

基于单原子近似的等离子体屏蔽模型及其在原子结构计算中的应用*

武晨晟^{1†} 过文丽¹⁾ 孙娇²⁾

1) (昆明理工大学理学院, 昆明 650500)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘 要

等离子体环境对嵌入其中的原子结构和原子参数具有显著影响, 准确描述等离子体屏蔽效应是理解天体物理和实验室高能量密度物理中物质状态与演化规律的关键。基于单原子近似的等离子体屏蔽模型因其物理图像清晰、计算量可控, 在等离子体诊断与模拟中被广泛应用。本文系统梳理了基于单原子近似的等离子体屏蔽模型及其在原子结构计算中的应用, 以简并参数 θ 和耦合参数 Γ_{ee} 为基本分类框架, 沿两条理论脉络展开综述。第一条脉络以 Thomas-Fermi (TF) 模型为起点, 涵盖从经典 Debye-Hückel (DH) 模型到考虑统计涨落的非广延修正 DH 模型、计入量子衍射效应的余弦屏蔽模型, 以及基于无轨道密度泛函理论引入梯度修正和交换-关联效应的梯度修正屏蔽模型, 展现了从理想等离子体向温稠密等离子体的理论拓展路径。第二条脉络以离子球模型为起点, 从均匀电子密度离子球模型出发, 到自洽求解电子密度空间分布的自洽离子球模型、解析离子球模型、两步 Hartree-Fock-Slater 模型, 以及纳入价带束缚-自由连续结构屏蔽模型, 体现了对强耦合等离子体中电子非均匀性和能带形成描述的逐步精细化。在此基础上, 本文介绍了本课题组发展的两类模型及其在原子结构计算中的应用: (1) 分区 DH 模型, 通过空间分区策略修正标准 DH 模型的近程缺陷, 并在类 H 至类 C 等多种等电子序列离子中建立跃迁能线移和振子强度随等离子体屏蔽强度变化的标度规律; (2) 原子态相关等离子体屏蔽模型, 通过引入能带电子贡献和非弹性散射过程对电子分布的影响, 为从弱耦合到强耦合、从非简并到强简并的宽广等离子体参数区间提供统一的屏蔽理论框架。本文的工作旨在为读者提供一条理解基于单原子近似的等离子体屏

蔽模型发展全貌的清晰线索，揭示各模型之间的内在联系与演化脉络，展示当前不同模型在原子结构及参数计算方面的应用情况，为等离子体原子结构计算中屏蔽模型的合理选择提供参考。

关键词： 等离子体屏蔽，单原子近似，离子球模型，Thomas-Fermi 模型，原子结构计算

基金： 中国工程物理研究院科学挑战项目（批准号：TZ2025013）、云南省基础研究计划（批准号：202401CF070090）、国家自然科学基金地区基金项目（批准号：12565002）、计算物理全国重点实验室资助。

† 通信作者.E-mail: 20220209@kust.edu.cn

1 引言

等离子体是物质存在的最主要形态之一，广泛存在于太阳及其他恒星的内部、行星的核心、星际介质、星云等天体物理环境^[1,2]，以及惯性约束聚变、磁约束聚变、Z 箍缩装置、激光等离子体等实验室高能量密度物理系统中^[3-8]。对于处于等离子体中的原子而言，其能级结构、电离能、跃迁速率等原子参数会因等离子体中自由电子和离子的屏蔽而发生显著改变^[9-12]。这些原子参数的变化直接影响等离子体的电荷态分布，进而对等离子体的输运、光学及动力学性质产生决定性影响^[9,13,14]。因此，准确描述等离子体屏蔽效应及其对原子结构的影响，是理解天体和实验室等离子体中物质状态与演化规律的关键科学问题，科学家们在近几十年来围绕其进行了大量理论和实验研究。

等离子体环境对原子结构的影响是一个复杂的量子多体问题，难以直接精确求解。从理论方面，人们基于对等离子体中相互作用和过程的不同程度近似，发展了两类复杂程度差异显著的理论模型。第一类为基于单原子近似的模型：将等离子体环境对目标离子的影响归结为一个有效屏蔽势，代入目标离子的原子结构计算中^[11,15-23]。这类模型物理图像清晰、计算量可控，且能细致考虑原子构型、多体关联及动态原子过程的影响，因此被广泛用于实际等离子体诊断和模拟中。第二类为基于系综理论的模型：从量子统计理论出发，以表征系统响应的介电函数及其关联的动态结构因子为核心，包括密度泛函方法^[24,25]、经典分子动力学模拟^[26,27]、量子统

计模型^[28,29]等。系综理论模型能够更为准确地抓住量子多体系统的物理本质，但由于等离子体中复杂的多体相互作用，实际使用时仍需大幅简化，且往往局限于局域热力学平衡条件，高计算成本和难以用于激发态离子的计算也限制了其应用范围。值得注意的是，量子统计理论为这两类模型提供了理论联系：基于单原子近似的 Debye-Hückel (DH) 模型可视为随机相位近似框架下的静态极限特例，从而架起了单原子模型与量子统计模型的桥梁^[28]。

在基于单原子近似的模型中，根据对等离子体中自由电子分布的不同近似处理，人们最早提出了等电子密度离子球模型以及 DH 模型这两种最简单的屏蔽模型。这两种模型计算简单、物理图像清晰，至今仍被大量用于等离子体屏蔽计算中。然而，真实等离子体的温度和密度等状态参量往往跨越多个数量级——从温度数千开尔文、密度仅数百个粒子每 cm^3 的星际介质，到温度达亿度量级、密度超过固体密度的惯性约束聚变核心，不同参数区间中等离子体的物理行为截然不同。DH 模型建立在弱耦合、电子服从玻尔兹曼分布等假设之上，通常仅适用于理想或弱耦合等离子体；而等电子密度离子球模型则只在强耦合条件下近似成立。当等离子体条件偏离这些理想化区间时，简单模型的适用性和计算精度均受到严重限制。为了克服这些局限，研究者们基于单原子近似，从 DH 模型以及更一般的 Thomas-Fermi (TF) 模型和离子球模型这两个基本物理图像出发，发展了一系列更加精细化的屏蔽模型，包括梯度修正 DH 模型^[22]、余弦屏蔽模型^[21]、自洽离子球模型^[16]、解析离子球模型^[17]、两步 Hartree-Fock-Slater (HFS) 模型^[18]，以及用于计算电离阈值下降的 Stewart-Pyatt (SP) 模型^[30]和 Ecker-Kröll (EK) 模型^[31]等。

当前真正能定量测定原子参数受等离子体屏蔽影响的实验极为有限，但这些有限的实验数据为理论模型的检验提供了不可替代的基准。值得注意的是，从这些实验结果与理论计算的对比看，最简单的 DH 模型反而能比一些更复杂的模型更好地与实验测量相符^[32-34]，这一反直觉的发现揭示了当前复杂模型在物理完备性方面仍有不足。在使用 X 射线自由电子激光 (XFEL) 技术测量温稠密等离子体中电离阈值下降的实验中，被广泛使用的 SP 模型与实验结果存在较大差异，反而是更早期的 EK 模型与实验结果较为接近^[3,6]。然而随后不同条件下的实验又发现，EK 模型

在其他等离子体条件下的计算结果同样与实验存在偏差^[7]。这些实验事实表明，不同模型在不同的等离子体参数区间各有优劣，并不存在单一的模型能在所有条件下均优于其他模型。这一认识构成了本文综述的核心动机之一：通过系统梳理各模型的理论基础和适用范围，为读者在具体等离子体条件下合理选择屏蔽模型提供参考。

本文旨在系统梳理基于单原子近似的等离子体屏蔽模型及其在原子结构计算中的应用。在阐明各类模型的物理图像和适用范围的基础上，通过文献综述和本课题组近年来的研究成果，重点讨论以下三个核心问题：（1）不同模型之间的内在联系与演化脉络；（2）各类模型的适用条件与局限性；（3）不同等离子体屏蔽模型在原子结构及光谱性质研究方面的应用情况。本文的结构安排如下：第2章介绍以简并参数和耦合参数为基础的等离子体分类方案，为后续各章讨论模型的适用范围提供统一框架。第3章介绍TF模型和离子球模型这两大基础屏蔽模型的物理内核及局限性。第4章和第5章分别从离子球模型和TF/DH模型两条脉络出发，系统回顾从简单模型向更精细模型演化的理论发展历程以及各类模型在原子结构及原子参数计算方面的应用情况。第6章和第7章聚焦本课题组近年来的研究成果，分别介绍分区DH模型揭示的原子跃迁标度规律以及原子态相关等离子体屏蔽模型。第8章为全文总结与展望。

2 等离子体的基本分类

在具体讨论各类等离子体屏蔽模型之前，有必要首先明确等离子体环境的分类体系。等离子体的温度和密度等状态参量横跨多个数量级，不同参数区间中等离子体的物理行为呈现出截然不同的特征。这种巨大的参数跨度意味着，不存在一个单一的屏蔽模型能同时适用于所有等离子体条件。在等离子体中，根据电子温度以及密度的不同，等离子体内粒子间的相互作用强度也不相同，不同类型等离子体中的原子结构与动力学行为呈现出截然不同的特征。为了系统地对等离子体进行分类，前人引入了与温度和密度相关的简并参数 θ 和耦合参数 Γ_{ee} 两个无量纲数^[35,36]。简并

参数 Θ 被定义为体系电子热动能与体系费米能级 $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_0)^{2/3}$ 的比值，通过这个比值来确定量子统计效应在系统中影响的大小

$$\Theta = \frac{k_b T_e}{\epsilon_F}, \quad (1)$$

式中， $\hbar$ 为约化普朗克常数， m_e 为电子质量， k_b 为玻尔兹曼常数， T_e 为电子温度， n_0 为等离子体电子密度。耦合参数 Γ_{ee} 则定义为等离子体中两电子处于平均间距时的库伦势与热动能的比值，通过该比值来确定电子间相互作用的强弱。

$$\Gamma_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \bar{d} k_b T_e}, \quad (2)$$

式中 $\bar{d} = (4\pi n_0/3)^{-1/3}$ 为电子的 Wigner-Seitz 半径，用以衡量等离子体内电子间的平均距离， e 为单位电荷， ϵ_0 为真空介电常数。

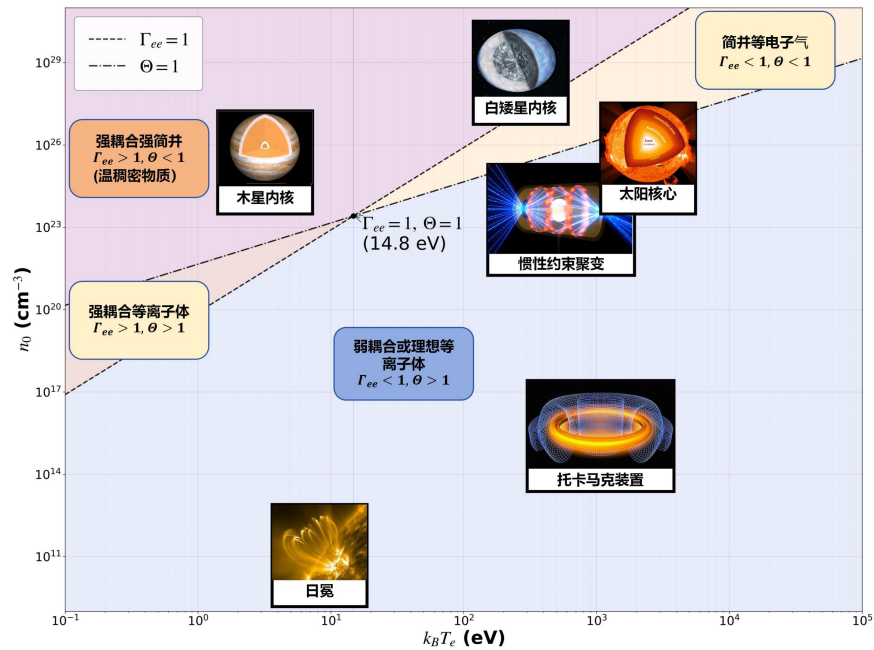


图 1 等离子体根据简并和耦合参数的分类以及自然界和实验室所产生等离子体所属参数范围。

Fig. 1 Classification of plasmas according to degeneracy and coupling parameters, and the parameter ranges of plasmas generated in nature and in the laboratory.

如图 1 所示，根据两个参数，等离子体可简单分为理想/弱耦合等离子体、简并等离子体、强耦合强简并等离子体、强耦合非简并等离子体^[36,37]。（1）对于理想/弱耦合等离子体而言， $\Gamma_{ee} < 1$ ， $\Theta > 1$ ，在这一区域，离子间平均库仑势能远小于热动能，同时温度高于费米能级，量子简并效应可忽略。电子可近似使用玻尔兹曼分布描述，等离子体静态屏蔽效应可使用 DH 模型描述，典型实例包括日冕、托卡马克等离子体等。（2）简并等离子体， $\Gamma_{ee} < 1$ ， $\Theta < 1$ ，电子费米能超过热动能，量子简并效应主导，但电子—电子关联仍较弱，可用 TF 模型描述，代表体系为金属自由电子气和白矮星内部。（3）强耦合强简并等离子体， $\Gamma_{ee} > 1$ ， $\Theta < 1$ ，即温热稠密物质区域，同时存在强库仑耦合和强量子简并效应，是理论描述最为复杂的区域。惯性约束聚变靶丸内爆核心及巨行星内部等属于此区域。（4）强耦合非简并等离子体， $\Gamma_{ee} > 1$ ， $\Theta > 1$ ，在这一区间，库仑相互作用能远超热动能，电子间形成强关联，但电子未简并，常见于超冷中性等离子体，需借助分子动力学或超网链方法来进行处理。

基于简并参数 Θ 和耦合参数 Γ_{ee} 的等离子体分类方案为描述等离子体状态提供了一套系统化的语言，也成为后续各章讨论模型适用范围的基本框架。从理想等离子体到强耦合强简并等离子体，每一个类等离子体对应着不同的主导物理过程，因而需要不同的理论模型加以描述。

3 基础屏蔽模型：Thomas-Fermi 模型与离子球模型

纵观现有基于单原子近似的等离子体屏蔽模型，它们大致可分为两个家族，分别源自两种不同的基本物理图像：一类以 Thomas-Fermi (TF) 模型为基础，另一类以离子球模型为基础。尽管这两种模型在数学形式和物理假设上存在显著差异，但它们共同奠定了后续绝大部分基于单原子近似的等离子体屏蔽模型的理论基础。两种模型各自在不同的等离子体参数区间为等离子体屏蔽提供了最低阶的物理描述。

3.1 Thomas-Fermi 模型及线性 TF 模型

Thomas-Fermi (TF) 模型是各类基于单原子近似的等离子体屏蔽模型的基础之一^[38,39]。在 TF 模型中，等离子体中的正电荷被看作一个均匀连续分布的正电荷背景，而等离子体中的自由电子同样被看作一个与正电荷背景重合的均匀连续分布负电荷背景，等离子体整体保持电中性。此时，在等离子体中放入电荷量为 Q 的目标离子，等离子体中的自由电子由于目标离子库伦势的扰动，其分布在空间上将向目标离子周围聚集，这反过来会对目标离子的库仑势产生屏蔽，设目标离子在受到自由电子屏蔽后的屏蔽势为 $\phi(\mathbf{r})$ ，这一屏蔽势应满足泊松方程(如无特殊说明，以下论文采用原子单位制，即 $e=m_e=\hbar=4\pi\epsilon_0=1$)

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r})=-4\pi[Q\delta(\mathbf{r})-\delta n(\mathbf{r})], (3)$$

式中， $\delta n(\mathbf{r})=[n(\mathbf{r})-n_0]$ 为由于目标离子存在造成的目标离子周围空间净余电荷的波动。 n_0 为空间中的正电荷密度，对于等离子体中的正电荷而言，由于原子核质量较大，受目标离子库伦势扰动较小，因此仍可近似看作保持均匀分布。由于等离子体的电中性条件， n_0 也是体系的平均自由电子密度。 $n(\mathbf{r})$ 为受到扰动的等离子体中自由电子数密度分布。在(3)式中，目标离子本身的束缚电子被简化为紧密束缚在离子周围，其在空间分布对屏蔽势的贡献被忽略。如果需要在模型中考虑目标离子本身束缚电子的贡献，可在(3)式中将目标离子的贡献 $Q\delta(\mathbf{r})$ 写作目标离子原子核以及束缚电子两部分的贡献之和，即 $Q\delta(\mathbf{r})\rightarrow Z\delta(\mathbf{r})-n_b(\mathbf{r})$ 。式中 $n_b(\mathbf{r})$ 即为束缚电子密度，可通过将屏蔽势加入薛定谔方程或狄拉克方程，利用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 等求解方法，求解得到不同轨道束缚电子波函数，再考虑上各轨道填充数后求和得到 $n_b(\mathbf{r})=\sum_{i=1}^N N_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2$ ，式中 N_i 为第 i 条轨道的束缚电子填充数，而 $\psi_i(\mathbf{r})$ 则为该轨道的束缚电子波函数。

理论上讲，求解此时自由电子在空间中的数密度分布 $n(\mathbf{r})$ 需要求解基于有效屏蔽势 $\phi(\mathbf{r})$ 的薛定谔方程，给出特定能量自由电子的波函数，再结合自由电子的能量分布通过积分给出，但当有效屏蔽势 $\phi(\mathbf{r})$ 在空间中是缓变的，且系统也达到了热力

学平衡的情况下，可忽略电子波动性的影响，近似用经典的 Fermi-Dirac 分布直接给出体系中自由电子在空间上的数密度分布

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f_{FD}(\varepsilon, \mathbf{r}) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon, \quad (4)$$

式中， $f_{FD}(\varepsilon, \mathbf{r}) = 1 / \{ \exp[(\varepsilon + \phi(\mathbf{r}) - \mu) / k_b T_e] + 1 \}$ 为费米分布函数， μ 为体系化学势，可由平均自由电子密度 n_0 及 Fermi-Dirac 分布给出

$$n_0 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{(\varepsilon - \mu) / k_b T_e} + 1} d\varepsilon, \quad (5)$$

(4) 式为对电子动能 ε 积分，在经典的 TF 模型中，认为总能量 $E = \varepsilon + \phi(\mathbf{r}) > 0$ 的电子为自由电子，因此自由电子的动能下限为 $\varepsilon_0 = -\phi(\mathbf{r})$ 。可以发现 $n(\mathbf{r})$ 与 $\phi(\mathbf{r})$ 是通过 (3) 和 (4) 两式互相耦合在一起的，难以解析求解，通常只能通过自洽场方法进行近似求解。

由 (4) 式可以发现， $n(\mathbf{r})$ 只是 $\phi(\mathbf{r}) - \mu$ 的函数，即 $n(\mathbf{r}) = n[\phi(\mathbf{r}) - \mu]$ ，如果有效屏蔽势 $\phi(\mathbf{r})$ 足够弱，则可以尝试将 $n(\mathbf{r})$ 在 $\phi = 0$ 附近进行泰勒展开并只保留线性项，即

$$n(\mathbf{r}) \approx n_0 - \frac{\partial n}{\partial \mu} \phi, \quad (6)$$

由此 $\delta n(\mathbf{r}) \approx -\frac{\partial n}{\partial \mu} \phi$ 。将 $\delta n(\mathbf{r})$ 代入 (3) 式，在球对称 ($\mathbf{r} \rightarrow r$) 的近似下，结合有效屏蔽势 $\phi(\mathbf{r})$ 应满足的边界条件，即在 $r \rightarrow 0$ 时，屏蔽势应由目标离子库伦势主导，即 $\phi(\mathbf{r}) \rightarrow -\frac{Q}{r}$ ，而在 $r \rightarrow \infty$ 时，屏蔽势应趋于 0，由此泊松方程将具有 Yukawa 势形式的解析解，即

$$\phi_{TF}(r) = -\frac{Q}{r} e^{-r/\lambda_{TF}}, \quad (7)$$

即在库仑势的基础上额外包含了一个指数衰减项，其中 λ_{TF} 为 TF 模型屏蔽长度，满足 $(\lambda_{TF})^{-2} = \frac{e^2}{\varepsilon_0} \frac{\partial n}{\partial \mu}$ ，可用于描述等离子体屏蔽强度， λ_{TF} 越小则等离子体屏蔽越强，(7) 式即为线性 TF 屏蔽模型的解析形式的屏蔽势。

