$. 值得强调的是, 对于液态区, 尽管 YVM 声称符合较好, 但由于将所有元素的液态 MD 黏性数据都用于 YVM 的参数拟合显然是不可能的, 所以总会出现 YVM 对一些元素在液态区的黏性估计差距较大. 例如 YVM 相关文献里提到的 Au 和 Ag, YVM 对它们在熔点附近的黏性计算较实验值最高低估了约 40%, 温度越低差别越大 [34]. 这是由于液态区的粒子间相互作用相对更加复杂, 通过一个统一的模型 (参数确定) 计算大部分元素在该区的黏性是很有挑战性的. 因此, 在液态区时, 需谨慎使用 YVM 以及 KMD.

4.3 集成的 Yukawa 黏性模型 (IYVM)

集成的 Yukawa 黏性模型 (IYVM) [35] 是一个在 YVM 基础上的改进模型, 由 Johnson 等建立. 改进方式为将 (16) 式中的 3 个固定系数及 Γ_m/Γ 和 Γ/Γ_m 的幂次更改为和 κ 相关的表达式, 即

$$\eta_{IYVM} = \eta_0 \left[A (\Gamma_m/\Gamma)^a + B (\Gamma/\Gamma_m)^b + C \right], \quad (21)$$

其中的拟合系数可以表示为

$$A(\kappa) = (1.45 - 1.04\kappa + 0.369\kappa^2) \times 10^{-4}, \quad (22a)$$

$$a(\kappa) = 1.78 + 0.13\kappa - 0.062\kappa^2, \quad (22b)$$

$$B(\kappa) = 0.3 + 0.86\kappa - 0.69\kappa^2 + 0.138\kappa^3, \quad (22c)$$

$$b(\kappa) = 1.63 - 0.325\kappa + 0.24\kappa^2, \quad (22d)$$

$$C(\kappa) = 0.015 + 0.048\kappa^{0.754}. \quad (22e)$$

拟合时, IYVM 相比 YVM 增加了 $0.1 < \Gamma < 1$ 及 $\kappa = 1, 2, 3$ 的 MD 数据, 因此 IYVM 适用范围增加了 HDM 区, 即增大为 $0.1 < \Gamma < 1000$ 及 $0.1 < \kappa < 3$. 与 YVM 同理, 需要谨慎对待 IYVM 在液态区的使用.

4.4 Stanton-Murillo 输运模型 (SMT)

Stanton 和 Murillo [36] 将有效势用于 Boltzmann 方程的 Chapman-Enskog 解, 特别地, 他们使用了一些变换变量表示碰撞积分, 以方便计算这些参数从而计算黏性. 其中碰撞积分可表示为

$$\Omega_{\alpha\alpha}^{(l,k)} = \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_{\alpha\alpha}}} \frac{q^4}{(k_B T)^{3/2}} \mathcal{K}^{(l,k)}(g), \quad (23a)$$

$$\mathcal{K}^{(l,k)}(g) \equiv g^k \int_0^\infty dw \exp(-gw^2) w^{2k+3} \sigma_l(w), \quad (23b)$$

$$g = \frac{q^2}{\lambda k_B T}, \quad (23c)$$

$$w^2 = \frac{\mu_{\alpha\alpha} \lambda u^2}{2q^2}, \quad (23d)$$

$$\sigma_l(w) = \frac{\sigma_{\alpha\alpha}^{(l)}}{2\pi\lambda^2}, \quad (23e)$$

这里 $\lambda = \lambda_{\text{eff}}$ 使用等效屏蔽距离, 可表示为

$$\lambda_{\text{eff}} = \left[\frac{1}{\lambda_e^2} + \frac{1}{\lambda_1^2} \frac{1}{1+3\Gamma} \right]^{-1/2}. \quad (24)$$

于是, (23c) 式可以表示为

$$g = \Gamma \left(\kappa^2 + \frac{3\Gamma}{1+3\Gamma} \right)^{1/2}, \quad (25)$$

式中的屏蔽参数为 $\kappa = a_{ws}/\lambda_e$, 其中 λ_e 可以使用 (14a) 式, 但是有一个使结果更准确的值为

$$\lambda_e = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \left[(k_B T)^p + \left(\frac{2}{3} E_F \right)^p \right]^{1/p}}{n_e e^2}}, \quad p = \frac{9}{5}, \quad (26)$$

其中, $p = 9/5$ 的相对误差在 1.1% 以下, 优于 $p = 2$

的 2.5% 以下的相对误差. 为便于计算 $\mathcal{K}^{(l,k)}(g)$, Stanton 和 Murillo 对其做了较高精度的拟合, 可表示为

$$\mathcal{K}^{(l,k)}(g) \approx \begin{cases} \mathcal{K}_{\text{WC}}^{(l,k)}(g), & g < 1, \\ \mathcal{K}_{\text{SC}}^{(l,k)}(g), & g > 1, \end{cases} \quad (27)$$

其中, 弱耦合项可以表示为

$$\mathcal{K}_{\text{WC}}^{(l,k)}(g) = -\frac{l}{4}(k-1)! \ln \left(\sum_{j=1}^5 a_j g^j \right); \quad (28)$$

强耦合项可以表示为

$$\mathcal{K}_{\text{SC}}^{(l,k)}(g) = \frac{b_0 + b_1 \ln(g) + b_2 \ln^2(g)}{1 + b_3 g + b_4 g^2}. \quad (29)$$

针对不同的 (l, k) 阶, 拟合系数 a_j 和 b_j 取值不同. 但是由于在此只使用了 $(2, 2)$ 阶, 所以此处只列出该组系数, 参见表 1. 其余阶的系数可在 SMT 原文^[36]找到.

表 1 约化的碰撞积分 (28) 式和 (29) 式在 $(2, 2)$ 阶的拟合系数^[36]

Table 1. Coefficients for Eqs. (28), (29) of the reduced collision integrals at index pair of $(2, 2)$ ^[36].

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
0.85401	-0.22898	-0.60059	0.80591	-0.30555
b_0	b_1	b_2	b_3	b_4
0.43475	-0.21147	0.11116	0.19665	0.15195

最后, 利用上述关系根据 Chapman-Enskog 公式, 即 (12) 式导出 SMT 的单质黏性公式为

$$\eta_{\text{SMT}} = \frac{5}{8} \frac{k_B T}{\Omega_{\alpha\alpha}^{(2,2)}} = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{m}(k_B T)^{5/2}}{\sqrt{\pi} q^4 \mathcal{K}^{(2,2)}(g)}. \quad (30)$$

Stanton 和 Murillo 使用他们提出的 SMT 分别计算了 $\kappa=1, 2, 3$, $1 < \Gamma < 100$ 时的黏性, 并与 MD 结果进行了对比. 结果显示, 对于 $\kappa=1$, 在 $\Gamma < 10$ 时, SMT 和 MD 数据符合较好, 但在 $\Gamma > 10$ 时, SMT 较 MD 有些许低估, 且 Γ 越大低估越多. 类似的结果在 $\kappa=2$ 时也有出现, 但出现低估的临界点大致在 $\Gamma=20$. 对于 $\kappa=3$, 在整个 $1 < \Gamma < 100$ 范围 SMT 和 MD 数据均符合较好. 但根据 SMT 使用的动力学理论, 当 Γ 继续增加时, 可以合理地推测, 和 $\kappa=1, 2$ 的情况类似, SMT 与 MD 相比也会逐渐开始低估. 因此, SMT 适用范围可以估计为, 当 $\kappa=1, 2, 3$ 时, Γ 分别要求大致满足 $\Gamma < 10$, $\Gamma < 20$, $\Gamma < 100$. 或者, 可以将临界点 Γ_c 看成 κ 的

函数并给出一个合适的拟合, 即对于一定范围的屏蔽参数 $1 \leq \kappa \leq 3$, 适用范围估计为 $\Gamma < \Gamma_c(\kappa) = 9.0 - 0.277 \exp(\kappa) + 0.239 \exp(2\kappa)$.

