

专题: 相对论原子结构理论、方法与应用

热稠密等离子体中电子碰撞电离过程的研究进展*

罗青波^{1)2)#} 侯永^{1)2)#†} 刘建鹏¹⁾²⁾ 高城¹⁾²⁾ 康冬冬¹⁾²⁾ 袁建民¹⁾³⁾

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学理学院, 极端条件物理及应用湖南省重点实验室, 长沙 410073)

3) (吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

(2026 年 6 月 29 日收到; 2026 年 8 月 27 日收到修改稿)

热稠密等离子体是惯性约束聚变与恒星物理中至关重要的物质形态, 其电离平衡与电荷态分布强烈依赖于电子碰撞电离这一基本原子过程. 系统研究极端条件下的电子碰撞电离, 不仅可为高能量密度物理研究提供关键原子参数, 也有力支撑极端环境下电子结构与状态诊断技术的发展. 与低密度理想等离子体不同, 热稠密环境中的强耦合效应会显著改变原子的能级和波函数, 进而影响电离阈值及电子碰撞电离截面, 这限制了现有等离子体模拟的精度与诊断结果的可靠性. 针对热稠密等离子体的物理复杂性及现有研究方法, 本文系统综述了国际上热稠密等离子体电子碰撞电离的研究进展, 重点介绍了在离子关联模型的框架下, 采用超网链 (hypernetted-chain, HNC) 近似自洽描述环境效应对原子结构的影响; 并在扭曲波 (Distorted-Wave, DW) 近似下研究了环境效应对电子碰撞电离截面的影响. 最后, 本文结合该领域的前沿研究热点与关键科学挑战, 展望了未来可能的发展方向, 为相关领域的后续研究提供参考.

关键词: 热稠密等离子体, 强耦合效应, 原子结构, 电子碰撞电离**DOI:** 10.7498/aps.75.20260920**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260920

1 引言

热稠密等离子体是介于理想弱耦合等离子体与凝聚态物质之间的一类极端物质状态, 广泛存在于惯性约束聚变、强激光与固体靶相互作用、粒子束辐照等实验环境^[1-3], 同时也大量分布于巨行星内核、恒星内部等天体演化体系中^[4-6]. 其电子数密度通常为 $10^{21} \sim 10^{26} \text{ cm}^{-3}$, 温度范围在几十 eV 至数千 eV 之间^[7], 呈现出强耦合与部分电离并存的典型特性. 由于耦合效应的影响, 热稠密等离子体中的原子或离子会发生能级移动与展宽, 导致电离能下降 (Ionization Potential Depression, IPD) 以及谱线展宽等现象. 由于热稠密环境效应对原子结

构的显著影响, 其既不能基于孤立原子模型^[8,9] 进行描述, 也不能采用基于能带结构的凝聚态物理模型^[10] 来描述. 为此, 研究者发展出多种等离子体屏蔽及 IPD 模型去描述环境效应, 1923 年提出了 Debye-Hückel 模型^[11], 该模型将等离子体环境势近似为指数衰减的屏蔽库仑势, 但由于该模型基于 Maxwell-Boltzmann 统计, 仅适用于弱耦合等离子体. 为拓展到强耦合区域, 1963 年 Ecker 与 Kröll 通过引入临界电子密度概念, 提出了 EK 模型^[12], 1966 年 Stewart 与 Pyatt 基于中心离子平均势能的自洽统计处理, 提出了 SP 模型^[13]. 除上述三种应用较广的模型外, 后续发展的模型还包括离子球模型^[14], 涨落模型^[15], two-step Hartree-Fock-Slater 模型^[16], 结构因子模型^[17,18] 以及经典分子动力学

* 计算物理全国重点实验室 (编号: JK2025-02) 和国家自然科学基金 (批准号: 11974424, 12404332, 和 12274384) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: yonghou@nudt.edu.cn

模拟^[19]等. 经过长期的发展, 热稠密等离子体中屏蔽与 IPD 的理论研究已得到极大完善.

电子碰撞电离^[20,21]作为热稠密等离子体中的核心原子过程, 直接决定了等离子体的电离平衡^[22,23]、电荷态分布^[24,25]及电子与离子的弛豫过程^[26,27]导致的非平衡演化^[28,29], 是连接微观粒子行为与宏观物态演化的关键纽带. 针对电子碰撞电离截面的计算, 国际上已发展出多种成熟的理论方法. 其中, 扭曲波 (Distorted-Wave, DW) 近似^[30]因其兼具效率与可靠性而得到了广泛应用. 该方法的核心在于考虑了靶原子势场对散射电子波函数的影响, 散射电子进入势场后不再被视为自由平面波, 而是在靶原子势场中运动的扭曲波, 从而更真实地描述碰撞过程中电子的运动行为. DW 近似既保留了重要的靶原子势场的影响, 又有效避免了过高的计算代价, 因此在电子碰撞电离截面的理论计算中视为最实用的方法之一. 此外, Lotz 半经验方程^[31,32]、库仑玻恩交换 (Coulomb-Born Exchange, CBE) 近似^[33]、两体碰撞偶极 (Binary-Encounter Dipole, BED) 近似^[34]、R 矩阵 (R-matrix, RM)^[35]、密耦合 (Close-Coupling, CC) 近似^[36]等也广泛用于电子碰撞电离截面的计算.

研究热稠密等离子体环境中的电子碰撞电离过程极具挑战性, 既需要精确描述等离子体环境效应对电子结构的影响, 又需要采用合理的截面计算方法. 针对这一难题, 研究者已对该过程开展了大量系统的探究. 例如, 基于一阶玻恩近似 (First Born Approximation, FBA), 通过 Debye-Hückel 模型分析了等离子体屏蔽效应对类 H 离子电子碰撞电离过程的影响^[37]; 采用非球对称的 Debye-Hückel 模型, 探究了热稠密等离子体中 H 离子电子碰撞电离的半经典电离概率^[38]; 针对高 Z 重元素等离子体, 基于 DW 近似, 利用离子球模型系统考察了等离子体环境效应对部分电离 Au 等离子体的原子结构与电子碰撞电离截面的影响^[39]; 采用组态平均 DW 方法, 基于 Debye-Hückel 势去计算高温、不同密度条件下 Ne⁴⁺ 与 Au⁴⁷⁺ 等离子体的电子碰撞电离截面^[40]; 基于平均原子模型, 通过 DW 近似考虑了散射电子的交换效应, 系统计算了稠密环境下 Li、Na、Mg、Al 等轻元素的电子碰撞电离截面^[41]等等. 此外, 为了描述热稠密等离子体中散射电子的瞬时空间局域化, 我们课题组基于离子球模型以及 DW 近似, 引入了动量展宽的波

函数与衰减型扭曲波函数去表征热稠密环境下散射电子的行为, 深入分析了热稠密 Mg⁷⁺ 自由电子波函数动量展宽和动量弛豫效应对电子碰撞电离的影响^[46,47], 计算结果与实验都吻合很好. 尽管已有大量针对热稠密等离子体中电子碰撞电离过程的研究, 但环境效应的影响机制极为复杂, 致使当前尚未形成一套统一、普适的理论处理框架. 这一理论缺口进一步制约了实验探测的精度与理论建模的可信度, 使得相关研究仍面临诸多挑战. 而正是这些挑战, 凸显了深入理解该原子过程对于揭示热稠密等离子体演化物理本质、推动极端条件下物理研究的关键意义. 鉴于此, 本文系统梳理了国际上在该领域的研究进展, 并在此基础上, 对未来可能的发展方向与前沿趋势进行前瞻性展望.

2 等离子体屏蔽模型的理论方法与发展

原子的能级结构以及波函数能直接决定电子碰撞电离的阈值和截面. 因此, 在研究热稠密等离子体环境下的电子碰撞电离过程时, 必须首先阐明环境效应对原子结构的影响. 目前, 国际上用于原子结构计算的代表性程序包括 FAC(Flexible Atomic Code)^[50]、GRASP(General-purpose Relativistic Atomic Structure Package)^[51]、HULLAC (Hebrew University Lawrence Livermore Atomic Code)^[52]、DARC(Dirac Atomic R-matrix Codes)^[53]以及 COWAN CODE^[54]等. 本节所论述的热稠密等离子体原子结构的计算理论是基于 FAC 程序实现的, 具体计算方案如下. 对于孤立原子或离子的状态满足相对论 Dirac 方程

$$H\Psi(r) = E\Psi(r), \quad (1)$$

其中, H 表示具有 N 个电子的原子或离子相对论哈密顿量:

$$H = \sum_{i=1}^N H_D(i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2)$$

这里 $H_D(i)$ 为原子核产生的单电子 Dirac 哈密顿量, $\frac{1}{r_{ij}}$ 表示束缚电子之间的相互作用. 其中单个原子的能量 E 是通过对角化相对论哈密顿量 H 得到. 而原子的波函数 $\Psi(r)$ 是通过基矢态 $\Phi_v(r)$ 展开得到

$$\Psi(r) = \sum_{\nu} b_{\nu} \Phi_{\nu}(r), \quad (3)$$

其中 b_{ν} 是通过对角化哈密顿量 H 得到的展开系数. 基矢态 $\Phi_{\nu}(r)$ 由 N 个单电子 Dirac 自旋量 φ_{nkm} 的乘积反对称和得到:

$$\varphi_{nkm} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(r) \chi_{km}(\theta, \phi, \sigma) \\ i Q_{nk}(r) \chi_{-km}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

式中的 n, k, m 分别为电子的主量子数、相对论角量子数和磁量子数; $\chi_{km}(\theta, \phi, \sigma)$ 为双分量球谐自旋量; $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 分别为径向波函数的大、小分量, 它们是在中心场近似下通过自洽求解单电子 Dirac 方程得到:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) P_{n\kappa}(r) &= \alpha \left[\varepsilon_{n\kappa} - V(r) + \frac{2}{\alpha^2} \right] Q_{n\kappa}(r), \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) Q_{n\kappa}(r) &= \alpha [-\varepsilon_{n\kappa} + V(r)] P_{n\kappa}(r). \end{aligned} \quad (5)$$

其中 α 为精细结构常数, $\varepsilon_{n\kappa}$ 为轨道 $n\kappa$ 的能量本征值, $V(r)$ 为自洽的单电子有效势. 由于上述自洽的单电子有效势 $V(r)$ 为孤立势, 因此 FAC^[50] 仅适用于孤立原子结构的计算. 对于处于等离子环境中的原子或离子, 还需要考虑等离子体环境效应对原子结构的中心势场影响.

2.1 Debye-Hückel 模型

迄今为止, 国际上已发展若干应用广泛的等离子体屏蔽模型. 其中, Debye-Hückel 模型^[11] 作为历史最悠久、物理图像最清晰的经典模型之一, 为理解等离子体环境对原子结构的屏蔽效应提供了重要的理论基础. 该模型将等离子体对目标离子的作用等效为一种指数衰减的屏蔽库仑势, 其屏蔽长度直观地关联了等离子体温度与密度, 形式简洁且便于解析处理, 因此在早期原子结构计算和碰撞过程研究中得到了广泛应用. 尽管该模型严格限于弱耦合等离子体条件, 但其在系统理解环境效应演进脉络中仍占据不可替代的基础性地位. 下面将对该模型的理论框架作简要介绍: 假设一个核电荷为 Z 的质点离子位于 $r = 0$ 处, 这个离子周围的电势满足泊松方程

$$\nabla^2 V(r) = -4\pi \left(\sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_{\zeta}(r) - n_e(r) \right), \quad (6)$$

其中 $N_{\zeta}(r)$ 是具有电荷 ζ 的离子数密度, 并且 $n_e(r)$

是电子数密度. 方程 (6) 中的第一项描述正电荷密度, 第二项描述负电荷密度, 如果已知所有离子电荷态和电子的空间分布, 那么从这个方程可以解出电势 $V(r)$. 假设离子和电子满足玻尔兹曼统计分布, 即

$$\begin{aligned} N_{\zeta}(r) &= N_{\zeta} \exp \left(-\frac{\zeta V(r)}{T} \right), \\ n_e(r) &= n_e \exp \left(+\frac{V(r)}{T} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

这里, N_{ζ} 和 n_e 没有明确的参数, 表示均匀分布下的密度, T 表示等离子体温度. 这组方程表明, 通过电势, 可以找到等离子体内部每个点的局部电荷状态和电子分布. 原则上, 可以将方程 (7) 代入方程 (6), 得到一个微分方程, 从该微分方程可以推导出电势, 即

$$\nabla^2 V(r) = \frac{1}{D^2} V(r), \quad (8)$$

其中,

$$D = \sqrt{\frac{T}{4\pi n_i (\bar{Z}^2 + \bar{Z})}}$$

为德拜屏蔽长度, $\bar{Z}$ 为平均电离度, 而 $\bar{Z}^2 = \sum \zeta^2 N_{\zeta} / n_i$, n_i 为总离子数密度. 在推导方程 (8) 时, 采用的一个简单的近似为 $\frac{V(r)}{T} \ll 1$. 如果势 $V(r)$ 具有球对称性, 那么就可以得到 Debye-Hückel 势

$$V(r) = \frac{Z}{r} e^{-r/D}, \quad (9)$$

Debye-Hückel 模型预测势能屏蔽因子呈指数递减, 其特征屏蔽距离等于德拜屏蔽长度 D . 德拜球定义为半径为 D 的中心离子周围的球. 中心离子的影响只延伸到包含在德拜球中的离子, 相反, 这个离子只受到德拜球内离子的影响. 如果离子数密度足够高时, 德拜半径可能小于离子球半径 $r_s = \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{\frac{1}{3}}$, 显然, 在这样高的密度下, Debye-Hückel 理论不再有效, 因为德拜球平均包含的离子少于一个, 方程 (7) 的统计处理不能被证明是合理的. 结果表明, Debye-Hückel 理论的基本假设在低密度高温等离子体中是成立的, 在这些条件下, 离子的平均电子距离很大, 离子与其它等离子体粒子的相互作用相对较小, 离子的内部电子结构不影响离子-离子或离子-电子的相互作用, 离子可以看作是一个点状无结构的物体.

