



·超强激光激发的强场量子电动力学·

温稠密参数下的双流不稳定性分析*

梁洞航, 吴 栋

(上海交通大学 物理与天文学院, 上海 200240)

摘 要: 温稠密物质状态是惯性约束聚变过程及天体演化过程中的重要物质发展阶段。随着密度的增加, 量子效应逐渐显现并导致包括温稠密参数下集体激发表行为与经典等离子体模型之间出现差异。密度泛函动力学方法是基于含时密度泛函理论建立的统计模型, 并依据 Wigner 分布函数(相空间量子力学)发展的动理学输运方法, 可以有效弥补经典等离子体理论对量子效应的忽略。基于密度泛函动力学方法, 发现温稠密特征参数内费米狄拉克分布、交换关联效应、量子衍射效应等性质都对双流不稳定性起到抑制作用。密度泛函动力学方法有望为等离子体视角研究温稠密系统输运性质提供第一性的理论平台。

关键词: 温稠密物质; 密度泛函动力学; Wigner 分布函数; 量子衍射效应; 交换关联效应; 双流不稳定性
中图分类号: O534.2 **文献标志码:** A **doi:** 10.11884/HPLPB202335.220209

Analysis of two-stream instability in warm dense region

Liang Jionghang, Wu Dong

(School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: Warm dense matter is an important stage of material development in the process of inertial confinement fusion and the evolution of the universe. As the density increases, quantum effects gradually manifest, and the collective excitations in warm dense region show behavior different from the classical cases. Density-functional kinetic theory (DFKT) is a statistical model based on the time-dependent-density-functional theory and Wigner distribution function (phase-space quantum theory), which can effectively compensate for the neglect of quantum effects by classical plasma theory. Based on the DFKT, we found that properties such as Fermi-Dirac distribution, exchange-correlation effects, and quantum diffraction effects in the warm-dense characteristic parameters can inhibit the two-stream instabilities. DFKT is expected to provide a first-principle theoretical platform for the study of the transport properties of the warm dense systems from the perspective of plasmas.

Key words: warm dense matter, density functional kinetic theory, Wigner distribution function, quantum diffraction effects, exchange-correlation effects, two-stream instability

温稠密物质状态是惯性约束聚变^[1-2]物理过程中物质发展的重要阶段, 并广泛存在于天体演化^[3-4]过程中, 包含了丰富的物理现象。温稠密状态介于固态和理想等离子体状态之间, 粒子数密度为 $10^{22} \sim 10^{27} \text{ cm}^{-3}$, 温度为 $0.1 \sim 100 \text{ eV}$ 。温稠密物质中的宏观大尺度输运问题是快点火^[5]聚变过程及实验室模拟天体喷流现象^[6]中的关键物理问题, 因此我们需要建立合适的温稠密参数输运模型。然而温稠密物质具有部分简并、强耦合、部分电离的特点, 这也加大了建立准确物理模型的难度。

相比于低温固体, 温稠密参数对应的高温高压条件会导致物质中出现新的自由电子^[7], 这些自由电子的特殊性质使得物质状态偏离于低温固态系统, 表现出类似于等离子体状态的宏观集体效应, 并对粒子输运问题产生重要的影响。然而极端条件会使得粒子间距与粒子德布罗意波长处于相同数量级, 波粒二象性开始展现。波粒二象性会导致粒子与等离子体波共振时出现共振吸收或者释放等离子体波的能量转移过程, 这也被称为量子波动效应或者量子衍射效应^[8]。同时费米子的全同粒子属性也导致自由电子在温度较低条件下保持费米狄拉克分布, 而不

* 收稿日期: 2022-06-28; 修订日期: 2022-12-06

基金项目: 中国科学院战略性先导科技专项 (XDA250050500); 国家自然科学基金项目 (12075204); 上海市科技创新行动计划项目 (22JC1401500)

联系方式: 梁洞航, liangjionghang@sjtu.edu.cn。

通信作者: 吴 栋, dwu.phys@sjtu.edu.cn。

同于高温下的麦克斯韦分布。另外粒子间距离的缩短也会导致粒子间短程相互作用更加强烈。这三种最重要的特性导致了理想等离子体理论并不直接适用于温稠密参数范围内的物理课题研究。

双流不稳定性作为一种典型的反应型不稳定性^[9],是经典等离子体系统宏观输运性质的重要研究内容。理解非理想等离子体系统中双流不稳定性的产生机理对研究惯性约束聚变中稠密电子束的注入过程^[10]及 γ 射线暴^[11]等天体物理现象等至关重要。而量子衍射效应以及粒子间强烈的短程相互作用导致经典等离子体理论无法准确描述温稠密参数下双流不稳定性的增长过程,因此需要建立合适的温稠密输运理论模型。

现在常用的温稠密输运模拟方法包括混合流体-PIC(Particle In Cell)方法、第一性原理分子动力学、量子朗之万分子动力学、电子力场分子动力学,以及量子动理学等^[12]。近年来,我国的科研团队也利用这些模拟方法在温稠密实验及理论方面做出了重要的工作。上海交通大学课题组基于PIC方法开发的LAPINS程序可以自洽地大尺度计算强流离子束在简并等离子体中的输运问题^[13]。北京应用物理与计算数学研究所开发的混合流体-PIC程序可以描述激波驱动的流体力学不稳定性以及非平衡演化过程^[14]。北京大学温稠密课题组利用平面波近似自由电子波函数的方法极大提升了第一性原理分子动力学对高温系统的计算效率^[15]。国防科技大学课题组利用布朗运动的思想建立了量子朗之万分子动力学模型^[16-17],拓展了第一性原理的应用范围。湖南大学课题组在波包分子动力学的基础上开发了电子力场方法^[18],与局域密度近似的结果比对说明了束缚态电子对温稠密氢系统阻止本领的贡献。然而量子动理学相比前几种方法,在国内则鲜有课题组开展相关研究。