4.5 胨离子凝胶模型 (PIJ)

胨离子凝胶模型 (PIJ) 由 Arnault^[37] 提出. 通过将束缚电子与一部分自由电子密度进行组合, 其中后者是偏离每个原子核周围均匀背景 (凝胶) 的自由电子, 然后针对电荷分布进行多极展开. 在展开的最低阶, 用一个点状的胨离子代替每一个具有额外自由电子分布的离子, 这些离子在凝胶中与其他离子相互作用. 通过结合弱耦合区的 Fokker-Planck-Landau (FPL) 黏性公式^[51] 和强耦合区的 Bastea^[52] 黏性公式, 并拟合它们连接区域得到 PIJ 黏性公式, 其中约化的黏性可以表示为

$$\eta_{\text{PIJ}}^* = \begin{cases} \eta_{\text{FPL}}^* = 0.965 \sqrt{\frac{\pi}{3}} \frac{\Gamma^{-5/2}}{\ln \left(\frac{2}{\sqrt{3}\Gamma^{3/2}} \right)}, & \Gamma < 0.1535, \\ 0.737 \Gamma^{-2.07}, & 0.1535 \leq \Gamma < 0.5, \\ \eta_{\text{B}}^* = b_1 \Gamma^{-2} + b_2 \Gamma^{-0.878} + b_3 \Gamma, & \Gamma \geq 0.5, \end{cases} \quad (31)$$

其中, $b_1 = 0.482$, $b_2 = 0.629$, $b_3 = 1.88 \times 10^{-3}$. 最后得到 PIJ 黏性为

$$\eta_{\text{PIJ}} = m n a_{\text{ws}}^2 \omega_p \eta_{\text{PIJ}}^*. \quad (32)$$

Arnault^[37] 使用 PIJ 计算了氘氚 (DT) 在密度为 5 g/cm^3 和 12.5 g/cm^3 , 温度为 $2\text{--}10 \text{ eV}$ 的黏性, 结果与 QMD 的结果符合较好. 同时, 他还使用 PIJ 计算了 Pu 在密度为 $20\text{--}100 \text{ g/cm}^3$, 温度为 $50\text{--}5000 \text{ eV}$ 的黏性, 结果与 OFMD 的结果符合较好. 这表明, PIJ 在 WDM 和 HDM 均适用. 然而, PIJ 在液态区的适用情况取决于 Bastea^[52] 公式的适用范围, 后者的参数是用 Bastea 在 $0.05 \leq \Gamma \leq 100$ 的 MD 模拟数据拟合的. 由于 Bastea 的公式也仅包含一个参数 Γ , 根据之前所述, 对于液体区的使用需要谨慎对待. 综上所述, 尽管 PIJ 对所有的 Γ 均给出了公式, 但仍建议只在 WDM 和 HDM 区使用 PIJ.

4.6 单质等离子体模型 (OCP)

需要强调的是, OCP 模型是一个针对 OCP 物质的统称模型, 早在 1980 年就开始被使用^[53]. 包括本文提到的 FPL 公式^[51]、Bastea 公式^[52] 以及

PIJ^[37] 模型, 当用它们处理单质时, 都属于 OCP 模型范畴. 因为本节由 Daligault 等^[38] 给出的公式拟合时使用的 MD 数据相对更精确, 因此以该公式为代表展示 OCP 模型.

Daligault 等^[38] 使用平衡 MD 模拟非常精确地计算了单质等离子体 (OCP) 的黏性. 此外, 他们还给出了一个在 $\kappa = 0$ 条件下可以计算 OCP 黏性的拟合公式. 该公式的系数是基于他们精确的 MD 模拟数据拟合得到, 涵盖了从弱耦合区域到固态边界的范围, 可表示为

$$\eta_{\text{OCP}}^* = \frac{a_0}{\Gamma^{5/2} \ln(1 + cb_0/\Gamma^{3/2})} \times \frac{1 + a_1\Gamma + a_2\Gamma^2 + a_3\Gamma^3}{1 + b_1\Gamma + b_2\Gamma^2 + b_3\Gamma^3 + b_4\Gamma^4}, \quad (33a)$$

$$\eta_{\text{OCP}} = mn a_{\text{ws}}^2 \omega_p \eta_{\text{OCP}}^*, \quad (33b)$$

其中, 拟合系数 a_j 和 b_j 可以参见表 2.

Daligault 等使用精确 MD 模拟计算了 $\kappa = 0$ 且 $0.1 \leq \Gamma \leq 200$, 以及 $\kappa = 2$ 且 $2 \leq \Gamma \leq 402$ 范围的黏性, 结果和当时已有的模型及其他 MD 数据符合较好. 此外, 对于 $\Gamma > 0.1$ 的情况, (33) 式和其他数据也符合很好. 然而, 由于他们给出的 OCP 公式是针对 $\kappa = 0$ 情况的拟合公式, 因此适用范围为 $\Gamma \leq 200$ 且必须满足 $\kappa = 0$ 或 κ 接近 0. 实际上, 当耦合较强 (例如 $\Gamma > 10$) 时, 一般地, 对于大多数物质, 屏蔽参数 κ 不再接近 0, 即无法使用 (33) 式计算黏性. 因此对于实际情况, 该 OCP 模型给出的公式适用范围还需要根据 κ 的取值决定, 而不是简单地套用 $\Gamma < 200$. 最后, 保守估计, (33) 式适用于 $\Gamma < 10$.

4.7 随机游走屏蔽势黏性模型 (RWSP-VM)

以上提到的黏性模型及方法均在合适的范围表现优秀. 然而, 各模型均有一定的局限性. EPT+AA 方法需要从赝势出发, 由 DFT 的 AA 模型确

定. 然而对于每个系统的赝势都不一样, 形式相对复杂, 获取时有一定困难. KMD 方法使用的 YVM 相对它的改进模型 IYVM 不够准确, 且 KMD 是结合了两个基于不同物理方法的模型, 其整体物理内涵不够清晰. IYVM, PIJ 和 OCP 均存在需要使用模拟数据进行参数拟合的情况, 导致了它们的准确性以及适用范围取决于拟合时使用数据的准确性和范围. PIJ 和 OCP 只使用了一个约化参数 Γ , 这不足以完整描述整个耦合空间, 尤其是对于强耦合区, 由于屏蔽参数的欠考虑, 它们的适用范围被限制; IYVM 使用了两个约化参数 Γ 和 κ , 涵盖范围更宽一些, 但适用的范围仍然被拟合参数所限制. SMT 相对以上几个模型表现较好, 虽然使用了拟合参数, 但都是针对碰撞积分的拟合, 且未使用 MD 模拟数据.

我们在之前的工作中建立了完全无拟合参数的黏性模型, 即随机游走屏蔽势黏性模型 (RWSP-VM)^[39,40], 其物理过程及意义更明确, 并且已证明适用范围广, 针对 WDM 和 HDM 的准确性较高. 因此, 本文将以此模型为基准, 其他方法及模型作为对比, 对 WDM 和 HDM 的极端条件物质黏性进行评估.

根据前述工作^[39,40] 描述, RWSP-VM 的基本物理思想如下. 对于 WDM 和 HDM, 离子的电离度随着温度增加而增加, 离子被部分甚至全部电离, 因此离子之间的相互作用势由库仑势主导. 另一方面, 在该条件下由于离子速度很快, 可以看作随机运动的“离子气”, 这样, 随机行走的概念可以用于合适地处理这些离子气的行为, 以便后续公式的推导和化简. 此外, 德拜屏蔽效应也起着重要的作用, 这导致了这些离子间的相互作用势为屏蔽的库仑势, 离子气间的相互作用被看作一种“碰撞”. 据此, 我们做了 2 个假设: 1) 离子作为离子气随机运动, 并只考虑离子的二体碰撞; 2) 存在一个截断距离 r_0 , 当且仅当一对离子间距离小于 r_0 时, 才根据它们间的库仑相互作用进行运动.

表 2 (33a) 式的拟合系数^[38]
Table 2. Coefficients for Eq. (33a)^[38].

a_0	a_1	a_2	a_3	
0.794811	0.0425698	0.00205782	7.03658×10^{-5}	
b_0	b_1	b_2	b_3	b_4
0.862151	0.0429942	-0.000270798	3.25441×10^{-6}	-1.15019×10^{-8}

根据以上分析和假设, 我们从黏性的其中一个定义出发, 经过详细的推导后 (推导过程见文献 [39,40]), 得到了 RWSP-VM 的黏性公式, 可表示为

$$\eta_{\text{RVM}} = \frac{\sqrt{3mk_{\text{B}}T}}{\pi d^4} I, \quad (34)$$

其中, d 是碰撞距离, 可以表示为

$$d = a \left[1 + \frac{R}{b_{\text{m}}} \ln \left(\frac{R + b_{\text{m}}}{a} \right) \right]; \quad (35)$$

I 是积分项, 可以表示为

$$I = 2r_0^2 \frac{K [2(1-K) + (1+K)\ln K]}{(1+\sqrt{K})^2(1-K)^2}. \quad (36)$$

引入德拜屏蔽距离 λ_{D} , 表示为

$$\lambda_{\text{D}} \equiv \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_{\text{B}} T}{n_{\text{e}} e^2 (z^* + 1)}}. \quad (37)$$

(35)–(37) 式中的一些物理量可由下列式子表示:

$$a = \frac{q^2}{3k_{\text{B}}T + 2q^2/r_0}, \text{ 双曲线半长轴}; \quad (38\text{a})$$

$$r_0 = \lambda_{\text{D}}, \text{ 截断距离}; \quad (38\text{b})$$

$$R \equiv r_0 - a, K \equiv \left(\frac{R}{a} \right)^2, z^* \equiv \frac{\bar{Z}^2}{Z}; \quad (38\text{c})$$

$$b_{\text{m}} = \sqrt{R^2 - a^2}, \text{ 双曲线半短轴最大值}. \quad (38\text{d})$$

将 (35)–(38) 式代入 (34) 式可得到黏性. 这里, 对于中 Z 及高 Z 元素, $z^* = \bar{Z}$ 是一个不错的近似.