在球对称 Debye-Hückel 模型的基础上, 通过几何修正, 后续又系统发展了适用于电子-离子碰撞过程的非球对称屏蔽势^[55]. 对于类 H 离子体系, 其具体形式为

$$V(r_1, r_2) = -\frac{Z}{r_1} e^{-r_1/D} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} e^{-|r_1 - r_2|/D}, \quad (10)$$

其中, r_1 表示入射电子相对于原子核的距离, r_2 表示束缚电子相对于原子核的距离. 其核心改进在于, 每一项库仑相互作用都独立地乘以其相对距离相关的屏蔽因子, 从而更真实地反映了屏蔽效应的局域性和空间各向异性.

2.2 离子球模型

除了 Debye-Hückel 模型外, 另一个应用广泛的等离子体屏蔽模型为离子球模型^[14], 该模型将整个等离子体空间均匀划分成若干互不重叠、体积相等的球形区域, 每个球体中心放置一个带电子子, 单个球体即为离子球. 离子球半径由等离子体粒子数密度唯一确定, 球内仅包含中心离子及其周围所有关联电子, 球边界处电势与电场均为零, 实现空间电荷分区隔离, 避免离子间长程库仑作用直接叠加. 在离子球模型中, 整个离子球内的电子分为两类: 一类是被原子或离子强束缚的内层电子, 仍保留原子原有壳层轨道结构, 遵循量子力学规律排布; 另一类是脱离原子或离子束缚的自由电子, 在离子球空间中在能量空间按 Fermi-Dirac 分布, 形成自由态电子气. 原子核会被球内束缚电子与自由电子逐层静电屏蔽, 使得离子球外部库仑势快速衰减, 替代了稀薄等离子体中的德拜屏蔽形式. 正是由于它的这种物理形式, 使得离子球模型的核心适用范围为高温、高密度强耦合稠密等离子体. 离子球模型屏蔽势^[46]为

$$V(r) = V_0(r) + 4\pi \left(\frac{1}{r} \int_0^r r_1^2 \rho_f(r) dr + \int_r^{r_s} r_1 \rho_f(r) dr \right) - \frac{3}{2} \left[\frac{3}{\pi} \rho_f(r) \right]^{1/3}, \quad (11)$$

其中第一项 $V_0(r) = V_N(r) + V_{ee}(r) + V_{ex}(r)$ 为孤立的原子中心势, 其包含原子核的中心势场 $V_N(r)$, 束缚电子之间的相互作用势 $V_{ee}(r)$ 和交换势 $V_{ex}(r)$; 第二项为自由电子屏蔽势; 第三项为自由电子的 Slater 交换势^[56]. r_s 为离子球半径, $\rho_f(r)$ 是非均匀分布的自由电子密度, 由 Thomas-Fermi 近似^[57]

计算得到

$$\rho_f(r) = \frac{1}{\pi^2} \times \int_{k_0(r)}^{\infty} \frac{k^2 dk}{\exp \{ [\sqrt{k^2 c^2 + c^4} - c^2 - V(r) - \mu] / k_B T_e \} + 1}, \quad (12)$$

在上式中, $k_0(r) = [2V(r)c^2 + V^2(r)]^{1/2}/c$, c 和 μ 分别是光速和化学势, k_B 为玻尔兹曼常数. 对核电荷为 Z 的离子来说, 通过离子球的电中性来确定化学势

$$\int_0^{r_s} 4\pi r^2 [\rho_b(r) + \rho_f(r)] dr = Z, \quad (13)$$

在这里, 通过束缚电子波函数来计算束缚电子密度 $\rho_b(r)$, 即

$$\rho_b(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_j l_j [P_j^2(r) + Q_j^2(r)], \quad (14)$$

其中, l_j 为 j 态的占据数.

2.3 离子关联模型

离子球模型只考虑中心离子对电子结构的影响, 在实际的热稠密等离子体环境中, 离子的随机热运动将导致相邻离子的电子云发生重叠, 引起近邻离子间对中心离子的电子结构产生影响. 为了考虑近邻离子分布对电子结构产生的影响, 我们发展了离子关联的屏蔽^[21,49]

$$V(r) = V_0(r) - \frac{n_e}{\beta_{ee}} \int C_{ee}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) h_{ie}(r') d^3 r' - \frac{n_i}{\beta_{ie}} \int C_{ie}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) h_{ii}(r') d^3 r', \quad (15)$$

在上述 $V(r)$ 的表达式中, 第一项 $V_0(r)$ 为孤立的中心原子势; 第二项表示等离子体环境中的自由电子与离子之间的相互作用; 第三项表示等离子体环境中离子-离子之间的相互作用. 其中, 后两项的等离子体环境效应是通过粒子-粒子之间的直接关联函数 $C_{ab}(r)$ 与总关联函数 $h_{ab}(r)$ 描述的; 在这里 $\beta_{ab} = 1/k_B T_{ab}$ 为拉氏乘子; 下标 a 和 b 表示 e 或 i .

首先, 电子-离子的总关联函数 $h_{ie}(r)$ 通过自由电子密度来定义

$$h_{ie}(r) = \frac{\rho_f(r)}{\rho_f(r_s)} - 1, \quad (16)$$

其中 $\rho_f(r)$ 、 $\rho_f(r_s)$ 分别表示离子周围的自由电子密度分布和离子球边界的自由电子密度, $\rho_f(r)$ 由方

程 (12) 计算得到. HNC 近似^[48,49] 被用来计算强耦合系统下的电子-离子的直接关联函数 $C_{ie}(r)$ 、电子-电子的直接关联函数 $C_{ee}(r)$ 以及离子-离子的总关联函数 $h_{ii}(r)$. 方程如下:

$$h_{ab}(r) = \exp[-\beta_{ab}V_{ab}(r) + h_{ab}(r) - C_{ab}(r)] - 1, \quad (17)$$

$V_{ab}(r)$ 表示 a 粒子和 b 粒子之间的相互作用势. 其中, $V_{ie}(r)$ 是方程 (15) 的单电子有效势, 而 $V_{ee}(r)$ 和 $V_{ii}(r)$ 分别为 Deutsch 势^[58] 和 Yukawa 势^[59]. 对于电子-电子和离子-离子关联函数的完全确定是通过 Ornstein-Zernike(OZ) 关系^[49]

$$h_{ab}(r) = C_{ab}(r) + \sum_c n_c \int d\mathbf{r}' C_{ac}(\mathbf{r}') h_{cb}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (18)$$

与式 (17) 形成闭合关系自洽迭代求解得到的, 其中 n_c 为 c 类粒子的密度. 该方法已成功应用于平均原子模型中, 形成了热稠密物质中电子、离子结构的自洽场计算, 并将自洽的电子、离子结果用于分析 X 射线汤姆逊散射、开展自扩散系数和剪切黏度的计算以及非平衡状态下宏观物理性质的计算^[42,43,60,61], 该方法还进一步扩展至高 Z 的 Au 元素在超高压冲击压缩下的行为, 与实验及模拟结果进行了验证比对, 揭示了从凝聚态向温稠密物质过渡过程中的一些新现象^[62].

2.4 其它等离子体屏蔽模型

对于等离子体环境下的单电子势 (9)、(10)、(11) 以及 (15) 可以通过代入方程 (5) 求解得到不同屏蔽模型下的电子结构. Debye-Hückel 模型和离子球模型作为描述等离子体屏蔽效应与原子结构的经典基础模型, 为热稠密等离子体原子物理研究奠定了重要理论框架. 随着研究不断深入, 在这两种基础模型之上已逐步发展出包含高阶屏蔽修正、量子效应改进等更精细物理效应的诸多衍生模型. 此外, 热稠密等离子体原子结构计算领域还涌现了其它的方法. 例如, 平均原子 (Average Atom, AA) 模型^[14,41,44,45], 它通过将等离子体中同类离子等效为平均原子, 高效兼顾了统计平均效应与原子壳层结构, 成为物态方程、光谱参数计算的常用工具; 量子分子动力学 (Quantum Molecular Dynamics, QMD) 模拟^[63], 它基于密度泛函理论根据电子分布考虑离子运动效应, 能够精准捕捉粒子间强关

联效应与非均匀体系的微观动态过程; 格林函数 (Green's Function) 与多体微扰理论 (Many-Body Perturbation Theory, MBPT)^[64], 则从多体相互作用出发, 系统计入电子-电子、电子-离子关联修正, 为高精度理论研究提供了有力支撑. 限于文章篇幅, 本节不再对 Debye-Hückel 模型、离子球模型的衍生变体以及其余各类先进方法展开详细论述.

3 IPD 的理论方法与发展

在热稠密等离子体环境中, 由于屏蔽势的影响, 浸没在等离子体环境中的离子的能级被展宽和移动, 从而导致 IPD 效应. IPD 与电离平衡密切相关, 因此影响等离子体的宏观物理性质, 如状态方程和不透明度. 由于 IPD 的重要性以及迫切需要理解释热稠密等离子体中 IPD 的相关实验结果, IPD 模型得到了快速的发展.

3.1 two-step 模型

本节首先讨论计算 IPD 的 two-step 模型^[49], two-step 模型来源于 Sang-Kil Son 等人发展的 two-step Hartree-Fock-Slater 模型^[16]. 该模型并不是简单的解析模型, 而是一种依赖于包含了热稠密环境效应的原子结构计算的理论方法. 所以, 实现该理论方法的计算步骤如下: 首先, 通过标准的 FAC 去求解孤立情况下的束缚电子轨道能量 ϵ_{iso} , 得到孤立情况下的电离能 $V_{iso} = 0 - \epsilon_{iso}$; 其次, 使用修改后的 FAC 引入电子屏蔽效应以及离子的关联效应, 求解等离子体环境下的束缚电子轨道能量 ϵ_{env} 以及离子球边界势能 ϵ_s , 得到等离子体环境中的电离能 $V_{env} = \epsilon_s - \epsilon_{env}$. 最后通过

$$I_{two-step} = V_{iso} - V_{env} = \epsilon_{env} - \epsilon_{iso} - \epsilon_s, \quad (19)$$

获得 IPD. 上述处理方式的物理依据在于: 孤立情况下, 仅当电子的能量 $\epsilon > 0$ 时才为连续电子, 所以 $\epsilon = 0$ 被称为孤立原子情况下的电离线; 而在热稠密等离子体环境中, 当电子的能量 $\epsilon > \epsilon_s$ 时, 已经被近邻离子所共有电子不能被束缚到单个离子球中, 可以视为连续电子, 故 $\epsilon = \epsilon_s$ 被认为是等离子体环境中的电离线, 其中 $0 > \epsilon > \epsilon_s$ 能量的电子, 称为准连续电子. 在等离子体环境中, 束缚电子变为准连续电子的过程称为内电离, 束缚电子变为连续电子的过程称为外电离.