量子动理学模型的建立可以追溯到1932年,Wigner将单粒子波函数与一个相空间下准概率分布函数^[19],也就是Wigner分布函数联系起来,开创了相空间量子力学,从而可以更自然地在微观量子效应与宏观输运性质之间建立联系。20世纪50年代Bohm和Pines^[20-22],以及Klimontovich和Silin^[23]等人采用多粒子Wigner分布函数对经典动理学方程进行量子推广。这也被视为量子动理学的开端。Lindhard解析求解了零温下的密度响应函数,数值地展现了静电色散关系中量子衍射效应的影响^[24]。量子动理学模型基于多体薛定谔方程和量子力学的相空间表述,第一性地囊括量子波动效应、短程关联效应等,并且对有限温度系统有比较好的适应性,但复杂的碰撞项形式使得研究者难以对其进行高维数值模拟^[25]。对于弱耦合等离子体,Hass和Manfredi忽略短程关联与动理学效应的影响利用流体近似简化量子动理学方程,得到相对更易求解的量子流体方程(Quantum Hydrodynamics, QHD)^[26-27]。初始的QHD方程中只包含Hartree平均场效应以及由量子衍射效应提供的量子压强项,忽略了费米子交换效应、波与粒子相互作用的动理学效应、短程关联效应以及有限温度效应等。零温下的交换关联修正在QHD发展后期基于含时密度泛函理论(Time-Dependent Density Functional Theory, TDDFT)通过有效泛函的形式加入模型中^[28-29],但其精确性依然需要通过与实验以及TDDFT模拟结果对比来进行检验。另外在温稠密物质参数范围内,系统物态方程并没有严格的解析解,一般都是通过第一性原理模拟手段得到的,因此有限温度物态方程解析形式难以得到,这也导致无法准确地将QHD扩展到温稠密参数区间。除此之外,QHD对动理学效应描述的缺失也会导致在短波区间出现较大的误差,从而对交换效应的贡献^[30-31]、双流不稳定性产生条件的预测^[32-33]等都会出现错误。因此,综合来看,基于含时密度泛函理论拓展量子动理学方可以涵盖经典等离子体模型所缺少的量子效应描述,而动理学方程形式则可以有效规避流体近似带来的问题,这也就是密度泛函动理学。本文将基于这一方法解析探讨量子效应对双流不稳定性增长率的影响。

1 理论模型

考虑到离子质量比电子大3~4个数量级,在相同的相互作用下,电子的移动速度比离子大得多,因此Born-Oppenheimer绝热近似是处理温稠密电子-离子体系集体响应的有效方法。将电子行为与离子行为解耦后,一般可以采用均匀电子气模型描述电子行为。这是一个只包含电子的理想模型,离子只是作为中性背景。如图1所示^[34],表征其物理性质一般

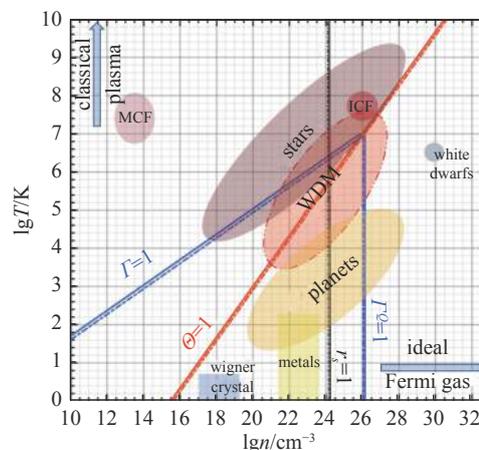


Fig. 1 Density-temperature plane with examples of matters and characteristic parameters. ICF denotes inertial confinement fusion. MCF denotes magnetic confinement fusion. Metals refer to the electron gas in metals. The parameter interval of WDM partially overlaps with the parameter intervals of planets and stars
图1 包含物质和特征参数示例的密度-温度参数平面^[34]

有以下三个参数：(1) 约化 Wigner-Seitz 半径, $r_s = (3/4\pi n)^{1/3}/a_B$; (2) 简并参数, $\Theta = (k_B T)/E_F$; (3) 耦合参数, $\Gamma = 1/(r_s a_B k_B T)$ 。其中参数 n 代表系统密度, a_B 代表波尔半径, k_B 为玻耳兹曼常数, T 为系统温度, E_F 为系统电子费米能。

当 $r_s \rightarrow 0$ 时, 系统处于极高密度状态, 粒子行为会接近理想费米液体; 而当 $r_s \gg 1$ 时, 长程的库伦排斥力占据主导, 低温的费米子会局域化形成维格纳晶格 (Wigner Crystal)^[35], 而高温费米子则会形成经典等离子体系统。温度参数 Θ 表征系统的简并程度。当 $\Theta \gg 1$ 时, 系统退回到经典等离子体系统; 而当 $\Theta \ll 1$ 时, 系统更接近强简并量子系统。当 $\Gamma \ll 1$ 时, 电子势能远小于动能, 系统可以作自由电子近似; 而当 $\Gamma \gg 1$ 时, 电子会由于强烈的相互作用被束缚在局域位置而不能自由移动。事实上, 对于 $\Theta \ll 1$ 的强耦合系统, 耦合参数应该由费米狄拉克分布修正为

$$\Gamma\Theta = \frac{U}{K} = \frac{e^2 n_0^{\frac{1}{3}}}{\epsilon_0 k_B T_F} \sim \frac{me^2}{\epsilon_0 \hbar^2 n_0^{\frac{1}{3}}} \quad (1)$$

这意味着密度越大, 理想费米气体模型对系统描述的准确性越高。温稠密参数范围内, 三个参数数值都在 1 附近, 意味着交换效应、关联效应、系统温度效应等都非常重要。

1.1 含时密度泛函理论

van Leeuwen 定理^[36] 证明了一定条件下我们可以找到一个无相互作用的系统来替代相互作用的系统得到相同密度分布演化过程。

对于一个给定粒子间相互作用 $V(|r-r_1|)$ 、外场 $V_{\text{ext}}(r, t)$, 以及初态 ψ_0 的系统, 其密度随时间变化过程可以由另一个相互作用 $V'(|r-r_1|)$ 系统在唯一确定的外场条件 $V'_{\text{ext}}(r, t)$ 中演化构建得到。 $V'_{\text{ext}}(r, t) \neq V_{\text{ext}}(r, t) + c(t)$, 并且 V' 系统选择的初态 ψ_0 必须保证系统的初始密度与初始密度对时间的一阶导与 V 系统相同。

根据 van Leeuwen 定理, 当我们假设相互作用 $V' = V$ 并且初态保持一致时, 外场 V_{ext} 与密度 n 是一一对应的, 也即 Runge-Gross(RG) 定理^[25]。而当 $V'(|r-r_1|) \equiv 0$ 时, 构造的无相互作用系统密度演化可以用含时 Kohn-Sham(TDKS) 方程^[26] 来描述