我们已经利用 RWSP-VM 计算了从低 Z 到高 Z 的多种单质在 WDM 及 HDM 的黏性. 通过和其他 MD 数据及模型的对比发现, 对于更高的温度, $\Gamma < 0.2$, RWSP-VM 相对其他模型对黏性有些许低估; 对于更低的温度, $\Gamma > 33.3$, 物质即将进入液态区, 势能贡献不可忽略, 导致只考虑动能贡献的 RWSP-VM 对黏性会进一步低估, 不再适用. 因此, 该模型的适用范围估计为 $0.2 < \Gamma < 33.3$.

5 结果与讨论

本节针对多种单质, 即 H, C, Al, Fe, Ge, W, 和 U, 对不同方法产生的黏性数据进行对比分析, 验证了各模型和模拟方法的准确性. 由于, RWSP-VM 具有普适性、精确性、高效性等特点, 且不需额

外的拟合参数, 因此, 如无特别说明, 以下内容将以 RWSP-VM 作为基准, 在其适用范围 ($0.2 < \Gamma < 33.3$, 基本涵盖 WDM 和 HDM) 比较其他方法, 从而实现极端条件下物质黏性的评估. 为了便于理解和分析, 后文的所有图将 RWSP-VM 适用范围的上下界 ($\Gamma = 0.2$ 对应上界, $\Gamma = 33.3$ 对应下界) 用竖直的灰色虚点线标记, 同时将前述的温区分界 ($\theta = 0.1$ 对应液态区与 WDM 分界线, $\theta = 10$ 对应 WDM 与 HDM 分界线) 用竖直的紫色虚线标记.

本文由 RWSP-VM 生成的数据可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00180> 中访问获取. 其余方法的数据均来自引用的文献或由文献给出的解析公式计算得到.

5.1 氢 (H)

H 的黏性如图 1 所示, 密度范围是 $0.1\text{--}100 \text{ g/cm}^3$, 温度范围是 $0.1\text{--}10^4 \text{ eV}$. 总体而言, 所有方法均符合较好.

密度为 0.1 g/cm^3 时, WDM 和 RWSP-VM 的适用范围几乎重合, 即 RWSP-VM 模型在此情况下只适用于 WDM 区. 在 WDM 区, AAHNC 符合较好, 而其余方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ 和 KMD) 均有一定偏高, 其中 OCP 和 PIJ 偏离得更少; 在 HDM 区, IYVM 符合较好, 而其余方法 (SMT, OCP, PIJ 和 KMD) 略微偏高.

密度为 1 g/cm^3 时, 在 WDM 区, OCP, PIJ, AAHNC 和 EPT+AA 符合很好, 而 SMT, IYVM 和 KMD 则略微偏高; 在 HDM 区, IYVM 符合较好, 而其余方法 (SMT, OCP, PIJ, KMD 和 EPT+AA) 则略微偏高.

密度为 10 g/cm^3 时, 在 WDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, PIJ, IYVM, KMD, EPT+AA 和 OFMD) 均符合较好; 在 HDM 区, 这些方法均略微偏高.

密度为 100 g/cm^3 时, 在 WDM 区, SMT 在较低温度时略微偏低, 其余方法 (OCP, PIJ, IYVM, KMD, EPT+AA 和 OFMD) 均符合较好; 在 HDM 区, IYVM 符合较好, 其余方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ, KMD, EPT+AA 和 OFMD) 均略微偏高.

值得注意的是, 对于 H 的这 4 个密度, RWSP-VM 的适用范围均未包含 HDM. 但是, 在其适用范围外, 当 $\Gamma < 0.2$ 时, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM,

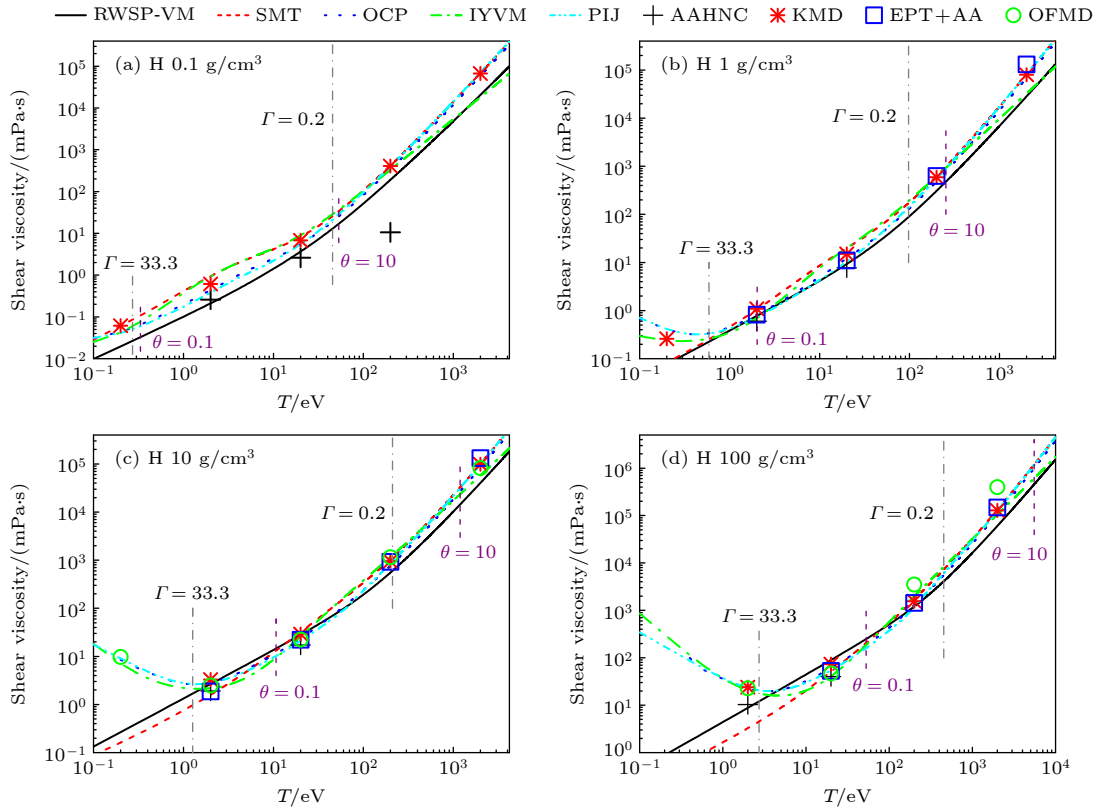


图 1 H 的黏性 (a)–(d) 密度分别为 0.1, 1, 10, 100 g/cm³. 黑色实线、红色虚线、蓝色点线、绿色虚点线和青色虚点点线分别为模型 RWSP-VM, SMT, OCP, IYVM 和 PIJ 由公式计算的结果. 黑色十字、红色星号、蓝色方块和绿色圆圈分别为 AAHNC, KMD, EPT+AA 和 OFMD 的计算结果, 数据来源于文献 [54]

Fig. 1. Shear viscosity of H. Panels (a)–(d) stand for the densities of 0.1, 1, 10, 100 g/cm³, respectively. Black solid, red dashed, blue dotted, and green dash-dot, and cyan dash-dot-dot curves stand for the results of RWSP-VM, SMT, OCP, IYVM, and PIJ respectively. Black crosses, red stars, blue squares, and green circles stand for the results of AAHNC, KMD, EPT+AA, and OFMD, respectively, which are from Ref. [54].

PIJ 和 KMD) 的黏性随温度变化趋势均与 RWSP-VM 一致, 仅在数值上有一定差别. 因此上述描述也包括了 HDM 区.

经过详细对比, 对于 H, OCP 和 PIJ 表现最好.

5.2 碳 (C)

C 的黏性如图 2 所示, 密度范围是 0.1–100 g/cm³, 温度范围是 0.01–10⁴ eV. 和 H 的情况类似, 总体而言, 所有方法均符合较好.

密度为 0.1 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT, IYVM 和 KMD 符合较好, 而 OCP, PIJ 和 AAHNC 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ, AAHNC 和 KMD) 均符合较好.

密度为 1 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT, IYVM, KMD 和 OFMD 符合较好, 而 OCP, PIJ, AAHNC 和 EPT+AA 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ 和 KMD) 均符合较好.

密度为 10 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT 和 KMD

符合较好, 而 OCP, IYVM, PIJ, EPT+AA 和 OFMD 则略微偏低; 在 HDM 区, 除 AAHNC 偏低以外, 其余方法 (SMT, OCP, IYVM, KMD, EPT+AA 和 OFMD) 均符合较好.

密度为 100 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT, KMD 和 OFMD 符合较好, 而 OCP, IYVM, PIJ, AAHNC 和 EPT+AA 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ) 均略微偏高.