3.2 EK 模型

EK 模型^[12]旨在处理强耦合等离子体环境. 该模型的出发点是将热力学平衡概念推广至含库仑相互作用体系, 认为带电粒子间的强相互作用会导致额外的静电自由能, 进而改变系统的化学势和电离平衡. EK 模型通过引入“临界电子密度”的概念, 构建了有效屏蔽长度来描述 IPD. 该模型假设 IPD 的函数形式在临界密度两侧具有不同的解析表达式, 并通过连续性条件确定衔接参数. 这一假设虽然在形式上连接了不同密度区域, 但在理论上仍存在一定的特设性. 当离子密度低于临界密度时, 模型倾向于德拜屏蔽行为; 而在高密度区, 则通过修正的屏蔽长度来逼近离子球极限. 在 EK 模型中, 净电荷为 ζ 的离子的 IPD 能够表示为

$$I_{EK}(\zeta) = \frac{(\zeta+1)}{r_s} \begin{cases} r_s/D & N_{cr} \geq n_i(1+\bar{Z}) \\ C(1+\bar{Z})^{1/3} & N_{cr} < n_i(1+\bar{Z}) \end{cases}, \quad (20)$$

其中, r_s 为离子球半径, D 为 Debye 屏蔽长度, n_i 为离子数密度, $\bar{Z}$ 为平均电离度, 常数 C 是通过在临界密度 N_{cr} 处 IPD 的连续性来确定.

$$C = \left(\frac{r_s}{(1+\bar{Z})^{1/3} D} \right)_{N_{cr}}$$

临界密度 N_{cr} 的定义如下

$$N_{cr} = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{T_e}{Z^2} \right)$$

式中 Z 为原子序数, T_e 为电子温度.

3.3 SP 模型

SP 模型^[13]的 IPD 公式是一个基于有限温度 Thomas-Fermi 统计模型的插值公式, 它通过求解该模型在离子球边界条件下的解析近似, 连接了低密度 (Debye-Hückel 极限) 和高密度 (离子球极限) 两个经典情形. SP 模型认为中心离子受到等离子体环境中电子和离子的平均势能影响, 其中心离子周围的电势分布是球对称的, 由稳定分布时平均的球对称电荷密度决定. 该模型分别用非相对论的 Fermi-Dirac 统计和 Maxwell-Boltzmann 统计来描述其中的电子和离子. SP 模型忽略了涨落效应, 考虑每个微扰元和中心离子之间的位置相关性, 以及每个微扰元和其它微扰元的平均分布之间的相关性. 一个净电荷为 ζ 的离子的 IPD 是 Debye 屏

蔽长度 D 与离子球半径 r_s 比值的函数:

$$I_{SP}(\zeta) = \frac{3(\zeta+1)}{2r_s} \left\{ \left[1 + \left(\frac{D}{r_s} \right)^3 \right]^{2/3} - \left(\frac{D}{r_s} \right)^2 \right\}, \quad (21)$$

在低密度极限下, $D \gg r_s$, SP 模型约化为 Debye-Hückel 模型的 IPD 公式, 即

$$I_{DH}(\zeta) = \frac{(\zeta+1)}{D}, \quad (22)$$

在高密度极限下, $D \ll r_s$, SP 模型趋于离子球模型的 IPD 公式, 即

$$I_{IS}(\zeta) = \frac{3(\zeta+1)}{2r_s}, \quad (23)$$

所以, SP 模型本质上是这两个经典极限的光滑插值.

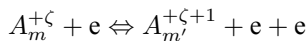
3.4 其它 IPD 计算模型

除了方程 (19)、(20)、(21) 计算的 IPD 公式外, 国际上还提出了许多 IPD 的计算方法. 例如 two-step Hartree-Fock-Slater 模型^[16], 该模型以有限温度 Hartree-Fock 方法和 muffin-tin 型球形势为理论基础, 采用 Wigner-Seitz 球描述离子球, 通过数值对角化获取束缚态与连续态波函数. 第一步在巨正则系综下确定自由电子密度与化学势, 第二步保持自由电子密度不变, 对选定的束缚电子组态进行微正则系综计算, 得到该组态下的单电子能级. 最终将等离子体环境中的电离能与孤立离子的电离能相减来获得 IPD. 以及基于第一性原理并采用有限温度密度泛函理论 (Finite-Temperature Density Functional Theory, FT-DFT), 结合投影缀加波 (Projector Augmented-Wave, PAW) 激发态势来计算 IPD 的方法^[65]. 该方法以面心立方 (Face-Centered Cubic, FCC) 结构的周期性超元胞对 Al 等离子体进行建模, 将 K 、 L 层电子冻结为芯态, 构建不同电荷态对应的激发态 PAW 势, 进而求解有限温度下的 Mermin-Kohn-Sham 方程, 通过自洽迭代获得价电子的波函数、能级分布及占据数. 最终借助总自由能差与芯能级校正来提取 K 边能量, 实现 IPD 效应的直接计算. 结构因子 (Structure Factor, SF) 模型^[17,18]同样是 IPD 计算的有效手段, 其核心思路是通过量子统计多体理论与格林函数方法, 建立 IPD 效应与离子动力学结构因子的直接关联. 该模型以涨落-耗散定理和介电函数为理论基础, 先将逆介电函数分解为离子结构因子、电子结构因子及两者的耦合结构因子; 再

通过格林函数近似求解单粒子自能实部, 定量表征连续态下移的贡献, 最终将复杂的动力学结构因子简化为静态结构因子, 推导出 IPD 的解析表达式. 除此之外, 还有考虑库仑对势相互作用来计算热稠密等离子体 IPD 的粒子-粒子巨正则 Monte Carlo 模型^[66]; 在 SP 模型的基础上, 假设离子近似固定在晶格位置, 引入自由电子数涨落, 将 IPD 从单一确定值扩展为概率分布的涨落模型^[15]; 以及使用经典分子动力学模拟^[19] 研究热稠密等离子体中的 IPD 等方法. 这些理论研究加深了我们对热稠密等离子体中屏蔽效应的理解. 值得指出的是, 当前热稠密等离子体 IPD 的计算基本上都是基于局域热力学平衡 (Local Thermodynamic Equilibrium, LTE) 假设. 这一假设虽为理论计算提供了简化框架, 使其在传统等离子体体系的研究中得到广泛应用, 但随着实验技术的突破, 其适用性正面临严峻挑战. 现有 X 射线自由电子激光器 (X-ray Free-Electron Laser, XFEL) 所产生的热稠密等离子体^[67], 已被证实处于非局域热动平衡 (Non-Local Thermodynamic Equilibrium, NLTE) 状态^[49,70], 这种 NLTE 特性会影响等离子体的微观结构与相互作用机制, 进而对 IPD 这一关键物理参数的计算结果产生不可忽视的影响. 鉴于本文的研究重点主要集中于 LTE 条件下的热稠密等离子体, 因此对于 NLTE 情形不作详细展开.

4 电子碰撞电离的理论方法与发展

电子碰撞电离过程是热稠密等离子体中最重要且最具代表性的原子过程之一. 该过程是指自由电子与处于等离子体环境中的原子或离子发生碰撞, 将其束缚电子激发至连续态从而实现电离的过程. 它是决定等离子体电离平衡与电荷态分布的关键微观机制, 直接制约着等离子体的辐射不透明度、能量输运以及状态方程等宏观性质. 该物理过程可以表示为



这里 m 和 m' 为离子的状态; ζ 、 $\zeta+1$ 为离子的电荷态; e 为连续态的电子.

4.1 Lotz 半经验方程

国际学界已发展多种用于计算电子碰撞电离截面的理论方法, 并且这些模型各具特色, 在各自

适用的区间可以给出合理的描述. 首先讨论的是 Lotz 半经验方程^[31,32]. 该公式是由 Lotz 于上世纪六十年代提出, 他将总截面写为各亚壳层贡献的求和, 其具体形式为

$$\sigma_{\text{Lotz}} = \sum_{i=1}^N a_i q_i \frac{\ln(\varepsilon_0/I_i)}{\varepsilon_0 I_i} \{1 - b_i \exp[-c_i(\varepsilon_0/I_i - 1)]\}, \quad (24)$$

其中, ε_0 为入射电子能量; I_i 为第 i 个亚壳层电子的结合能 (I_1 为电离能); q_i 为第 i 个亚壳层内的等价电子数; a_i 、 b_i 、 c_i 为由实验、理论或合理推测确定的经验常数. 公式 (24) 的设计具有明确的物理考虑, 在阈值能量附近 ($\varepsilon_0 \approx I_1$), 公式约化为

$$\sigma \approx a_1 q_1 \frac{\varepsilon_0/I_1 - 1}{I_1^2} (1 - b_1) \propto \varepsilon_0/I_1 - 1,$$

符合 Wannier 定律^[72] 在阈值附近的线性行为. 在 高能渐近区 ($\varepsilon_0 \gg I_i$), 公式约化为

$$\sigma_i \approx a_i q_i \frac{\ln(\varepsilon_0/I_i)}{\varepsilon_0 I_i} \propto \frac{\ln \varepsilon_0}{\varepsilon_0},$$

符合 Born 近似^[73] 在高速极限下的行为. Lotz 半经验方程在原子物理和等离子体物理领域产生了深远影响. 其主要贡献在于, 提供了一个参数化方法, 使得大量未知体系的电离截面可被快速估算, 为早期等离子体模拟、天体物理建模和辐射输运计算提供了必要的输入数据. 在早期的原子数据积累和等离子体模拟中发挥了不可替代的作用. 其对截面能量依赖行为的物理描述, 至今仍作为检验和校准更精确计算的重要参考. 然而, 随着计算能力和理论方法的进步, Lotz 半经验方程的局限性也日益凸显. 该公式仅适用于基态单电离, 不涉及多重电离、激发态电离或内壳层电离; 并且仅适用于稀薄等离子体, 没有考虑等离子体环境效应的影响, 也没有考虑碰撞限制 (即高密度下可能出现的激发态截断). 这些限制意味着 Lotz 半经验方程主要适用于稀薄、低密度的等离子体条件.

4.2 DW 近似

另一个与 Lotz 半经验方程有同样里程碑意义的方法为 DW 近似^[30], 因其兼顾计算精度和效率至今仍为热门方法之一. 其核心物理假设是将入射电子与靶离子的相互作用分为两部分的叠加. 第一部分是一个平均的、球对称的静态势场 (主要贡献), 第二部分是一个剩余的、非球对称的微扰项 (次要贡献). 在 DW 近似中, 入射电子不再被看作

自由的平面波, 而是认为它在靶离子的平均势场中运动. 这个平均势场通常包括原子核的库仑势、束缚电子的屏蔽势以及在等离子体环境中来自周围带电粒子的平均屏蔽势. 入射电子的波函数通过求解在该平均势场中的薛定谔方程或狄拉克方程获得. 由于入射电子的波函数被靶离子势场所扭曲, 因此被称为扭曲波, 从而携带了碰撞过程中最重要的静电相互作用信息. 对于散射电子和电离后出射的自由电子, 同样采用扭曲波描述, 但根据其所在区域的渐近行为选择相应的边界条件. 在 DW 近似下, 电子碰撞电离关于出射电子能量的微分截面方程^[74]为

$$\sigma(\varepsilon_0, \varepsilon) = \frac{1}{k_0^2 g_0} \Omega_{01}, \quad (25)$$

其中, ε_0 和 k_0 分别为入射电子的能量和动量, ε 为出射电子的能量, g_0 为初态的简并度. 碰撞强度 Ω_{01} 为

$$\begin{aligned} \Omega_{01} = & 2 \sum_{\kappa, J_T, k, \alpha_0, \beta_0} Q^k(\alpha_0 \kappa; \beta_0 \kappa) \\ & \times \langle \psi_0 \| Z^k(\alpha_0, \kappa) \| \psi_1, \kappa; J_T \rangle \langle \psi_0 \| Z^k(\beta_0, \kappa) \| \psi_1, \kappa; J_T \rangle, \end{aligned} \quad (26)$$

其中 κ 为出射电子的相对论角量子数, J_T 是末态耦合出射电子的总角量子数, $Z^k(\alpha_0, \kappa)$ 、 $Z^k(\beta_0, \kappa)$ 表示张量, k 为张量的秩, α_0 、 β_0 为单电子态, ψ_0 和 ψ_1 分别表示靶的初态和末态. 径向部分 Q^k ^[75] 表示为

$$\begin{aligned} Q^k(\alpha_0 \kappa; \beta_0 \kappa) = & \sum_{\kappa_0, \kappa_1} [k]^{-1} P^k(\kappa_0 \kappa_1; \alpha_0 \kappa) \\ & \times P^k(\kappa_0 \kappa_1; \beta_0 \kappa), \end{aligned} \quad (27)$$