在有限温的情况下， λ_{TF} 具有形式^[35]

$$(\lambda_{TF})^{-2} = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 k_b T_e} \frac{F_{-1/2}(\eta_e)}{F_{1/2}(\eta_e)}, \quad (8)$$

式中 $\eta_e = \mu / k_b T_e$ 为约化化学势，而 $F_\nu(y)$ 为费米积分，具有形式

$$F_\nu(y) = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \int_0^\infty \frac{x^\nu dx}{e^{x-y} + 1}, \quad (9)$$

式中 $\Gamma(\nu)$ 为 Gamma 函数。当简并参数 $\Theta < 1$ 时，等离子体电子大部分处于费米面以内，体系量子效应显著，此时屏蔽长度 λ_{TF} 可进一步简化为

$$(\lambda_{TF})^{-2} = \frac{m_e e^2}{\pi \epsilon_0 \hbar^2} \left(\frac{3n_0}{\pi} \right)^{1/3}, \quad (10)$$

即在简并等离子体中，等离子体屏蔽强度近似与温度无关。

TF 模型作为基于单原子近似的等离子体屏蔽模型的基础之一，可用于从理想等离子体到简并等离子体的宽等离子体参数区间。但 TF 模型也有其局限性，首先，TF 模型仍然是一个基于平衡态分布的准静态模型，因此，只有当离子内电子运动的时间尺度远离等离子体振荡的频率范围 $f_p = 8.977 \times 10^3 n_0^{1/2}$ ，且所研究原子过程的时间尺度亦远离等离子体的振荡频率范围时，准静态近似才是成立的，这就对 TF 模型在时间尺度上的适用范围给出了限定。其次，TF 模型本身是一个基于平均场近似的半经典统计模型，它忽略了电子间交换—关联效应、电子的波动性带来的电子密度振荡以及进一步带来的量子干涉效应，同时也要求在以 TF 屏蔽长度 λ_{TF} 为半径的球体以内，电子数必须足够多，使得统计涨落的影响可被忽略，且等离子体应趋于热力学平衡状态，此时等离子体电子的分布可近似用 Fermi-Dirac 分布描述。再次，TF 模型中认为有效屏蔽势 $\phi(\mathbf{r})$ 在空间中是缓变的，因此也没有考虑由于空间电子密度非均匀性带来的梯度修正影响。因此，传统 TF 模型在描述强耦合等离子体等电子波动性以及电子间交换—关联效应影响较大的体系时将产生较大误差。

与传统 TF 模型相比，线性 TF 模型的有效性还额外依赖于 (6) 式中对电子数密度的线性展开，即电子的有效屏蔽势能 $\phi(r)$ 足够弱，远小于电子的特征能量标度。在简并区 $\Theta < 1$ 时，这要求 $\phi(r) \ll \epsilon_F$ ；而在非简并区 $\Theta > 1$ ，则退化为经典的 DH 模型成立的条件 $\phi(r) \ll k_b T_e$ 。但由于模型的数学形式简洁且能直接解析求解，计算

量较小，线性 TF 模型在理解等离子体屏蔽现象和作为更复杂理论的零阶近似方面仍然具有重要地位，在当前也仍然被大量用于对计算量要求较为敏感的大规模等离子体模拟。

3.2 离子球模型及等电子密度离子球模型

离子球模型可被认为是基于单原子近似的等离子体屏蔽模型的另一个起点。在离子球模型中，等离子体被划分为许多个非重叠的离子球，每个离子球由中心一个带正电荷的离子实以及周围一定份额的电子分布共同构成，在离子球以内正负电荷数相等，使得整个离子球保持电中性条件^[16]。基于以上这些基本假设，可以列出离子球模型屏蔽势及电子密度所满足的方程。此时离子球模型与 TF 模型所满足方程是相似的，只是屏蔽势所满足的泊松方程变为

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r})=-4\pi[Q\delta(\mathbf{r})-n(\mathbf{r})], (11)$$

式子右边第二项不再是由于目标离子存在引起的电子密度波动 $\delta n(\mathbf{r})$ ，而直接是电子密度 $n(\mathbf{r})$ 。同时，离子球对屏蔽势以及电子密度在空间中的范围存在限制，即两者都被限制在 $r \leq R_0$ 范围内，其中 R_0 即为离子球半径。由于整个离子球需要保证电中性条件，因此要求

$$\int_0^{R_0} n(\mathbf{r})d\mathbf{r}=Q, (12)$$

即整个离子球以内自由电子的总电荷量应与中心离子的电荷量相等。而电子密度 $n(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ 则仍由(4)式的 Fermi-Dirac 分布给出。可以发现，(11)、(12)与(4)式同样是互相耦合的，无法解析求解，而只能通过自洽场方法给出数值解。此时(4)式中的化学势 μ 不再可由自由电子密度，即(5)式直接给出，而是同样需要自洽求解得到。

在离子球模型中，离子球半径 R_0 是十分重要的一个参数，直接影响最终的自洽计算结果。对于单质等离子体而言， R_0 较为容易确定，单个离子球的大小可直接由离子的 Wigner-Seitz 半径决定，即 $R_0=(4\pi n_i/3)^{-1/3}$ 决定，式中 n_i 为等离子体中的离子密度。但对于非单质等离子体而言，不同离子的离子球半径确定起来就要更为复杂一些。例如对于非完全电离等离子体而言，往往多个离化度的离子共同存在，此时

对于不同离化度的离子采用相同的 Wigner-Seitz 半径作为 R_0 近似程度就过高了。袁建民于 2002 年提出，可选择化学势作为突破口，对于一个处于稳态的等离子体而言，应该整体具有统一的化学势 μ ^[40]。因此可通过自洽场方法分别求解不同离化度离子，并在自洽计算过程中逐步调节不同离化度离子的离子球半径 R_0 ，以期在最终自洽计算完成时不同离化度离子具有相同的化学势 μ ，并确定不同离化度离子的离子球半径 R_0 。

(11)式中的泊松方程与 TF 模型一样，目标离子本身的束缚电子被近似为紧密束缚在了目标离子周围，其空间分布对屏蔽势的贡献被忽略，而如果考虑这部分电子的空间分布对屏蔽势的贡献，同样可将目标离子的贡献 $Q\delta(\mathbf{r})$ 详细写作目标离子原子核以及束缚电子两部分的贡献之和，即 $Q\delta(\mathbf{r}) \rightarrow Z\delta(\mathbf{r}) - n_b(\mathbf{r})$ 。

类似于 TF 模型，离子球模型中，由于(11)、(12)与(4)式是互相耦合的，往往只能采取自洽场方法进行数值求解。但当自由电子平均动能远大于电子—离子间的库伦势时，可认为电子受离子库伦势的影响较小，自由电子在等离子体中趋于均匀分布，即 $n(\mathbf{r}) \rightarrow n_0$ ，代入(11)式泊松方程，结合屏蔽势在 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{0}$ 和 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_0$ 处的边界条件，可以给出一个解析形式的有效屏蔽势形式^[17]

$$\phi_{UEGM}(\mathbf{r}) = - \left[\frac{Z}{r} - \frac{(Z - N_b)}{2R_0} \left(3 - \frac{r^2}{R_0^2} \right) \right], \quad (13)$$

式中 N_b 为离子球以内束缚电子数。式中第一项为离子球中心原子核的库仑势的贡献，而第二部分则为在离子球以内均匀分布的自由电子所产生的屏蔽势，其中 N_b 为束缚电子数。等电子密度离子球模型可认为是普通离子球模型在等离子体电子温度 $k_b T_e \rightarrow \infty$ 时的一种极限情况，由于具有解析形式，可很方便地代入后续的原子结构和原子参数计算，因此被广泛用于对于强耦合等离子体的定性分析，或作为自洽求解离子球模型的屏蔽势起点。

离子球模型的核心假设在于可将等离子体划分为一系列互不重叠且内部保持电中性的离子球，并分别对不同离子球进行求解给出离子球以内的屏蔽势。这一假设通常要求等离子体处于强耦合状态，即 $\Gamma_{ee} \gg 1$ ，此时等离子体中电子间的相互作用势

能远远强于电子自身的热动能，此时等离子体表现出类似于固体或液体的强关联特征，粒子间存在短程序，为划分独立的离子球奠定了物理基础。而在弱耦合等离子体中，电子热动能远大于电子间相互作用势，系统处于类理想气体状态。在该条件下，带电粒子的屏蔽效应本质上是一种动态、长程、多体的集体行为，此时刚性的离子球模型中，球内屏蔽势只由球内电子所提供的物理图像就与实际情况不符。因此，离子球模型在弱耦合等离子体中的适用性可能就存在疑问。

总的来说，TF 模型和离子球模型构成了基于单原子近似的等离子体屏蔽理论的两大支柱。TF 模型的线性化形式给出了以单一屏蔽长度为特征的 Yukawa 型势，通过引入屏蔽长度 λ_{TF} 描述等离子体屏蔽效应。TF 模型可覆盖了从非简并到简并等离子体的宽广区间。然而，TF 模型忽略了电子密度空间非均匀性带来的梯度修正、电子间的交换—关联效应以及近邻离子的离散性带来的影响，在强耦合条件下可靠性可能存在疑问。离子球模型通过引入有限空间边界条件提取到了强耦合等离子体的基本特征，但在弱耦合条件下，离子球模型的物理图像就与等离子体实际存在较大差异了，而计算简单的均匀密度离子球模型更是仅在强耦合且高温极限下严格成立。这些局限性催生了从两种基础模型出发的一系列更精细的理论发展。

4 从离子球模型衍生的屏蔽模型

在最简单的平均密度离子球模型基础之上，研究者们发展了一系列精细化的屏蔽模型，在保留离子球核心思想的同时，不断纳入更为真实的物理效应。这一演进脉络呈现出清晰的层次结构：从最简单的均匀电子密度离子球模型出发，到自洽求解电子密度空间分布的自洽离子球模型，再到用波函数的模方与分布函数结合取代半经典统计分布的两步 Hartree-Fock-Slater 模型，以及考虑价带束缚态—自由态连续过渡的价带束缚—自由连续结构屏蔽模型。这些新的模型抓住了最简单的均匀密度离子球模型所忽略的关键物理过程，如电子密度的空间非均匀性、电子的波动性、能带结构的形成以及束缚—自由电子的连续过渡。

4.1 自洽离子球模型

直接自洽求解(4)、(11)、(12)式来得到等离子体电子密度及有效屏蔽势即为自洽离子球模型。自洽离子球模型由于物理图像较为简单，计算量适中，当前仍被大

量用于原子结构及原子过程计算。例如早在 1972 年, [B. F. Rozsnyai](#) 即利用自洽离子球模型, 计算了 Fe 和 Rb 在不同温度、密度下的能级和状态方程。并提出一个重要结论, 即在高密度等离子体中, 离子的上层能级将展宽为能带, 而利用在离子球边界处波函数取不同边界条件 (即波函数在边界处为 0 或在边界处导数为 0), 即可对能带顶和能带底位置进行估计。电子压力、熵等热力学量可通过自洽计算获得^[16]。

[Li Yongqiang](#) 等人于 2008 年利用自洽离子球模型计算了 Fe 到 Kr 的类 Be 离子在热稠密等离子体中的能级移动和振子强度变化。该工作发现对于类 Be 离子的同壳层跃迁而言($2s \rightarrow 2p$ 跃迁), 跃迁能量受等离子体屏蔽影响发生蓝移, 跃迁线移随电子密度增大而增大, 而随温度升高而减小。且自由电子空间分布的非均匀性对计算结果影响显著^[41]。

[李向富](#) 等人于 2017 年利用自洽离子球模型和均匀密度离子球模型计算了类 He 的 Al 离子非同壳层跃迁 $1s^2 \rightarrow 1snp$ ($n=2-4$) 跃迁的跃迁能、跃迁概率以及约化振子强度。发现同壳层跃迁的跃迁能量、线强度、跃迁概率和振子强度均随自由电子密度增加而快速减小, 随电子温度升高而轻微增加并趋近平均密度离子球模型, 该工作认为自洽离子球模型由于考虑了自由电子空间分布的非均匀性, 更适合描述实际等离子体中的屏蔽效应^[42]。随后, 该课题组又在 2018 年利用自洽离子球模型, 提出了一种估计类 H 或类 He 离子中谱线消失的临界温度密度的方法^[43]。

[陈展斌](#) 等人利用自洽离子球模型于 2019 年计算了 Cl^{15+} 离子在温热稠密等离子体中 $1s3p \rightarrow 1s^2$ 跃迁 ($He\beta$ 线) 的跃迁能变化情况, 并与 Beiersdorfer 等人的实验以及 Li-Rosmej 解析模型进行了比较。计算发现自洽离子球模型的计算结果在实验等离子体条件下与实验测量结果相符, 而均匀电子密度离子球模型计算结果与实验结果差异较大^[44]。随后, 该课题组又继续使用自洽离子球模型计算了 Al^{11+} 离子 $1s2p \rightarrow 1s^2$ 跃迁 ($He\alpha$ 线) 的跃迁能变化, 并与 Stillman 等人的实验结果进行了比较。但在 Al^{11+} 离子中, 自洽离子球模型的计算结果与实验结果差异很大^[45]。

曾交龙等人于 2020 年将自洽离子球模型应用到了温热稠密 Si 等离子体的电离阈值下降 (IPD) 计算中。在 Si 离子的 IPD 计算中, 自洽离子球模型的计算结果与实验结果在低离化度离子中吻合很好, 而在更高离化度下则会显著偏离实验结果。同时发现, 在太阳内部条件下, 不同离化度离子的 IPD 计算结果随离化度线性增加^[14]。随后, 该课题组又于同年及 2022 年分别计算了温稠密 C 及 Fe 等离子体中不同离化度离子的能级移动以及电离阈值下降, 并与经典的 DH、等电子密度离子球、SP 以及 EK 等模型计算结果进行了比较^[46,47]。此后, 该课题组还于 2025 年采用自洽离子球模型研究了稠密等离子体中不同电荷态 Fe 离子的 K 壳层和 2p 空穴态的俄歇衰变过程, 计算了俄歇电子动能和衰变率, 并与无等离子体屏蔽的情况进行了比较^[48]。

4.2 解析离子球模型

基于自洽离子球模型, 李向东与 F. B. Rosmej 合作在 2019 年发展了一套具有解析形式的离子球模型^[17]。该模型从等电子密度离子球出发, 推导出在等电子密度离子球模型中, 位于半径 r 范围内的自由电子数为 $P_f(r)=N_f(r^3/R_0^3)$, 式中, $N_f=(4\pi R_0^3/3)n_0$ 为离子球内总的自由电子数。据此, 作者假设在自洽离子球模型中, $P_f(r)$ 具有满足边界条件 $P_f(0)=0$ 和 $P_f(R_0)=N_f$ 的类似形式 $P_f(r)=N_f(r^x/R_0^x)$, 其中 x 为一个与等离子体状态相关的参数。据此, 得到解析形式的等离子体屏蔽势, 形式为

$$\phi_{scr}(r)=-\frac{Z}{r}+\frac{N_f}{R}\left[1+\frac{1}{x-1}-\frac{1}{x-1}\left(\frac{r}{R_0}\right)^{x-1}\right] \quad (r \leq R_0). \quad (14)$$

通过对自洽离子球模型的计算结果进行拟合, 得到参数 $x=3-(b/\pi)\sqrt{N_f/R_0T_e}$, 其中 $b \approx 2$ 对应于自由电子处于玻尔兹曼分布。这一解析的屏蔽势能所得到的自由电子空间分布可与直接基于自洽离子球模型的计算结果很好吻合。该解析模型在实验条件下 Cl^{15+} 离子 $\text{He}\beta$ 线的跃迁能量变化计算中取得了与实验相一致的结果, 而通过取 $b=4$, 也可在实验条件下 Al^{11+} 离子 $\text{He}\alpha$ 线的跃迁能量变化计算中取得与实验一致的结果^[34]。如图 2 所示, 利用解析离子球及自洽离子球模型计算的 Cl^{15+} $\text{He}\beta$ 线及 Al^{11+} $\text{He}\alpha$ 线线移结果与实验结果进行了比较。如图所示, 在 Cl^{15+} $\text{He}\beta$ 线的计算中, 解析离子球模型与自洽离子球模型都能够很好地与实验结果相符, 但到

$\text{Al}^{11+} \text{He}\alpha$ 线的计算时，自洽离子球模型与取 $b=2$ 的解析离子球模型计算结果均显著小于实验结果，只有当 $b=4$ 时解析离子球模型与实验结果相符。较大的 b 取值可能来源于实验中可能仍然存在的晶格结构的影响^[34]。注意图中两组自洽离子球模型的计算结果分别来自李向东与 Rosmej 合作完成的工作^[34]以及陈展斌的工作^[44,45]。两个模型在准备屏蔽势 $\phi(r)$ 时方案存在差异，在陈展斌的工作中，是先利用自洽离子球模型计算得到当前等离子体条件下平均原子的屏蔽势，再将屏蔽势代入处于特定离化态特定能级的离子，利用 MCDF 方法计算能级能量，然后进行线移计算。而李和 Rosmej 的工作则是直接利用自洽离子球模型计算处于特定离化态特定组态的离子所对应的屏蔽势，然后将屏蔽势代入处于特定能级的离子利用 MCDF 方法计算能级能量，然后计算线移。如图所示，可发现两组计算结果存在细微差异。

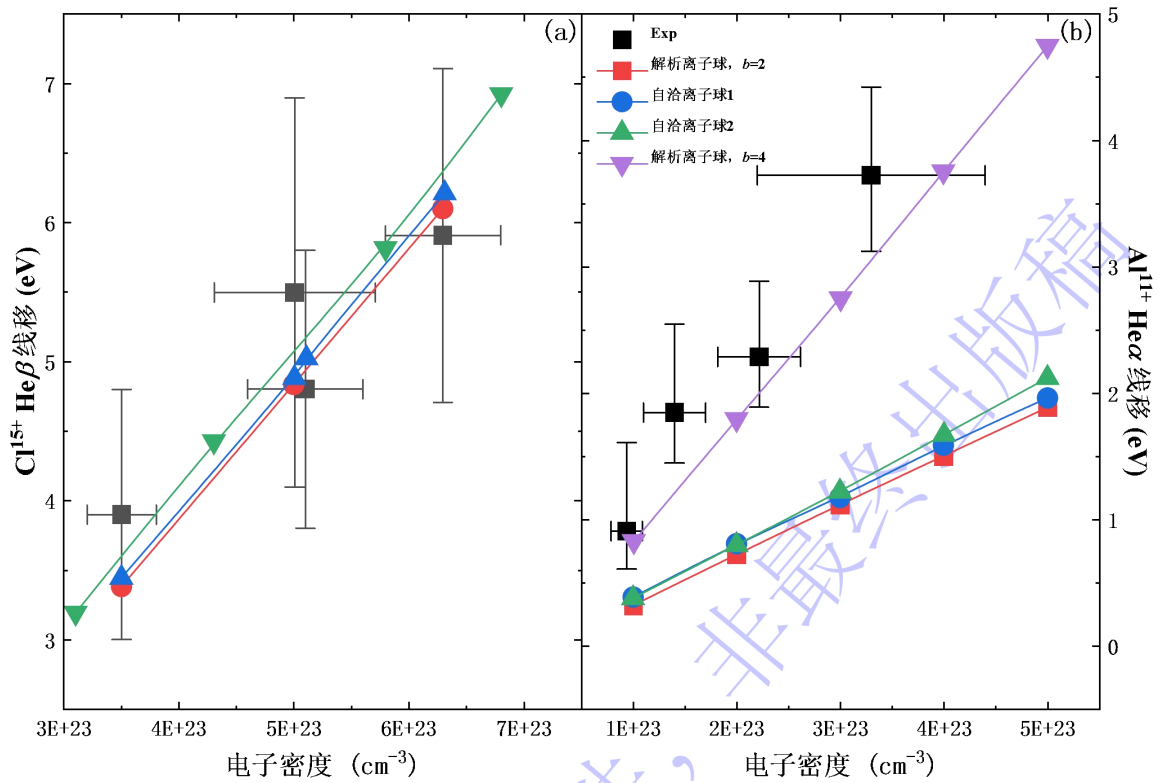


图 2 利用解析离子球模型及自洽离子球模型计算 $\text{Cl}^{15+} \text{He}\beta$ 线及 $\text{Al}^{11+} \text{He}\alpha$ 线线移，并与实验结果进行对比。其中自洽离子球 1 结果来自文献^[34]，而自洽离子球 2 结果来自文献^[44,45]。在 $\text{Al}^{11+} \text{He}\alpha$ 线的计算中，解析离子球取了 $b=2$ 和 $b=4$ 两种情况， Al^{11+} 的计算取温度 $k_b T_e = 250 \text{ eV}$ ， Cl^{15+} 的计算取温度 $k_b T_e = 600 \text{ eV}$ 。

Fig. 2 Comparison of the line shifts of the Cl^{15+} He β line and the Al^{11+} He α line calculated using the analytical ion sphere model and the self-consistent ion sphere model with experimental results. The results of self-consistent ion sphere 1 are from Ref. [34], while those of self-consistent ion sphere 2 are from Ref. [44,45]. In the calculations of the Al^{11+} He α line, the analytical ion sphere model adopts two cases with $b=2$ and $b=4$. The temperatures used in the calculation is $k_b T_e=250$ eV for the Al^{11+} , and $k_b T_e=600$ eV for the Cl^{15+} .