经详细对比, 对于 C, SMT 和 KMD 表现最好.

5.3 铝 (Al)

Al 的黏性如图 3 所示, 密度范围是 0.27–27 g/cm³, 温度范围是 0.01–10⁴ eV. 总体而言, 所有方法均符合较好.

密度为 0.27 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT 和 IYVM 符合较好, 而 OCP 和 PIJ 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好.

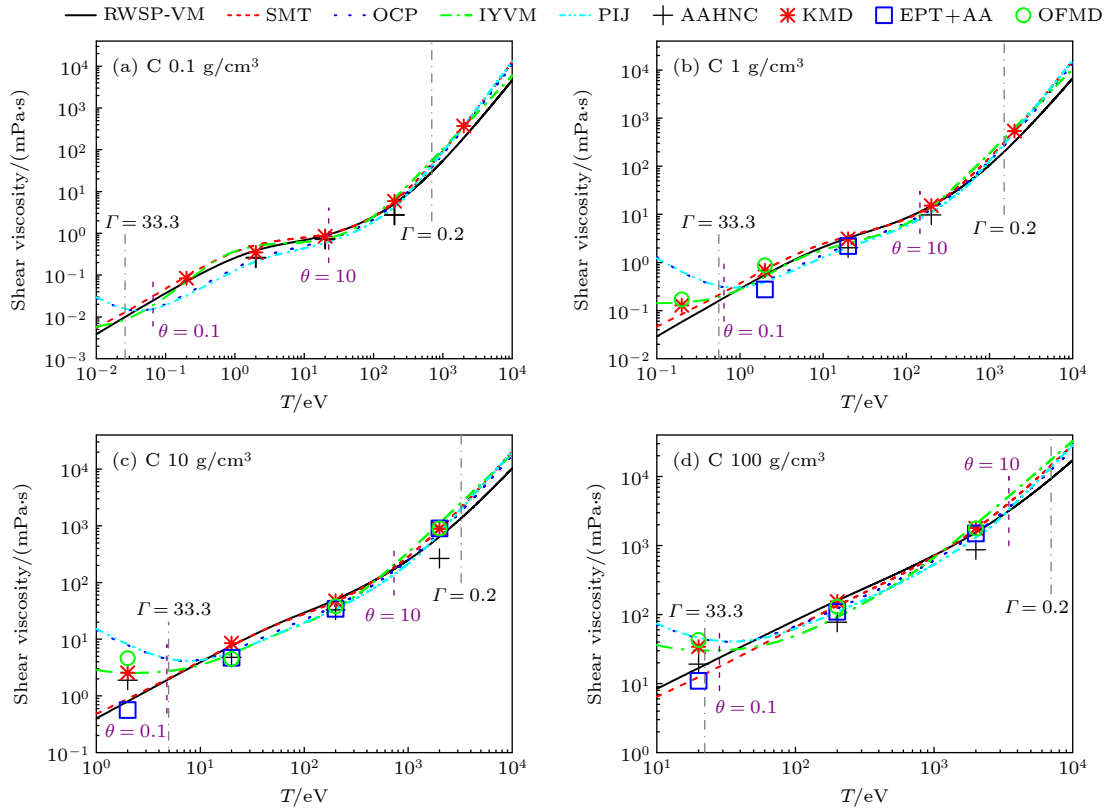


图 2 C 的黏性 (a)–(d) 密度分别为 0.1, 1, 10, 100 g/cm³. 图例与图 1 一致. AAHNC, KMD, EPT+AA 和 OFMD 的数据来源于文献 [54].
 Fig. 2. Shear viscosity of C. Panels (a)–(d) stand for the densities of 0.1, 1, 10, 100 g/cm³, respectively. The legends are the same as Fig. 1. The results of AAHNC, KMD, EPT+AA, and OFMD are from Ref. [54].

密度为 2.7 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT 符合较好, 而 OCP, PIJ 和 AAHNC 则略微偏低, IYVM 偏低更多一些; 在 HDM 区, 这些模型 (SMT, OCP, IYVM, PIJ 和 AAHNC) 均符合较好.

密度为 8.1 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT 符合较好, 仅在较高温度略微偏低, 而 OCP, IYVM, PIJ 和 AAHNC 则略微偏低, 其中 IYVM 偏低最多; 在 HDM 区, 这些模型 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好.

密度为 27 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT, OCP 和 PIJ 符合较好, 但是在较高温度略微偏低, 而 AAHNC 略微偏低, IYVM 则偏低一些; 在 HDM 区, 这些模型 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好.

经过详细对比, 对于 Al, SMT 表现最好.

5.4 铁 (Fe)

Fe 的黏性如图 4 所示, 密度范围是 1.6–40 g/cm³, 温度范围是 1–10⁵ eV. 总体而言, 所有方法均符合较好, 仅在高密度下略偏低.

密度为 1.6 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT 和

IYVM 符合较好, 其中 SMT 仅在温度较低时略微偏高; 在 HDM 区, 这些模型 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好.

密度为 4.0 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT, OCP, PIJ 和 OFMD 符合较好, AAHNC 和 IYVM 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些模型 (SMT, OCP, IYVM, PIJ 和 AAHNC) 均符合较好.

密度为 7.9 g/cm³ 时, 在 WDM 区, SMT, OCP 和 PIJ 符合较好, OFMD, IYVM, EPT+AA 和 AAHNC 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ, EPT+AA 和 OFMD) 均符合较好.

密度为 16 g/cm³ 时, 在 WDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, SMT, IYVM 和 OFMD 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好, 其中 OCP 和 PIJ 表现更好.

密度为 32 g/cm³ 时, 在 WDM 区, OCP, PIJ, AAHNC 和 OFMD 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好, 其中 OCP 和 PIJ 表现更好.

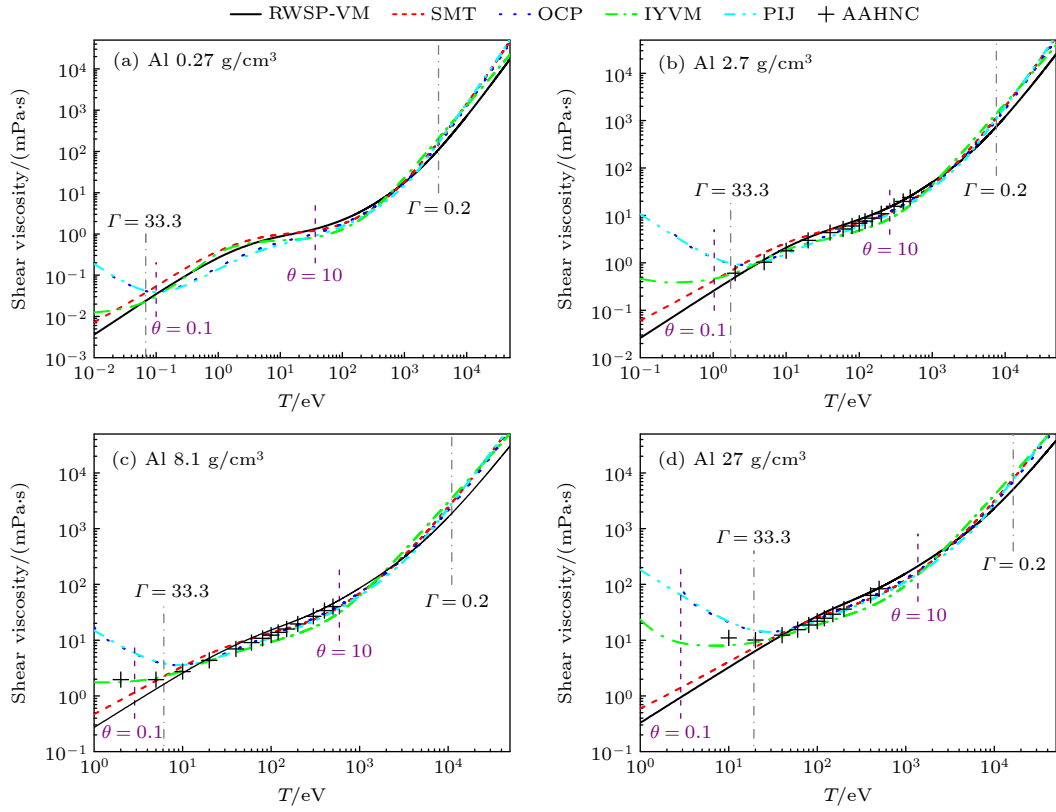


图3 Al的黏性 (a)–(d) 密度分别为0.27, 2.7, 8.1, 27 g/cm³. 黑色实线、红色虚线、蓝色点线、绿色虚点线和青色虚点线分别为模型RWSP-VM, SMT, OCP, IYVM和PIJ由公式计算的结果. 黑色十字为AAHNC (CMD)的计算结果, 数据来源于文献[47]

Fig. 3. Shear viscosity of Al. Panels (a)–(d) stand for the densities of 0.27, 2.7, 8.1, and 27 g/cm³, respectively. Black solid, red dashed, blue dotted, green dash-dot, and cyan dash-dot-dot curves stand for the results of RWSP-VM, SMT, OCP, IYVM, and PIJ, respectively. Black crosses stand for the results of AAHNC (CMD), which are from Ref. [47].