其中, κ_0 、 κ_1 分别为入射电子和散射电子的相对论角量子数, $[k] = 2k + 1$. P^k 表示为

$$\begin{aligned} P^k(\kappa_0 \kappa_1; \alpha_0 \kappa) = & X^k(\alpha_0 \kappa_0; \kappa \kappa_1) \\ & + \sum_t (-1)^{k+t} [k] \begin{Bmatrix} j_{\alpha_0} & j_1 & t \\ j_0 & j_{\alpha_1} & k \end{Bmatrix} X^t(\alpha_0 \kappa_0; \kappa_1 \kappa), \end{aligned} \quad (28)$$

其中, t 为张量的秩, $\begin{pmatrix} j_{\alpha_0} & j_1 & t \\ j_0 & j_{\alpha_1} & k \end{pmatrix}$ 为 $6j$ 符号. X^k 的具体表达式如下

$$\begin{aligned} X^k(\alpha_0 \kappa_0; \kappa \kappa_1) = & \langle \alpha_0 \| C^k \| \kappa \rangle \langle \kappa_0 \| C^k \| \kappa_1 \rangle \\ & \times R^k(\alpha_0 \kappa_0; \kappa \kappa_1), \end{aligned} \quad (29)$$

其中 C^k 为归一化的球谐张量, R^k 为广义 Slater

积分

$$R^k(\alpha_0 \kappa_0; \kappa \kappa_1) = \int \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \rho_{\alpha_0 \kappa}(r_1) \rho_{\kappa_0 \kappa_1}(r_2) dr_1 dr_2, \quad (30)$$

$r_{<}$ 和 $r_{>}$ 分别为 r_1 和 r_2 之间的较小者和较大者, $\rho_{\alpha_0 \kappa}(r) = P_{\alpha_0}(r) P_{\kappa}(r) + Q_{\alpha_0}(r) Q_{\kappa}(r)$. 除了径向 Q^k 外, 方程 (26) 中的角向部分可以通过 Racah 解耦方程进行化简^[76], 从而得到碰撞强度 Ω_{01} 的最终表达式, 这里不进行详细的讨论. 最后对出射电子能量 ε 采用式 (25) 进行能量积分, 得到电子碰撞电离总截面

$$\sigma(\varepsilon_0) = \int_0^{(\varepsilon_0 - I)/2} \sigma(\varepsilon_0, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (31)$$

其中 I 为电离能, 并且 $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 + I + \varepsilon$ 满足能量守恒, ε_1 为散射电子的能量. 与更精确的方法相比, DW 近似对电子交换效应 (入射电子与靶电子因全同性而产生的量子效应) 和通道耦合采取了简化处理. 在这种近似下, 电子交换效应通常通过交换势或 Born-Oppenheimer 交换近似^[77] 加以考虑, 但并非自洽地包含在波函数中; 并且该方法忽略了碰撞过程中靶离子内部不同激发态之间的通道耦合, 不考虑靶离子在碰撞过程中可能发生的内禀态变化对散射波函数的反馈作用. 这一系列假设使得 DW 近似在计算效率和物理精度之间取得了良好的平衡. 因此在处理复杂原子体系的电子碰撞过程时, DW 近似已成为首选的理论工具. 该方法已被系统应用于轻核区类氢离子的电子碰撞电离截面计算, 涵盖 C^{5+} 、 O^{7+} 、 Mg^{11+} 及 Ar^{17+} 等离子体系, 并进一步扩展至磁约束聚变与天体物理等离子体中常见的、处于中核区的杂质离子体系, 如 Fe^{25+} 、 Cu^{28+} 、 As^{32+} 、 Kr^{35+} 、 Y^{38+} 及 Mo^{41+} 等. 在 DW 近似框架下获得的电离截面, 经与实验测量、其它理论结果及国际推荐数据比对, 整体上展现出良好的一致性, 从而为低至中等 Z 元素的类 H 离子提供了系统且高精度的电离数据支撑^[78-82].

4.3 CBE 近似

针对 DW 近似计算的简化, 又催生了 CBE 近似^[33]. 在 CBE 近似中, 自由电子波函数采用库仑波函数来描述, 即扭曲势选取为库仑势. 此时方程 (26) 的径向部分 Q^k 能够进一步的简化, 然后利用 Bar-Shalom, Klapisch 以及 Oreg 的因式分解法^[83] 能够得到一个计算非常快速并且相对精确的参数

化方程^[84,85]

$$Q_R = A \ln(\mu) + D \left(1 - \frac{1}{\mu}\right)^2 + \left(\frac{c}{\mu} + \frac{d}{\mu^2}\right) \left(1 - \frac{1}{\mu}\right), \quad (32)$$

这里 $\mu = \varepsilon_0/I$, A 、 D 、 c 、 d 分别为拟合参数. 其中, 参数 A 是与高能渐近行为相关的有效振子强度, 集成了靶电子的轨道平均偶极振子强度信息, 决定了截面曲线在高能尾巴的高度. 参数 D 是与阈值附近行为相关的形状因子, 主要控制截面峰值的大小, 并确保截面曲线在阈值处平滑地由零上升. 它与靶的激发态结构和低能电子关联的强度有关. 参数 c 和 d 是联合起作用的中低能区的精细调节系数, 它们协同描述了碰撞动力学中的非偶极效应和更细致的能量依赖关系. 对于不同的入射电子能量通过使用各个参数去得到总的电子碰撞电离截面. 当靶离子的电荷较高以及入射电子的能量较大时, 入射电子与靶离子之间的库仑相互作用占据主导地位. 此时, CBE 近似具有高精度与高效率的核心优势. W 作为托卡马克装置中面向等离子体部件的主要材料, 其各电荷态的电离数据对聚变等离子体建模至关重要. 而 CBE 近似对于这类高 Z 元素可快速生成电子碰撞电离数据, 弥补了高精度方法计算量过大的不足, 因此 CBE 近似在 W 等离子体体系中展现出重要价值^[86–88].

4.4 BED 近似

BED 近似^[34]也是计算电子碰撞电离截面的热门方法之一. 它是结合 Mott 截面^[90]和二元相遇截面^[91]推导的径向积分的半经验方程, 其中还考虑了高能量范围的 Bethe 极限^[89]. 在 BED 近似下需要用到束缚-自由的微分振子强度 $\frac{df(\omega)}{d\omega}$, 它与 Bethe 系数相关, 但它比 DW 近似计算的径向积分要简单的多. BED 近似下得到的半经验方程^[92]为

$$\sigma_i(t) = \frac{S}{t+u+1} \left[D(t) \ln t + \left(2 - \frac{N_i}{N}\right) \left(\frac{t-1}{t} - \frac{\ln t}{t+1}\right) \right], \quad (33)$$

其中, $D(t)$ 的定义为

$$D(t) \equiv N^{-1} \int_0^{(t-1)/2} \frac{1}{\omega+1} \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega, \quad (34)$$

方程 (33) 中, S 是一个复合参数, 由该轨道的基态性质 (半径、电子数、电离能) 决定的几何标度因

子, 定义为 $S = 4\pi\alpha_0^2 N (R/I)^2$, α_0 为玻尔半径, R 为里德伯能量; $t = \varepsilon_0/I$ 是归一化入射能量, 即入射电子能量与靶电子电离能的比值; $\mu = U/I$ 为低能修正的缓冲能量, 它使得公式在阈值附近的行为更平滑、更符合实际, U 为壳层内电子的动能; $D(t)$ 是归一化的、能量依赖的有效偶极振子强度分布的积分, 其将精确的光学数据融入到电子碰撞截面的计算中. $2 - \frac{N_i}{N}$ 是一个交换效应的修正因子, 来源于二元碰撞理论中的 Mott 截面. 它考虑了入射电子与靶电子不可区分性对散射概率的修正, 其中, N 为壳层内的电子数, 角标 i 为壳层的序数, $N_i \equiv \int_0^\infty \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega$, N_i 表示从某个特定原子轨道电离出去的电子的有效数目, 在物理上, 它远不止是简单的电子计数, 它实际上是该轨道的总偶极振子强度, $\omega = \varepsilon/I$ 是归一化出射能量, 即出射电子能量与靶电子电离能的比值. BED 近似被用来计算中性 Be 原子及其 Be^+ 、 Be^{2+} 、 Be^{3+} 从基态和第一激发态的电子碰撞电离截面^[93]. 结果表明, BED 近似对 Be^+ 基态表现最优, 其与实验数据^[94]惊人吻合. 对于其它的情况, 由于缺乏相应的实验, 无法直接验证 BED 近似的理论数据. 但 BED 近似对激发态和高电荷态的计算相比与其它的方法具有一定的误差, 需谨慎使用.

4.5 R 矩阵

前面介绍的 Lotz 半经验方程、DW 近似、CBE 近似以及 BED 近似, 在电子碰撞截面计算时更偏向于计算效率. 接下来介绍的电子碰撞电离截面计算的方法将会更偏向于计算精度. 首先是 R 矩阵^[35,95,96], 该方法的核心在于将电子与靶离子组成的复合系统在空间上进行分区处理, 通过边界处的 R 矩阵衔接不同区域的波函数, 从而将复杂的多体散射问题转化为可求解的边界值问题, 最终得到电离截面. 具体而言, 该方法将散射空间划分为内区和外区, 在内区 (半径约等于靶电子云范围, 通常取 $10 - 20 a_0$, a_0 为玻尔半径), 入射电子与靶电子之间的交换效应和电子-电子关联效应占据主导, 复合系统的行为类似于一个具有分立能级的束缚态; 在外区, 入射电子与靶的短程相互作用已经结束, 电子仅感受到靶离子的长程库仑势和极化势, 其运动由耦合的微分方程描述. 内区的计算首先是通过加入 Bloch 算符使非厄米的总哈密顿量

转化为厄密算符, 然后在一个有限球体内对角化总哈密顿. 最后, 得到一组离散的本征能量 E_k 和对应的表面振幅 w_{ik} (即本征波函数在边界上的值), 进而构造出 R 矩阵

$$R_{ij}(E) = \frac{1}{2a_0} \sum_k \frac{w_{ik} w_{jk}}{E_k - E}, \quad (35)$$

R 矩阵是能量的函数, 其极点位置 E_k 和留数 $w_{ik} w_{jk}$ 精确编码了复合系统在内部的所有共振结构, 这正是 R 矩阵区别于其它方法的核心优势. 因为它不仅包含非共振背景, 还自动且精确地包含了所有 Feshbach 形状共振^[97,98]的贡献. 外区的耦合微分方程在边界上的对数导数值由 R 矩阵给定, 将其传播到渐近区域并与库仑波函数的渐近形式匹配, 即可提取出 K 矩阵和 S 矩阵, 进而通过

$$\sigma(i \rightarrow f) = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_{J\pi} \frac{2J+1}{2(2L_i+1)(2S_i+1)} \sum_{\iota_i \iota_f} |T_{\iota_i \iota_f}^J|^2, \quad (36)$$

获得电离截面. 在这里 $T = S - I$, k_i 为入射电子的动量, i, f 分别为初态和末态, L_i 为初态的轨道角动量, S_i 为初态的自旋角动量, ι_i 为入射电子轨道角动量, ι_f 为出射电子轨道角动量. R 矩阵的强大之处在于, 一旦内区的哈密顿量矩阵被对角化, 所有能量下的 R 矩阵均可通过一次简单的求和得到, 这使得它成为处理宽能段内大量共振结构的首选方法, 在惯性约束聚变和天体等离子体建模中具有不可替代的地位. R 矩阵在处理内区时, 认为入射电子被目标离子的势场暂时俘获, 与离子共同形成准束缚的共振态, 这些共振态由 R 矩阵的极点和对应的宽度来表征, 分别对应其能量位置和寿命; 处理外区时, 相互作用减弱, 电子与离子可视为独立粒子, 通过匹配内、外区波函数, 即可得到共振态衰变为各种电离通道或散射通道的概率幅. 该方法在理论框架上系统性地涵盖了电子-离子碰撞中的共振激发、通道耦合、自电离及辐射复合等复杂物理过程, 能够实现对低能碰撞过程的高精度描述, 被公认为当前原子碰撞领域最精确的计算工具之一. 但由于矩阵维数随组态数目急剧增长, 使得该方法在处理复杂多电子离子体系时面临显著的数值挑战. R 矩阵被用来计算 Al^{2+} 的电子碰撞电离总截面^[99], 首次将直接电离、激发自电离、共振激发双自电离和共振激发自双电离四种过程在一致的理论框架下同时处理, 所得到的总截面与实验

结果^[100]高度吻合. 展示了统一 R 矩阵在定量描述复杂共振电离过程中的强大能力, 也揭示了处理高里德伯态损失通道的未来改进方向. 此外, R 矩阵还被用于复杂原子和离子的电子碰撞激发截面^[101], 为后续众多复杂原子 (如类 Ne、类 B、W 离子) 的 R 矩阵散射研究奠定了方法论基础.