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(r, t) \psi_i(r, t) = i\hbar \frac{\partial \psi_i(r, t)}{\partial t} \quad (2)$$

$$V_{\text{eff}}(r, t) = V_{\text{ext}}(r, t) + V_H(r, t) + V_{\text{xc}}(r, t) \quad (3)$$

$$n(r, t) = \sum_i^N [f_i |\psi_i(r, t)|^2] \quad (4)$$

Runge 和 Gross 将含时的交换关联势 V_{xc} 定义为交换关联作用量 (xc-action) A_{xc} 对密度的泛函导数: $V_{\text{xc}}(r, t) = (\delta A_{\text{xc}}[n_e](r, t))/(\delta n_e(r, t))$ 。对于交换关联作用量而言, 最简单的方法就是将其对时间和空间局域化, 也就是在近绝热过程中用静态泛函的演化替代动态泛函的演化。这通常也被称为绝热局域密度近似 (Adiabatic Local Density Approximation, ALDA)^[37], $A_{\text{xc}}^{\text{ALDA}}[n] = \int_{t_0}^{t_1} dt \int dr e^{\text{HEG}}(n(r, t))$ 。

1.2 Wigner 分布函数

单粒子 Wigner 分布函数可以表示为

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \psi^*(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2, t) \psi(\mathbf{R} - \mathbf{r}/2, t) \quad (5)$$

或者可以表示为更一般的形式^[38]: $f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})}{\hbar}\right) \left\langle \psi(t) \left| \exp\left(\frac{i(\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{X}})}{\hbar}\right) \right| \psi(t) \right\rangle$ 。其中位置算符 $\hat{\mathbf{X}}$ 和动量算符 $\hat{\mathbf{P}}$ 满足对易关系 $[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar$ 。 $\left\langle \psi \left| \exp\left(\frac{i(\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{X}})}{\hbar}\right) \right| \psi \right\rangle$ 代表算符 $\exp\left(\frac{i(\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{X}})}{\hbar}\right)$ 在 Weyl 量子化规则下的期望, 并且表现为特征函数的作用。更进一步, A. Royer 将 Wigner 分布函数表示为对相空间点 (\mathbf{R}, \mathbf{p}) 的宇称算符形式^[39]

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = \left\langle \psi(t) \left| \hat{\Pi}_{\mathbf{pR}} \right| \psi(t) \right\rangle = \left\langle \psi \left| \hat{P}_{\mathbf{pR}}^+ - \hat{P}_{\mathbf{pR}}^- \right| \psi \right\rangle \quad (6)$$

其中 $\hat{P}_{\mathbf{pR}}^\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{\Pi}_{\mathbf{pR}})$ 为对于相空间原点 (\mathbf{R}, \mathbf{p}) 的对称与反对称算符, 并且满足下述关系: $(\hat{P}_{\mathbf{pR}}^\pm)^2 = \hat{P}_{\mathbf{pR}}^\pm$, $\hat{P}_{\mathbf{pR}}^+ + \hat{P}_{\mathbf{pR}}^- = 1$, $\hat{P}_{\mathbf{pR}}^+ - \hat{P}_{\mathbf{pR}}^- = \hat{\Pi}_{\mathbf{pR}}$ 。

从而 Wigner 分布函数可以表示为波函数 ψ 关于相空间点 (\mathbf{R}, \mathbf{p}) 对称量与反对称量的差的形式

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = |\psi_{\mathbf{pR}}^+|^2 - |\psi_{\mathbf{pR}}^-|^2 \quad (7)$$

其中 $|\psi_{\mathbf{pR}}^\pm\rangle \equiv \hat{P}_{\mathbf{pR}}^\pm |\psi\rangle$ 并且 $|\psi_{\mathbf{pR}}^+|^2 + |\psi_{\mathbf{pR}}^-|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$ 。很明显, Wigner 分布函数不同于经典分布函数, 对于一些特殊的量子系统, 波函数形式关于相空间点 (\mathbf{R}, \mathbf{p}) 的反对称分量大于对称分量时, Wigner 分布函数就可以表现为负值。类似于经典分布函数的作用, Wigner 分布函数对动量空间积分后的结果即为粒子在坐标空间分布的概率。随着尺度增加, 或者系统密度降低, 系统逐渐趋近于经典系统, 粒子的位置和动量可以被同时确定。此时波函数的对称量要远大于反对称量, Wigner 函数逐渐趋近于经典分布函数的物理含义从而只表现出正值。

对于多粒子无相互作用系统而言, 我们同样可以采用 Wigner 分布函数的定义, 此时需要考虑粒子在各能级状态的分布概率

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{R}, t) = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right) \psi_{\alpha}^*(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{R} - \mathbf{r}/2, t) \quad (8)$$

其中分布概率满足 $\sum_{\alpha} P_{\alpha} = 1$ 。由于 Wigner 分布函数同时适用于单粒子及多粒子系统, 因此密度泛函动力学并不会缩小含时密度泛函理论对应的适用范围, 但需要保证相互作用势对时间可以进行 Taylor 展开, 这是 van Leeuwen 定理的基础。

1.3 密度泛函动力学

结合多粒子系统 Wigner 分布函数的定义(8)及 TDKS 方程(2), 可以得到密度泛函动力学方程

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}\cdot\nabla_{\mathbf{R}}}{m_{\alpha}}\right) f_{\alpha}(p, R, t) = \frac{1}{i\hbar} \int \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right) [V_{\text{eff}}^+ - V_{\text{eff}}^-] f_{\alpha}(p', R, t) \quad (9)$$

其中 $V_{\text{eff}}^{\pm} = V_{\text{eff}}\left(\mathbf{R} \pm \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right)$ 。假设有效势 V_{eff} 随空间变化非常缓慢, 并且在经典条件下, 由于简并参数 $\Theta \gg 1$, 可以忽略交换关联相互作用, 将有效势对空间进行展开, $V_{\text{eff}}^{\pm} = V_{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \pm \left(\frac{\mathbf{r}}{2}\right) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} V_{\text{eff}}(\mathbf{R}, t)$, 可以得到经典静电系统中的无碰撞 Vlasov 方程

$$\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}\cdot\nabla_{\mathbf{R}}}{m_{\alpha}} - \nabla_{\mathbf{R}} V_{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_{\alpha}(p, R, t) = 0 \quad (10)$$