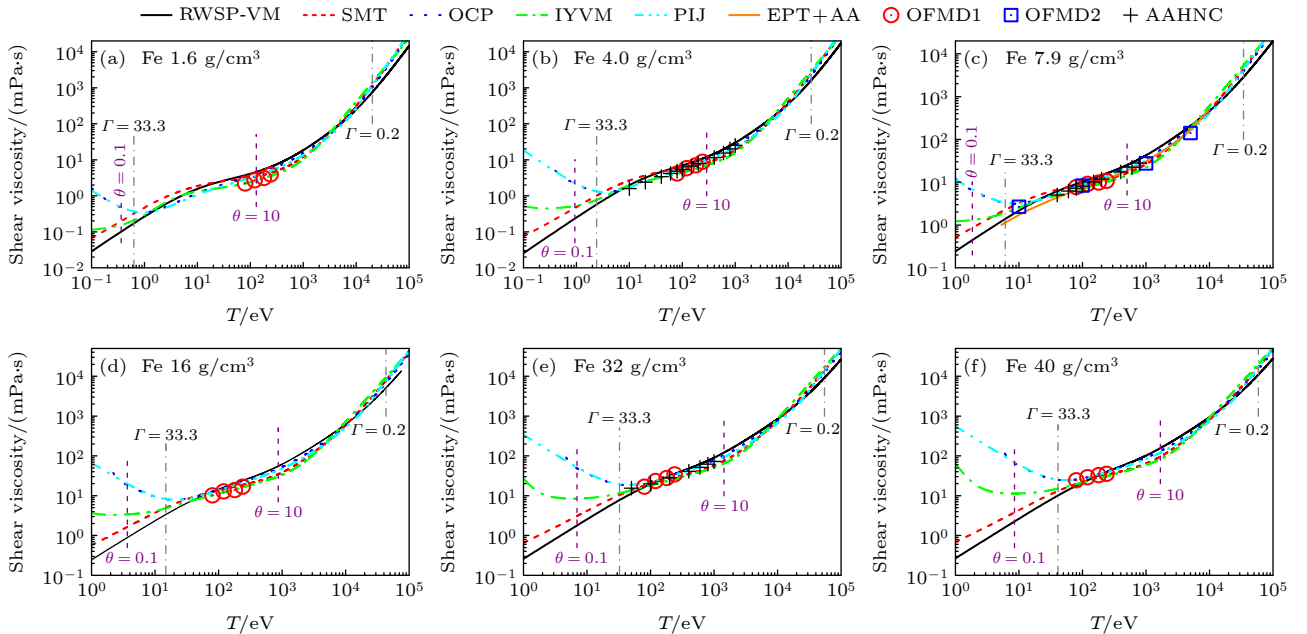


图4 Fe的黏性 (a)–(f) 密度分别为1.6, 4.0, 7.9, 16, 32, 40 g/cm³. 曲线图例与图3一致, 除了橙色实线代表EPT+AA[27], 红色圆圈、蓝色方块和黑色十字分别为OFMD1[55], OFMD2[27]和AAHNC (CMD)[39]的计算结果

Fig. 4. Shear viscosity of Fe. Panels (a)–(f) stand for the densities of 1.6, 4.0, 7.9, 16, 32, and 40 g/cm³, respectively. The legends of the curves are the same as Fig. 3. Orange solid stands for the results of EPT+AA[27]. Red circles, blue squares, and black crosses stand for the results of OFMD1[55], OFMD2[27], and AAHNC (CMD)[39], respectively.

密度为 40 g/cm^3 时, 在 WDM 区, OCP, PIJ 和 OFMD 符合较好, SMT 和 IYVM 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM 和 PIJ) 均符合较好, 其中 OCP 和 PIJ 表现更好。

经过详细对比, 对于 Fe, 中低密度 (与常态密度相比) SMT 表现最好, 而高密度 OCP 和 PIJ 表现最好。

5.5 锗 (Ge)

Ge 的黏性如图 5 所示, 密度范围是 $0.53\text{--}53 \text{ g/cm}^3$, 温度范围是 $0.01\text{--}10^5 \text{ eV}$ 。总体而言, 所有方法均符合较好。

密度为 0.53 g/cm^3 时, 在 WDM 区, SMT 和 IYVM 符合较好, 而 OCP 和 PIJ 则略微偏低; 在 HDM 区, 这些模型均符合较好, 其中 OCP 和 PIJ 表现更好。

密度为 5.3 g/cm^3 时, 在 WDM 和 HDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ 和 OFMD) 均符合较好, 其中 IYVM 相对略微偏低。

密度为 53 g/cm^3 时, 在 WDM 和 HDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则略微

偏低。

经过详细对比, 对于 Ge, 中低密度 SMT 表现最好, 而高密度 OCP 和 PIJ 表现最好。

5.6 钨 (W)

W 的黏性如图 6 所示, 密度范围是 $2.0\text{--}200 \text{ g/cm}^3$, 温度范围是 $0.1\text{--}10^6 \text{ eV}$ 。总体而言, 在低密度时, 所有方法均符合较好, 在高密度时, 这些方法差别稍大。

密度为 2.0 g/cm^3 时, 在 WDM 区, 这些方法 (SMT, OCP, IYVM, PIJ) 均符合较好; 在 HDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则略微偏低。

密度为 40 g/cm^3 时, 在 WDM 区, IYVM 符合较好, 而 OCP, PIJ 和 OFMD 均略微偏高, SMT 略微偏低; 在 HDM 区, OCP, PIJ 和 OFMD 符合较好, 而 IYVM 和 SMT 在温度较低时略微偏低。

密度为 200 g/cm^3 时, 在 WDM 区, OCP, IYVM 和 PIJ 偏高, 而 SMT 偏低; 在 HDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则偏低。

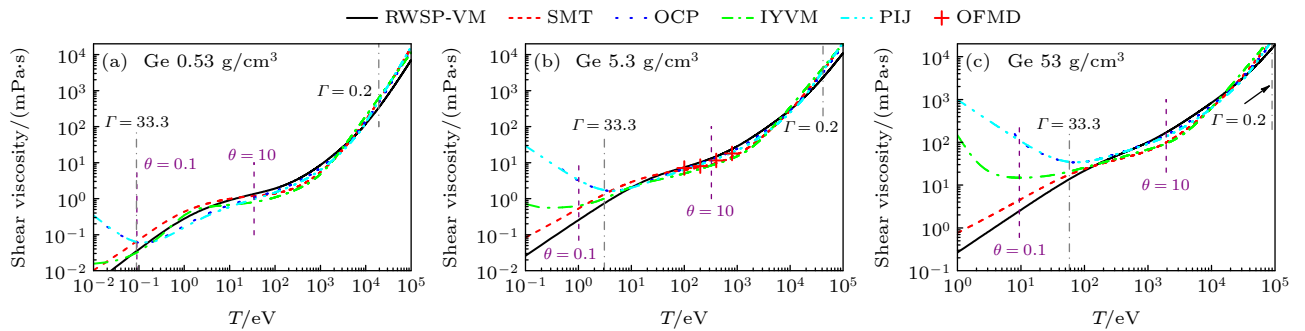


图 5 Ge 的黏性 (a)–(c) 密度分别为 $0.53, 5.3, 53 \text{ g/cm}^3$ 。曲线图例与图 3 一致。红色十字为 OFMD 的计算结果^[56]

Fig. 5. Shear viscosity of Ge. Panels (a)–(c) stand for the densities of $0.53, 5.3, \text{ and } 53 \text{ g/cm}^3$, respectively. The legends of the curves are the same as Fig. 3. Red crosses stand for the results of OFMD^[56].

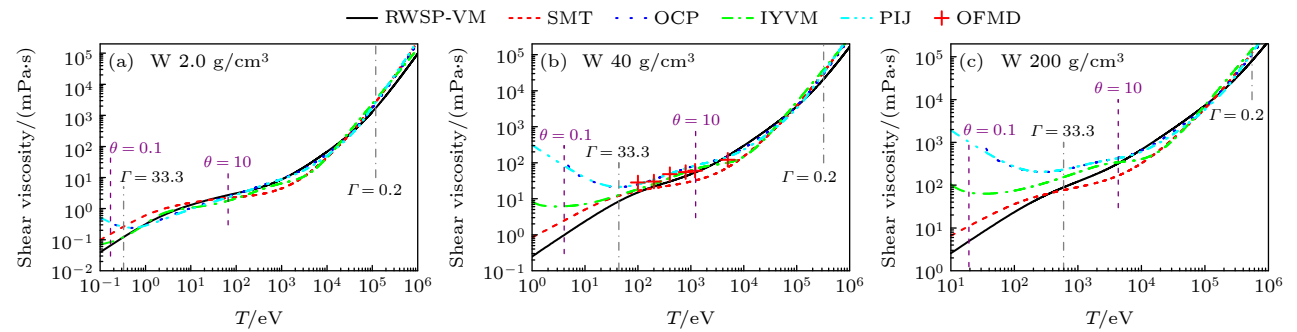


图 6 W 的黏性 (a)–(c) 密度分别为 $2.0, 40, 200 \text{ g/cm}^3$ 。图例与图 5 一致, 紫色虚线表示 $\theta = 10$ 对应的温度。OFMD 数据来源于文献^[56]

Fig. 6. Shear viscosity of W. Panels (a)–(c) stand for the densities of $2.0, 40, \text{ and } 200 \text{ g/cm}^3$, respectively. The legends are the same as Fig. 5. The results of OFMD are from Ref. [56].