4.6 CC 近似

CC 近似^[36]也是属于高精度计算的方法. 它的核心理念在于, 碰撞过程中入射电子与靶原子/离子并非简单地“擦肩而过”, 而是会形成一个临时的复合体系. 这个复合体系在演化过程中, 各个可能的衰变或跃迁通道之间存在强烈的量子力学干涉和耦合. CC 近似的核心目标就是通过求解包含所有重要末态通道的耦合方程组, 精确描述这一复合体系的演化, 从而获得从初态到各个末态 (包括电离连续态) 的跃迁概率. 对于 $N+1$ 个电子的复合体系, 其波函数将展开为靶态波函数与入射电子波函数的乘积之和^[102-104]

$$\Psi(E) = A \sum_i \chi_i \theta_i + \sum_j c_j \Phi_j, \quad (37)$$

式 (37) 的第一项为物理核心项, 这一项描述了入射电子与靶原子/离子发生真实散射的开放通道. 其中, $A = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_p (-1)^p P$ 为反对称化算符; 下标 i 遍历所有被纳入计算的通道; χ_i 为第 i 个靶态的波函数; θ_i 为第 i 个通道的入射电子波函数; 求和号表示将所有物理上重要的靶态通道进行线性叠加, 这是密耦合名称的由来, 通道越密, i 的数目越多, 计算结果就越精确. 第二项为短程修正项, 这一项描述了当入射电子进入靶内部强关联区域时, 电子之间产生的短程极化、相关效应, 以及因靶态展开不完整而缺失的关联信息. 其中, c_j 为展开系数; Φ_j 为短程关联基函数, 这是由束缚型基组构成的 $(N+1)$ 个电子的状态. 应当注意的是, Φ_j 中的 $(N+1)$ 个电子都集中在原子核附近的有限空间内, 不满足散射边界条件 (即不延伸到无穷远). 它的作用是补偿第一项中因截断 (仅取有限 i) 而丢失的短程电子-电子关联效应, 确保在原子内部区域的波函数足够精确. 第二项中的求和表示用一组完备的束缚基组来展开短程关联部分. 在实际计算中, j 的数目通常远大于 i 的数目 (因为在内部区域需要极精细的描述). CC 近似相比 R 矩阵在能

量范围上更具灵活性. 然而, 体系波函数的计算对其靶态的选择高度敏感, 且当靶态数目增多时计算复杂度急剧上升. CC 近似被运用于计算 B 离子的激发态电离截面^[105], 与 R 矩阵的计算结果合理一致. 还计算重原子 Kr、W 和 Pb 元素的电子碰撞电离截面^[106]. 其计算结果表明, 相比 DW 近似等微扰方法, CC 近似系统性地降低了直接电离截面, 但与 R 矩阵计算的结果相一致, 揭示了微扰方法可能存在的系统性偏差.

5 理论模型的数值计算

5.1 热稠密等离子体环境下的原子结构

本小节系统研究热稠密等离子体中原子或离子的中心势场以及自由电子波函数等原子结构特性. 首先, 以 Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ 组态为例, 分析不同等离子体屏蔽模型模型下的原子中心势能. 图 1 展示了自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 等离子体温度为 $T = 100 \text{ eV}$ 时的情况. 其中, 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 Debye-Hückel 模型计算的结果; 绿色虚线代表离子球模型计算的结果; 蓝色点-虚线代表离子关联模型计算的结果.

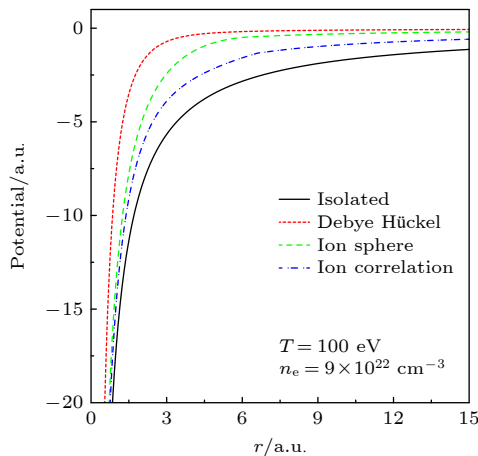


图 1 在自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 等离子体温度 $T = 100 \text{ eV}$ 时, Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ 组态的原子势. 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 Debye-Hückel 模型计算的结果; 绿色虚线代表离子球模型计算的结果; 蓝色点-虚线代表离子关联模型计算的结果

Fig. 1. The atomic potential for the $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0$ configuration of Fe^{16+} at a free electron density of $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ and a plasma temperature of $T = 100 \text{ eV}$. The black solid line represents the isolated case; the red dotted line represents the results calculated by the Debye-Hückel model; the green dashed line represents the results calculated by the ion-sphere model; the blue dot-dashed line represents the results calculated by the ion-correlation model.

从图 1 中可以看出, 考虑热稠密等离子体环境效应后, Fe^{16+} 的中心势场发生上移, 反映出等离子体环境的屏蔽效应消弱了原子核对电子的吸引作用. 并且, 三种等离子体屏蔽模型下的原子中心势呈现出不同的结果. 从图 1 中可以发现, Debye-Hückel 模型的屏蔽效应最强, 离子球模型的屏蔽效应其次, 离子关联模型的屏蔽效应最弱. 核心原因在于, Debye-Hückel 模型作为早期的理论尝试, 根植于弱耦合理想气体假设. 认为任何离子都会被周围的带电粒子瞬间、线性地中和. 这种高度理想化的处理虽然简洁优美, 但因完全忽略了电子间的交换关联以及离子对电子云的约束, 导致了过于强烈的指数级衰减. 因此, 在热稠密等离子体环境中构成了过度屏蔽. 而离子球模型虽然适合强耦合图像, 但它用硬性边界来近似复杂的多体相互作用. 这种人为截断虽然在一定程度上反映了等离子体密度的约束效应, 但其屏蔽机制源于对长程库仑力的物理边界限制, 而非粒子间屏蔽的自然结果. 相比之下, 离子关联模型不仅考虑了给定离子球内的自由电子贡献, 还考虑了离子-离子之间的关联效应, 反映了中心离子对环境效应最真实的响应. 这种合理的处理方式使得屏蔽效应最弱, 却更接近物理真实.

在热稠密等离子体环境效应对中心势场直接影响的基础上, 又进一步考察了环境效应对自由电子波函数的影响. 自由电子波函数受原子核影响较弱, 而受到等离子体环境影响将更为明显, 同时, 它也是表征散射行为的重要物理量, 其变化将显著影响电子碰撞电离截面的跃迁矩阵元, 最终影响电子碰撞电离行为. 所以, 在图 2 给出了中心离子为 Fe^{16+} 时, 能量为 10 eV 的自由电子径向波函数大分量 $P(r)$. 其中, 图 2(a) 为自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 等离子体温度 $T = 100 \text{ eV}$ 时, 三种等离子体屏蔽模型下的自由电子波函数. 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 Debye-Hückel 模型计算的结果; 绿色虚线代表离子球模型计算的结果; 蓝色点-虚线代表离子关联模型计算的结果. 图 2(b) 为在离子关联模型下, 不同等离子体状态下的自由电子波函数. 黑色实线代表孤立情况; 紫色点线为 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T = 100 \text{ eV}$ 的结果; 青色虚线为 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T = 100 \text{ eV}$ 的结果; 粉色点虚线为 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T = 50 \text{ eV}$ 的结果. 由图 2(a) 可见, Debye-Hückel 模型计算的自由电

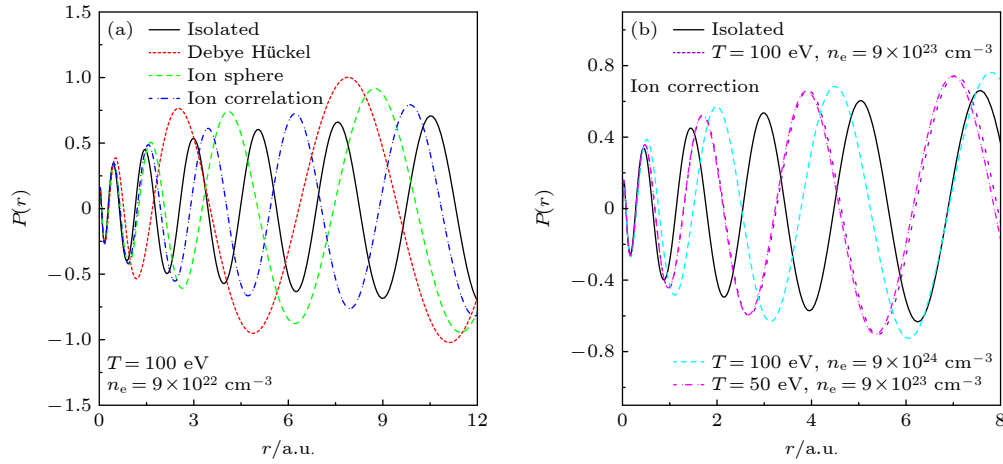


图 2 中心离子为 Fe^{16+} 时, 能量为 10 eV 的自由电子径向波函数大分量 $P(r)$ 随 r 的变化. 图 (a) 给出了自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 等离子体温度 $T = 100 \text{ eV}$ 时, 三种等离子体屏蔽模型下的自由电子波函数. 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 Debye-Hückel 模型计算的结果; 绿色虚线代表离子球模型计算的结果; 蓝色点-虚线代表离子关联模型计算的结果. 图 (b) 给出了在离子关联模型下, 不同等离子体状态下的自由电子波函数. 黑色实线代表孤立情况; 紫色点线为 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T = 100 \text{ eV}$ 的结果; 青色虚线为 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T = 100 \text{ eV}$ 的结果; 粉色点虚线为 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T = 50 \text{ eV}$ 的结果

Fig. 2. For the central ion Fe^{16+} , the radial wavefunction large component $P(r)$ of free electrons with energy 10 eV is plotted as a function of r . Figure (a) shows the free-electron wavefunctions under three plasma screening models, for a free electron density $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ and plasma temperature $T = 100 \text{ eV}$. The black solid line represents the isolated case; the red dotted line corresponds to the Debye-Hückel model; the green dashed line corresponds to the ion-sphere model; and the blue dash-dotted line corresponds to the ion-correlation model. Figure (b) presents the free-electron wavefunctions under the ion-correlation model for different plasma conditions. The black solid line again denotes the isolated case; the purple dotted line corresponds to $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T = 100 \text{ eV}$; the cyan dashed line to $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T = 100 \text{ eV}$; and the pink dash-dotted line to $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T = 50 \text{ eV}$.

子波函数向外运动的趋势最明显, 其次是离子球模型, 最后是离子关联模型. 这与图 1 得出的结论一致, 等离子体环境的屏蔽效应考虑的越强, 原子核对自由电子的吸引越弱, 使得自由电子波函数向外运动的趋势越明显. 由图 2(b) 可见, 随着等离子体温度降低、自由电子密度升高, 自由电子径向波函数呈现出愈发显著的向外延展趋势. 其核心原因在于, 等离子体温度降低以及自由电子密度增加会导致等离子体耦合强度增强, 而更强的耦合效应会引发更为显著的等离子体屏蔽作用, 屏蔽效应的增强会削弱原子核的有效库仑势, 使得自由电子所受的引力约束减弱, 进而呈现出向外运动的特征.