而其中有效作用势 V_{eff} 与分布函数的关系也由泊松方程描述

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{R}, t) = V_{\text{ext}}(\mathbf{R}, t) + \int d\mathbf{r}' v(\mathbf{R} - \mathbf{r}') \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} f_{\alpha}(p', r', t) \quad (11)$$

耦合组成的 Vlasov-Poisson 方程组也是经典静电动力学描述粒子运动的基本方程。因此我们看到密度泛函动力学方程在高温极限或者稀薄等离子极限下与经典动力学方程是相一致的。

我们可以采用 Vlasov 方程(10)描述非简并离子行为, 并将其与电子行为(9)相耦合, 得到电子-离子系统的色散关系

$$\varepsilon^l = 1 - v(k) \chi_i(k, \omega) - \{v(k) + [1 - v(k) \chi_i(k, \omega)] f_{\text{xc}}(k, \omega)\} \chi_e^q(k, \omega) \quad (12)$$

其中相应的密度响应函数为

$$\chi_{\alpha}^q(\omega, \mathbf{k}) = \frac{2}{\hbar} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{f_{0\alpha}\left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\mathbf{k}\right) - f_{0\alpha}\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{k}\right)}{\omega - \hbar\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}}{m}} \quad (13)$$

$$\chi_{\alpha}(\omega, \mathbf{k}) = \int d\mathbf{v} \frac{\mathbf{k} \cdot \frac{\partial f_{0\alpha}}{\partial \mathbf{v}}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \quad (14)$$

其中参数 2 来源于自旋求和。将 ALDA 运用到交换关联核 f_{xc} 中, 有

$$f_{\text{xc}}^{\text{ALDA}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = \left. \frac{d^2 e_{\text{xc}}^{\text{HEG}}(n)}{dn^2} \right|_{n=n_{\alpha}(\mathbf{r})} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t) = \left. \frac{\delta V_{\text{xc}}^{\text{ALDA}}[n](\mathbf{r}, t)}{\delta n(\mathbf{r}, t)} \right|_{n=n_{\alpha}(\mathbf{r})} \quad (15)$$

其中 ALDA 交换关联势由 t 时刻的密度决定, 因此有

$$V_{xc}^{\text{ALDA}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta \mathcal{A}_{xc}[n](\mathbf{r}, t)}{\delta n(\mathbf{r}, t)} = \left. \frac{d e_{xc}^{\text{HEG}}(n)}{dn} \right|_{n=n(\mathbf{r}, t)} = V_{xc}^{\text{LDA}}(n(\mathbf{r}, t)) \quad (16)$$

本文中的交换关联势选用了由 Perrot 和 Dharma-Wardana 于 1984 年给出的局域密度泛函形式(采取原子单位制)。

1.4 量子衍射效应

量子衍射(波动)效应源于粒子的波粒二象性。量子衍射效应表现在共振过程中粒子吸收或者释放辐射波。这一过程满足能量守恒与动量守恒关系: $\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega$, $\mathbf{p}' = \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{k}$ 。在相对论条件下, 我们有能量与动量的关系: $\varepsilon = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$, 其中 m 是粒子的静止质量, 而 c 是光速。从而我们有共振关系^[8]

$$\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \pm \frac{\hbar}{2m\gamma} \left(k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \right) = 0 \quad (17)$$

其中 $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ 为相对论参数。对于非相对论粒子, 我们可以近似 $\gamma \approx 1$, 并且考虑相速度远小于光速的情况, $\omega^2/c^2 \ll k^2$, 我们可以得到共振关系

$$\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \pm \frac{\hbar}{2m} k^2 \quad (18)$$

这一结果可以由非相对论条件 $\varepsilon = p^2/2m$ 得到, 同时也导致了密度响应函数(13)中的分布函数差分形式。取 $\hbar \rightarrow 0$ 的经典极限, 我们可以得到共振关系为: $\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}$ 。

2 量子双流不稳定性

电子束注入材料的物理过程可以简化为电子束定向漂移时与背景等离子体本征集体模式相互作用的结果。当电子束与背景等离子体密度以及温度相近时, 通过坐标变换可以自然地将注入过程视为两团电子的相对运动过程并导致能量传递, 也就是等离子体理论中最经典的双流不稳定性模型。温稠密等离子体中的量子双流不稳定性色散关系可以写作

$$1 - \{v(k) + [1 - v(k)]\chi_i(k, \omega)\} f_{xc}(k, \omega) [\chi_e^q(k, \omega - ku_0) + \chi_e^q(k, \omega + ku_0)] = 0 \quad (19)$$

考虑流体近似条件下 $\frac{\omega}{k} \gg \sqrt{\langle v^2 \rangle} \gg \frac{\hbar k}{2m_e}$, 电子密度响应函数可以近似为 $\chi_e^q(k, \omega \pm ku_0) \approx \frac{1}{2v(k)} \frac{\omega_{pe}^2}{(\omega \pm ku_0)^2 - \omega_u^2}$ 。从而我们可以将方程(19)改写为

$$1 - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_{0e} f_{xc}}{m_e \omega_{pe}^2} k^2 \right) \left(\frac{\omega_{pe}^2}{(\omega - ku_0)^2 - \omega_u^2} + \frac{\omega_{pe}^2}{(\omega + ku_0)^2 - \omega_u^2} \right) = 0 \quad (20)$$

其中 ω_{pe} 代表电子等离子体频率, n_{0e} 为系统电子密度, m_e 为电子质量, u_0 代表对流速度。对参数 ω_u^2 取不同的值代表不同的物理模型。方程(20)的解为

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_{0e} f_{xc}}{m_e \omega_{pe}^2} k^2 \right) \omega_{pe}^2 + \omega_u^2 + k^2 u_0^2 \pm \left\{ \frac{1}{4} \left(1 + \frac{n_{0e} f_{xc}}{m_e \omega_{pe}^2} k^2 \right)^2 \omega_{pe}^4 + 2k^2 u_0^2 \left[\omega_{pe}^2 \left(1 + \frac{n_{0e} f_{xc}}{m_e \omega_{pe}^2} k^2 \right) + 2\omega_u^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

不稳定性模式存在的条件为

$$\left(k^2 u_0^2 - \omega_u^2 \right) \left[k^2 \left(u_0^2 - \frac{n_{0e} f_{xc}}{m_e} \right) - \omega_{pe}^2 - \omega_u^2 \right] < 0 \quad (22)$$