经过详细对比, 对于 W, 中低密度 SMT 表现最好, 而高密度 OCP 和 PIJ 表现最好。

5.7 铀 (U)

U 的黏性如图 7 所示, 密度范围是 1.893—189.3 g/cm³, 温度范围是 0.1—10⁶ eV. 整体而言, 在中低密度, 所有方法均符合较好; 在高密度, 差别较大. 此外, 使用 CMD 的 AAHNC 在低密度表现较好, 而使用 LMD 的在高密度表现较好。

密度为 1.893 g/cm³ 时, 在 WDM 区, OCP, IYVM, PIJ 和 AAHNC (CMD) 均符合较好, SMT 略微偏高, AAHNC (LMD) 则略微偏低; 在 HDM, OCP, PIJ 和 AAHNC (CMD) 符合较好, SMT, IYVM 和 AAHNC (LMD) 略微偏低。

密度为 18.93 g/cm³ 时, 在 WDM 区, OCP, IYVM, PIJ, AAHNC 和 OFMD 均符合较好, 在较低温度 SMT 略微偏高, 而在较高温度 SMT 则略微偏低, CMD 略微偏高, LMD 略微偏低;

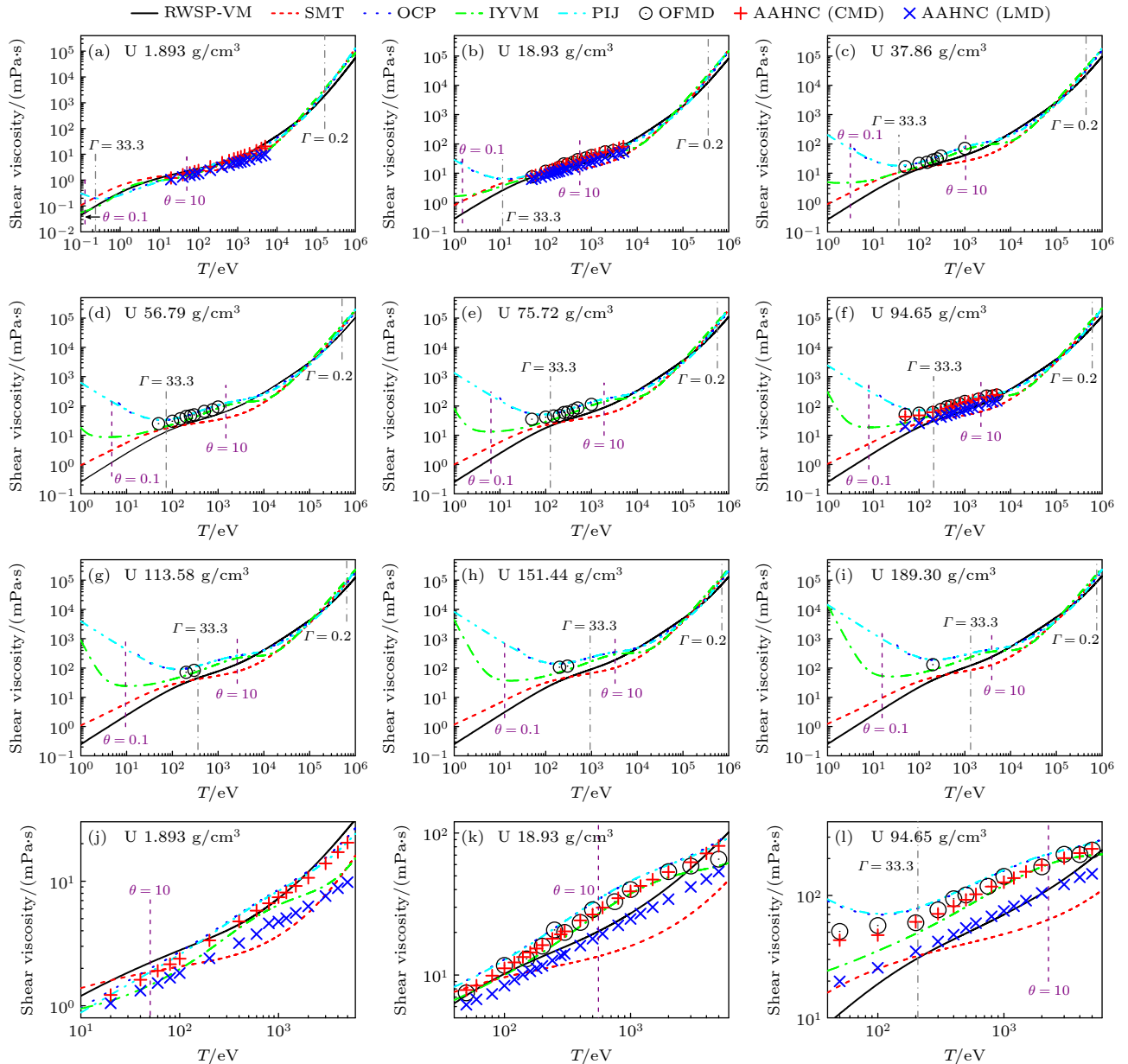


图 7 U 的黏性. (a)—(i) 密度分别为 ρ_0 的 0.1, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10 倍, 其中 $\rho_0 = 18.93 \text{ g/cm}^3$. 曲线的图例与图 3 一致. 黑色圆圈, 红色十字和蓝色叉分别为 OFMD^[57], AAHNC (CMD) 和 AAHNC (LMD)^[48] 的计算结果. (j), (k), (l) 分别为 (a), (b), (f) 的放大图 Fig. 7. Shear viscosity of U. Panels (a)—(i) stand for the densities of (0.1, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, and 10) ρ_0 , where $\rho_0 = 18.93 \text{ g/cm}^3$. The legends of the curves are the same as Fig. 3. Black circles, red crosses (+), and blue crosses (×) stand for the results of OFMD^[57], AAHNC (CMD), and AAHNC (LMD)^[48], respectively. Panels (j), (k), (l) represent the zoom of panels (a), (b), (f), respectively.

在 HDM 区, OCP, PIJ, AAHNC 和 OFMD 均符合较好, 其中 CMD 略微偏高, 而 LMD 略微偏低, SMT 和 IYVM 在温度较低时略微偏低.

密度为 37.86, 56.79 和 75.72 g/cm³ 时, 在 WDM 区, OCP, IYVM, PIJ 和 OFMD 均略微偏高, SMT 略微偏低; 在 HDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则在温度较低时略微偏低.

密度为 94.65 g/cm³ 时, 在 WDM 区, AAHNC (LMD) 符合较好, SMT 略微偏低, OCP, IYVM, PIJ, AAHNC (CMD) 和 OFMD 则略微偏高; 在 HDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则在较低温度时略微偏低.

在更高的密度时, 即 113.58—189.30 g/cm³, 由于 RWSP-VM 的适用温度下限相较于其他密度时更接近 HDM 区, 导致 OFMD 数据不在适用范围, 因此 OFMD 数据仅供参考, 不作比较. 在 WDM 区, OCP, IYVM 和 PIJ 均略微偏高, SMT 则略微偏低; 在 HDM 区, OCP 和 PIJ 符合较好, 而 SMT 和 IYVM 则在较低温度时略微偏低.

经过详细对比, 对于 U, 中低密度 OCP 和 PIJ 表现最好, 高密度 OCP 和 PIJ 在 HDM 表现最好. 特别地, WDM, AAHNC (CMD) 更适合中低密度, 而 AAHNC (LMD) 更适合高密度.

5.8 讨论

针对液态区, 以上所有元素都存在一个明显的现象, 不同的方法 (模型) 得到的黏性差距较大. 原因需要分两种情况讨论.

第 1 种情况, 以 RWSP-VM, SMT, EPT+AA 为代表的方法 (利用离子的动力学过程建模) 跟以 OCP, PIJ, IYVM 为代表的方法 (利用 MD 模拟数据对经验公式的拟合) 相比, 随着温度降低, 前者的黏性在降低, 而后的黏性在升高. 这是因为, 前者是只考虑了离子的动能, 而没有考虑离子的势能对黏性的贡献; 后者公式里的参数在拟合时, 使用的数据都来源于同时考虑了动能和势能对黏性贡献的 MD 模拟数据. 因此, 在液态区, 后者对黏性的描述会更准确, 而前者对黏性会明显低估.