5.2 热稠密等离子体环境下的 IPD

热稠密等离子体环境效应除了对原子中心势以及波函数有影响外, 还会导致原子能级的移动以及展宽, 从而出现 IPD 效应. 而合理刻画热稠密等离子体环境下的 IPD, 是准确求解热稠密等离子体电子碰撞电离截面的重要前提. 为此, 本小节系统探究了环境效应对 IPD 的作用机制, 并且进一步分析了不同 IPD 模型计算所带来的影响. 首先探

究了 two-step 模型^[49]、EK 模型^[12] 以及 SP 模型^[13] 对于 Fe 离子 IPD 的影响. 这里, two-step 选取的原子结构数据来源于离子关联模型的计算. 图 3 给出了自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 时, Fe 离子 IPD 随等离子体温度的演变规律. 其中, 黑色圆形、蓝色菱形、紫色三角形代表 two-step 模型分别在 $T = 100 \text{ eV}$ 、 $T = 180 \text{ eV}$ 、 $T = 300 \text{ eV}$ 的结果; 红色实线、灰色实线、青色实线是 SP 模型分别在 $T = 100 \text{ eV}$ 、 $T = 180 \text{ eV}$ 、 $T = 300 \text{ eV}$ 的结果; 绿色虚线、深绿虚线、粉色虚线是 EK 模型分别在 $T = 100 \text{ eV}$ 、 $T = 180 \text{ eV}$ 、 $T = 300 \text{ eV}$ 的结果. 可以看出, 对同一种 IPD 模型、相同的等离子体环境条件下, IPD 随离子电荷态升高逐渐增大. 这是由于相同密度与温度环境中, 高电荷态离子间的平均库仑相互作用远强于低电荷态离子, 其电子结构受离子关联效应与电子屏蔽效应的调制更为显著, 最终表现为更高的 IPD 数值. 同时, 对于同一电荷态离子, IPD 随等离子体温度升高逐步减小, 原因在于温度升高会提升体系内电子与离子的热运动动能, 降低等离子体有效耦合强度, 削弱电子屏蔽效应与离子关联效应, 使得环境效应电离能的影响随

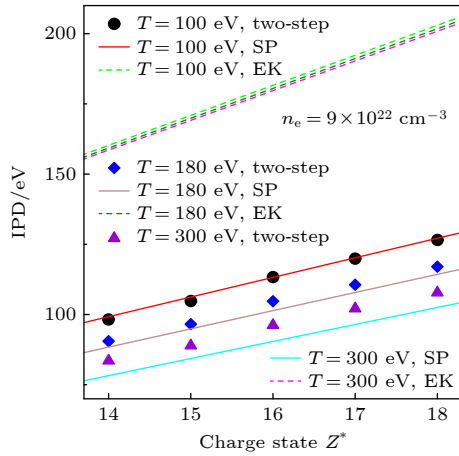


图 3 自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 时, Fe 离子的 IPD 随着等离子体温度变化关系. 黑色圆形、蓝色菱形、紫色三角形代表 two-step 模型分别在 $T = 100 \text{ eV}$ 、 $T = 180 \text{ eV}$ 、 $T = 300 \text{ eV}$ 的结果; 红色实线、灰色实线、青色实线是 SP 模型分别在 $T = 100 \text{ eV}$ 、 $T = 180 \text{ eV}$ 、 $T = 300 \text{ eV}$ 的结果; 绿色虚线、深绿虚线、粉色虚线是 EK 模型分别在 $T = 100 \text{ eV}$ 、 $T = 180 \text{ eV}$ 、 $T = 300 \text{ eV}$ 的结果

Fig. 3. The IPD of iron ions as a function of plasma temperature at a free electron density of $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. In the figure, black circles, blue diamonds, and purple triangles represent the results of the two-step model at $T = 100 \text{ eV}$, $T = 180 \text{ eV}$ and $T = 300 \text{ eV}$, respectively; solid red, solid gray, and solid cyan lines are the results of the SP model at $T = 100 \text{ eV}$, $T = 180 \text{ eV}$ and $T = 300 \text{ eV}$, respectively; dashed green, dashed dark green, and dashed pink lines are the results of the EK model at $T = 100 \text{ eV}$, $T = 180 \text{ eV}$ and $T = 300 \text{ eV}$, respectively.

之减弱. 此外, 在我们计算的热稠密区域电离能下降, 同一等离子体状态下, 采用 two-step 模型的计算结果与 SP 模型的计算结果吻合度更高, 与 EK 模型差别较大.

图 4 给出了在等离子体温度 $T = 180 \text{ eV}$ 时, Fe 离子 IPD 随自由电子密度的变化. 其中, 黑色圆形、蓝色菱形、紫色三角形代表 two-step 模型分别在 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的结果; 红色实线、灰色实线、青色实线是 SP 模型分别在 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的结果; 绿色虚线、深绿虚线、粉色虚线是 EK 模型分别在 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的结果. 可以发现, 对相同的 IPD 模型、同一电荷态 Fe 离子, IPD 随着自由电子数密度的增大呈现明显上升趋势. 原因在于, 自由电子密度不断提升会进一步增强离子核外的静电屏蔽作用, 削弱了原子核对外层束缚电子的有效库仑束缚势, 进而造成

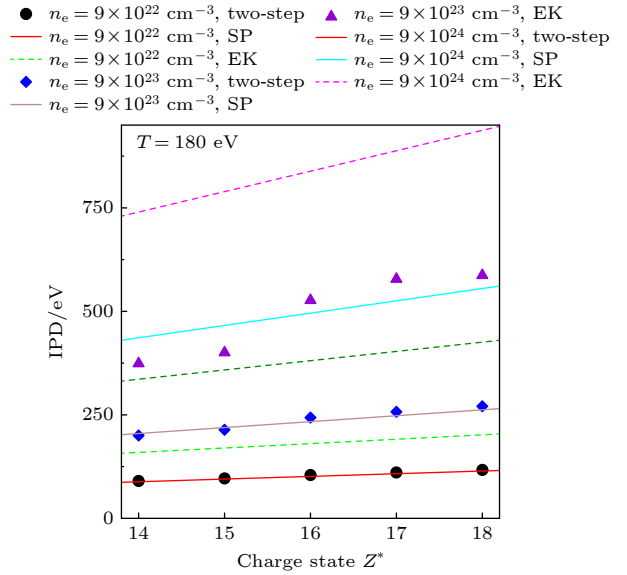


图 4 等离子体温度 $T = 180 \text{ eV}$ 时, Fe 离子的 IPD 随着自由电子密度变化关系. 黑色圆形、蓝色菱形、紫色三角形代表 two-step 模型分别在 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的结果; 红色实线、灰色实线、青色实线是 SP 模型分别在 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的结果; 绿色虚线、深绿虚线、粉色虚线是 EK 模型分别在 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的结果

Fig. 4. The IPD of iron ions as a function of free electron density at a plasma temperature of $T = 180 \text{ eV}$. In the figure, black circles, blue diamonds, and purple triangles represent the results of the two-step model at $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, and $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, respectively; solid red, solid gray, and solid cyan lines are the results of the SP model at $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, and $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, respectively; dashed green, dashed dark green, and dashed pink lines are the results of the EK model at $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, and $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, respectively.

束缚电子能级整体下移, 使得能级压低程度不断加剧. 结合 EK、SP 模型的结果对比能够发现, two-step 模型所得 IPD 计算结果依旧与 SP 模型拟合结果整体吻合度较高. 但与图 3 相比, 此处出现了明显差异: 随着自由电子密度持续升高, two-step 模型计算得到的 Fe^{16+} 的 IPD 数值相较于 Fe^{15+} 出现明显突增现象, 这一特殊变化趋势并未在 EK 模型与 SP 模型两类解析模型中体现. 究其根本原因, two-step 模型求解 IPD 以原子结构计算为基础, 可真实反映离子内部电子排布演化规律, Fe^{16+} 发生电离过程中会开启新的电子壳层结构, 电子排布状态发生突变, 从而导致其 IPD 数值出现异常提升.

在我们已发表的文章中 [47], 已经计算了自由

电子密度为 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、等离子体温度为 $T = 75 \text{ eV}$ 时, two-step 模型、SP 模型以及 EK 模型对 Mg 离子 IPD 的影响, 如图 5 所示. 其中, 黑色圆表示 two-step 模型计算的结果; 红色菱形、绿色上三角形和蓝色下三角形分别表示 SF^[17,18]、EK 和 SP 模型计算的结果. 在图 3 和图 4 中, 我们发现对于 Fe 离子体, two-step 模型的计算结果与 SP 模型吻合度较高, 而与 EK 模型差异较大. 然而, 在图 5 的 Mg 离子体系中, 情况发生了反转: two-step 模型的结果更接近 EK 模型. 出现这一有趣现象的根本原因在于不同元素所处等离子体环境的耦合强度差异. 相比于 Fe 离子所处的环境, Mg 离子实验条件下的离子数密度更高, 导致体系的耦合强度显著增强. SP 模型作为弱耦合至中等耦合的近似, 在强耦合环境下逐渐失效; 而 EK 模型针对强耦合设计的特性使其在 Mg 情况下表现更好. 这一对比不仅验证了 two-step 模型的自洽性, 也深刻揭示了等离子体耦合强度是决定 IPD 模型适用性的关键物理因子.

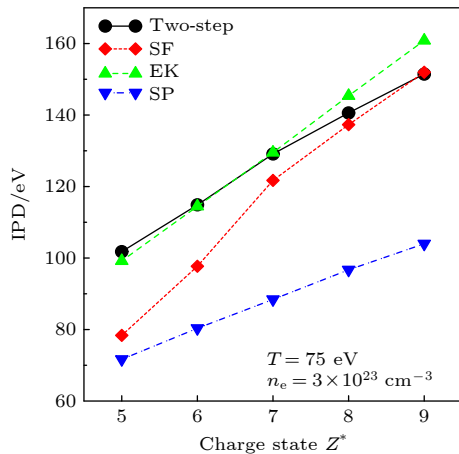


图 5 自由电子密度 $n_e = 3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 、等离子体温度 $T = 75 \text{ eV}$ 时, Mg^{n+} 的 IPD 随着电荷态 Z^* 的变化^[47]. 黑色圆形、红色菱形、绿色上三角形、蓝色下三角形分别代表 two-step 模型、SF 模型、EK 模型、SP 模型的计算结果. Fig. 5. The IPD of as a function of Mg^{n+} charge state Z^* at a free electron density $n_e = 3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ and plasma temperature $T = 75 \text{ eV}$ ^[47]. The black circles, red diamonds, green upward triangles, and blue downward triangles represent the results calculated by the two-step model, the SF model, the EK model, and the SP model, respectively.

对于 two-step 模型, 其在计算电离能下降时是考虑环境效应后的原子电离能与孤立原子电离能之间差值得到的, 该模型物理图像清晰, 其数值

取决于环境效应对离子电离能量的影响, 适用于量子效应主导的物理问题. 然而, 该模型的计算消耗较大, 其计算成本随原子序数 Z 急剧攀升, 对中高 Z 元素需处理大量组态. 更重要的是, 其计算精度依赖于屏蔽模型的选取. 如果选择的屏蔽模型无法合理的描述等离子体环境效应, 则后续量子结构计算的精确性反而被掩盖. SP 模型是经典的解析模型, 其主要适用范围偏向于弱耦合和中等耦合等离子体. 因其形式简洁、计算效率极高且无需调用原子结构程序, 在惯性约束聚变 (ICF) 靶丸设计^[1]、天体物理不透明度计算^[4-6]以及大型辐射流体力学模拟^[107]中得到了极为广泛的应用. 然而, 该模型的固有缺陷亦十分突出, 它本质上是一个平均场模型, 假定每个离子所处的局域环境是各向同性且平滑的, 完全忽略了自由电子密度的局域涨落以及邻近离子实时构型引起的势场起伏. 近期在 LCLS 等大型 X 射线自由电子激光装置上^[67]的精密光谱实验已明确指出, SP 模型在固体密度附近会系统性低估 IPD. EK 模型是为描述强耦合等离子体而发展的. 在某些固体密度下的温稠密物质光谱实验中 (如金刚石压砧结合激光加热的测量^[108]), EK 模型的预测反而比 SP 模型更接近实验结果, 这使其获得部分研究者的青睐. 然而, 该模型所采用的连续性假设缺乏严格的理论支持, 被普遍认为具有特设性特征. 并且在弱耦合向中等耦合过渡的区域, EK 模型往往会过高估计 IPD, 从而在某些低密度条件下产生误导性结果.