(1) 对于经典零温等离子体^[9], $\omega_u^2 = 0$, $f_{xc} = 0$, 此时不稳定区间的波数范围为: $k < \omega_{pe}/u_0$ 。不稳定区间不会随对流速度的变化而消失。最不稳定的模式波数满足 $k_{\max}^2 = 3\omega_{pe}^2/8u_0^2$, 增长率为 $\frac{\gamma_{\max}^0}{\omega_{pe}} = \frac{\sqrt{2}}{4}$ 。

(2) 对于经典有限温度等离子体(或者无耦合费米气体), 我们有 $\omega_u^2 = \langle v^2 \rangle k^2$, $f_{xc} = 0$ 。此时存在出现不稳定区间的速度阈值 $u_0^2 > \langle v^2 \rangle$ 。当对流速度低于系统平均热速度时, 对流系统中不会出现不稳定性现象。最不稳定的模式满足 $k_{\max}^2 = \omega_{pe}^2/2(u_0^2 - \langle v^2 \rangle)$, 其增长率为

$$\frac{\gamma_{\max}^{\text{th}}}{\omega_{pe}} = \sqrt{\frac{1}{1-x} \left(-1 + \sqrt{\frac{1}{4}(1-x)^2 + 1} \right)} \approx \pm \frac{\sqrt{2(1-x)}}{4} < \frac{\gamma_{\max}^0}{\omega_{pe}} \quad (23)$$

其中 $x = \langle v^2 \rangle / u_0^2 \in (0, 1)$ 。

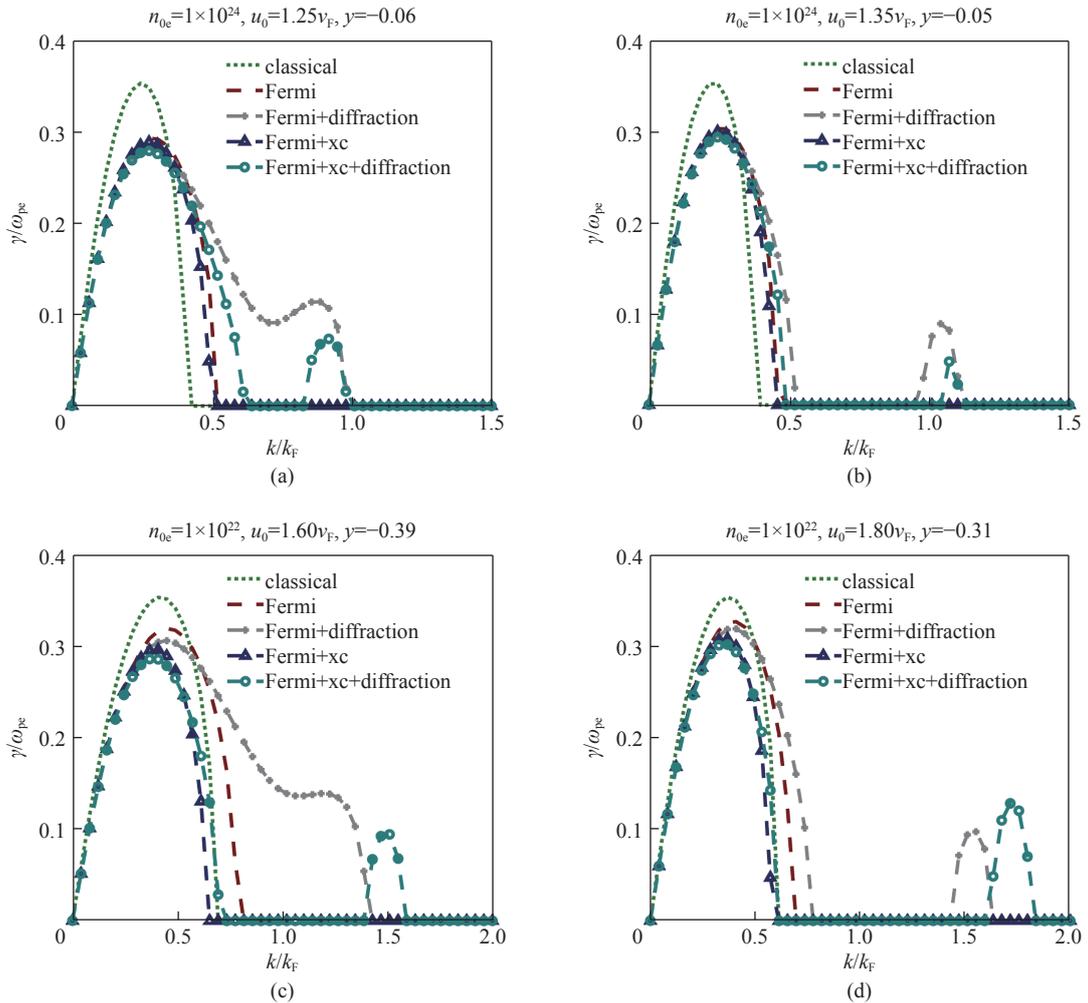
(3) 对于耦合费米气体, 我们有 $\omega_u^2 = \langle v^2 \rangle k^2$, $f_{xc} \neq 0$ 。此时同样存在出现不稳定区间的速度阈值 $u_0^2 > \langle v^2 \rangle$ 。最不稳定的模式增长率为 $\frac{\gamma_{\max}^F}{\omega_{pe}} \approx \frac{\gamma_{\max}^{th}}{\omega_{pe}} (1 + \alpha(x)y)$, 其中 $y = \frac{n_{0e} f_{xc}}{m_e u_0^2} < 0$, $\alpha(x) > 0$ 。很明显交换关联效应对双流不稳定性起抑制作用。

(4) 考虑量子衍射效应, $\omega_u^2 = \langle v^2 \rangle k^2 + \hbar^2 k^4 / 4m_e^2$ 。产生双流不稳定性的大流速度阈值与不考虑量子衍射效应的情况相同, 也是 $u_0^2 > \langle v^2 \rangle$ 。当对撞速度 $\langle v^2 \rangle < u_0^2 < \langle v^2 \rangle + (n_{0e} f_{xc} + \hbar \omega_{pe}) / m_e$ 时, 不稳定区间的波数满足 $k < 2m(u_0^2 - \langle v^2 \rangle)^{1/2} / \hbar$ 。当对撞速度 $u_0^2 > \langle v^2 \rangle + (n_{0e} f_{xc} + \hbar \omega_{pe}) / m_e$ 时, 不稳定区间中间出现了新的稳定区间 $[k_a, k_b]$

$$k_{a,b}^2 = (2m_e^2 / \hbar^2) [U \pm (U^2 - \hbar^2 \omega_{pe}^2 / m_e^2)^{1/2}] \quad (24)$$