由于具有解析的形式，可极大降低获得等离子体屏蔽势的计算量，且计算结果与自洽离子球模型很接近，因此解析离子球模型也被大量用于稠密等离子体中的原子参数计算。例如，陈展斌等人 2021 年利用解析离子球模型与 MCDF 方法结合，计算了 Ni^{21+} 离子在稠密等离子体中的谱线移动和辐射跃迁等性质^[49]。2022 年，该课题组又利用解析离子球模型研究了有限温度稠密等离子体环境中类 H 的 Mg^{11+} 和 Ni^{27+} 离子的能级、跃迁能、谱线移动和光电离截面。结果表明等离子体屏蔽会抑制电离，从而使光电离截面在电离阈值附近增大，且对于给定电子温度，截面随电子密度增加而增大，对于给定电子密度，截面随温度升高而减小^[50]。同年，该课题组又利用解析离子球模型研究了固体密度 Si 等离子体中电子碰撞激发截面和荧光偏振性。结果表明，等离子体密度显著影响原子结构和碰撞截面，但对辐射的线性偏振特性影响很小^[51]。

[A. K. Singh](#) 等人利用解析离子球模型和等电子密度离子球模型计算了类 He 的 Cl^{15+} 、 Ar^{16+} 、 Ti^{20+} 、 Fe^{24+} 等离子的线位移和辐射跃迁性质，发现这些跃迁的跃迁能量相对于自由电子密度是红移的，且红移随电子密度增加而增大，随核电荷增加而减小，而跃迁概率则随电子密度增加有轻微下降^[52]。2024 年，Rosmej 及其合作者将解析离子球模型与 MCDF 方法结合，研究了稠密等离子体中单 K 壳层空穴和双 K 壳层空穴等电子序列中不同离子电离阈值下降^[53]。

4.3 两步 Hartree-Fock-Slater 模型

2014 年，[Sang-Kil Son](#) 等人基于自洽离子球模型，提出了一种两步 Hartree-Fock-Slater (HFS) 模型^[18]。在第一步计算中，与自洽离子球模型相似，该模型同样自洽求解电中性条件，屏蔽势 $\phi_{scr}(r)$ 以及电子密度 $n(r)$ 。但与传统的离子球模型不同，在两步法模型中，束缚电子和自由电子在处理时不再进行区分，同时电子也不再用

半经典的 Thomas-Fermi 分布函数描述其密度分布，而是根据自洽得到的屏蔽势直接求解平均原子下的束缚和自由电子波函数，使用波函数的模方来给出特定态轨道电子的空间分布，而总的电子密度分布由分布函数及特定轨道电子的空间分布组合得到

$$n(r)=\sum_P |\psi_P(r)|^2 \frac{1}{e^{(E_P-\mu)/k_b T_e}+1}, (15)$$

式中，编号 P 为特定轨道电子，包括束缚电子和自由电子， E_P 则为该轨道的轨道能。通过这一方案，所有电子使用统一方案处理，且电子波动性对电子密度空间分布的影响也被考虑了进来（由于在该工作中，所有电子均在 100 a.u. 处取相同边界条件给出，因此即使是自由电子也被近似为处于一系列分立轨道上，故自由电子也采用求和）。为在离子球以外求解波函数，屏蔽势在离子球以外采取 Muffin-tin 形式平势，即 $\phi_{scr}(r>R_0)=\phi_{scr}(R_0)$ 。如图 3 所示，在计算中，模型明确区分了“内电离”（电子跃迁至总能量 $0>E>\phi_{scr}(R_0)$ 的能带上）与“外电离”（电子跃迁至 $E>0$ 的状态上）。取离子球边界处的有效势 $\phi_{scr}(R_0)$ 作为“内电离”限，然后取总能量 $E<\phi_{scr}(R_0)$ 的电子为束缚态电子，而取 $E>\phi_{scr}(R_0)$ 的电子为连续态电子。

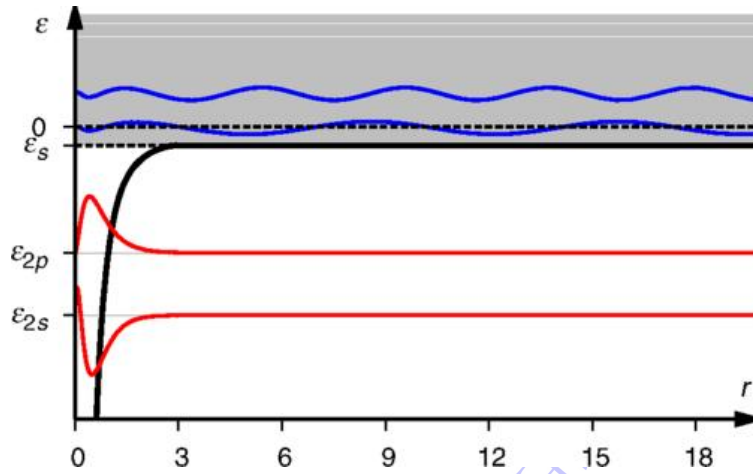


图 3 两步法模型中束缚能区、“内电离”区、连续能区示意以及各区波函数示意图，图中 ϵ_s 即为内电离限 $\phi_{scr}(R_0)$ （引自 Son 等论文“Quantum-Mechanical Calculation of Ionization-Potential Lowering in Dense Plasmas”, Phys. Rev. X 4, 031004 (2014), doi: 10.1103/PhysRevX.4.031004; 根据 Creative Commons Attribution 3.0 许可协议使用）。

Fig. 3 Schematic diagram of the bound energy region, the “inner ionization” region, and the continuum energy region in the two-step model, along with the wavefunctions in each region. In the figure, ϵ_s is the inner ionization limit $\phi_{scr}(R_0)$ (from Son et al., “Quantum-Mechanical

在第二步计算中固定第一步获得的自由电子密度，并结合一个确定的离子组态给出的束缚电子布居情况，再次自洽计算得到确定离子组态下的束缚电子波函数以及本征能量，并基于本征能量计算了特定离子组态下的 $1s$ 电子的电离能 E_K 以及 $2p \rightarrow 1s$ 跃迁 ($K\alpha$ 线) 的跃迁能。在电离能 E_K 的计算中，提出电子被激发到 $E > \phi_{scr}(R_0)$ 的状态上即可被认为已经电离，由此， $1s$ 电子的电离能可表示为 $E_K = E_{1s} - \phi_{scr}(R_0)$ 。作者将该模型用于计算固体密度 Al 等离子体的 IPD，计算与实验结果相符。

在温热稠密等离子体中，由于等离子体电子的屏蔽效应以及周围离子的库伦势影响，目标离子的外层轨道将展宽为能带。由于能带中电子能量分布连续，尽管这些布居在能带中的电子 $E < 0$ ，其对等离子体屏蔽的贡献不再像普通处于分立轨道的束缚电子那样，可以通过分立的光谱项来进行区分，而是与自由电子类似，变得不可区分，因此其对等离子体屏蔽的贡献也与自由电子类似，应通过整体的等离子体屏蔽势考虑进来。相比传统的自洽离子球模型或是 TF 模型，在两步法模型中，能带电子的贡献被通过“内电离”的概念引入：通过将总能量 $0 > E > \phi_{scr}(R_0)$ 这部分电子考虑进自由电子的方式，能带电子对等离子体屏蔽的贡献被考虑了进来^[18]。能带电子的引入相比传统的自洽离子球模型是很重要的一步。

在之后，[Bekx](#) 等人在两步法模型基础上，进一步将有限温度下两步法模型的计算框架与 Bloch 理论相结合，采用平面波与局域原子轨道的混合基组描述周期性晶格中的电子态，首次实现了对 X 射线激发固体中热电子—冷离子晶格体系的能带结构计算，展示了随温度升高能带降低、带宽减小并形成准原子能级的演化规律。同时，通过核心轨道的自洽优化，改进方法成功复现了 LCLS 实验中测量得到的 Al 的 K 壳层阈值能量和 IPD 数据^[54]。

4.4 价带束缚—自由连续结构屏蔽模型

除 Son 的工作外，在 2025 年，李向东和 Rosmej 又基于自洽离子球模型和 MC DF 方法计算，发展了一种基于价带束缚—自由连续（Valence Band – Bound Free Continuum, VB-BFC）结构的等离子体屏蔽模型^[19]。该模型同样尝试将能带电子对等离子体屏蔽的贡献考虑进来。该模型的物理图像是：在近固体密度等离子体中，由于等离子体屏蔽效应，离子中外层轨道电子从束缚态向自由态过渡，能量分布呈准连续状，其低能端仍保留明确的束缚态特性，高能端则延伸至导带成为自由态。因此，处于这些能带中的电子本质上是束缚态与自由态的混合（bound-free mixture），电子从内壳层跃迁到能带上，既可以进入束缚态（对应激发过程），也可以进入自由态（对应电离过程）。该模型系统区分了激发通道与电离通道，指出实验观测的 K 边能量可能实际对应 $1s \rightarrow 3p$ 激发能而非 $1s$ 电离能。在 Al、Mg、Si 及化合物 SiO₂ 的固体密度等离子体电离阈值下降计算中，该模型均与 XFEL 实验数据高度吻合^[19, 55]。

4.5 本章小结

本章所述各模型均源自离子球模型这一基本图像，其共同前提是将等离子体划分为互不重叠、内部电中性的离子球。在此前提下，本章所介绍各类基于离子球所发展的模型沿“逐步纳入更多真实物理效应”的脉络演进：

（1）等电子密度离子球模型是普通离子球在高温极限下的形式，即在高温极限下，电子的动能远远大于势能，此时可近似认为电子在等离子体中的分布完全均匀，进而可以给出解析形式的屏蔽势。等电子密度离子球模型适用于强耦合且极高温的等离子体，且因具解析形式而广泛用于强耦合等离子体的定性分析或作为自洽求解的屏蔽势起点。

（2）自洽离子球模型直接自洽求解电子密度的空间分布，计入了自由电子空间非均匀性，物理图像简单、计算量适中，适用于强耦合等离子体。但在自洽离子球模型中，等离子体电子仍然被看作是经典粒子，其分布由经典的 Fermi-Dirac 分布给出，没有考虑电子波动性造成的影响，而电子的波动性可能对低能区等离子体电子的空间分布产生很大影响，进而影响相关原子过程。自洽离子球模型在实验条

件下 Cl^{15+} 离子 $\text{He}\beta$ 线移计算中与实验相符，但在 Al^{11+} 离子 $\text{He}\alpha$ 线移以及高离化度 Si 离子的电离阈值下降计算中与实验存在较大偏差。

(3) 解析离子球模型由自洽离子球结果拟合得到解析屏蔽势，适用域与自洽离子球相同，并可通过参数 b 纳入额外晶格结构影响；其优势在于解析、计算量低且结果与自洽离子球接近。在 Cl^{15+} $\text{He}\beta$ 线移计算中与实验相符，在 Al^{11+} $\text{He}\alpha$ 线移计算中需调节参数 b 的取值以考虑晶格结构影响，才能与实验取得一致。

(4) 两步 Hartree–Fock–Slater 模型用波函数模方结合分布函数取代经典统计分布，统一处理束缚与自由电子，并通过“内电离”概念将能带电子贡献纳入屏蔽，适用于近固体密度的温热稠密物质；其在固体密度 Al 等离子体的电离阈值下降计算中与实验相符，且在后续工作中也进一步考虑了存留的晶格结构可能带来的影响。

(5) VB-BFC 模型进一步将能带电子视为束缚态—自由态的混合，区分激发通道与电离通道，适用于近固体密度、能带影响显著的等离子体；其在 Al、Mg、Si 及 SiO_2 固体密度等离子体的电离阈值下降计算中与 XFEL 实验数据高度吻合。

总体而言，本章沿“均匀密度→自洽非均匀密度→波函数量子化与能带电子→束缚—自由连续过渡”的方向，逐步纳入了电子密度空间非均匀性、电子波动性、能带结构形成及束缚—自由电子连续过渡等物理过程，模型的适用密度区间也随之向近固体密度方向延伸。各模型受离子球有限边界假设制约，因而通常要求等离子体处于强耦合状态，此时粒子间存在类似固体或液体的短程序，为划分独立离子球提供物理基础；而在弱耦合等离子体中，屏蔽本质上是动态、长程、多体的集体行为，刚性离子球图像与实际不符，故离子球类模型在弱耦合区适用性存疑。本章所介绍基于离子球的各模型优势、局限性及对比情况如表 1 所示。

表 1 基于离子球模型所发展各类等离子体屏蔽模型简单对比。

Table 1 A brief comparison of plasma screening models developed based on the ion sphere model.

模型	核心物理假设	屏蔽势形式	适用区间	主要优势	主要局限	实验/基准验证情况
离子球模型 (起源)	等离子体划分为互不重叠的电中性离子球；球内正负电荷数相等		强耦合等离子体	抓住强耦合电中性与短程序核心特征	弱耦合区刚性离子球图像与实际不符、适用性存疑	作为各模型理论起点
等电子密度 离子球模型	离子球内自由电子均匀分布	$\phi_{UEGM}(r)=-\left[\frac{Z}{r}-\frac{(Z-N_b)}{2R_0}\left(3-\frac{r^2}{R_0^2}\right)\right]$	强耦合，且自由电子平均动能远大于电子—离子间库伦势	解析、便于代入原子结构计算；常作为自洽起点	仅强耦合高温极限严格成立；忽略电子密度非均匀性	通常用于定性分析及自洽计算起点， <u>或用于与更复杂模型对比^[44]</u> ，无实验验证
自洽离子球模型	离子球内电子密度由Fermi-Dirac分布结合有效屏蔽势自洽求解	自洽计算得到，无解析形式	强耦合等离子体	计入自由电子空间非均匀性；物理简单、计算量适中	电子波动性影响未考虑，且未考虑能带电子贡献	<u>线移计算与实验对比，Cl¹⁵⁺符合^[44]、Al¹¹⁺偏差较大^[45]；Si离子IPD低离子化度与实验符合^[14]</u>
解析离子球模型	基于自洽离子球计算结果拟合获得解析屏蔽势	$\phi_{scr}(r)=-\frac{Z}{r}+\frac{N_f}{R}\left[1+\frac{1}{x-1}-\frac{1}{x-1}\left(\frac{r}{R_0}\right)^x\right]$	同自洽离子球模型，可通过调节参数 <i>b</i> 来纳入额外晶格结构影响。	解析、计算量低、结果接近自洽离子球	与自洽离子球面临相同问题，拟合结果适用区间不明	<u>线移计算与实验对比，Cl¹⁵⁺符合、Al¹¹⁺需调节参数才能与实验相符^[34]</u>
两步 HFS 模型	所有电子波函数化，区分“内电离”和“外电离”，将“内电离”限至“外电离”限间能带电子纳入自由电子考虑	自洽计算得到，无解析形式	近固体密度温热稠密物质	统一处理束缚/自由电子、计入电子波动性与能带电子贡献	计算较自洽离子球模型更为复杂	<u>固体密度 Al 离子 IPD 与实验相符^[18, 54]</u>
VB-BFC 模	离子外层轨道电子为	自洽计算得到，无解析形式	近固体密度等	辨析激发/电离	计算较复杂，向	固体密度下多种离子计

模型	核心物理假设	屏蔽势形式	适用区间	主要优势	主要局限	实验/基准验证情况
型	束缚态—自由态混合；系统区分激发通道与电离通道		离子体，能带影响显著时	通道：指出实验边能量可能对应激发能	更宽等离子体参数区间拓展性存疑	算所得 IPD 与实验结果相符 ^[19, 55]

未用稿件，非最终出版稿

5 从 TF 模型衍生的屏蔽模型

与离子球衍生模型并行的，是一系列从 TF 模型出发发展得到的屏蔽模型。Debye-Hückel (DH) 模型早在 1923 年即由 P. Debye 和 E. Hückel 提出，最初用于描述电解质溶液行为^[15]，所以从时间上讲，DH 模型的提出实际上还要比 TF 模型更早，但从物理图像上 DH 模型可看作 TF 模型在弱耦合弱简并条件下的近似，因此为理清各模型间的物理联系，本文将 DH 模型放在 TF 模型的衍生模型部分进行介绍。由 DH 模型及线性 TF 模型给出的 Yukawa 型屏蔽势具有形式简洁、物理图像清晰的优点。然而，标准 DH 模型及线性 TF 模型建立在一系列严格假设之上，如需要等离子体处于热力学平衡状态使得电子服从玻尔兹曼分布或 Fermi-Dirac 分布、屏蔽长度半径以内粒子数足够大以致涨落可忽略、电子可视为无结构的经典点粒子等等。针对这些局限性，研究者们从不同角度提出了一系列新的模型，对传统模型进行了补充，本章依次介绍标准 DH 模型及这三种重要的推广形式。

5.1 Debye-Hückel 屏蔽模型

当简并参数 $\Theta \gg 1$ 时，自由电子退简并，此时描述电子空间数密度分布的(4)式可进一步简化为玻尔兹曼分布，此时同样将 $n(r)$ 在 $\phi=0$ 附近进行泰勒展开并只保留线性项，进而求解泊松方程，同样可以得到与(7)式形式相同的 Yukawa 势形式解析解，只是此时 TF 模型屏蔽长度 λ_{TF} 退化为 DH 模型屏蔽长度 D ，具有形式

$$D^{-2} = \frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 k_B T_e}, \quad (16)$$

由此，线性 TF 模型退化为更为经典和简单的 DH 模型。

由于 DH 模型具有极为简单的数学形式，且物理图像清晰，可很方便与 MCDF 等原子结构计算方法相结合，用于讨论理想等离子体中的原子结构与原子过程受等离子体屏蔽的影响。且基于类 H 离子进行推导，可证明基于 DH 模型，同一等电子序列中不同离子的跃迁能量、振子强度等参数会随屏蔽长度 D 变化呈现出一定的标度规律，可极大地方便等离子体模拟中需要快速获取大量等离子体条件下原子

参数的需求^[33]。因此，即使 DH 模型已被提出 100 余年，当前仍被大量用于理想等离子体或弱耦合等离子体中的原子参数计算研究。

这一方向每年均会有大量工作发表，因此本文仅列举部分这一方向的工作。例如，2012 年，[颜录有](#)等人采用 MCDF 方法，将 DH 屏蔽势同时用于电子离子与电子电子间相互作用，系统计算了 C^{4+} 离子在弱耦合等离子体中的 17 个精细结构能级以及电偶极(E1)、磁偶极(M1)及磁四极(M2)跃迁的跃迁概率和振子强度。结果表明，随着屏蔽长度 D 减小，对应着屏蔽强度增大，非同壳层跃迁 ($\Delta n \neq 0$ 跃迁) 的跃迁能减小且跃迁概率减小，而同壳层跃迁 ($\Delta n = 0$ 跃迁) 则呈现跃迁能量增大且跃迁概率增大的相反趋势，同时在电子—电子相互作用中加入 DH 屏蔽势使离子更加稳定，对低 Z 离子尤为显著^[56]。陈展斌等人于 2018 年利用 DH 模型研究了等离子体中类 He 的 C^{4+} 、 Ne^{8+} 、 Ar^{16+} 、 Kr^{34+} 离子的能级和辐射跃迁。他们发现随着屏蔽长度 D 减小，激发能降低，跃迁概率减小，而电子—电子相互作用中加入 DH 屏蔽势对高 Z 离子影响很小，质量修正、Darwin 项修正项对高 Z 离子非常重要且随屏蔽长度变化^[57]。