5.3 热稠密等离子体环境下的电子碰撞电离

热稠密等离子体环境下电子碰撞电离的研究不仅依赖于屏蔽模型的选取, 也依赖于电子碰撞电离截面理论方法的运用. 针对这一难点, 本小节先阐述了孤立情况电子碰撞电离理论方法之间的差异. 我们课题组在先前的工作中^[21]针对 Fogle 等人的实验, 计算了 C、N、O 元素的类 Be 离子的电子碰撞电离截面^[109-111]. 对于 C^{2+} 的电子碰撞电离过程, DW 近似^[30]计算所得的阈值能量略低于实验值, 但整体截面趋势与实验基本一致; CBE 近似^[33]虽能给出较为合理的阈值位置, 却在低能区间高估了电离截面, 而高能渐近区域又出现低估; 相比之下, BED 近似^[34]的结果在整个计算能量范围内均与实验数据保持较好的一致性. 进一步分析表明, DW 近似阈值偏小主要源于对 $1s^2 2s^1 2p^1 \ ^3P_1$ 组态能

量的计算偏差. 而 DW 近似与 CBE 近似在高能量区域的系统性偏低, 结合 BED 近似的结果可归因于未引入 Bethe 极限^[89]的高能修正. 对于 N^{3+} 的电子碰撞电离过程, 在低能区域, 除了 DW 近似与 BED 近似与 Fogle 等人的实验数据吻合较好以外, 其余理论模型均存在不同程度的高估; 在其它能量区间, DW 近似、CBE 近似及 BED 近似的计算结果均与实验截面较为一致. 对于 O^{4+} 的电子碰撞电离过程, 在所考察的理论模型中, DW 近似给出的截面在中低能量区域与 Fogle 等人的实验结果基本一致, 但在高能区域仍出现系统性偏低; 其余所有理论模型仅在高能渐近行为上与实验相符. 对比结果表明: DW 近似在阈值附近及中低能区展现了较高的精度, 能够较好地重现实验趋势, 这得益于其扭曲波函数对靶势场的精确描述; CBE 近似虽然在高能区提供了合理的近似, 但在低能区往往高估截面; BED 近似则在高能渐近区与实验数据符合最好, 主要归功于其对 Bethe 极限的正确引入. 这一横向对比表明, 在实际应用中, 应根据具体的能量区间和精度需求选择合适的计算方法: 若需兼顾效率与精度, DW 近似是首选; 若仅关注高能行为, BED 或 CBE 近似则更为经济.

在探究完孤立情况下电子碰撞电离截面计算方法之间的差异后, 又进一步在 DW 近似框架下, 探究了不同等离子体屏蔽模型对电子碰撞电离过程的影响. 图 6 给出了在自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 等离子体温度 $T = 100 \text{ eV}$ 时, Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ 的电子碰撞电离过程截面. 其中, 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 Debye-Hückel 模型计算的结果; 绿色虚线代表离子球模型计算的结果; 蓝色点-虚线代表离子关联模型计算的结果. 从图 6 可以看出, 等离子体环境效应不仅会显著降低电子碰撞电离截面的阈值能量, 还会提升电子碰撞电离截面. 这是因为一旦考虑等离子体的环境效应, 原子核对束缚电子的吸引就会减弱, 使得电子碰撞电离过程更容易发生. 并且 Debye-Hückel 模型对于电离阈值以及电离截面的影响最大, 其次是离子球模型, 最后是离子关联模型. 原因在于, 等离子体屏蔽模型考虑的环境效应越强, 它对电子碰撞电离过程的影响就越大, 这与对图 1、图 2(a) 的分析相一致.

为了探究电子碰撞电离截面随等离子体温度、自由电子密度的变化规律. 基于离子关联模型, 在

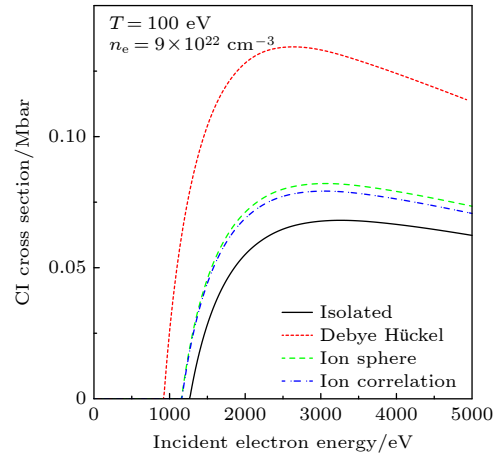


图 6 在自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 等离子体温度 $T = 100 \text{ eV}$ 时, Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ 过程的电子碰撞电离截面随入射电子能量的变化. 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 Debye-Hückel 模型计算的结果; 绿色虚线代表离子球模型计算的结果; 蓝色点-虚线代表离子关联模型计算的结果

Fig. 6. The electron-impact ionization cross section of the $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ process for Fe^{16+} as a function of the incident electron energy, at a free electron density of $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ and a plasma temperature of $T = 100 \text{ eV}$. The black solid line represents the isolated case; the red dotted line represents the results calculated by the Debye-Hückel model; the green dashed line represents the results calculated by the ion-sphere model; the blue dot-dashed line represents the results calculated by the ion-correlation model.

DW 近似框架下, 计算了 Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ 的电子碰撞电离截面. 图 7 给出自由电子密度为 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 时, Fe^{16+} 的电子碰撞电离截面随等离子体温度的变化. 图 8 给出等离子体温度 $T = 180 \text{ eV}$ 时, Fe^{16+} 的电子碰撞电离截面随自由电子密度的变化. 从图 7 和图 8 中可以看出, 当自由电子密度保持固定时, 温度降低使电离阈值能量的下降幅度增大, 电离截面增强更显著; 当等离子体温度保持不变时, 自由电子密度升高同样使得电离阈值能量的下降, 碰撞电离截面的增强加剧. 其物理根源在于, 随着等离子体温度的降低和自由电子密度的升高, 热稠密等离子体的耦合强度不断增大, 离子球内的屏蔽势逐渐增加, IPD 值不断提高, 从而使得电子碰撞电离过程更容易发生.

在以上的计算中, 都是基于定态条件下的原子结构计算, 在实验测量过程中, 特别是, 在自由电子和靶原子碰撞过程中, 弛豫过程也会对测量的碰撞电离截面产生影响. 所以, 在热稠密等离子体中除了等离子体屏蔽效应对电子结构影响外, 在电子

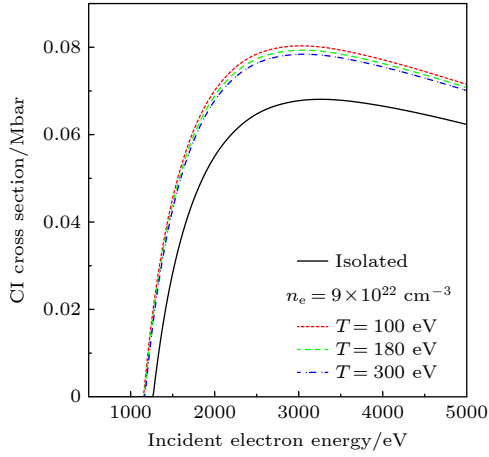


图 7 自由电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 时, Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ 的电子碰撞电离截面随着等离子体温度变化关系. 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 $T = 100 \text{ eV}$ 的情况; 绿色虚线代表 $T = 180 \text{ eV}$ 的情况; 蓝色点-虚线代表 $T = 300 \text{ eV}$ 的情况

Fig. 7. Variation of the electron impact ionization cross section of Fe^{16+} from $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ with plasma temperature at free electron density $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. The black solid line denotes the isolated state, the red dotted line for $T = 100 \text{ eV}$, the green dashed line for $T = 180 \text{ eV}$, and the blue dotted-dashed line for $T = 300 \text{ eV}$.

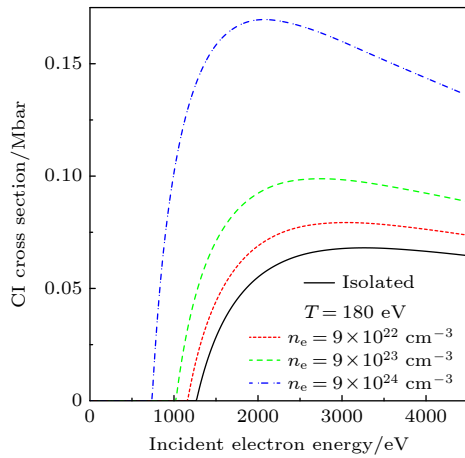


图 8 等离子体温度 $T = 180 \text{ eV}$ 时, Fe^{16+} 的 $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ 的电子碰撞电离截面随着自由电子密度变化关系. 黑色实线代表孤立情况; 红色点线代表 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 的情况; 绿色虚线代表 $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 的情况; 蓝色点-虚线代表 $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 的情况

Fig. 8. Variation of the electron impact ionization cross section of Fe^{16+} from $1s^2 2s^2 2p^6 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5$ with free electron density at plasma temperature $T = 180 \text{ eV}$. The black solid line denotes the isolated state, the red dotted line for $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, the green dashed line for $n_e = 9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, and the blue dotted-dashed line for $n_e = 9 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$.

碰撞电离过程中还需要考虑自由电子波函数的动

量弛豫效应^[47]. 在热稠密环境中, 散射电子 (尤其是能量接近阈值的低能散射电子) 与周围自由电子及离子发生频繁碰撞, 其动量因这些碰撞而被迅速耗散, 不再保持恒定, 呈现出较短的弛豫时间, 进而形成部分退相干效应. 在计算电子碰撞电离过程时, 该效应实质上反映了热稠密等离子体中自由电子波函数随时间的动态演化, 是散射电子与周围带电粒子之间的一种动态关联效应. M.Yu.Kuchiev 和 W.R.Johnson 提出^[68], 等离子体中自由电子的波函数应该从扭曲平面波修改为衰减的扭曲波函数形式:

$$\Psi_p(r, t) = \psi_p(r) \exp(iE_p t - t/\tau_p)$$

其中 $\psi_p(r)$ 是扭曲波函数, 衰减因子与弛豫时间 τ_p 相关, τ_p 为两次连续碰撞之间的弛豫时间, 在 Born-Mermin 近似 (BMA)^[69] 下碰撞频率 $\nu(\omega)$ 的倒数. 在我们课题组 2021 年的文章中^[47] 采用衰减扭曲波函数可使截面提升约一个量级, 这直接证明了自由电子波函数动量弛豫效应的重要性. 此外, 也有研究通过考虑散射电子的瞬时空间局域化效应^[46,71], 采用动量展宽的自由电子波函数来处理电子碰撞电离截面. 本质上, 自由电子的动量弛豫效应与瞬时空间局域化效应是等价的.

6 结论与展望

热稠密等离子体的电离平衡与电荷态分布受电子碰撞电离过程的深刻影响. 然而, 在热稠密条件下, 强耦合效应导致传统理想等离子体模型失效, 亟需发展可以合理描述电子屏蔽、离子关联及 IPD 等环境效应的理论方法. 本文系统综述了该领域的研究进展, 重点介绍了离子关联模型的理论框架. 该框架通过关联函数描述了自由电子屏蔽与离子耦合效应, 并将其引入相对论原子结构计算程序 FAC 中, 自洽求解束缚电子与自由电子的波函数、能级及电离能. 以 Fe^{16+} 为例的研究表明, 等离子体环境会显著降低电离能, 且温度越低、自由电子密度越高, 能级移动越大, 径向波函数向外延展的越明显. 在 IPD 研究方面, 本文采用 two-step 模型, 并与 EK、SP 等解析模型进行对比, 对于 Fe^{n+} 的计算结果与 SP 模型更为接近, 对于 Mg^{n+} 的计算结果与 EK 模型更为接近; 同时, 因该模型基于真实原子结构计算, 可以得到更合理物理

结果. 在电子碰撞电离截面计算方面, 基于 DW 近似的结果表明, 等离子体环境效应不仅降低电离阈值, 还在整个能量范围内增强截面, 且温度降低或密度升高均会加剧这一趋势. 此外, 本文还综述了 Lotz 半经验方程、CBE 近似、BED 近似、R 矩阵、CC 近似等多种计算电子碰撞电离截面理论方法, 并强调了热稠密等离子体中的自由电子波函数的动量弛豫效应对电子碰撞电离过程有显著的影响.

尽管热稠密等离子体中电子碰撞电离过程的研究已取得显著进展, 但当前理论框架仍面临若干关键挑战, 未来研究在以下几个方面有待取得突破. 首先, 发展统一的、非经验性的多尺度理论模型仍是核心任务. 现有方法在屏蔽描述、IPD 计算与电离截面求解之间缺乏自洽的整合框架, 这要求屏蔽描述与 IPD 计算要和电子碰撞电离理论有机结合, 而非作为独立环节处理. 其次, NLTE 状态下碰撞电离截面的计算. 随着实验测量精度的提升, NLTE 状态已成为研究热点. 当前实验产生的热稠密等离子体普遍处于电子-离子双温状态, 而传统 IPD 与电离截面模型多建立在 LTE 状态假设之上. 未来需系统发展双温甚至多温框架下的理论, 定量评估非平衡程度对 IPD 以及电离过程的影响. 第三, 当前计算仍以特定离子、特定跃迁为主, 缺乏系统性的参数扫描与不确定性量化. 未来应结合机器学习与高精度理论方法, 构建覆盖宽温密范围、多元素、多电荷态的电子碰撞电离截面数据库, 为大型等离子体模拟提供可靠输入. 最后, 实验验证仍不可或缺. 理论与实验的深度融合将是推动该领域走向精准物理学的关键路径.