第 2 种情况, 同样是利用 MD 模拟数据拟合公式的方法, 例如 OCP 和 IYVM, 虽然它们计算的黏性随温度的变化趋势一致, 但在数值上有些差异. 这是因为, OCP 只考虑了一个参数 Γ , 给出的是 $\kappa = 0$ 时的公式; 而 IYVM 不仅考虑了 Γ 还考虑

了 κ 的变化. 特别是在液态区, $\kappa = 0$ 已不再是一个合适的近似, κ 随温度 (密度) 的变化是有必要考虑的. 因此, 在液态区, IYVM 对黏性的描述会更准确, 而 OCP 对黏性的估计会有偏差. 这个结论也可以从图 1(b)、图 2(b)、图 3(c) 中的 OCP 和 IYVM 跟其他 MD 模拟数据的对比得到.

针对 WDM 和 HDM, 通过对以上多种单质的不同方法得到的黏性数据进行对比分析可知, 对于低中 Z 元素, 大多数模型和模拟结果符合较好; 然而对于高 Z 元素, 这些模型和方法间的差别逐渐凸显, 以至于更深入的计算验证和分析以确认数据的准确性变得尤为重要. 尤其是对于高 Z 的高温高密度情况, CMD 和 LMD 的差别变得重要, 使用这两者的哪种结果作为合适的黏性数据也值得进一步详细讨论.

对于不同元素的不同条件, 由于不同方法给出的黏性有所差别, 因此基于以上详细的对比分析, 计算 WDM 和 HDM 区的单质黏性时, 我们给出以下建议.

- 1) RWSP-VM 作为一个普适性的模型, 有解析表达式, 且无需额外拟合参数, 在其适用范围内均可使用.
- 2) 对于低 Z 元素, 例如 H, C 和 Al, 使用 SMT.
- 3) 对于中 Z 元素, 例如 Fe, Ge 和 W, 在低密度使用 SMT, 在高密度使用 OCP 及 PIJ.
- 4) 对于高 Z 元素, 例如 U, 可以使用 OCP 及 PIJ.

其余方法, 例如 EPT+AA, KMD 及各种 MD 方法, 尽管它们均在适用范围具备一定的准确性, 但由于没有直接给出的公式, 因此使用时存在一定难度, 比如需要消耗较大计算量等, 在需要大量黏性数据时不建议使用.

6 结论

针对极端条件物质的黏性, 本文详细介绍了几种合适的计算方法, 包括 3 种主要的 MD 模拟方法 (QMD, OFMD 和 AAHNC) 和 6 种物理模型 (EPT+AA, KMD, IYVM, SMT, PIJ, RWSP-VM). 其中, 我们在之前建立的 RWSP-VM 在极端条件下对几乎所有元素都适用 (涵盖低到高 Z 元素). 并且该模型不需要任何额外的拟合参数作为输入, 仅需要诸如离子质量、密度、温度等必

要的基本性质作为输入. 此外, 该模型还是解析的, 可以直接代入公式进行快速计算, 迅速得到大量的黏性数据. 因此, 我们将 RWSP-VM 作为基准, 对其余方法进行了详细的评估. 通过对这些方法计算的多种单质 (H, C, Al, Fe, Ge, W, U) 的黏性数据进行对比, 得到如下结论: 这些方法总体上均能较为准确地计算其适用范围内的黏性; 特别地, 对于低中 Z 元素, 各模型和模拟结果均符合较好; 对于高 Z 元素, 模型和模拟结果之间差异逐渐明显. 因此在 5.8 节给出了针对不同情况的黏性使用方法的建议.

本文的数据将对惯性约束聚变中的靶丸设计、天体结构演化的理解、极端条件界面不稳定性及混合的发展等相关应用领域起到一定的推动作用.

数据可用性声明

声明支撑本研究的主要数据可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00180> 中访问获取.

附录A 平均电离度拟合公式

More^[42] 给出的 TF 模型计算 Z 的参数公式可以表示为

$$a_1 = 3.323 \times 10^{-3}, a_2 = 0.971832, \quad (A1)$$

$$a_3 = 9.26148 \times 10^{-5}, a_4 = 3.10165, \quad (A2)$$

$$b_1 = -1.7630, b_2 = 1.43175, b_3 = 0.31546, \quad (A3)$$

$$c_1 = -0.366667, c_2 = 0.983333, \quad (A4)$$

$$\alpha = 14.3139, \beta = 0.6624, \quad (A5)$$

$$Z_* = Z^{4/3}, \quad (A6)$$

$$T_e = \frac{k_B}{e} T, T_0 = \frac{T_e}{Z_*}, T_T = \frac{T_0}{1 + T_0}, \quad (A7)$$

$$R = \frac{\rho}{A_m Z}, \quad (A8)$$

$$A = a_1 T_0^{a_2} + a_3 T_0^{a_4}, \quad (A9)$$

$$B = -\exp(b_1 + b_2 T_T + b_3 T_T^7), \quad (A10)$$

$$C = c_1 T_T + c_2, \quad (A11)$$

$$x = \alpha (R^C + A^C R^{BC})^{\beta/C}, \quad (A12)$$

$$\bar{Z} = \frac{x}{1 + x\sqrt{1 + 2x}} Z. \quad (A13)$$

这里, 输入物理量为元素的原子序数 Z , 原子量 A_m , 密度 ρ

和温度 T . 需要注意的是, ρ 仅在此处使用单位 g/cm^3 , 其余物理量均使用国际单位制.

附录B 黏性相关物理量

表 B1 本文使用的基本物理常量以及物质的一些基本物理量

Table B1. Fundamental physical constants and some basic physical quantities of the materials used in this work.

符号	物理量	表达式
e	元电荷	
k_B	玻尔兹曼常量	
\hbar	约化普朗克常量	
m_e	电子质量	
ϵ_0	真空电导率	
a_{ws}	Wigner-Seitz半径	$(4\pi n/3)^{-1/3}$
E_F	费米能量	$\hbar^2(3\pi^2 n_e)^{2/3}/(2m_e)$
m	离子质量	
n	离子数密度	
n_e	电离的电子数密度	$\bar{Z}n$
q^2	电荷平方	$(\bar{Z}e)^2/(4\pi\epsilon_0)$
T	温度	
Z	原子序数	
\bar{Z}	平均电离度	
\bar{Z}^2	电离度方均值	
Γ	耦合参数	$q^2/(a_{ws}k_B T)$
θ	电子简并参数	$k_B T/E_F$
κ	屏蔽参数	a_{ws}/λ
λ	屏蔽距离	根据模型需要取值
ω_p	等离子体频率	$\sqrt{4\pi q^2 n/m}$

参考文献

- [1] Dornheim T, Groth S, Bonitz M 2018 *Phys. Rep.* **744** 1
- [2] Karasiev V V, Sjostrom T, Chakraborty D, Dufty J W, Runge K, Harris F E, Trickey S B 2014 *Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter* (Cham: Springer International Publishing) pp61–85
- [3] Graziani F R, Bauer J D, Murillo M S 2014 *Phys. Rev. E* **90** 033104
- [4] Regan S, Goncharov V, Sangster T, et al. 2018 *Nucl. Fusion* **59** 032007
- [5] Bruno D, Catalfamo C, Capitelli M, Colonna G, De Pascale O, Diomede P, Gorse C, Laricchiuta A, Longo S, Giordano D, Pirani F 2010 *Phys. Plasmas* **17** 112315
- [6] Yin J W, Pan H, Wu Z H, Hao P C, Duan Z P, Hu X M 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 204701 (in Chinese) [殷建伟, 潘昊, 吴子辉, 郝鹏程, 段卓平, 胡晓棉 2017 物理学报 **66** 204701]
- [7] Allen M P, Tildesley D J 1989 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press) pp60, 61
- [8] Alfè D, Gillan M J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5161