2013 年 [T. N. Chang](#) 等人采用 B 样条方法,利用 DH 屏蔽势计算了等离子体中 H 原子的单光子和双光子电离截面。研究发现，随着屏蔽长度 D 减小，原本束缚的激发态因屏蔽势变弱而进入连续态，在电离阈值附近产生等离子体诱导的共振结构。随着屏蔽进一步增强，这类共振结构从尖锐的窄峰逐渐展宽为连续谱，其变化可通过初态束缚电子波函数与末态电离电子波函数之间的重叠积分进行定量解释^[58]。2020 年 [马玉龙](#)等人采用 MCDF 方法结合 DH 势，研究了 C^{5+} 离子的双电子复合过程。计算表明，随着屏蔽长度 D 减小，俄歇电子能量先增大后减小，这源于电子核势屏蔽对 $1s$ 和 $2l$ 壳层电子的不同影响；除 $2p^2, ^1S \rightarrow 1s$ 外，俄歇速率和辐射跃迁速率整体随屏蔽增强而减小，而 $2p^2, ^1S \rightarrow 1s$ 会由于组态混合系数随屏蔽强度发生变化，使得的俄歇速率随屏蔽强度发生非单调变化^[59]。2024 年 [戈迪](#)等人研究了相对论效应对处于 DH 模型屏蔽势中的类 H 离子光电离过程的影响，计算了 C^{5+} 、 Al^{12+} 和 W^{73+} 离子的光电离截面。结果表明，相对论效应随核电荷数增大而显著增强，导致精细结构劈裂，使总截面中出现双共振峰结构，且双峰的大小、宽度和位

置差异随核电荷数增大而增大；分截面中 Cooper 极小位置的差异也随核电荷数增大而增大，使得总截面中叠加的极小值变浅；虚态效应出现的临界屏蔽长度及低能区的截面增强幅度也存在明显的相对论差异^[60]。

张松斌利用 R 矩阵加赝态方法，对电子—H 原子体系在 DH 势下的散射过程开展了一系列系统的研究。他首先在 2010 年的一个工作中发现，当屏蔽长度 D 从无穷大减小到一定值时，Feshbach 共振 1^3P 和 1^1D 在越过 $2s$ 或 $2p$ 轨道的电离阈值时转变为形状共振的现象^[61]。同年，他们详细给出了 $n=2$ 轨道电离阈值附近多种共振参数随屏蔽长度 D 的演化情况，揭示了共振转变对 $1s \rightarrow 2s$ 和 $1s \rightarrow 2p$ 碰撞激发强度的强烈影响^[62]。2011 年，他们将研究扩展到 $n=2$ 与 $n=3$ 电离阈值之间的能量区域^[63]。此外，他还在 2010 年利用相同方法研究了 H-离子在 DH 等离子体中的光脱附过程，观察到 1^1P 态 Feshbach 共振随着屏蔽长度 D 减小，转变为形状共振的过程^[64]。

刘玲于 2016 年采用双中心原子轨道紧耦合方法，研究了 DH 屏蔽势下 N^{5+} 离子与 H 原子碰撞中的电子俘获过程。随着屏蔽长度 D 减小，电子被俘获到 N 离子 $n=4$ 轨道的俘获通道被显著抑制，而 $n=3$ 通道在部分能量区变得占主导。同时，该工作也研究了与俘获过程相关的辐射跃迁过程，发现受等离子体屏蔽影响，跃迁线发生红移，而跃迁线强度变化与碰撞能量和屏蔽长度密切相关^[65]。

高城等人于 2011 年基于细致能级（DLA）模型将 DH 势用于 C 离子体的辐射不透明度计算，同时考虑了能级、振子强度、光电离截面的屏蔽效应以及电离势压低对 Saha-Boltzmann 方程的影响。随着屏蔽长度 D 减小，吸收峰的位置向低能移动且强度减弱，K 边附近的连续吸收显著改变，Rosseland 和 Planck 平均不透明度随屏蔽增强而增大^[66]。

5.2 考虑统计涨落的修正德拜模型

标准 DH 屏蔽模型建立在等离子体处于热力学平衡、电子服从玻尔兹曼分布以及以屏蔽长度 D 为半径的球体内粒子数足够大以致涨落可以忽略等假设之上。然而，在天体物理等离子体中，屏蔽长度为半径的球体内实际包含的粒子数可能较

少，此时统计涨落的影响变得不可忽略。这些涨落使得电子在空间上的分布偏离玻尔兹曼分布。[P. Quarati 与 A. M. Scarfone](#) 在 2007 年提出的修正 DH 模型正是针对这一问题，通过引入非广延统计力学和超统计（superstatistics）方法，对标准 DH 模型进行了系统性修正^[20]。该模型额外考虑的核心物理机制是 DH 屏蔽长度 D 作为一个强度参数的时空涨落。在标准 DH 模型中，如(14)式所示， D 在标准 DH 模型中是由电子温度及密度唯一确定的常数。而 Quarati 与 Scarfone 认为，在非理想或小尺度等离子体环境中，局部温度和密度的涨落会导致 D 本身成为一个随机变量。基于以上考量，通过超统计平均，Quarati 与 Scarfone 推导得到了修正的屏蔽势

$$\phi_q(r) = -\frac{Q}{r} \left[1 - (1-q) \frac{r}{\zeta_q} \right]^{1/(1-q)}, \quad (17)$$

式中， q 为 Tsallis 非广延参数（ $0 < q < 1$ ），描述电子分布偏离指数形式的程度，其值越小，偏离越大。 $q \rightarrow 1$ 对应涨落消失，(17)式回归标准 DH 屏蔽势形式 $\phi_{DH}(r) \sim \frac{1}{r} e^{-r/D}$ 。 $\zeta_q = \frac{2-q}{\langle 1/D \rangle}$ 为修正的特征屏蔽长度。 $\langle 1/D \rangle$ 是屏蔽长度 D 的倒数的平均值， ζ_q 在 $q \rightarrow 1$ 时自然回归为 D 。对于 $0 < q < 1$ ，屏蔽势 $\phi_q(r)$ 在 $r = \frac{\zeta_q}{1-q}$ 处存在一个物理截断，超出该距离势能消失，这与标准 DH 屏蔽势延伸到无穷远的特征截然不同。

基于这一修正屏蔽势，Quarati 与 Scarfone 计算了等离子体中两核子以能量 E 穿透使用屏蔽模型修正后的势垒的穿透概率 $\Gamma_q(E)$ ，这一概率直接关系到恒星中的核反应速率。研究发现，以能量 E 穿透修正势垒等价于以等效能量 $E + U_q$ 穿透纯库仑势垒，其中等效屏蔽能 U_q 不再是常数，而是能量 E 的函数。尤其在低能区， U_q 不趋于 0，而趋于 $(1-q)Z_1Z_2e^2\langle 1/D \rangle$ ，其中 Z_1 、 Z_2 分别为两核子核电荷数，这意味着即便在极低能量碰撞下屏蔽效应对穿透概率 $\Gamma_q(E)$ 的增强依然存在。这一特征对天体物理环境中低能核反应率的评估具有重要意义。李向东于 2011 年将这一修正的 DH 模型推广至原子结构计算领域，对类 He Al 离子束缚态的能级进行计算，发现修正势下自由电子极化分布与标准 DH 模型存在结构性差异，并指出此涨落统计方法可进一步推广到自洽离子球等其他屏蔽模型^[67]。

5.3 余弦 DH 屏蔽模型：量子简并与量子散射效应

在标准 DH 模型中，电子被看作在空间中连续分布，未考虑量子效应的影响。然而，在高密度、低温的简并等离子体环境中，电子间平均距离与德布罗意波长相当时，量子效应不可忽略。2008 年，[P. K. Shukla 与 B. Eliasson](#) 针对此类电子以量子衍射效应为主导的量子等离子体，提出了一种余弦屏蔽库伦势模型^[21]。当电子密度发生扰动时，量子衍射会对电子施加一个等效的压力。该模型假设这一量子效应项的贡献远大于费米温度决定的量子衍射等效压力，且电子惯性可忽略。此时，电子动量方程简化为电场力与等效压力的直接平衡。这彻底改变了电子对测试电荷的屏蔽响应：电子云不再按热平衡的玻尔兹曼因子分布，而是由量子相干性决定。通过求解由电子动量方程、离子连续性方程和泊松方程组成的方程组，他们得到了测试电荷周围的屏蔽势为

$$\phi_D(r) = -\frac{Q}{r} e^{-\frac{k_q r}{\sqrt{2}}} \cos\left(\frac{k_q r}{\sqrt{2}}\right), \quad (18)$$

式中， $k_q = \left(\frac{4m_e^2 \omega_{pe}^2}{\hbar^2}\right)^{1/4}$ 为量子波数， $\omega_{pe} = \sqrt{\frac{4\pi n_0 e^2}{m_e}}$ 为等离子体频率，量子波数 k_q 刻画了量子衍射效应的强弱。

从数学形式上，余弦屏蔽库伦势在标准 DH 屏蔽势的基础上增加了一个余弦项，这使得修正的屏蔽势与标准 DH 势在结构和性质上存在很大差异，在修正的 DH 屏蔽势中， $r \approx 3k_q^{-1}$ 位置存在一个屏蔽势的极小值点，从而形成一个显著的势阱，这与原子间的 Lennard-Jones 势相似。此外，在距离目标电荷较远时，屏蔽势还会由于余弦项的存在出现振荡。势阱和长程振荡为两个带同号电荷的粒子提供了可能的吸引机制，这在经典 DH 模型中是不存在的。此外屏蔽势的有效屏蔽长度可以看作是 $\frac{\sqrt{2}}{k_q}$ ，与温度完全无关，这与经典德拜屏蔽长度 D 不同。

余弦屏蔽库伦势模型可用于解释稠密等离子体等量子衍射效应影响显著的系统获得的实验数据。但同时，该模型也因无法被严格地推广到有限温度情形，也无法以自洽的方式纳入额外的贡献而受到后续工作的诟病^[22]。后续有大量工作利用

该模型计算了原子能级、振子强度、光电离截面、散射截面及电荷交换截面等关键原子参数。

例如，[祁月盈](#)等人于 2016—2017 年对类 H 离子在余弦屏蔽库伦势下的束缚态与光电离过程进行了系统性计算。通过比较基于标准 DH 模型与余弦屏蔽模型的跃迁能量及振子强度的计算结果，发现同屏蔽强度下余弦屏蔽模型相比标准 DH 模型对于跃迁能量及振子强度等光谱性质的影响更大；在光电离过程中，光电子低能区展现出丰富的共振结构，且共振后常伴生 Cooper 极小^[68,69]。[Wu Ju Yan](#) 等人在 2020 年将研究拓展至等离子体中电子的自由—自由跃迁过程，计算了强耦合量子等离子体中类 H 离子的自由—自由 Gaunt 因子。与弱耦合等离子体的对比显示，在相似屏蔽条件下，余弦德拜势中的共振幅度可达标准 DH 势中的数倍至上十倍^[70]。

[C.Y. Lin 和 Y.K. Ho](#) 于 2010-2011 年同样利用余弦屏蔽库伦势计算了 H 原子及 He⁺ 离子的光电离截面，发现余弦屏蔽库伦势较标准 DH 势会导致更大的 IPD；在激发态的四极光电离中，等离子体屏蔽还会诱发额外的 Cooper 极小，其出现位置与束缚态的稳定性密切相关^[71-73]。该课题组还在 2010 年将余弦屏蔽模型应用于双电子体系，研究了稠密量子等离子体中 H⁻ 离子的光脱附过程。研究发现，最大光脱附截面及其对应的入射光波长均随屏蔽增强而增大，表明屏蔽越强，脱附电子所需的能量越低。与标准 DH 模型相比，由于在强屏蔽时余弦屏蔽模型的余弦振荡项带来了更强的屏蔽效力，使得 H⁻ 离子束缚更弱、更易发生光脱附^[74]。[Zhang Lin-yu](#) 等人则于 2013 和 2014 年采用经典轨道蒙特卡罗方法，计算了裸原子核与 H 原子在余弦屏蔽模型下的电荷交换及电离截面，发现弱屏蔽下余弦屏蔽模型与标准 DH 模型屏蔽强度接近，但在强屏蔽下，余弦振荡项的存在会显著增强等离子体屏蔽效应，导致电荷交换截面的进一步降低和电离截面的进一步增高^[75,76]。

5.4 梯度修正屏蔽模型：电子密度梯度与交换关联效应

线性有限温 TF 模型中已经能够通过屏蔽长度 λ_{TF} 自然地涵盖从理想等离子体到简并等离子体之间的各类等离子体状态。但 TF 模型忽略了电子密度的空间非均匀性对动能的贡献，也无法描述中等强度的电子间交换—关联效应。于是，2015

年, [L. G. Stanton](#) 和 [M. S. Murillo](#) 基于无轨道密度泛函理论 (OF-DFT), 在线性 TF 模型的基础上, 通过在动能泛函中引入有限温度的 Kirzhnits 梯度修正项, 并在长波极限下通过局域场修正引入电子间交换—关联效应, 发展了一个新的等离子体屏蔽势, 称为精确梯度修正屏蔽势 (exact gradient-corrected screening potential, EGS) [22]。在 EGS 势中, 梯度修正项以及电子间交换—关联效应的影响由梯度修正参数 $\nu = \sqrt{8\beta F'_{-1/2}(\eta_e)}/3\pi$ 以及局域场修正参数 $b = 1 - \gamma_0/\lambda_{TF}^2$ 引入, 式中参数 γ_0 需通过拟合得到, $\beta = 1/T_e$ 。最终屏蔽势分为两个分支: 在 $\nu < b^2$ 时, 屏蔽势呈现单调衰减

$$\phi(r) = -\frac{Q}{2r} \left[(1+\alpha)e^{-r/\lambda_-} + (1-\alpha)e^{-r/\lambda_+} \right], \quad (19)$$

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{\nu\lambda_{TF}^2}{2b \pm 2\sqrt{b^2 - \nu}}$$

式中, $\alpha = b/\sqrt{b^2 - \nu}$ 。而在 $\nu > b^2$ 时则过渡为阻尼振荡形式

$$\phi(r) = -\frac{Q}{r} e^{-r/\gamma_+} \left[\cos\left(\frac{r}{\gamma_-}\right) + \alpha' \sin\left(\frac{r}{\gamma_-}\right) \right], \quad (20)$$

$$\gamma_{\pm}^2 = \frac{\nu\lambda_{TF}^2}{\sqrt{\nu \pm b}}$$

式中 $\alpha' = b/\sqrt{\nu - b}$ 。相比标准 Yukawa 型势, 该模型消除了离子核处电子密度的非物理奇异性, 预言了此处为有限的密度尖峰, 同时修正了远场电子密度衰减行为, 能自然地描述温稠密等离子体中可能出现的 Friedel 振荡。关于模型的适用条件, 论文通过分析特征长度指出, 当离子球半径 R_0 与 TF 屏蔽长度 λ_{TF} 相当时, 孤立原子的纯库仑相互作用图景不再有效, 需采用线性 TF 模型对应的 Yukawa 型势; 而当梯度修正所引入的 λ_+ 与 λ_- 满足 $\lambda_+ \approx \lambda_-$, 即 $b^2 - \nu \approx 0$ 时, Yukawa 型势本身也告失效, 必须采用精确梯度修正屏蔽势, 这在参数空间中对对应较强耦合区域, 表明梯度修正与交换-关联效应主要在温稠密物质状态下产生实质影响[22]。

EGS 势相比标准 DH 模型乃至线性 TF 模型, 通过引入梯度修正考虑了电子密度非均匀性带来的额外修正, 通过局域场修正引入了电子间的交换-关联效应的影响, 因此在温稠密物质中相比线性 TF 模型具有更好的适用性。且由于具有解析的形式, 方便计算, 因此已被多个研究组应用于等离子体环境中原子结构与碰撞过程

的计算，涵盖了从光谱线移、光电离截面到电子碰撞激发和重粒子碰撞等多个方面。

例如，[Li Wen Gang](#)等人在 2021 年系统比较了标准的线性 TF 模型、不考虑交换—关联效应与考虑交换—关联效应的 EGS 模型三种模型在临界密度—温度轮廓线上的原子能级、振子强度、辐射跃迁概率计算结果。结果表明，随着等离子体温度降低和密度增加，有限温度梯度修正和交换—关联效应均增强；交换—关联效应的影响大于有限温度梯度修正；在弱耦合等离子体中这些修正可忽略，EGS 势退化为 TF 势^[77]。陈展斌于 2020 年计算了 Al^{12+} 离子 $n \leq 3$ 束缚态的光电离截面。结果表明，对于给定温度，光电离截面随密度增加而增大；对于给定密度，光电离截面随温度降低而增大^[78]。随后，于 2025 年进一步计算了 Si^{13+} 离子的光电子角分布。结果表明，等离子体屏蔽效应对光电子角分布具有显著影响，其中 $3p_{3/2}$ 电子光电离的角分布比 $1s$ 电子光电离的角分布受等离子体屏蔽影响更大^[79]。2026 年，又采用相对论扭曲波方法，采用 EGS 势研究了 Cr^{22+} 离子在热稠密等离子体中的电子碰撞激发过程。结果表明，稠密等离子体效应使激发能降低并导致谱线红移；而 Breit 相互作用对截面和线偏振的影响随入射电子能量增加而增大^[80]。

[赵国鹏](#)等人于 2017 年采用双中心原子轨道紧耦合（TC-AOCC）方法，使用 EGS 势研究了质子与 H 原子碰撞中的电子俘获和激发过程^[81]。该课题组在 2018 年又利用 EGS 屏蔽模型研究了类氢离子 Lyman 和 Balmer 线系的强度和线移。结果表明，对于固定温度，谱线强度峰值随密度增加而降低，对于固定密度，谱线强度峰值随温度升高而增加，发现了线移随密度呈非线性增加的趋势^[82]。该课题组于同年以 C^{5+} 离子为例，采用 EGS 势计算了光电离截面。结果表明，在中间能量区，当等离子体密度略高于相应轨道的电离能时，出现共振态结构^[83]。此后，又于 2022 年研究了 Ar^{17+} 离子在耦合参数 $0.007 < \Gamma_{ee} < 0.202$ 范围内的光电离过程。通过比较 EGS 势与标准 DH 势的结果发现，在共振区，EGS 势与 DH 势的光电离截面存在显著差异^[84]。[陈晨](#)在 2022 年使用相同方法研究了 He 原子核与 H 原子碰撞体系，计算了总截面、态选择截面和角微分截面。结果表明，异核的 He 原子核与氢原子碰撞体系对等离子体环境比同核的质子与氢原子体系更为敏感；同等条件下

EGS 势与标准 DH 势的计算结果存在显著差异，且差异随密度增加而增大^[85]。陈晨还于 2023 年研究了电子在 EGS 势振荡形式（即 $v > b^2$ ）上的弹性散射。结果表明，固定密度下屏蔽强度随温度非单调变化，导致在 $v > b^2$ 条件下同一个轨道电离可能存在不止一个临界温度，同时共振态出现的条件因温区不同而异^[86]。

5.5 本章小结

本章各模型均以 Thomas–Fermi 模型及其线性化（Yukawa 型势）为共同基础。线性 TF 模型通过单一屏蔽长度描述屏蔽效应，可覆盖从非简并到简并的宽广区间，但其有效性依赖弱有效势下对电子密度的线性展开，即要求有效屏蔽势远小于电子特征能标。在此基础上，本章模型分别从不同物理角度对 TF 模型进行了拓展：

（1）标准 Debye–Hückel 模型是线性 TF 模型在非简并极限下电子服从玻尔兹曼分布时的形式，适用于理想/弱耦合等离子体，如日冕、托卡马克等离子体等。其数学形式极为简单、物理图像清晰，并可导出同一等电子序列原子参数随屏蔽长度变化的标度规律，故被广泛用于理想/弱耦合等离子体的原子参数计算。但与线性化的 TF 模型相同，DH 模型依赖于弱有效势下对电子密度的线性展开，同时要求等离子体满足准静态条件，且也未考虑等离子体中电子间交换关联效应、电子波动性等影响，因此在理想等离子体参数区间以外适用性存疑。

（2）考虑统计涨落的修正 DH 模型将德拜屏蔽长度视为存在时空涨落的随机量，通过非广延统计与超统计平均得到修正屏蔽势，适用于屏蔽球内粒子数较少、统计涨落不可忽略的非理想或小尺度等离子体；其屏蔽势在有限距离处存在物理截断，区别于标准 DH 势延伸至无穷远的特征。

（3）余弦 DH 模型针对电子以量子衍射效应为主导的量子等离子体，适用于高密度、低温的强简并等离子体；其有效屏蔽长度与温度无关，屏蔽势含余弦项而出现势阱与长程振荡。该模型的局限在于无法严格推广到有限温度情形，也无法以自洽方式纳入额外贡献。

(4) 梯度修正屏蔽模型基于无轨道密度泛函理论，在线性 TF 基础上引入有限温度 Kirzhnits 梯度修正与局域场交换—关联修正，屏蔽势呈单调衰减与阻尼振荡双分支，能描述温稠密物质中的 Friedel 振荡，相比线性 TF 模型在温稠密区适用性更好。值得注意的是，EGS 是本文所述模型中少数明确给出定量适用判据者：当离子球半径与 TF 屏蔽长度相当时纯库仑图像失效、须采用 Yukawa 型势，而当梯度修正引入的特征长度满足相应条件时 Yukawa 型势亦失效、须采用 EGS 势，对应参数空间中的较强耦合区。

总体而言，本章模型在保持解析形式、便于大规模计算的同时，分别从统计涨落、量子简并与衍射、电子密度梯度与交换—关联效应三个方向拓展了标准 DH/TF 模型的适用范围，覆盖了从理想/弱耦合、到非理想/小尺度、到强简并量子、再到温稠密强耦合的不同等离子体参数区间区域。但除 EGS 给出基于特征长度的定量判据外，本章其余模型多以物理机制的定性讨论界定适用范围，尚未给出精确数值边界。此外，大部分模型也仅进行了不同模型间对比以讨论模型特性，而未真正与实验结果进行比较，这也与当前精确的等离子体中原子参数测量实验的稀缺相关。本章所介绍基于 TF 模型的各模型优势、局限性及对比情况如表 2 所示。

录用稿件，
非最终出版稿

表 2 基于 TF 模型所发展各类等离子体屏蔽模型简单对比。

Table 2 A brief comparison of plasma screening models developed based on the TF model.