其中 $U = u_0^2 - \langle v^2 \rangle - n_{0e} f_{xc} / m_e$ 。

图 2 主要展示的是费米狄拉克分布、交换关联效应、量子衍射效应对双流不稳定性的影响。相比于经典双流不稳定性解, 费米气体模型由于泡利不相容带来一定动量空间的展宽而导致最大增长率降低。同时对于强耦合系统而言, 如图 2(c)~图 2(f) 所示, 交换关联效应会明显削弱最大增长率。因此强耦合系统中采用理想费米气体近似会导致对双流不稳定性增长率的高估。|y| 值的大小是判断交换关联效应对双流不稳定性影响强弱的有效参量, 当 |y| 值较小时, 无耦合费米气体曲线与只考虑耦合费米气体曲线的最不稳定模式增长率非常接近。而当 |y| 值较大时, 如图 2(e) 所示, 两者的差别则可以超过 30%。这一点在图 3(c) 和图 3(d) 中也有体现。另外, 量子衍射效应也会导致最大增长率的减小, 同时影响不稳定模式的动量空间分布。当对流速度较低时, 如图 2(e) 和图 2(f) 所示, 双流不稳定性增长率对量子衍射效应的影响是决定性的。而当对流速度较大时, 如图 2(a) 和图 2(c) 所示, 短波区间双流不稳定性增长率则由量子衍射效应与交换关联效应的耦合结果来决定。当 $u_0^2 \approx \langle v^2 \rangle + (n_{0e} f_{xc} + \hbar \omega_{pe}) / m_e$, 即新的稳定区间刚刚形成时, 不同模型中短波区域的差别最大, 并且这一差异会随着对流速度的增大而不断减小。



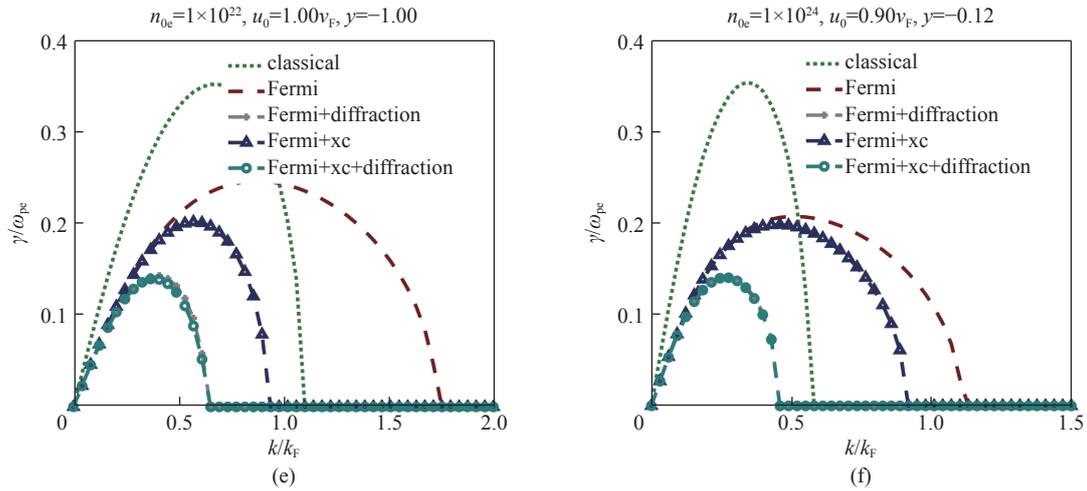


Fig. 2 Growth rates of different conditions at different counteracting drift, with the density unit of cm^{-3} . The values of y depends on the selection of xc potentials^[21], $\theta = 0.1$. The ‘classical’ curves represent the instability rates of the classical plasma model at 0 T

图 2 不同条件下的增长率对比, 其中密度单位为 cm^{-3} , y 值的确定依据交换关联势的选取, $\theta = 0.1$, “classical” 曲线代表零温下经典等离子体模型的不稳定性增长率

图 3 主要展示的是温度对双流不稳定性的影响。对比图 2, 提高温度明显会削弱双流不稳定性的增长率, 这与费米狄拉克分布带来的双流不稳定性的削弱具有相同的原理。因此双流不稳定性在高温条件下相比低温需要更