- [9] Wang S C, Liu H 2017 *Computational Science and its Applications—ICCSA 2017* (Cham: Springer International Publishing) pp787–795
- [10] Wang S C, Zhang G, Sun B, Song H, Tian M, Fang J, Liu H 2019 *Chin. J. Comput. Phys.* **36** 253
- [11] Wang C, Long Y, Tian M F, He X T, Zhang P 2013 *Phys. Rev. E* **87** 043105
- [12] Wang C, Wang Z B, Chen Q F, Zhang P 2014 *Phys. Rev. E* **89** 023101
- [13] Li D F, Wang C, Kang W, Yan J, Zhang P 2015 *Phys. Rev. E* **92** 043108
- [14] Li Z G, Zhang W, Fu Z J, Dai J Y, Chen Q F, Chen X R 2017 *Phys. Plasmas* **24** 052903
- [15] Wang Z Q, Tang J, Hou Y, Chen Q F, Chen X R, Dai J Y, Meng X J, Gu Y J, Liu L, Li G J, Lan Y S, Li Z G 2020 *Phys. Rev. E* **101** 023302
- [16] Cheng Y Q, Wang H, Wang S, Gao X, Li Q, Fang J, Song H, Chu W, Zhang G, Song H, Liu H 2021 *AIP Adv.* **11** 015043
- [17] Hou Y, Bredow R, Yuan J, Redmer R 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033114
- [18] Hou Y, Jin F, Yuan J 2006 *Phys. Plasmas* **13** 093301
- [19] Hou Y, Jin F, Yuan J 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 425204
- [20] van Leeuwen J, Groeneveld J, de Boer J 1959 *Physica* **25** 792
- [21] de Boer J, Van Leeuwen J, Groeneveld J 1964 *Physica* **30** 2265
- [22] Wünsch K, Hilde P, Schlages M, Gericke D O 2008 *Phys. Rev. E* **77** 056404
- [23] Lambert F, Clérouin J, Zérah G 2006 *Phys. Rev. E* **73** 016403
- [24] Blanchet A, Torrent M, Clérouin J 2020 *Phys. Plasmas* **27** 122706
- [25] Lambert F, Clérouin J, Mazevet S, Gilles D 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 272
- [26] Brack M, Bhaduri R K 2003 *Semiclassical Physics* (Boulder: Westview Press) pp155–175
- [27] Daligault J, Baalrud S D, Starrett C E, Saumon D, Sjöström T 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 075002
- [28] Starrett C E, Saumon D 2013 *Phys. Rev. E* **87** 013104
- [29] Starrett C E, Saumon D, Daligault J, Hamel S 2014 *Phys. Rev. E* **90** 033110
- [30] Baalrud S D, Daligault J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 235001
- [31] Baalrud S D, Daligault J 2015 *Phys. Rev. E* **91** 063107
- [32] Haxhimali T, Rudd R E, Cabot W H, Graziani F R 2015 *Phys. Rev. E* **92** 053110
- [33] Chapman S, Cowling T G 1970 *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge: Cambridge University Press) pp179–196
- [34] Murillo M S 2008 *High Energy Density Phys.* **4** 49
- [35] Johnson Z A, Silvestri L G, Petrov G M, Stanton L G, Murillo M S 2024 *Phys. Plasmas* **31** 082701
- [36] Stanton L G, Murillo M S 2016 *Phys. Rev. E* **93** 043203
- [37] Arnault P 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 711
- [38] Daligault J, Rasmussen K O, Baalrud S D 2014 *Phys. Rev. E* **90** 033105
- [39] Cheng Y Q, Liu H, Hou Y, Meng X, Li Q, Liu Y, Gao X, Yuan J, Song H, Wang J 2022 *Phys. Rev. E* **106** 014142
- [40] Cheng Y Q, Gao X, Li Q, Liu Y, Song H, Liu H 2023 arXiv: 2305.16551 [cond-mat.stat-mech]
- [41] Thomas L H 1927 *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **23** 542
- [42] More R M 1985 *Adv. At. Mol. Phys.* **21** 305
- [43] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [44] Danel J F, Kazandjian L, Zérah G 2012 *Phys. Rev. E* **85** 066701
- [45] Gordon R G, Kim Y S 1972 *J. Chem. Phys.* **56** 3122
- [46] Kim Y S, Gordon R G 1974 *Phys. Rev. B* **9** 3548
- [47] Hou Y, Fu Y, Bredow R, Kang D, Redmer R, Yuan J 2017 *High Energy Density Phys.* **22** 21
- [48] Hou Y, Jin Y, Zhang P, Kang D, Gao C, Redmer R, Yuan J 2021 *Matter Radiat. Extrem.* **6** 026901
- [49] Ornstein L, Zernike F 1914 *Proc. K. Ned. Akad. Wet.* **17** 793
- [50] Rosenfeld Y 1986 *J. Stat. Phys.* **42** 437
- [51] Decoster A, Raviart P A, Markowich P A, Perthame B 1998 *Modeling of Collisions* (Paris: Gauthier-Villars)
- [52] Bastea S 2005 *Phys. Rev. E* **71** 056405
- [53] Baus M, Hansen J P 1980 *Phys. Rep.* **59** 1
- [54] Grabowski P, Hansen S, Murillo M, et al. 2020 *High Energy Density Phys.* **37** 100905
- [55] Sun H, Kang D, Hou Y, Dai J 2017 *Matter Radiat. Extrem.* **2** 287
- [56] Clérouin J, Arnault P, Ticknor C, Kress J D, Collins L A 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 115003
- [57] Kress J, Cohen J S, Kilcrease D, Horner D, Collins L 2011 *High Energy Density Phys.* **7** 155

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

Research progress and data assessment of shear viscosity under extreme conditions of warm and hot dense matters*

CHENG Yuqing¹⁾ LIU Haifeng²⁾ LI Qiong^{2)†} WANG Shuaichuang²⁾
 WANG Lifang²⁾ FANG Jun²⁾ GAO Xingyu²⁾ SUN Bo²⁾
 SONG Haifeng²⁾ WANG Jianguo²⁾

1) (*School of Mathematics and Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China*)

2) (*National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and
 Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

(Received 1 July 2025; revised manuscript received 6 September 2025)

Abstract

The viscosities of matters under extreme conditions, i.e. warm dense matter (WDM) and hot dense matter (HDM), have significant applications in various fields, such as the design of inertial confinement fusion targets, the astrophysical structure evolution, and the interfacial instability and mixing development under extreme conditions. Since the temperature and pressure ranges accessible by experimental techniques for viscosity measurement are very limited, the acquisition of viscosity data under extreme conditions mainly relies on theoretical calculations. This work introduces a variety of molecular dynamics (MD) methods and models for calculating the viscosities of WDM and HDM, they being quantum MD (QMD), orbital-free MD (OFMD), average atom model combined with hypernetted chain (AAHNC), effective potential theory combined with average atom model (EPT+AA), hybrid kinetics MD (KMD), integrated Yukawa viscosity model (IYVM), Stanton-Murillo transport model (SMT), pseudo-ion in jellium (PIJ), one-component plasma model (OCP), and random-walk shielding-potential viscosity model (RWSP-VM). Simultaneously, the viscosities of various elements obtained by these methods are shown, ranging from low to high atomic number (Z), i.e., H, C, Al, Fe, Ge, W, and U. The accuracy and the applicability of each method are analyzed in detail by comparison. RWSP-VM, which is based on physical modeling and independent of MD data, has comparable accuracy to simulation data over a wide range of temperature and pressure, and is an efficient method of obtaining viscosity data of WDM and HDM. This work will pave the way for calculating the shear viscosities under extreme conditions, and may play an important role in promoting the relevant applications. The data calculated from RWSP-VM in this work are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00180>.

Keywords: shear viscosity, molecular dynamics, *ab initio* calculations, kinetic theory

PACS: 51.20.+d, 52.65.Yy, 31.15.A-, 05.20.Dd

DOI: [10.7498/aps.74.20250861](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250861)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250861](https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00180)

* Project supported by the Funding of National Key Laboratory of Computational Physics, China.

† Corresponding author. E-mail: li_qiong@iapcm.ac.cn



温稠密和热稠密极端条件下的物质黏性研究进展及数据评估

程宇清 刘海风 李琼 王帅创 王丽芳 方俊 高兴誉 孙博 宋海峰 王建国

Research progress and data assessment of shear viscosity under extreme conditions of warm and hot dense matters

CHENG Yuqing LIU Haifeng LI Qiong WANG Shuaichuang WANG Lifang FANG Jun GAO Xingyu
SUN Bo SONG Haifeng WANG Jianguo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 245101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250861

CSTR: 32037.14.aps.74.20250861

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250861>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一氧化碳气体黏度微观机理研究

Microscopic mechanism on viscosity of carbon monoxide

物理学报. 2025, 74(15): 153101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250417>

元素掺杂对储氢容器用高强度钢性能影响的第一性原理和分子动力学模拟

First principles and molecular dynamics simulations of effect of dopants on properties of high strength steel for hydrogen storage vessels

物理学报. 2024, 73(6): 067101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231735>

大规模、量子精度的分子动力学模拟: 以极端条件液态铁为例

Large scale and quantum accurate molecular dynamics simulation: Liquid iron under extreme condition

物理学报. 2023, 72(18): 187102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231258>

分子动力学中的几何相位

Geometric phase in molecular dynamics

物理学报. 2025, 74(15): 150201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250388>

非牛顿流体剪切稀化特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation on shear thinning characteristics of non-Newtonian fluids

物理学报. 2021, 70(12): 124701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202116>

不同润湿条件下带正弦凸起粗糙表面上气泡成核的分子动力学研究

Molecular dynamics study on bubble nucleation on rough surfaces with sinusoidal protrusions under different wetting conditions

物理学报. 2025, 74(20): 204701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250717>