模型	核心物理假设	屏蔽势形式	适用条件	主要优势	主要局限	实验/基准验证情况
TF 模型 (起源)	正电荷均匀背景；电子为连续流体，Fermi-Dirac 分布；准静态、平衡态、屏蔽球内粒子数足够大、势函数空间缓变；忽略电子波动性和交换关联效应		从非简并到简并等离子体，要求准静态近似成立	覆盖宽等离子体参数区间，物理图像清晰	准静态限制；忽略电子间交换关联、电子波动性影响、梯度修正；强耦合区适用性存疑	作为各模型理论起点
线性 TF 模型	弱屏蔽条件下对电子密度作线性展开	$\phi_{TF}(r) = -\frac{Q}{r} e^{-r/\lambda_{TF}}$	弱屏蔽条件： $\Theta \ll 1$ 时， $\phi(r) \ll \epsilon_F$ ； $\Theta > 1$ 时 $\phi(r) \ll k_B T_e$ 。	模型解析，形式简单，物理图像清晰，计算量小	依赖弱有效势下对电子密度的线性展开，强耦合或强有效势情况下线性展开条件不成立	常用于与更精密模型的计算结果对比或作为基准验证趋势
标准 DH 模型	线性 TF 模型的非简并极限；电子服从玻尔兹曼分布	$\phi_{DH}(r) = -\frac{Q}{r} e^{-r/D}$	理想/弱耦合等离子体；弱屏蔽条件： $\phi(r) \ll k_B T_e$ 。	模型解析，形式简单，物理图像清晰，计算量小，可导出标度规律	依赖弱有效势下对电子密度的线性展开，强耦合或强有效势情况下线性展开条件不成立	<u>广泛用于理论原子参数与标度规律计算^[56-66]</u>
修正 DH 模型	德拜屏蔽长度存在涨落；基于 Tsallis 非广延统计力学进行超统计平均	$\phi_q(r) = -\frac{Q}{r} \left[1 - (1-q) \frac{r}{\zeta_q} \right]^{1/(1-q)}$	涨落不可忽略的小尺度或理想等离子体	计入统计涨落影响	依赖非广延参数 q 的引入；偏离平衡分布程度需外部确定	<u>用于天体核反应率/类 He Al 能级等理论计算^[20, 67]，无实验验证</u>
余弦 DH 模型	量子衍射压力主导电子动力学；电子对测试电荷的响应由量子相干性决定。	$\phi_D(r) = -\frac{Q}{r} e^{-\frac{k_q r}{\sqrt{2}}} \cos\left(\frac{k_q r}{\sqrt{2}}\right)$	强简并等离子： $k_B T_e \rightarrow 0$	可解释量子衍射显著体系的实验数据；屏蔽长度与温度无关	无法严格推广到有限温度；无法自洽纳入额外贡献	<u>类 H、类 He 离子束缚态、光电离计算，H-离子光脱附计算，自由—自由跃迁 Gaunt 因子计算^[68-76]，无实验验证</u>
EGS 模型	引入有限温 Kirzhnits 梯度修正项和局域场交换关联修正	双分支形式： $v < b^2$ 时单调衰减； $v > b^2$ 时阻尼振荡	相比线性 TF 模型在温稠密区具有更好的适用性	消除核处非物理奇异；计入梯度与交换关联；解析、温稠密区优于线 TF 模型	电子波动性依然未考虑	<u>临界密度-温度区间原子参数、光电离、碰撞激发参数计算^[77-86]，无实验验证</u>

6 分区 DH 模型与原子跃迁标度规律

从标准 DH 到涨落修正、余弦屏蔽、再到梯度修正模型，第 5 章所回顾的演化路径展现了研究者们如何从不同物理角度出发，系统地拓展 Yukawa 型屏蔽描述的适用范围。上述模型在数学上均保持解析形式，这对于需要大规模计算的等离子体模拟具有重要的实际意义。然而，上述模型同时存在一个根本性局限：Yukawa 型屏蔽势均依赖对电子密度的线性展开，该展开仅当有效屏蔽势远小于电子特征能标时成立。在接近目标离子的区域，屏蔽势受核库伦势主导，而核库伦势随着接近原子核而迅速增大，线性展开条件自然失效。另一方面，对于等离子体的模拟和诊断是一个系统性的工程，而等离子体中的原子结构计算仅是其中一环。面对海量的等离子体模拟和诊断中的原子数据需求，如果针对每种特定离子都单独进行屏蔽计算的话，即便使用简单的 DH 模型，所需的计算量也将极其庞大，对实际的等离子体研究和模拟产生巨大的阻碍。因此，利用等离子体屏蔽模型对不同等电子序列离子进行系统化研究，从中总结出等离子体屏蔽对原子参数影响的一些共同的标度规律，并给出适宜的拟合方案，可对未来等离子体实验诊断与理论模拟提供极大便利，也有助于未来更精确模型的发展。本课题组及合作者正是基于以上两个问题，使用分区 DH 模型在这一方向十几年来开展了大量相关工作，并取得了丰富的研究成果。

6.1 分区 DH 模型的提出背景与构建思想

标准 DH 模型具有与(7)式相同的指数衰减的形式，但德拜模型要求的在 $\phi=0$ 附近进行的电子密度的线性展开本身即要求在 $\phi(r) \ll k_b T_e$ 的条件下才能够进行，此即经典德拜模型的成立条件。但显然，在 $r \rightarrow 0$ ，即接近目标离子的区域，屏蔽势将受到目标离子本身的库仑势主导，迅速增大，此时 $\phi(r) \ll k_b T_e$ 的条件显然是无法满足的，因此基于线性展开的具有(7)式形式的标准 DH 模型在半径 r 较小的区域并不成立。

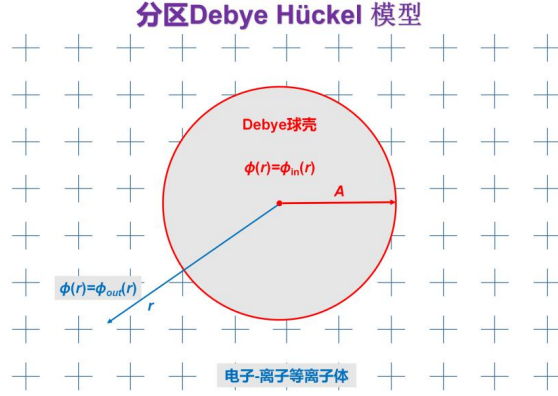


图 4 分区 DH 模型空间示意图。

Fig. 4 Schematic diagram of the spatial regions in the partitioned DH model.

此时，如果希望保留标准 DH 模型所具有的解析形式，则可尝试根据半径 r 对空间进行分区，在 r 较小的内区，此时德拜模型所基于的电子密度的线性展开并不成立，但此时由于屏蔽势本身就受到目标离子库仑势主导，等离子体屏蔽的影响相比目标离子的库仑势较弱，那么可将内区的屏蔽势近似看作仍具有库仑势的形式。而在 r 较大的外区，则使用经典 DH 模型对电子密度进行线性展开的方案进行处理，然后保证内外区边界处屏蔽势连续，即可得到分区 DH 模型屏蔽势^[87,88]：

$$\phi_{DH}(r) = \begin{cases} \phi_{in}(r) = -Q \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{D+A} \right), & r \leq A, \\ \phi_{out}(r) = -Q \left(\frac{De^{A/D}}{D+A} \right) \frac{e^{-r/D}}{r}, & r > A. \end{cases}, (21)$$

式中 A 为德拜球半径，用以给出内区半径，在内区，电子与目标离子间的相互作用不受等离子体屏蔽影响，而在外区，电子与目标离子间相互作用随半径增大指数衰减。

6.2 利用分区 DH 模型对等离子体中标度规律的探索

分区 DH 模型保持了标准 DH 模型形式简单以及物理图像清晰的优点，仅依赖于屏蔽长度 D 以及德拜球半径 A 。本课题组及合作者基于分区 DH 模型对等离子体环境中原子结构和原子过程开展了一系列系统研究，研究历程呈现出从简单离子到复杂离子、从跃迁能量到振子强度、从壳间跃迁到壳内跃迁的逐步深化特征，并尝试给出不同等电子序列离子跃迁能量及振子强度随等离子体屏蔽强度变化的标度规律，以期对等离子体中原子结构和光谱参数的诊断提供了可解析、可外推的理论工具。

系列工作始于 2013 年 [T.N. Chang](#) 使用分区 DH 模型研究了 H、He 原子及 H⁻ 离子在等离子体中的光电离过程^[89]，该研究发现当屏蔽长度 D 接近束缚态临界值时，电离阈值附近出现窄共振结构，该结构源于准束缚态与连续态中相同角动量组合，这与传统的 Fano 共振不同，同时，该工作指出了 DH 模型适用的空间判据，即所考虑原子过程涉及的原子初态波函数必须局域于原子核周边较小的区域，以使得在这一范围内原子的特征得以保持。

2015 年，Chang 与本课题组合作，将分区 DH 模型应用于类 H 离子 Lyman- α 发射线（即类 H 离子中的 $2p \rightarrow 1s$ 跃迁）的红移^[11]，并明确提出 DH 模型在稠密等离子体中适用的时空判据，即原子过程的时间尺度与等离子体振荡的时间尺度应显著不同，同时为保证模型适用性，德拜球半径 A 应远小于屏蔽长度 D 。这一工作中引入了约化屏蔽长度 $\lambda_D = ZD$ ，并取 A 为类氢离子 $1s$ 轨道半径的倍数，即 $A = \eta/Z \cdot a_0$ ，式中 a_0 为玻尔半径，而 η 即为轨道半径的倍数。该工作计算得到的 Al¹²⁺ 离子红移与实验吻合。

对于类 H 离子而言，给定屏蔽长度 D ，则跃迁的初末轨道的轨道能变化为轨道能在 DH 屏蔽势下和无屏蔽情况下的期望值之差，而跃迁线移则为初末轨道的轨道能变化之差，即为

$$\Delta\omega = \langle nl | \Delta\phi | nl \rangle - \langle n'l' | \Delta\phi | n'l' \rangle, \quad (22)$$

式中， $|nl\rangle$ 和 $|n'l'\rangle$ 分别为跃迁初末态的轨道波函数， $\Delta\phi=\phi_{DH}+Z/r$ 为 DH 势与库伦势之差。若取德拜球半径 $A=0$ ，则分区 DH 势回到标准 DH 势形式。此时对 ϕ_{DH} 中的指数部分按照 r/D 作泰勒展开，则在最低阶近似下，线移 $\Delta\omega$ 正比于 $1/D^2$ ，而与核电荷数 Z 无关。同时，对于类 H 离子而言，无屏蔽情况下跃迁能 $\omega_0\sim Z^2$ ，因此跃迁线移 $\Delta\omega$ 与无屏蔽跃迁能 ω_0 的比值 $R_\omega=\Delta\omega/\omega_0$ 只是约化屏蔽长度 $\lambda_D=ZD$ 的函数。

2017 年，[T. K. Fang](#)与本课题组合作，将分区 DH 模型推广至类 He 离子的 He α 线受等离子体屏蔽影响的计算^[90]。如图 5 所示，该工作发现，虽然线移比 $R_\omega=\Delta\omega/\omega_0$ 只是约化屏蔽长度 λ_D 的函数只在类 H 离子情况下，且对 ϕ_{DH} 中的指数部分进行泰勒展开的展开项只保留最低阶的情况下严格成立，但对于少电子的类 He 离子体系，由于电子间关联效应较弱，这一标度规律对于类 He 离子体系也是近似成立的，只是此时 $\lambda_D=(Z-1)D$ ，核电荷数 Z 变为有效核电荷数 $Z_{eff}=(Z-1)$ 。

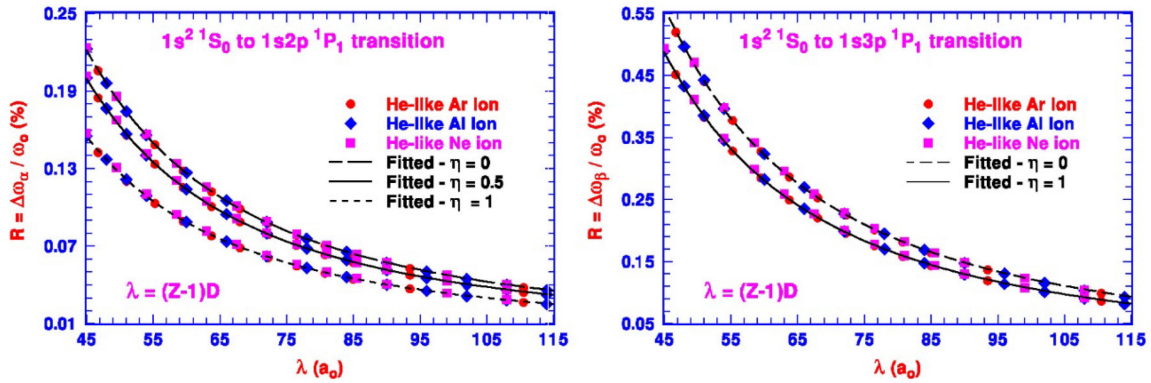


图 5 基于分区 DH 模型计算所得不同类 He 离子 He α 和 He β 线受等离子体屏蔽发生相对线移 R_ω 随约化屏蔽长度 λ_D 变化情况，可发现同一等电子序列不同离子 R_ω 与 λ_D 具有很好的标度规律（引自 Chang 等的论文“Atomic Processes, Including Photoabsorption, Subject to Outside Charge-Neutral Plasma”, Atoms, 10, 16 (2022), doi: 10.3390/atoms10010016; 根据 Creative Commons Attribution 4.0 许可协议使用 <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>）。

Fig. 5 Relative line shift R_ω of the He α and He β lines for various He-like ions as a function of the reduced screening length λ_D by using the partitioned DH model. A good scaling law of R_ω with λ_D can be observed for different ions (from Chang et al., “Atomic Processes, Including Photoabsorption, Subject to Outside Charge-Neutral Plasma”, Atoms, 10, 16 (2022), doi: 10.3390/atoms10010016; used under the Creative Commons Attribution 4.0 license, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

2019 年，本课题组将研究继续向更多电子的类 Ne 离子体系前进，使用分区 DH 模型系统研究了类 Ne 等电子序列 3C 线（即 $2s^2 2p^5 3d, {}^1P_1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ 跃迁）和 3D 线（即 $2s^2 2p^5 3d, {}^3D_1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ 跃迁）受等离子体屏蔽的影响^[91]。该工作发现 R_ω 依然可近似看作 λ_D 的函数，但此时 $\lambda_D = (Z-9.2)D$ ，而不是由类 H 和类 He 直接外推的 $(Z-9)D$ ，这一差异可能来自类 Ne 离子中更强的电子间关联效应。

2021 年，Chang 系统总结了类 H 和类 He 离子跃迁的跃迁能量受等离子体屏蔽发生变化时 R_ω 与 λ_D 间存在的普适标度规律，并给出了 R_ω 与 λ_D 的一个三系数拟合公式

$$R_\omega(a, b, c, \lambda_D) = a + \frac{b}{\lambda_D} + \frac{c}{\lambda_D^2}, \quad (23)$$

式中， a 、 b 、 c 分别为三个拟合系数。在这一工作中，分区 DH 模型也被用于实验等离子体条件下的 Al^{11+} 离子 $\text{He}\alpha$ 线和 Cl^{15+} 离子 $\text{He}\beta$ 线受等离子体屏蔽影响发生的红移的计算，且均取得了与实验相符的结果。同时，通过与离子球模型进行对比，该工作指出，在固定密度条件下，DH 模型预测的谱线红移 $\Delta\omega \propto 1/T_e$ ，而 IS 模型则预测 $\Delta\omega \propto (1/T_e)^{1/2}$ ，这一差异可作为判别模型适用性的实验依据^[32]。

录用稿件，非最终出版稿

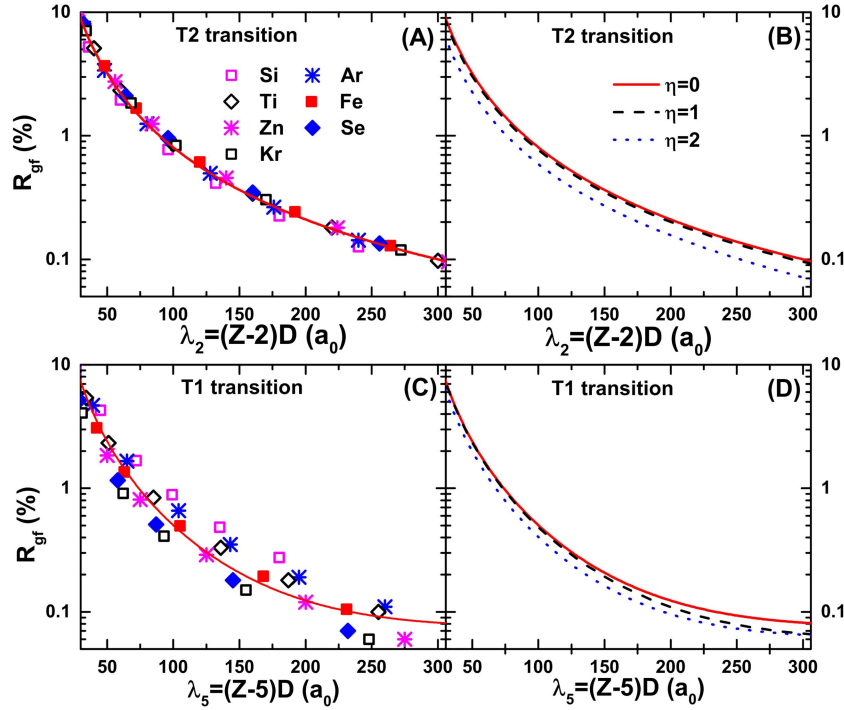


图 6 类 C 离子等电子序列同壳层跃迁(T2)与非同壳层跃迁(T1)振子强度相对变化 R_{gf} 随 λ_D 变化情况（引自作者的论文“Transition energies and oscillator strengths for the intrashell and intershell transitions of the C-like ions in a thermodynamic equilibrium plasma environment”, Phys. Rev. E, 105, 015206 (2022), doi: 10.1103/PhysRevE.105.015206）。

Fig. 6 Relative change of oscillator strength R_{gf} for intrashell (T2) and intershell (T1) transitions of C-like ions along the isoelectronic sequence as a function of λ_D (from the authors' paper, “Transition energies and oscillator strengths for the intrashell and intershell transitions of the C-like ions in a thermodynamic equilibrium plasma environment”, Phys. Rev. E, 105, 015206 (2022), doi: 10.1103/PhysRevE.105.015206).