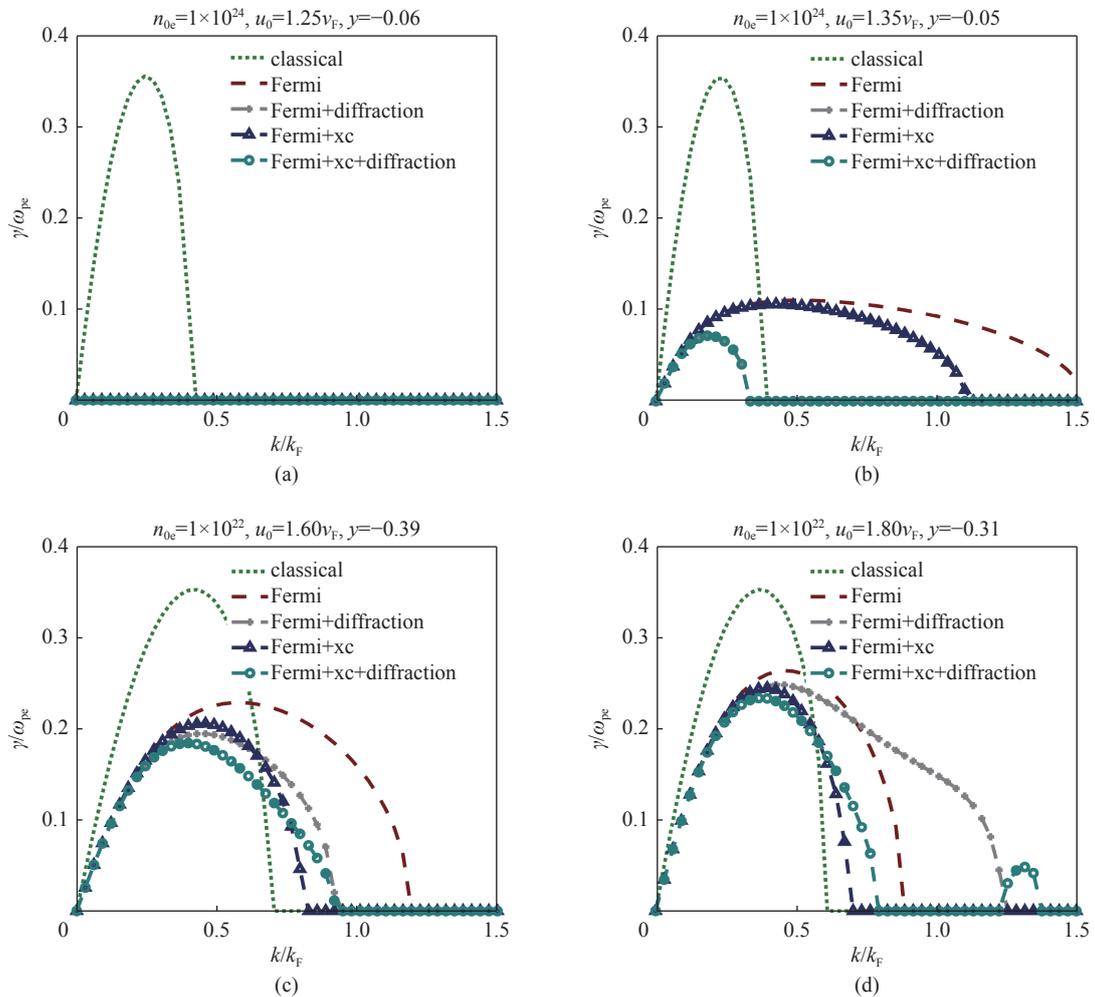


Fig. 3 Growth rates of different conditions at different counteracting drift, with the density unit of cm^{-3} , $\theta = 1$.

The ‘classical’ curves represent the instability rates of the classical plasma model at 0 T

图 3 不同条件下的增长率对比, 其中密度单位为 cm^{-3} , $\theta = 1$, “classical” 曲线代表零温下经典等离子体模型的不稳定性增长率

高的对流速度才能被激发。并且量子衍射效应会与高阶动理学效应耦合,影响无阻尼区间的形成,从而进一步提升产生不稳定性的对流速度阈值^[24]。

3 结 论

本文基于含时密度泛函理论与多体 Wigner 分布函数(相空间量子力学)推导了密度泛函动理学方程。并基于此方程以双流不稳定性为例,探讨了不同量子效应对不稳定性的影响,发现费米狄拉克分布在低温条件下相比玻尔兹曼分布会带来更大的动量空间展宽,双流不稳定性强度会被抑制。量子衍射效应也会抑制双流不稳定性,并且低对流速度条件下相比其他量子效应,量子衍射效应的影响具有主导性,并会使得短波区间出现不同于经典等离子体理论结果的不稳定性区间。交换关联效应在相对低温($\theta \leq 1$)、低密度($r_s \leq 1$)条件^[31]及短波区间对双流不稳定性影响比较明显。这一系列的结果说明量子效应通过抑制双流不稳定性减少对 Langmuir 波的激发,从而可能削弱电子系统的阻止本领,并且这将有助于我们理解惯性约束聚变及大行星核心、白矮星内部形成极高磁场过程中的温稠密物质演化性质。除此之外,密度泛函动理学也为更多的研究内容提供了理论基础,例如离子晶格结构以及能带对集体效应的影响、量子效应对非线性阶段演化的影响^[40]、对阻止本领的影响等等。

但值得注意的是,使用密度泛函动理学过程中不可避免需要涉及绝热局域密度近似。它用局域密度涨落描述近似全局效应,因而对存在剧烈密度振荡的系统并不适用。并且由于采用了绝热演化近似,忽略了更早时间的系统密度 $n(r,t)(0 \leq t \leq t)$ 带来的影响,也就是忽略了“记忆”效应^[28]。因此 ALDA 在空间和时间上都是局域的。然而想要提升 ALDA 的精确性并不容易。这是因为 ALDA 的时间依赖性与空间非局域性是关联在一起的,意味着我们必须同时解决记忆效应和全局效应缺失带来的影响,在绝热条件下将 LDA 泛函形式更换为 GGA 等形式来修正空间非局域性需要严格的理论证明保证其适用性。另一个问题是 TDDFT 只能处理静电系统,而无法处理电磁系统。对此, Xu, Rajagopalyi^[41], 以及 Dhara 和 Ghosh^[42-43] 发展了含时电流密度泛函理论(Time-Dependent Current Density Functional Theory, TDCDFT),通过增加一个依赖于电流密度的矢势泛函将时间和空间非局域性的问题很好地解决了。而且由于引入了矢势的概念,TDCDFT 自然适用于电磁系统的研究。TDCDFT 弥补了 TDDFT 在电磁效应缺失及空间时间局域的缺点,并可以很好地拓展到扩张系统(Extended System)中,因此未来我们可以基于 TDCDFT 结合相空间量子力学发展适用于电磁系统的密度泛函动理学,这一方程将更具有普适性。

参 考 文 献:

- [1] Kritcher A L, Döppner T, Fortmann C, et al. In-flight measurements of capsule shell adiabats in laser-driven implosions[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107: 015002.
- [2] Gomez M R, Slutz S A, Sefkow A B, et al. Experimental demonstration of fusion-relevant conditions in magnetized liner inertial fusion[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113: 155003.
- [3] Hausoel A, Karolak M, Şaşıoğlu E, et al. Local magnetic moments in iron and nickel at ambient and Earth's core conditions[J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 16062.
- [4] Saumon D, Hubbard W B, Chabrier G, et al. The role of the molecular-metallic transition of hydrogen in the evolution of Jupiter, Saturn, and brown dwarfs[J]. *Astrophysical Journal*, 1992, 391(2): 827-831.
- [5] Roth M, Cowan T E, Key M H, et al. Fast ignition by intense laser-accelerated proton beams[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 86(3): 436-439.
- [6] Lebedev S V, Ampleford D, Ciardi A, et al. Jet deflection via crosswinds: laboratory astrophysical studies[J]. *The Astrophysical Journal*, 2004, 616(2): 988-997.
- [7] Drake R P. High-energy-density physics[M]. Cham: Springer, 2018.
- [8] Vladimirov S V, Tyshetskiy Y O. On description of a collisionless quantum plasma[J]. *Physics-Uspekhi*, 2011, 54(12): 1243-1256.
- [9] Chen Liu. Waves and instabilities in plasmas[M]. Singapore: World Scientific, 1987.
- [10] Mangles S P D, Murphy C D, Najmudin Z, et al. Monoenergetic beams of relativistic electrons from intense laser-plasma interactions[J]. *Nature*, 2004, 431(7008): 535-538.
- [11] Nakar E. Short-hard gamma-ray bursts[J]. *Physics Reports*, 2007, 442(1/6): 166-236.
- [12] 康冬冬, 曾启昱, 张坤, 等. 激光产生温稠密物质的微观动力学过程及状态诊断[J]. *强激光与粒子束*, 2020, 32: 092006. (Kang Dongdong, Zeng Qiyu, Zhang Shen, et al. Dynamics and micro-structures in generation of warm dense matter using intense laser[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2020, 32: 092006)
- [13] Wu D, Yu W, Fritzsche S, et al. Particle-in-cell simulation method for macroscopic degenerate plasmas[J]. *Physical Review E*, 2020, 102: 033312.
- [14] Cai Hongbo, Yan Xinxin, Yao Peilin, et al. Hybrid fluid-particle modeling of shock-driven hydrodynamic instabilities in a plasma[J]. *Matter and Radiation at Extremes*, 2021, 6: 035901.
- [15] Zhang Shen, Wang Hongwei, Kang Wei, et al. Extended application of Kohn-Sham first-principles molecular dynamics method with plane wave approximation

- at high energy—From cold materials to hot dense plasmas[J]. *Physics of Plasmas*, 2016, 23: 042707.
- [16] Dai Jiayu, Hou Yong, Yuan Jianmin. Unified first principles description from warm dense matter to ideal ionized gas plasma: electron-ion collisions induced friction[J]. *Physical Review Letters*, 2010, 104: 245001.
- [17] Dai Jiayu, Kang Dongdong, Zhao Zengxiu, et al. Dynamic ionic clusters with flowing electron bubbles from warm to hot dense iron along the Hugoniot curve[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 109: 175701.
- [18] Liu Yun, Liu Xing, Zhang Shen, et al. Molecular dynamics investigation of the stopping power of warm dense hydrogen for electrons[J]. *Physical Review E*, 2021, 103: 063215.
- [19] Wigner E. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium[J]. *Physical Review*, 1932, 40(5): 749-759.
- [20] Bohm D, Gross E P. Theory of plasma oscillations. A. Origin of medium-like behavior[J]. *Physical Review*, 1949, 75(12): 1851-1864.
- [21] Pines D, Bohm D. A collective description of electron interactions: II. Collective vs individual particle aspects of the interactions[J]. *Physical Review*, 1952, 85(2): 338-353.
- [22] Bohm D, Pines D. A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas[J]. *Physical Review*, 1953, 92(3): 609-625.
- [23] Klimontovich Y L, Silin V P. O Spektrakh sistem vzaimodeistvuyushchikh chastits[J]. *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki*, 1952, 23(2): 151-160.
- [24] Lindhard J. On the properties of a gas of charged particles[J]. *Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.*, 1954, 28: 8.
- [25] Bonitz M. Quantum kinetic theory[M]. Cham: Springer, 2016.
- [26] Haas F, Manfredi G, Feix M. Multistream model for quantum plasmas[J]. *Physical Review E*, 2000, 62(2): 2763-2772.
- [27] Manfredi G, Haas F. Self-consistent fluid model for a quantum electron gas[J]. *Physical Review B*, 2001, 64: 075316.
- [28] Manfredi G. Density functional theory for collisionless plasmas—equivalence of fluid and kinetic approaches[J]. *Journal of Plasma Physics*, 2020, 86: 825860201.
- [29] Haas F. Kinetic theory derivation of exchange-correlation in quantum plasma hydrodynamics[J]. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 2019, 61: 044001.
- [30] Brodin G, Ekman R, Zamanian J. Do hydrodynamic models based on time-independent density functional theory misestimate exchange effects? Comparison with kinetic theory for electrostatic waves[J]. *Physics of Plasmas*, 2019, 26: 092113.
- [31] Liang Jionghang, Hu Tianxing, Wu D, et al. Kinetic studies of exchange-correlation effect on the collective excitations of warm dense plasmas[J]. *Physical Review E*, 2022, 105: 045206.
- [32] Son S. Two-stream instability, 378(34): 2505-2508.
- [33] Liang Jionghang, Hu Tianxing, Wu D, et al. Kinetic study of quantum two-stream instability by Wigner approach[J]. *Physical Review E*, 2021, 103: 033207.
- [34] Dornheim T, Groth S, Bonitz M. The uniform electron gas at warm dense matter conditions[J]. *Physics Reports*, 2018, 744: 1-86.
- [35] Wigner E. On the interaction of electrons in metals[J]. *Physical Review*, 1934, 46(11): 1002-1011.
- [36] van Leeuwen R. Mapping from densities to potentials in time-dependent density-functional theory[J]. *Physical Review Letters*, 1999, 82(19): 3863-3866.
- [37] Ullrich C A. Time-dependent density-functional theory: concepts and applications[M]. Oxford: Oxford University Press, 2012.
- [38] Moyal J E. Quantum mechanics as a statistical theory[J]. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1949, 45(1): 99-124.
- [39] Royer A. Wigner function as the expectation value of a parity operator[J]. *Physical Review A*, 1977, 15(2): 449-450.
- [40] Hu Tianxing, Liang Jionghang, Sheng Zhengmao, et al. Kinetic investigations of nonlinear electrostatic excitations in quantum plasmas[J]. *Physical Review E*, 2022, 105: 065203.
- [41] Xu Buxing, Rajagopal A K. Current-density-functional theory for time-dependent systems[J]. *Physical Review A*, 1985, 31(4): 2682-2684.
- [42] Dhara A K, Ghosh S K. Density-functional theory for time-dependent systems[J]. *Physical Review A*, 1987, 35(1): 442-444.
- [43] Ghosh S K, Dhara A K. Density-functional theory of many-electron systems subjected to time-dependent electric and magnetic fields[J]. *Physical Review A*, 1988, 38(3): 1149-1158.