2022 年，课题组将分区 DH 模型进一步应用于电子间关联效应更强的类 C 离子体系，研究类 C 离子等电子序列的非同壳层跃迁 $2s^22p3d, {}^3D_1 \rightarrow 2s^22p^2, {}^3P_0$ (T1) 和同壳层跃迁 $2s2p^3, {}^3D_1 \rightarrow 2s^22p^2, {}^3P_0$ (T2) 受等离子体屏蔽的影响^[92]。计算表明，随着等离子体屏蔽强度增强，非同壳层跃迁红移、而同壳层跃迁蓝移，且 R_ω 同样可近似看作只是 λ_D 的函数，只是对于同壳层跃迁， $\lambda_D = (Z-2)D$ ，而非同壳层跃迁， $\lambda_D = (Z-5)D$ 。如图 6 所示，与跃迁能变化类似，非同壳层跃迁振子强度减小，而同壳层跃迁振子强度增大。对于类 H 和类 He 离子，可以发现跃迁振子强度的相对变

化 R_{gf} 同样可以近似写作 λ_D 的函数形式，并满足（23）式形式的三项拟合关系^[33]。这一现象也出现在了类 C 离子体系中，但非同壳层跃迁的振子强度相对变化 R_{gf} 不严格遵循标度规律，这可能是由于自旋轨道相互作用随 Z 的变化。该工作还给出了 a 、 b 、 c 三个参数的物理含义，即由于 $\lambda_D \rightarrow \infty$ 对应着无等离子体屏蔽的情况，此时 R_ω 应趋于 0，因此常数 a 应为一个少量，对应着当前模型计算的不确定程度，而二次项 c/λ_D^2 应为主要贡献项，对应着最低阶近似下正比于 $1/D^2$ 的线移 $\Delta\omega$ 。而一次项 b/λ_D 主要代表电子关联的贡献。在多电子离子中，电子关联效应会修正单电子图像下的能级移动。

同年 Chang 发表的综述 系统总结了分区 DH 模型的适用性条件、标度规律，以及在类 H、类 He 离子原子结构、辐射跃迁及光电离过程中的应用，分析了分区 DH 模型作为简化工具的有效性^[33]。2024 年，Chang 进一步将分区 DH 模型的应用拓展到了类 He 离子 $n=3 \rightarrow n=2$ 跃迁受等离子体屏蔽的影响^[93]，验证了对于 $n=3 \rightarrow n=2$ 跃迁而言，线移比 R_ω 仍为约化屏蔽长度 $\lambda_D=(Z-1)D$ 的函数，并给出了各跃迁的拟合系数。此外，该工作对将 DH 屏蔽势用于电子—电子间相互作用的合理性进行了讨论，认为这一做法并不合理。因为 DH 屏蔽势是通过求解固定原子核周围的泊松方程，并假设等离子体中的自由电子快速运动而离子运动缓慢导出的。该推导过程依赖于一个静止的、无限重的力心（即原子核），而对于两个快速运动且非定域的电子而言，并不存在类似“静止重核”的条件，因此将 DH 屏蔽形式直接推广到电子—电子相互作用缺乏理论依据。此外，如果将 DH 屏蔽势引入电子—电子相互作用势（例如 $\phi_{ij}=\frac{1}{r_{ij}}e^{r_{ij}/D}$ ），则会过度降低电子间的排斥作用，例如 H-离子的两个弱束缚电子，如果将 DH 屏蔽势引入电子—电子间相互作用，那么即使在等离子体密度很高的情况下依然可以保持束缚态，这并不合理。

6.3 本章小结

分区 DH 模型是一套面向标度规律研究的实用化模型。其构建思想在于：标准 DH 模型基于电子密度的线性展开，该展开要求屏蔽势相对较弱，故在接近目标离子的近核区由于此时原子核库伦势迅速增大而失效。分区 DH 模型据此按半径对空

间分区，内区近似保留纯库仑势、外区采用标准 DH 模型的 Yukawa 型指数衰减势，并保证内外区边界处屏蔽势连续。

适用区间方面，分区 DH 模型继承标准 DH 模型，主要适用于理想/弱耦合等离子体，同时也要求体系处于热力学平衡状态，同样，模型适用须满足时空判据，即所考虑原子过程的时间尺度应显著不同于等离子体振荡的时间尺度，且为保证近程修正合理，德拜球半径应远小于屏蔽长度，同时所涉原子过程空间尺度也应小于屏蔽长度。这些前提界定了分区 DH 模型作为简化工具的有效边界。

分区 DH 模型优势在于保留了标准 DH 模型形式简单、物理图像清晰的特点，仅依赖屏蔽长度与德拜球半径两个参数，又修正了标准 DH 在近核区的缺陷；基于该模型，课题组系统研究了类 H、类 He、类 Ne、类 C 等电子序列离子跃迁能量与振子强度随屏蔽强度的变化，证明谱线线移比与振子强度相对变化同约化屏蔽长度之间存在较明确的标度规律，可为等离子体诊断提供可解析、可外推的工具。在实验对比方面，分区 DH 模型在实验条件下 Al^{11+} 离子 $\text{He}\alpha$ 线与 Cl^{15+} 离子 $\text{He}\beta$ 线的线移计算中均取得了与实验相符的结果，并且分区 DH 与离子球模型对线移随电子密度的标度预测存在差异，这一差异可作为判别模型适用性的实验依据。

7 原子态相关等离子体屏蔽模型的应用研究

分区 DH 模型代表了一种务实的理论综合，它保留了标准 DH 模型计算简便的核心优势，同时通过空间分区策略修正了 Yukawa 型势的近程缺陷。然而，分区 DH 模型与本文此前所述所有模型一样，均建立在热力学平衡假设之上，体系电子分布须满足 Fermi-Dirac 或玻尔兹曼分布，电子分布偏离平衡的影响未被考虑进来。课题组发展的原子态相关等离子体屏蔽 (ASD) 模型正是从这一关键物理缺口出发：在自洽 TF 模型框架中引入能带电子贡献，并通过非平衡系数统一纳入各类电子—离子间非弹性散射过程对非平衡等离子体电子分布的贡献，为宽广参数区间的等离子体屏蔽提供了一套统一的理论框架。

7.1 模型精细计算框架的建立

基于自洽 TF 模型，[周福阳](#)于 2021 年提出了原子态相关等离子体屏蔽模型 (Atomic-state-dependent screening model, ASD)，旨在为宽温度和密度范围的温/热稠密等离子体提供统一的电子屏蔽描述^[23]。该模型核心在于确定靶离子周围的等离子体电子密度分布 $n(r)$ 。如我们前文所述，在诸如 DH、自洽离子球模型等基于单原子近似的等离子体屏蔽模型中，仅考虑了总能量 $E>0$ 部分的自由电子对等离子体屏蔽的贡献。然而，在温热稠密等离子体中，目标离子的外层轨道将展宽为能带。等离子体电子可通过与目标离子之间的三体复合、辐射复合、碰撞电离等非弹性散射过程被布居到这些能带上。这些能带电子尽管总能量 $E<0$ ，依然会对等离子体屏蔽产生贡献。在原子态相关等离子体屏蔽模型中，这部分能带电子对等离子体屏蔽的贡献被考虑了进来。该模型假设等离子体中 $E>0$ 的自由电子由于电子—电子和电子—离子弹性碰撞过程具有很大的反应速率，自由电子分布可以在极短时间内达到平衡，从而可直接使用 Fermi-Dirac 分布描述；而对于能量为负的能带电子，其分布受三体复合、碰撞电离等非弹性碰撞过程主导，这些过程的速率远低于弹性碰撞，在短脉冲激光产生等离子体的时间尺度内可能无法达到平衡，因此理论上讲需要求解速率方程来得到其分布情况。基于稳态近似，该工作提出总等离子体电子密度为能带电子与自由电子贡献之和

$$n(r)=\frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left[\int_{\varepsilon_0}^{-\phi(r)} f_{FD}(\varepsilon,r)\chi(\varepsilon,r)\varepsilon^{1/2}d\varepsilon+\int_{-\phi(r)}^{\infty} f_{FD}(\varepsilon,r)\varepsilon^{1/2}d\varepsilon\right],(24)$$

式中 ε_0 为能带电子动能下限， $\chi(\varepsilon,r)$ 为非平衡系数，基于稳态近似并结合经典散射理论，可给在三体复合过程占主导的情况下 $\chi(\varepsilon,r)$ 的解析形式

$$\chi_{TBR}(\varepsilon,r)=2\sqrt{\frac{E_r}{\pi k_b T_e}}\exp\left[-\frac{E_r}{k_b T_e}\right]/\text{Erf}\left[\sqrt{\frac{E_r}{k_b T_e}}\right],(25)$$

式中 $E_r=|\varepsilon+\phi(r)|$ 为能带电子总能量的绝对值。由于能带电子与靶离子束缚电子之间的泡利不相容原理，能带电子只能占据未被占据的外壳层轨道。由此能带电子动能下限可由 $\varepsilon_0=E_b-\phi(r)$ 得到，其中 E_b 为最外层束缚电子能量，其取值对目标离子周围的电子分布有显著影响。

此时，目标离子周边总的有效屏蔽势 $\phi(r)$ 由核电荷、束缚电子密度 $n_b(r)$ 和空间净余电荷波动 $\delta n(r)$ 共同决定：

$$\phi(r)=-\frac{Z}{r}+\int \frac{n_b(r')+\delta n(r')}{|r-r'|} dr', (26)$$

由于有效屏蔽势 $\phi(r)$ 与等离子体电子密度 $n(r)$ 互相耦合，需通过自洽场方法迭代求解。

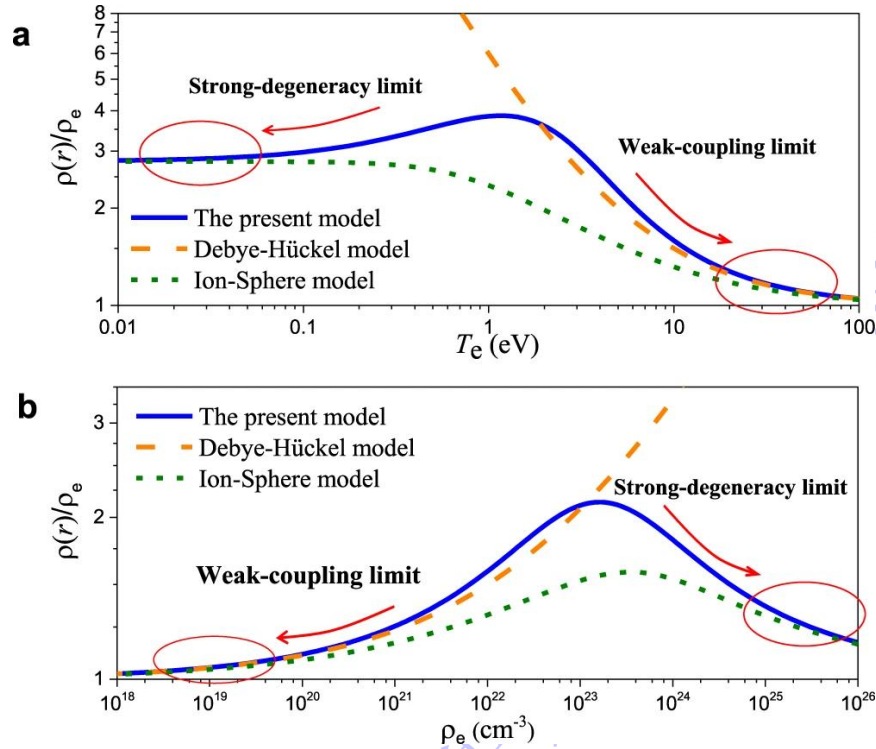


图 7 当有效势 $\phi(r)=1/a_{ws}$ 时 ASD 模型与 DH 模型及离子球模型电子密度比较，其中 a_{ws} 即为 Wigner-Seitz 半径。(a)固定平均电子密度 $n_0=1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ，改变电子温度。(b)固定电子温度 $k_b T_e=10 \text{ eV}$ ，不同电子密度。图中 $\rho(r)$ 即电子密度 $n(r)$ ， ρ_e 即平均电子密度 n_0 （引自周福阳等的论文“Atomic-state-dependent screening model for hot and warm dense plasmas”, Communication

Fig. 7 Comparison of the electron density calculated using the ASD model, the DH model, and the ion sphere model for the effective potential $\phi(r)=1/a_{ws}$, where a_{ws} is the Wigner–Seitz radius. (a) Fixed average electron density $n_0=1\times 10^{22}\text{cm}^{-3}$ with different electron temperature. (b) Fixed electron temperature $k_bT_e=10\text{ eV}$ with different electron densities. In the figure, $\rho(r)$ denotes the electron density $n(r)$, and ρ_e denotes the average electron density n_0 (from Zhou Fuyang et al., “Atomic-state-dependent screening model for hot and warm dense plasmas”, Communications Physics, 4, 148 (2021), doi: 10.1038/s42005-021-00652-x; used under the Creative Commons Attribution 4.0 license, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

为验证模型的有效性，ASD 模型被用于在固定密度不同温度以及固定温度不同密度条件下计算电子密度，并与 DH 模型及离子球模型进行了对比。如图 7 所示，在弱耦合极限下，原子态相关等离子体屏蔽模型收敛于 DH 模型，而在强简并极限下，该模型收敛到离子球模型，这一结果表明原子态相关等离子体屏蔽模型可在宽等离子体参数区间为等离子体电子屏蔽提供一套统一的理论框架。随后，该模型又被用于 $\text{Al}^{11+}\text{He}\alpha$ 线和 $\text{Cl}^{15+}\text{He}\beta$ 线在等离子体中的线移计算，并且都取得了与实验相符的结果，成为少数可同时与两个实验结果均相符的理论模型之一。如图 8 所示，分区 DH 模型以及 ASD 模型计算所得线移均能与 Al^{11+} 和 Cl^{15+} 的实验结果相符^[23,32]。此外，该模型还被用于对中等耦合超冷等离子体的计算，所获得的电荷密度波动 δn 与在这一等离子体参数区间更为精确的经典分子动力学模拟结果高度一致，而如果自由电子和能带电子均采用 Fermi-Dirac 分布则会明显高估近核区电子密度，使用 DH 模型则会显著低估近核区电子密度。

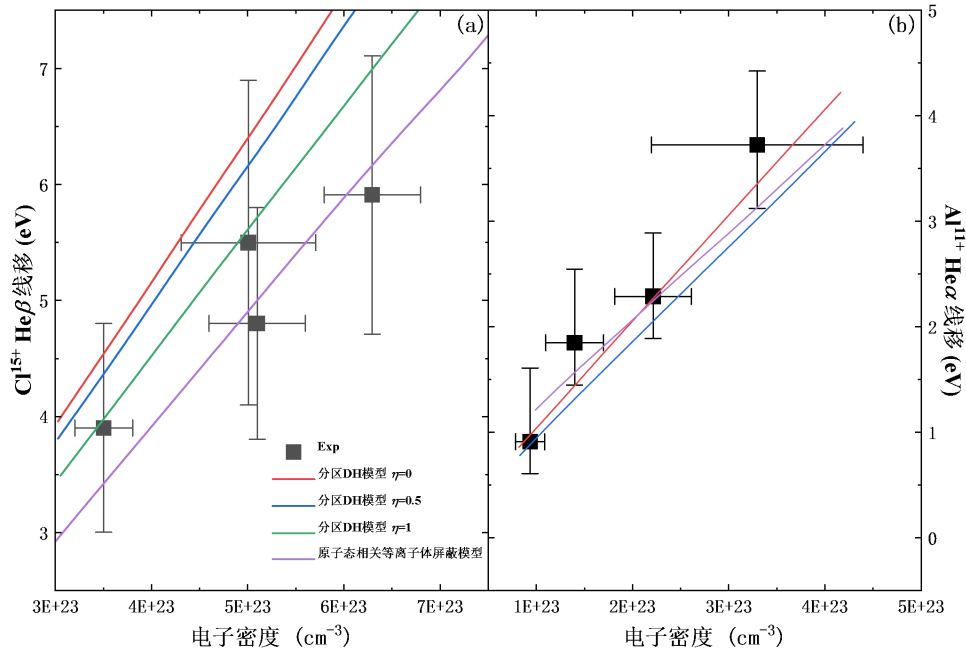


图 8 利用分区 DH 模型及 ASD 模型计算 Cl^{15+} He β 线及 Al^{11+} He α 线线移，并与实验结果进行对比。分区模型包含 $\eta=0, 0.5, 1$ 三组参数的计算结果，其中 $\eta=0$ 对应传统 DH 模型，分区 DH 模型 Al^{11+} 的计算取温度 $k_b T_e = 250$ eV， Cl^{15+} 取温度 $k_b T_e = 600$ eV^[32]，而 ASD 模型 Al^{11+} 取温度 $k_b T_e = 300$ eV， Cl^{15+} 取温度 $k_b T_e = 625$ eV^[23]。

Fig. 8 Comparison of the line shifts of the Cl^{15+} He β and Al^{11+} He α lines calculated using the partitioned DH model and the ASD model with experimental results. The partitioned model includes calculations with three sets of parameters: $\eta=0, 0.5$ and 1 , where $\eta=0$ corresponds to the conventional DH model. For the partitioned DH model, the temperature used for the Al^{11+} is $k_b T_e = 250$ eV, and for the Cl^{15+} is $k_b T_e = 600$ eV^[32]. For the ASD model, the temperature used for the Al^{11+} is $k_b T_e = 300$ eV, and for the Cl^{15+} is $k_b T_e = 625$ eV^[23].

7.2 基于原子态相关等离子体屏蔽模型的相关工作

在原子态相关等离子体屏蔽模型建立后，[路思梅](#)首先于 2024 年将其应用于研究温/热稠密等离子体 C^{5+} 离子的光电离过程。该研究发现，由于计入了能带电子的贡献，其电荷密度波动 $\delta n(\mathbf{r})$ 显著大于仅考虑 $E > 0$ 自由电子的 TF 模型。此外，对于低能区域，原子态相关等离子体屏蔽模型得到的截面势形共振峰位置与 DH 模型的结果存在显著差异，这源于两种模型对屏蔽效应的不同描述^[94]。在此基础上，路思梅等人于 2025 年进一步将 ASD 模型应用于类 H 等电子序列离子在太阳内部热

稠密等离子体条件下的光电离动力学研究^[95]。该研究发现等离子体屏蔽效应显著增大了光电离截面，而等离子体屏蔽对截面的影响随原子序数增大而减小，对激发态的影响比基态更为显著。在低密度等离子体中 ASD 模型与 DH 模型结果一致，但在高密度下 DH 模型因忽略电子简并效应而高估了等离子体电子密度。同年，路思梅等人还基于 ASD 模型研究了 Fe^{25+} 离子光电离截面的低能特征，分析了屏蔽势、连续波函数以及能级布居随等离子体密度的变化，揭示了截面在低能区服从 Wigner 阈值定律。随着能量逐渐增大，等离子体屏蔽引起的低能特征出现，并进而对截面产生显著影响^[96]。

在 2024 年，[本文作者与周福阳等人合作](#)，对 ASD 模型进行了进一步发展^[97]。在原版 ASD 模型中，仅考虑了三体复合过程对于能带电子布居的贡献，而未考虑更多诸如电子碰撞电离、辐射复合、双电子复合等电子-离子非弹性散射过程对于能带电子布居的贡献。在本工作中，我们将不同电子—离子非弹性散射过程对电子分布和屏蔽势的贡献通过对非平衡系数 χ 的影响以一套统一的方法考虑进来，将 χ 拓展为不同非弹性散射过程贡献求和的形式

$$\chi = \chi_{TBR} + \sum_P \chi_P, \quad (27)$$

式中 χ_{TBR} 为只考虑三体复合时的非平衡系数，而 χ_P 则为特定非弹性散射过程 P 对于非平衡系数的贡献。三体复合过程由于速率正比于电子密度的平方，在温热稠密等离子体中往往占据非弹性散射过程的主导地位，而其他过程贡献则以三体复合过程为基准，通过一阶微扰方式得到，即 $\chi_P = \eta_P \chi_{TBR}$ ，式中系数 η_P 为

$$\eta_P = \frac{R_P^{O+} N_P^{O+}}{R_{TBR}^{q+} N_{TBR}^{q+}}, \quad (28)$$

式中 R_P^{O+} 和 N_P^{O+} 分别为特定非弹性散射过程 P 的速率系数以及初态离子布居数，而 R_{TBR}^{q+} 和 N_{TBR}^{q+} 则分别为对应同一末态的三体复合过程速率系数以及初态离子布居数。

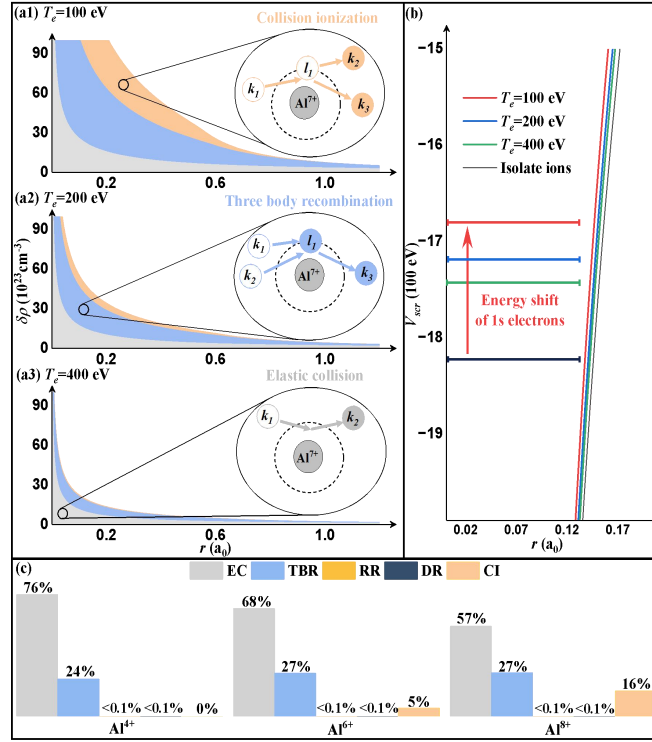


图 9 (a1-a3) 在固体密度、电子温度分别为 100、200、400 eV 条件下，不同非弹性原子过程对 Al^{7+} 等离子体电子密度涨落 δn 的贡献（图中 $\delta\rho$ 即为 δn ）；（b）嵌入相应等离子体中 Al^{7+} 的屏蔽势及其 1s 电子结合能；（c）在固体密度、电子温度 $k_b T_e = 85 \text{ eV}$ 的 Al 等离子体中，不同原子过程对 IPD 的贡献。EC：弹性碰撞，TBR：三体复合，RR：辐射复合，DR：双电子复合，CI：碰撞电离 (引自作者的论文“*Ionization Potential Depression Model for Warm/Hot and Dense Plasmas*”, Chinese Physics Letters, 41, 085202 (2024), doi: 10.1088/0256-307X/41/8/085202)。

Fig. 9 (a1–a3) Contributions of different inelastic atomic processes to the electron density fluctuation δn (denoted as $\delta\rho$ in the figure) of Al^{7+} plasma at solid density and electron temperatures of 100, 200, and 400 eV, respectively. (b) Screening potential and the 1s electron binding energy of Al^{7+} embedded in the corresponding plasma. (c) Contributions of different atomic processes to the IPDs in an Al plasma at solid density and electron temperature $k_b T_e = 85 \text{ eV}$. EC: elastic collision, TBR: three-body recombination, RR: radiative recombination, DR: dielectric recombination, CI: collisional ionization (from the authors’ paper, “*Ionization Potential Depression Model for Warm/Hot and Dense Plasmas*”, Chinese Physics Letters, 41, 085202 (2024), doi: 10.1088/0256-307X/41/8/085202).

如图 9 所示，基于改进的 ASD 模型计算表明，三体复合和碰撞电离过程对温热稠密等离子体中目标离子周围屏蔽势的贡献至关重要，而双电子复合和辐射复合的贡献则显著较小，因此在温热稠密等离子体的屏蔽势建模中，除弹性碰撞外，三体复合和碰撞电离过程必须纳入考量。

改进的模型被用于温热稠密等离子体 IPD 的研究中，研究发现，若忽略非弹性碰撞过程（即只考虑由于弹性散射过程产生的总能量 $E>0$ 的自由电子对屏蔽势的贡献，对应 TF 模型自洽求解结果），会对 IPD 造成显著低估，且几乎不显示温度依赖性，而完整模型则因计入了对温度和密度高度敏感的非弹性碰撞过程，展现出显著的温度依赖性。该模型成功复现了 Al 等离子体在宽温度和密度范围内的最新实验 IPD 结果，并在 1s 空心态 Al 离子这类典型的非局域热力学平衡体系的 IPD 下降计算中取得与实验相符的结果。此外对于空心 Al 离子，还发现计算结果对具体的原子过程高度敏感：若忽略泵浦激光对能带电子分布的选择效应，则会造成对于空心态 Al 离子 IPD 的显著低估。如图 10 所示，在这一工作中，我们还将不同等离子体参数区间使用改进模型的 IPD 计算结果与其他模型进行了比较，发现在固体密度约 100eV 温度下，改进的 ASD 模型结果接近 EK 模型并优于 SP 模型；而在更高温度和密度条件下，模型结果更接近 SP 模型，显著低于 EK 模型。该模型揭示了 LCLS 和 Orion 实验分别支持 EK 和 SP 模型的物理根源在于不同温度密度下非弹性碰撞过程的贡献差异。

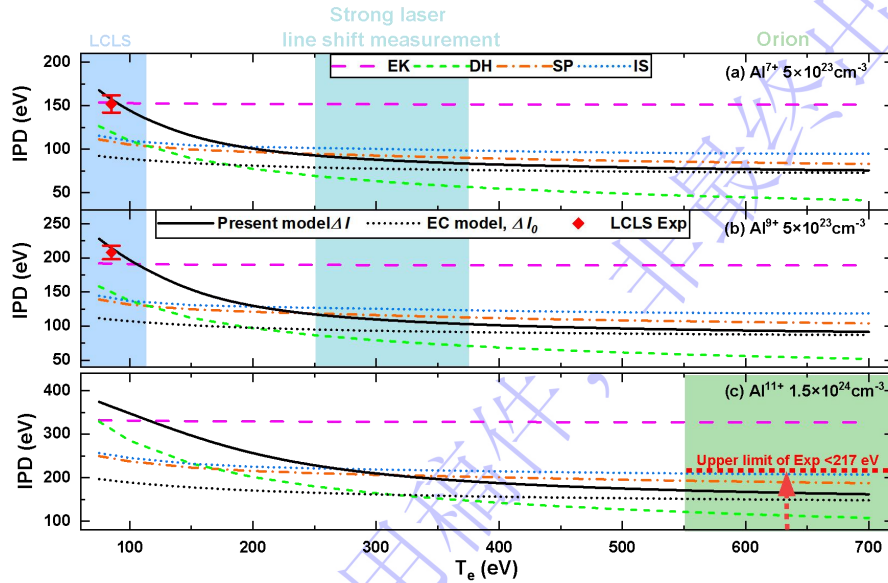


图 10 在固定电子密度下 (Al^{7+} 和 Al^{9+} 为 $5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$, Al^{11+} 为 $1.5 \times 10^{24} \text{cm}^{-3}$), Al^{7+} , Al^{9+} 和 Al^{11+} 离子的 IPD 随温度的变化关系。 ΔI 表示改进 ASD 模型的计算结果, ΔI_0 为未包含非弹性碰撞过程贡献的计算结果, 也就是 TF 模型自洽求解结果。图中还展示了其他理论模型及实验数据以作比较 (引自作者的论文“*Ionization Potential Depression Model for Warm/Hot and Dense Plasmas*”, Chinese Physics Letters, 41, 085202 (2024), doi: 10.1088/0256-307X/41/8/085202)。

Fig. 10 IPDs as a function of temperature for Al^{7+} , Al^{9+} , and Al^{11+} ions at fixed electron densities ($5.0 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ for Al^{7+} and Al^{9+} , and $1.5 \times 10^{24} \text{cm}^{-3}$ for Al^{11+}). ΔI represents the results calculated by the revised ASD model, while ΔI_0 corresponds to the results without the contribution of inelastic collision processes, i.e., the self-consistent solution of the TF model. Also shown for comparison are results from other theoretical models and experimental data (from the authors' paper, “*Ionization Potential Depression Model for Warm/Hot and Dense Plasmas*”, Chinese Physics Letters, 41, 085202 (2024), doi: 10.1088/0256-307X/41/8/085202).

在 2025 年, 我们又进一步对 ASD 模型进行了进一步拓展^[98]。在温稠密等离子体中, 离子间距很小, 近邻离子对靶离子的影响不可忽略。该工作将近邻离子的影响归纳为三个相互关联的方面: (1) 近邻离子的直接库仑势直接影响目标离子周围的屏蔽势。(2) 由于等离子体电子的屏蔽效应以及周围离子的库伦势影响, 目标离子的外层轨道将展宽为能带。电子布居于这些能带中时, 尽管电子的总能量 $E < 0$, 但与固体中的情况类似, 电子将不再局域在某一个离子周围, 而是可以在不同近邻离子之间穿行, 变得非局域化。这一特征与 $E > 0$ 的自由电子类似。这些非局域化的电子可被视为已电离。这与孤立原子的情况不同, 在孤立原子中, 只有当电子 $E > 0$ 时, 电子才可被视为电离。电离条件的变化会直接影响到等离子体中束缚电子的电离阈值, 并进一步影响对连续态及涉及连续态的原子过程的描述, 从而对等离子体屏蔽模型整体产生影响。(3) 等离子体中电子可通过三体复合 (TBR)、双电子复合 (DR) 等非弹性碰撞过程布居到这些连续的能带上。由于能带中电子能量分布连续, 尽管这些布居在能带中的电子 $E < 0$, 其对等离子体屏蔽的贡献不再像普通处于分立轨道的束缚电子那样, 可以通过分立的光谱项来进行区分, 而是与自由电子类似, 变得不可区分, 因此其对等离子体屏蔽的贡献也与自由电子类似, 应通过整体的等离子体屏蔽势考虑进来。

在考虑近邻离子库伦势直接贡献，并基于平均场近似的条件下，目标离子周围的屏蔽势可写作

$$\phi_{\text{scr}}(r) = -\frac{Z}{r} + \int_0^{r_0} \frac{n_b(r') + \delta n(r')}{|r-r'|} dr' - \frac{Z_n}{|R-r|} \quad (|r| < r_0), \quad (29)$$

其中 r_0 为有效屏蔽势 ϕ_{scr} 在目标离子和近邻离子之间取最大值的径向位置，可视为两离子的边界。第三项 $-Z_n/|R-r|$ 为近邻离子在超越边界后的库伦势残余， Z_n 为近邻离子的有效残余电荷数。在分布函数能量下限选择上，该工作认为最低已并入连续态的外壳层已扩展为连续的能带，布居在该壳层的电子被计入屏蔽势，该壳层的轨道能量被取为电子总能量的下限。同时，激发到该连续能带的电子被视为电离。该工作发现，近邻离子对温稠密等离子体中的 IPD 有显著影响，且导致比未考虑近邻离子时更弱的温度依赖性，表明能带电子的贡献与近邻离子直接库伦势的贡献之间存在潜在的竞争机制。该模型与 Al、Mg 和 Si 等离子体在宽温度（18–700 eV）和密度（1–3 倍固体密度）范围内的实验结果显示出良好的一致性，而在 1s 空心态 Al 离子 IPD 的计算中也取得了与实验接近的结果，而与实验存在的差异可能正来源于先前工作中讨论的非平衡效应影响。

2026 年，周福阳为了研究中等耦合等离子体中离子关联效应对电子屏蔽的影响，将 ASD 模型推广到双离子情形^[99]，引入两离子有效屏蔽势

$$\phi(r, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = -\frac{Q_1}{|r-\mathbf{R}_1|} - \frac{Q_2}{|r-\mathbf{R}_2|} + \int \frac{e}{|r-r'|} [n(r', \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) - n_0] dr', \quad (31)$$

电子密度 $n(r', \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ 则仍由(24)式给出。与先前工作相同，有效屏蔽势及电子密度均通过自洽场方法得到。

将获得的双中心势对应的电子密度 $n(r', \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ 通过与在 $\mathbf{R}_2$ 处离子只考虑单中心情况下得到的电子密度 $n(r', \mathbf{R}_2)$ 比较，即可获得处于 $\mathbf{R}_1$ 处的目标离子诱导的电荷密度波动。研究发现，两离子间关联效应造成目标离子周围电荷密度呈现非球对称分布，出现双峰结构。而由于缺乏对于离子间关联的考量，诸如 DH 模型等传统模型在中等/强耦合等离子体中将显著低估等离子体屏蔽效应。为验证模型有效性，该

工作在超冷中性等离子体条件下使用经典分子动力学方法与改进的模型计算结果进行了比较,改进的模型与分子动力学方法计算结果吻合良好。

此外,该工作发现中等耦合等离子体中屏蔽效应依赖于两离子电荷态 Q 的正负。例如对 H^+-H^+ 相互作用,双中心 ASD 及分子动力学方法给出的等离子体屏蔽效应强于 DH 模型,而对 H^--H^+ 相互作用则相反,表明非线性电子密度分布下屏蔽效应并非简单正比于目标离子电荷态,而与电荷态正负无关。该工作还研究了离子关联效应对等离子体输运性质的影响,研究发现离子关联效应导致 Coulomb 对数 Λ_{ii} 下降约 10%–30%,这表明对于中等/强耦合且弱简并等离子体,离子关联效应不可忽略。

7.3 本章小结

ASD 模型是课题组及合作者发展的、面向宽参数区间统一描述的屏蔽模型。它基于自洽 TF 模型,针对温/热稠密等离子体中目标离子外层轨道展宽为能带这一物理事实,将总能量为负,但可通过三体复合、碰撞电离等非弹性散射过程被布居的能带电子对屏蔽的贡献纳入,并以非平衡系数统一刻画各非弹性散射过程对电子分布的影响。在模型验证方面,ASD 模型可同时与 Cl^{15+} He β 线与 Al^{11+} He α 线两组线移实验相符,成为少数能同时符合两者的理论模型之一。在计入电子碰撞电离、辐射复合、双电子复合等过程并进一步引入近邻离子贡献后,模型成功复现了 Al、Mg、Si 等离子体在宽温度与密度范围内的电离阈值下降实验结果,并揭示了 LCLS 与 Orion 实验分别支持 EK 与 SP 模型的物理根源在于不同温密条件下非弹性碰撞过程贡献的差异。

适用区间方面,ASD 模型在弱耦合极限下收敛于 DH 模型、在强简并极限下收敛于离子球模型,从而在弱耦合到强耦合、非简并到强简并的宽广参数区间内提供了统一的电子屏蔽描述。但 ASD 模型同样基于稳态近似得到,模型在含时演化系统中并不适用。同时非平衡系数的计算依赖于速率系数的准确计算,而不同原子过程速率系数本身也会受到等离子体屏蔽影响,因此当前 ASD 模型中非平衡系数的计算近似程度仍然很高。此外,当前 ASD 模型对于等离子体电子分布的描述依

然采用经典分布函数方式，未考虑电子波动性对电子空间分布的影响，对于等离子体电子的空间分布会存在偏差。当前分区 DH 模型以及 ASD 模型简单对比如表 3 所示。

录用稿件，非最终出版稿

表 3 分区 DH、ASD 模型简单对比。

Table 3 A brief comparison of DH and ASD models.

模型	核心物理假设	屏蔽势形式	适用区间	主要优势	主要局限	实验/基准验证情况
分区 DH 模型	对空间分区，内区纯库伦势，外区指数衰减势	$\phi_{\text{DH}}(r)=\begin{cases}\phi_{\text{in}}(r)=-Q(\frac{1}{r}-\frac{1}{D+A}) & r\leq A, \\ \phi_{\text{out}}(r)=-Q(\frac{De^{A/D}}{D+A})\frac{e^{-r/D}}{r} & r>A.\end{cases}$	与 DH 模型相同	保留 DH 解析与简洁、修正近核区线性展开失效；仅依赖屏蔽长度与德拜球半径；可导出标度规律	准静态限制；强耦合条件下线性展开失效	<u>Al¹¹⁺及 Cl¹⁵⁺离子线移计算结果与实验符合^[32]；类 H、He、Ne、C 多等电子序列标度规律^[11, 90-92]计算和整理</u>
ASD 模型	计入能带电子对屏蔽的贡献；非弹性散射过程通过非平衡系数 χ 统一纳入	自洽计算得到，无解析形式	弱耦合极限趋于 DH 模型，强简并极限趋于离子球模型，覆盖宽参数区间	宽参数区间统一理论框架；计入非平衡效应与近邻离子影响	依赖稳态近似；非平衡系数近似程度较高；未考虑电子波动性的影响；计算量高于解析模型	<u>Al¹¹⁺及 Cl¹⁵⁺离子线移计算结果与实验符合^[23]；宽参数区间多种离子 IPD 计算结果与实验相符^[97, 98]</u>

8 总结

本文系统梳理了基于单原子近似的等离子体屏蔽模型及其在原子结构计算中的应用。从 TF 模型和离子球模型两类最基本模型的物理图像出发，详细阐述了基于两套模型所发展的各种理论模型的理论基础、数学形式、物理图像、适用范围及局限性，并讨论了不同模型之间的内在联系以及屏蔽效应在原子结构计算中的应用和对光谱性质的影响规律。其中，TF 模型及其线性化形式通过引入单一屏蔽长度的 Yukawa 型势，将等离子体屏蔽效应纳入解析框架，能够覆盖从非简并到简并的宽广参数区间；离子球模型则通过引入有限空间边界条件，抓住了强耦合等离子体中电中性和短程序的核心特征。然而，这两种基础模型各自存在明显的适用范围局限，TF 模型忽略了梯度效应、电子间交换—关联效应及电子波动性、近邻离子离散性的影响，使得模型在这些效应影响显著的强关联等离子体中偏差很大。而离子球模型则在弱耦合条件下因刚性划分离子球的物理图像与实际的动态、长程集体行为不符而适用性存疑。

从这些局限性出发，研究者们沿着两条路径发展了一系列更为精细的模型。从离子球模型衍生出的自洽离子球模型、解析离子球模型、两步 HFS 模型以及 VB-BFC 模型等模型，逐步纳入了电子密度空间非均匀性、电子的量子波动性、能带结构的形成以及束缚—自由电子的连续过渡等关键物理过程。从 TF 模型衍生出的考虑统计涨落的修正德拜模型、余弦屏蔽模型及梯度修正屏蔽模型，则分别从统计涨落、量子简并与衍射效应、电子密度梯度与交换关联效应等不同角度，对标准 DH/TF 模型进行了系统性拓展。这些模型的共同趋势是在保留单原子近似框架的前提下，尽可能纳入更多真实的等离子体物理过程，以拓展模型的参数适用范围。

在此基础上，本文介绍了本课题组近年来利用分区 DH 模型揭示等离子体中原子跃迁标度规律以及基于所发展的原子态相关等离子体屏蔽模型及其在原子结构和参数计算中的应用两方面的研究成果。在利用分区 DH 模型研究标度规律方面，本课题组研究了类 H、类 He、类 Ne、类 C 离子等电子序列中跃迁能量及振子强度随

等离子体屏蔽强度的变化规律，证明谱线线移比 R_ω 以及振子强度相对变化 R_g 与约化屏蔽长度 λ_D 之间存在着较明确的标度规律。所发现的标度规律可为未来等离子体模拟及诊断提供支撑。而在基于 ASD 模型的相关工作中，课题组通过引入能带电子分布的非平衡系数，逐步将各类非弹性散射过程对能带电子布居的贡献逐渐考虑进来，从而考虑了非平衡效应对等离子体电子分布的影响。在此基础上，又进一步引入近邻离子的贡献，拓展了模型在稠密环境中的适用范围。

从现有有限的实验对比来看，不同屏蔽模型在不同等离子体条件下与实验的吻合程度存在差异。例如，在 Cl^{15+} 离子的 $\text{He}\beta$ 线移测量中，分区 DH 模型、ASD 模型和自洽离子球模型均取得了与实验相符的结果；而在 Al^{11+} 离子的 $\text{He}\alpha$ 线移测量中，分区 DH 模型和 ASD 模型无需调节参数即可与实验吻合，自洽离子球模型和解析离子球模型则与实验存在较大偏差。在 Al 等离子体的 IPD 测量中，ASD 模型和 VB-BFC 模型在宽温度和密度范围内与实验结果一致，EK 模型在固体密度约 100 eV 条件下与实验接近，而 SP 模型在更高温度密度条件下更接近实验。这些对比表明，并不存在一个在所有等离子体条件下均优于其他模型的“万能”屏蔽模型；相反，不同模型在不同参数区间的表现各有短长。一个值得注意的领域现状是，绝大多数模型并未以简并参数和耦合参数明确界定自身的定量适用范围，也缺乏定量精度评估，这并非单个模型的缺陷，而是反映了当前领域的一个共性方法论缺口：大部分模型的提出是以物理机制的定性讨论为导向，而非以定量参数空间的系统验证为目标。建立各模型在 Θ - Γ_{ee} 参数空间上的定量适用边界，有赖于未来更系统的实验测量和跨模型的第一性原理基准比对，这也是本领域亟待推进的重要方向。

需要指出的是，本文所讨论的模型均建立在单原子近似框架之上。这一框架在两种极限情形下具有良好的物理基础：在弱耦合极限下，离子间关联较弱，屏蔽效应本质上以各离子独立的德拜屏蔽为主；在强耦合极限下，离子间存在明确的短程序，离子球模型的有限边界条件自然捕捉了近邻离子对目标离子的影响。然而，在中等耦合区域，离子间关联既不可忽略，又不足以形成稳定的短程序来描述，此时单原子近似的物理基础面临最严峻的挑战。近年来，研究者们已开始尝试在单原子近似框架内系统性地纳入多离子效应的修正：两步 HFS 模型中结合 Bloch 定理对

周期性晶格的处理、ASD 模型中近邻离子库仑势的直接引入，以及双中心 ASD 模型对离子间关联电荷密度波动的描述，均可视为在这一方向上的逐步推进。这些工作表明，单原子近似的有效边界并非固定不变，而是随着理论方法的改进在不断向外扩展。然而，定量地确定单原子近似框架在 Θ - Γ_{ee} 参数空间中的失效边界，以及在该边界之外需要何种程度的多离子或系综理论方法方能给出可靠描述，目前仍是一个开放的科学问题，有待于与第一性原理方法的系统基准比对来逐步澄清。

纵观这一领域的发展历程，可以看出一个清晰的演进逻辑：从最简单的解析形式出发，逐步纳入更为真实的物理效应，在计算效率与物理精度之间寻求最优平衡。基于单原子近似的模型因其计算效率高、物理图像清晰、能够处理激发态离子且易于拓展至非平衡态等优势，在当前和可预见的未来仍将是等离子体诊断和模拟中广泛使用的工具。未来这一领域的发展方向可能包括：进一步将模型推广至更为复杂的非平衡等离子体条件，发展适用于复杂离子（如开壳层、内壳层空穴态）的高效屏蔽算法，以及结合机器学习方法构建覆盖全参数空间的快速屏蔽势预测模型。随着 X 射线自由电子激光等先进实验技术的持续发展，更多高精度的实验数据将为模型验证与改进提供关键基准，理论与实验的紧密结合将推动等离子体屏蔽物理研究迈向新的高度。

参考文献

- [1] Tayler R J 1994 *The Stars: Their Structure and Evolution* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Helled R, Anderson J D, Podolak M, Schubert G 2010 *Astrophys. J.* **726** 15
- [3] Vinko S M, Ciricosta O, Cho B I, Engelhorn K, Chung H K, Brown C R D, Burian T, Chalupský J, Falcone R W, Graves C, Hájková V, Higginbotham A, Juha L, Krzywinski J, Lee H J, Messerschmidt M, Murphy C D, Ping Y, Scherz A, Schlotter W, Toleikis S, Turner J J, Vysin L, Wang T, Wu B, Zastra U, Zhu D, Lee R W, Heimann P A, Nagler B, Wark J S 2012 *Nature* **482** 59
- [4] Gomez M R, Slutz S A, Sefkow A B, Sinars D B, Hahn K D, Hansen S B, Harding E C, Knapp P F, Schmit P F, Jennings C A, Awe T J, Geissel M, Rovang D C, Chandler G A, Cooper G W, Cuneo M E, Harvey-Thompson A J, Herrmann M C, Hess M H, Johns O, Lippa D C, Martin M R, McBride R D, Peterson K J, Porter J L, Robertson G K, Rochau G A, Ruiz C L, Savage M E, Smith I C, Stygar W A, Vesey R A 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 155003

- [5] Ciricosta O, Vinko S M, Chung H K, Cho B I, Brown C R D, Burian T, Chalupsk Y J, Engelhorn K, Falcone R W, Graves C, Hájková V, Higginbotham A, Juha L, Krzywinski J, Lee H J, Messerschmidt M, Murphy C D, Ping Y, Rackstraw D S, Scherz A, Schlotter W, Toleikis S, Turner J J, Vysin L, Wang T, Wu B, Zastrau U, Zhu D, Lee R W, Heimann P, Nagler B, Wark J S 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 065002
- [6] Ciricosta O, Vinko S M, Barbrel B, Rackstraw D S, Preston T R, Burian T, Chalupsky J, Cho B I, Chung H, Dakovski G L, Engelhorn K, Hajkova V, Heimann P, Holmes M, Juha L, Krzywinski J, Lee R W, Toleikis S, Turner J J, Zastrau U, Wark J S 2016 *Nat. Commun.* **7** 11713
- [7] Hoarty D J, Allan P, James S F, Brown C R D, Hobbs L M R, Hill M P, Harris J W O, Morton J, Brookes M G, Shepherd R, Dunn J, Chen H, Von Marley E, Beiersdorfer P, Chung H K, Lee R W, Brown G, Emig J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 265003
- [8] Bailey J E, Nagayama T, Loisel G P, Rochau G A, Blancard C, Colgan J, Cosse P, Faussurier G, Fontes C J, Gilleron F, Golovkin I, Hansen S B, Iglesias C A, Kilcrease D P, MacFarlane J J, Mancini R C, Nahar S N, Orban C, Pain J C, Pradhan A K, Sherrill M, Wilson B G 2015 *Nature* **517** 56
- [9] [Salzman D 1998 *Atomic Physics in Hot Plasmas* \(New York: Oxford University Press\)](#)
- [10] Nguyen H, Koenig M, Benredjem D, Caby M, Coulaud G E 1986 *Phys. Rev. A* **33** 1279
- [11] Chang T N, Fang T K, Gao X 2015 *Phys. Rev. A* **91** 063422
- [12] Janev R K, Zhang S B, Wang J G 2016 *Matter Radiat. Extrem.* **1** 237
- [13] Mazzitelli G, Mattioli M 2002 *Atom. Data Nucl. Data Tables* **82** 313
- [14] Zeng J, Li Y, Gao C, Yuan J 2020 *Astron. Astrophys.* **634** A117
- [15] Debye P, Hückel E 1923 *Physikalische Zeitschrift* **24** 185
- [16] Rozsnyai B F 1972 *Phys. Rev. A* **5** 1137
- [17] Li X, Rosmej F B, Lisitsa V S, Astapenko V A 2019 *Phys. Plasmas* **26** 033301
- [18] Son S, Thiele R, Jurek Z, Ziaja B, Santra R 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031004
- [19] Li X, Rosmej F B 2025 *Matter Radiat. Extrem.* **10** 027201
- [20] Quarati P, Scarfone A M 2007 *Astrophys. J.* **666** 1303
- [21] Shukla P K, Eliasson B 2008 *Phys. Lett. A* **372** 2897
- [22] Stanton L G, Murillo M S 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033104
- [23] Zhou F Y, Qu Y, Gao J, Ma Y, Wu Y, Wang J 2021 *Commun. Phys.* **4** 148
- [24] Vinko S M, Ciricosta O, Wark J S 2014 *Nat. Commun.* **5** 3533
- [25] Hu S X 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 065001
- [26] Jin R, Abdullah M M, Jurek Z, Santra R, Son S 2021 *Phys. Rev. E* **103** 023203

- [27] Plummer D, Svensson P, Gericke D O, Hollebon P, Vinko S M, Gregori G 2025 *Phys. Rev. E* **111** 015204
- [28] Lin C, Roepke G, Kraeft W, Reinholz H 2017 *Phys. Rev. E* **96** 013202
- [29] Lin C 2019 *Phys. Plasmas* **26** 122707
- [30] Stewart J C, Pyatt K D J 1966 *Astrophys. J.* **144** 1203
- [31] Ecker G, Kröll W 1963 *Phys. Fluids* **6** 62
- [32] Chang T N, Fang T K, Wu C, Gao X 2021 *Phys. Scr.* **96** 124012
- [33] Chang T N, Fang T K, Wu C, Gao X 2022 *Atoms* **10** 16
- [34] Li X, Rosmej F B 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126478
- [35] Glenzer S H, Redmer R 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1625
- [36] Ichimaru S 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 1017
- [37] Liboff R L 1984 *J. Appl. Phys.* **56** 2530
- [38] Feynman R P, Metropolis N, Teller E 1949 *Phys. Rev.* **75** 1561
- [39] Latter R 1955 *Phys. Rev.* **99** 1854
- [40] Yuan J 2002 *Phys. Rev. E* **66** 047401
- [41] Li Y, Wu J, Hou Y, Yuan J 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 145002
- [42] Li X, Jiang G, Wang H, Wu M, Sun Q 2017 *Phys. Scr.* **92** 075401
- [43] Li X, Zheng X, Deng P, Jiang G 2018 *Eur. Phys. J. D* **72** 176
- [44] Chen Z 2019 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **237** 106615
- [45] Chen Z, Wang K 2020 *Radiat. Phys. Chem.* **172** 108816
- [46] Zeng J, Li Y, Hou Y, Gao C, Yuan J 2020 *Astron. Astrophys.* **644** A92
- [47] Zeng J, Ye C, Li Y, Yuan J 2022 *Results Phys.* **40** 105836
- [48] Zeng J, Huang Y, Deng A, Gao C, Hou Y, Yuan J 2025 *Phys. Rev. A* **112** 023115
- [49] Chen Z, Tian Y S, Yin Y M, Qi Y Y, Zhao G P, Shen X Z, Wang K 2021 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **266** 107570
- [50] Ma K, Chen C, Chu Y, Jiao Z, Chen Z B 2022 *Few-Body Syst.* **63** 69
- [51] Chen Z 2022 *Phys. Plasmas* **29** 022106
- [52] Singh A K, Dawra D, Dimri M, Jha A K S, Pandey R K, Mohan M 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126369
- [53] Rosmej F B, Fontes C J 2024 *Matter Radiat. Extrem.* **9** 067202

- [54] Bekx J J, Son S, Ziaja B, Santra R 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033061
- [55] Li X, Rosmej F B 2025 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **345** 109563
- [56] Xie L Y, Wang J G, Janev R K, Qu Y Z, Dong C Z 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 125
- [57] Chen Z, Ma K, Hu H, Wang K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 072120
- [58] Chang T N, Fang T K, Ho Y K 2013 *Phys. Plasmas* **20** 092110
- [59] Ma Y, Liu L, Xie L, Wu Y, Qu Y, Wang J 2020 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **241** 106731
- [60] Ge D, Zhao G P, Qi Y Y, Chen C, Gao J W, Hou H S 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 083201 (in Chinese)
[戈迪, 赵国鹏, 祁月盈, 陈晨, 高俊文, 侯红生 2024 物理学报 **73** 083201]
- [61] Zhang S B, Wang J G, Janev R K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 023203
- [62] Zhang S B, Wang J G, Janev R K 2010 *Phys. Rev. A* **81** 032707
- [63] Zhang S B, Wang J G, Janev R K, Chen X J 2011 *Phys. Rev. A* **83** 032724
- [64] Zhang S B, Wang J G, Janev R K, Qu Y Z, Chen X J 2010 *Phys. Rev. A* **81** 065402
- [65] Liu L, Wang J G 2016 *Matter Radiat. Extrem.* **1** 114
- [66] Gao C, Zeng J, Yuan J 2011 *High Energy Density Phys.* **7** 54
- [67] Li X 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 053201 (in Chinese) [李向东 2011 物理学报 **60** 053201]
- [68] Qi Y Y, Wang J G, Janev R K 2016 *Phys. Plasmas* **23** 073302
- [69] Qi Y Y, Wang J G, Janev R K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 062110
- [70] Wu J Y, Qi Y Y, Cheng Y J, Wu Y, Wang J G, Janev R K, Zhang S B 2020 *Phys. Plasmas* **27** 043301
- [71] Lin C Y, Ho Y K 2011 *Phys. Scr.* **T144** 014051
- [72] Lin C Y, Ho Y K 2010 *Eur. Phys. J. D* **57** 21
- [73] Lin C Y, Ho Y K 2011 *Comput. Phys. Commun.* **182** 125
- [74] Ghoshal A, Ho Y K 2010 *Phys. Rev. E* **81** 016403
- [75] Zhang L, Qi X, Zhao X, Meng D, Xiao G, Duan W, Yang L 2013 *Phys. Plasmas* **20** 113301
- [76] Zhang L, Zhao X, Wan J, Xiao G, Duan W, Qi X, Yang L 2014 *Phys. Plasmas* **21** 093302
- [77] Li W G, Cheng Y, Wu J Y, Wu Y, Wang J G, Zhang S B 2021 *Phys. Plasmas* **28** 012708
- [78] Chen Z, Qi Y Y, Sun H, Zhao G, Liu P, Wang K 2020 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **253** 107170
- [79] Chen Z 2025 *Eur. Phys. J. Plus* **140** 782

- [80] Chen Z 2026 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **348** 109706
- [81] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 103504
- [82] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K, Yan J 2018 *Matter Radiat. Extrem.* **3** 300
- [83] Zhao G P, Xie L Y, Liu L, Wang J G, Janev R K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 083302
- [84] Zhao G P, Chen C, Liu L, Chen Z B, Qi Y Y, Wang J G 2022 *Phys. Plasmas* **29** 053301
- [85] Chen C, Zhao G P, Qi Y Y, Liu L, Chen Z B, Wang J G 2022 *Phys. Plasmas* **29** 072901
- [86] Chen C, Zhao G P, Chen Z B, Qi Y Y, Liu L, Wu Y, Wang J G 2023 *Phys. Plasmas* **30** 123503
- [87] Rouse C A 1967 *Phys. Rev.* **163** 62
- [88] Margenau H, Lewis M 1959 *Rev. Mod. Phys.* **31** 569
- [89] Chang T N, Fang T K 2013 *Phys. Rev. A* **88** 023406
- [90] Fang T K, Wu C S, Gao X, Chang T N 2017 *Phys. Rev. A* **96** 052502
- [91] Wu C, Chen S, Chang T N, Gao X 2019 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52** 185004
- [92] Wu C, Wu Y, Yan J, Chang T N, Gao X 2022 *Phys. Rev. E* **105** 015206
- [93] Chang T N, Fang T K, Sun R, Wu C, Gao X 2024 *Atoms* **12** 4
- [94] Lu S M, Zhou F Y, Xie L Y, Ma Y L, Zhao G P, Gao X, Wu Y, Wang J G 2024 *Phys. Rev. E* **109** 055205
- [95] Lu S M, Zhou F Y, Gao X, Xie L, Zhao G, Wu Y, Wang J 2025 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **340** 109447
- [96] Lu S M, Zhou F Y, Gao X, Wu Y, Wang J G 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 113202 (in Chinese) [路思梅, 周福阳, 高翔, 吴勇, 王建国 2025 物理学报 **74** 113202]
- [97] Wu C, Zhou F Y, Yan J, Gao X, Wu Y, Zeng C, Wang J 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 085202
- [98] Wu C, Sun J, Song Q, Zeng C, Gao X, Yan J 2025 *Sci. Rep.* **15** 39678
- [99] Zhou F Y, Meng G, Qu Y, Wu Y, Wang J 2026 *Matter Radiat. Extrem.* **11** 047203

Plasma Screening Models Based on the Single-Atom Approximation and Their Applications in Atomic Structure Calculations^{*}

Wu Chen-Sheng^{1)†} Guo Wen-Li¹⁾ Sun Jiao²⁾

1) (Faculty of Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China)

2) (Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

Abstract

The plasma environment significantly affects the atomic structures and parameters of embedded atoms, and accurately describing plasma screening effects is essential for understanding the state and evolution of matter in astrophysical objects and laboratory high-energy-density physics facilities. Owing to their intuitive physical interpretations and moderate computational cost, plasma screening models based on the single-atom approximation are widely employed in plasma diagnostic analysis and numerical simulations. This review systematically surveys the full spectrum of single-atom-based plasma screening models and their implementations in atomic structure computations. The degeneracy parameter Θ and the coupling parameter Γ_{ee} are adopted as a unified classification benchmark. The review is organized along two distinct developmental chains based on these parameters. The first chain originates from the Thomas-Fermi (TF) formalism, encompassing the classical Debye-Hückel (DH) model, the non-extensive modified DH model that accounts for statistical fluctuations, the cosine-screened Coulomb potential, which incorporates quantum diffraction effects, and the gradient-corrected screening model that includes gradient corrections and exchange-correlation effects within the framework of orbital-free density functional theory. This chain traces the theoretical improvements extending from ideal or weakly coupled plasmas to warm dense matter regimes. The second chain starts from the ion-sphere ansatz, evolving from the uniform-electron-density ion-sphere model, self-consistent ion-sphere models that determines the spatial distribution of the electron density self-consistently, the analytical ion-sphere model, to the two-step Hartree-Fock-Slater model, and the valence-band bound-free-continuum screening model. This chain demonstrates progressive refinements

in describing electron non-uniformity and band formation in strongly coupled plasmas. On this theoretical basis, we elaborate two models developed by our group alongside their applications in atomic structure calculations. (1) the partitioned DH model, which corrects the short-range deficiency of the standard DH model through a spatial partitioning strategy. Scaling laws are established for transition-energy shifts and oscillator strengths as functions of the plasma screening intensity across multiple isoelectronic sequences ranging from H-like to C-like ions. (2) the atomic-state-dependent plasma screening model, which incorporates the contribution of band electrons and the influence of inelastic scattering processes on the electron distribution. This model provides a unified screening framework that can be applied in a wide range of plasma parameters, ranging from weakly to strongly coupled regimes and from non-degenerate to strongly degenerate conditions. This review intends to provide the reader a coherent and holistic overview of single-atom-approximation-based plasma screening models. We want to elucidate the intrinsic connections and evolutionary relationships among different models, and present their current applications in atomic structure and parameter calculations. We hope this review can deliver practical guidance for selecting appropriate screening models in plasma atomic structure computations.

Keywords: plasma screening, single-atom approximation, ion-sphere model, Thomas–Fermi model, atomic structure calculations

* Project supported by the Science Challenge Project of China Academy of Engineering Physics (Grant No. TZ2025013), the Basic Research Program of Yunnan Province (Grant No. 202401CF070090), Project of the Regional Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12565002), and Foundation of National Key Laboratory of Computational Physics.

† Corresponding author. E-mail: 20220209@kust.edu.cn