参考文献

- [1] Nantel M, Ma G, Gu S, et al 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4442
- [2] Hurricane O A, Callahan D A, Casey D T, et al 2014 *Nature* **506** 343
- [3] Cuneo M E, Herrmann M C, Sinars D B, et al 2012 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **40** 3222
- [4] Knudson M D, Desjarlais M P, Lemke R W, et al 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 091102
- [5] Guenther D B, Demarque P, Kim Y C, et al 1992 *Astrophys. J.* **387** 372
- [6] Basu S, Grevesse N, Mathis S, et al 2015 *Space Sci. Rev.* **196** 49
- [7] Murillo M S, Weisheit J C. 1998 *Phys. Rep.* **302** 1
- [8] Fogle M, Bahati E M, Bannister M E, et al 2008 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **175** 543
- [9] Ma L L, Zhang S P, Zhang F J, et al 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 123401 (in Chinese) [马莉莉, 张世平, 张芳军, 等 2024 物理学报 **73** 123401]
- [10] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [11] Debye P, Hückel E. 1923 *Phys. Zeitschrift.* **24** 185
- [12] Ecker G, Kröll W. 1963 *Phys. Fluids* **6** 62
- [13] Stewart J C, Pyatt Jr K D. 1966 *Astrophys. J.* **144** 1203
- [14] Rozsnyai B F. 1972 *Phys. Rev. A.* **5** 1137
- [15] Iglesias C A, Sterne P A. 2013 *High. Energ. Dens. Phys.* **9** 103
- [16] Son S K, Thiele R, Jurek Z, et al 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031004
- [17] Lin C, Röpke G, Kraeft W D, et al 2017 *Phys. Rev. E* **96** 013202
- [18] Zan X, Lin C, Hou Y, et al 2021 *Phys. Rev. E* **104** 025203
- [19] Benredjem D, Pain J C, Calisti A, et al 2022 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **55** 105001
- [20] Williams G O, Chung H K, Künzel S, et al 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 033216
- [21] Hou Y, Luo Q B, Liang X, et al 2026 *Acta Phys. Sin.* **75** 010302 (in Chinese) [侯永, 罗青波, 梁欣, 等 2026 物理学报 **75** 010302]
- [22] Mazzotta P, Mazzitelli G, Colafrancesco S, et al 1998 *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **133** 403
- [23] Zeng J, Li Y, Hou Y, et al 2020 *Astron. Astrophys.* **644** A92
- [24] Lee H J, Neumayer P, Castor J, et al 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 115001
- [25] Garcia Saiz E, Gregori G, Khattak F Y, et al 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 075003
- [26] Ma Q, Dai J, Kang D, et al 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 015001
- [27] Yao Y, Zeng Q, Chen K, et al 2021 *Phys. Plasmas* **28** 012704
- [28] Glenzer S H, MacGowan B J, Michel P, et al 2010 *Science* **327** 1228
- [29] Lindl J. 1995 *Phys. plasmas* **2** 3933
- [30] Itikawa Y. 1986 *Phys. Rep.* **143** 69
- [31] Alna'washi G A, Aryal N B, Baral K K. 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 135203
- [32] Lotz W. 1969 *Zeitschrift für Physik* **220** 466
- [33] Fontes C J, Sampson D H, Zhang H L. 1993 *Phys. Rev. A* **48** 1975
- [34] Kim Y K, Rudd M E. 1994 *Phys. Rev. A* **50** 3954
- [35] Ludlow J A, Ballance C P, Loch S D, et al 2009 *Phys. Rev. A* **79** 032715
- [36] Bray I, McNamara K, Fursa D V. 2015 *Phys. Rev. A* **92** 022705
- [37] Qi Y Y, Ning L N, Wang J G, et al 2013 *Phys. Plasmas* **20** 12
- [38] Jung Y D, Yoon J S. 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 3549
- [39] Wu Z Q, Han G X, Yan J, et al 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 2305
- [40] Pindzola M S, Loch S D, Colgan J, et al 2008 *Phys. Rev. A* **77** 062707
- [41] Johnson W R, Nilsen J, Cheng K T. 2024 *High. Energ. Dens. Phys.* **53** 101153
- [42] Hou Y, Jin Y, Zhang P, et al 2021 *Matter Radiat. Extremes* **6** 026901
- [43] Hou Y, Bredow R, Yuan J, Redmer R. 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033114
- [44] Hou Y, Yuan J. *Phys. Rev. E* **79** 016402
- [45] Hou Y, Jin F, Yuan J. *Phys. Plasmas* **13** 093301
- [46] Zeng J, Ye C, Liu P, et al 2022 *Int. J. Mol. Sci.* **23** 6033
- [47] Zhang P, Jin Y, Zan X, et al 2021 *Phys. Rev. E* **104** 035204

- [48] Bezukrovniy V, Schlanges M, Kremp D, et al 2004 *Phys. Rev. E* **69** 061204
- [49] Luo Q B, Liang X, Lin C L, et al 2025 *Phys. Rev. E* **111** 035208
- [50] Gu M F. 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675
- [51] Jönsson P, He X, Fischer C F, et al 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [52] Bar-Shalom A, Klapisch M, Oreg J. 2001 *J. Quant. Spectrosc. Ra.* **71** 169
- [53] Berrington K A, Eissner W B, Norrington P H. 1995 *Comput. Phys. Commun.* **92** 290
- [54] Kramida A. 2019 *Atoms* **7** 64
- [55] Janev R K, Zhang S, Wang J. 2016 *Matter Radiat. Extremes* **1** 237
- [56] Dharma-Wardana M W C, Taylor R. 1981 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14** 629
- [57] Feynman R P, Metropolis N, Teller E. 1949 *Phys. Rev.* **75** 1561
- [58] Deutsch C. 1977 *Phys. Lett. A* **60** 317
- [59] Wang Y. 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 017002
- [60] Hou Y, Fu Y, Bredow R, et al 2017 *High Energ. Dens. Phys.* **22** 21
- [61] Lv M, Hu Z, Hou Y, et al 2019 *Phys. Plasmas* **26** 022702
- [62] Li Z, Wang X, Hou Y, et al 2023 *PNAS* **120** e2300066120
- [63] Holst B, Redmer R, Desjarlais M P. 2008 *Phys. Rev. B* **77** 184201
- [64] Onida G, Reining L, Rubio A. 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 601
- [65] Vinko S M, Ciricosta O, Wark J S. 2014 *Nat. Commun.* **5** 3533
- [66] Stransky M. 2016 *Phys. Plasmas* **23** 1
- [67] Ciricosta O, Vinko S M, Barbreil B, et al 2016 *Nat. Commun.* **7** 11713
- [68] Kuchiev M Y, Johnson W R. 2008 *Phys. Rev. E* **78** 026401
- [69] Glenzer S H, Redmer R. 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1625
- [70] Wu C, Zhou F, Yan J, et al 2024 *Chin. Phys. Lett.* **41** 085202
- [71] Liu P, Gao C, Hou Y, Zeng J, Yuan J. 2018 *Nat. Commun.* **1** 95
- [72] Wannier G H. 1953 *Phys. Rev.* **90** 817
- [73] Bates D R, Nicolet M. 1950 *J. Geophys. Res.* **55** 301
- [74] Zeng J L, Liu L P, Liu P F, et al 2014 *Phys. Rev. A* **90** 044701
- [75] Cowan R D. 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (California: University of California Press) pp214–236
- [76] Gaigalas G, Rudzikas Z, Fischer C F. 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 3747
- [77] Oppenheimer J R. 1928 *Phys. Rev.* **32** 361
- [78] Shi X H, Chen C Y, Zhao Y, et al 2005 *J. Quant. Spectrosc. Ra.* **91** 161
- [79] O'Rourke B, Currell FJ, Kuramoto H, et al 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **34** 4003
- [80] Watanabe H, Currell FJ, Kuramoto H, et al 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **35** 5095
- [81] Bernshtam VA, Ralchenko YV, Maron Y. 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **33** 5025
- [82] Donets E D, Ovsyannikov V P. 1981 *Sov. Phys. JETP* **53** 466
- [83] Bar-Shalom A, Klapisch M, Oreg J. 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1773
- [84] Golden L B, Sampson D H. 1977 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **10** 2229
- [85] Golden L B, Sampson D H. 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** 2645
- [86] Hussein A A A, Abdel-Aty A H, Al-Juboori U, et al 2019 *J. Electron Spectrosc.* **234** 86
- [87] El-Maaref A A, Abou halaka M M, Mahmoud Tammam, et al 2019 *J. Quant. Spectrosc. Ra.* **224** 147
- [88] Kumar R, Singh N, Goyal A. 2024 *Radiat. Phys. Chem.* **220** 111672
- [89] Bethe H. 1930 *Ann. Phys.* **397** 325
- [90] Mott N F. 1930 *Proc. R. Soc. Lond. A* **126** 259
- [91] Vriens L. 1969 *Case Studies in Atomic Collision Physics* (Vol. 1) (North-Holland Amsterdam: Press) p335
- [92] Kumar A, Roy B N. 1978 *Phys. Lett. A* **66** 362
- [93] Dhakar K C, Pandey A, Kato D, et al 2025 *Eur. Phys. J. D* **79** 61
- [94] Falk R A, Dunn G H. 1983 *Phys. Rev. A* **27** 754
- [95] O'Malley T F, Burke P G, Berrington K A. 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 953
- [96] Burke P G, Robb W D. 1976 *Adv. Ato. Mol. Phys.* **11** 143
- [97] Pilch K, Lange A D, Prantner A, et al 2009 *Phys. Rev. A* **79** 042718
- [98] Deh B, Marzok C, Zimmermann C, et al 2008 *Phys. Rev. A* **77** 010701
- [99] Teng H. 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **33** L553
- [100] Thomason J W G, Peart B. 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L201
- [101] Burke P G, Burke V M, Dunseath K M. 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** 5341
- [102] Shimoni Y, Kouri D J. 1977 *J. Chem. Phys.* **66** 2841
- [103] Fritsch W, Lin C D. *Phys. Rep.* **202** 1
- [104] Bray I, Fursa V. 1996 *Phys. Rev. A* **54** 2991
- [105] Lee T G, Loch S D, Ballance C P, et al 2010 *Phys. Rev. A* **82** 042721
- [106] Pindzola M S, Loch S D, Colgan J P. 2021 *Atoms* **9** 32
- [107] Fryer C L, Keiter P A, Sharma V, et al 2025 *Astrophys. J.* **991** 22
- [108] Ricks M, Gleason A E, Miozzi F, et al 2024 *Phys. Rev. Res.* **6** 013316
- [109] Fogle M, Bahati E M, Bannister M E, et al 2008 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **175** 543
- [110] Brouillard F. 2013 *Atomic Processes in Electron-ion and Ion-ion Collisions* (Vol. 145) (New York: Springer Science & Business Media Press) pp75–91
- [111] Bartschat K. 1998 *Comput. Phys. Commun.* **114** 168

SPECIAL TOPIC—Relativistic atomic structure theory, methods, and applications

Research progress on electron-impact ionization processes in hot dense plasmas*

LUO Qingbo^{1)2)#} HOU Yong^{1)2)#†} LIU Jianpeng¹⁾²⁾ GAO Cheng¹⁾²⁾
KANG Dongdong¹⁾²⁾ YUAN Jianmin¹⁾³⁾

1) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Hunan Key Laboratory of Extreme Matter and Applications, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

3) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun Jilin 130012, China*)

(Received 29 June 2026; revised manuscript received 27 August 2026)

Abstract

Hot dense plasmas are a critical state of matter found extensively in inertial confinement fusion and stellar interiors. Their ionization balance and charge-state distribution are largely governed by electron impact ionization (EII)—a fundamental atomic process that also determines the radiative opacity, energy transport, and equation of state of the plasma. Systematic studies of EII under such extreme conditions provide essential atomic data for high-energy-density physics and support the development of diagnostic techniques for probing electronic structure. Unlike low-density ideal plasmas, hot dense plasmas exhibit strong coupling effects that can significantly alter atomic energy levels and wave functions. These modifications shift ionization thresholds and change EII cross sections, thereby limiting the predictive power of plasma simulations and undermining the reliability of experimental diagnostics. To address these challenges, this review provides a comprehensive overview of recent international progress in EII research in hot dense plasmas. Particular emphasis is placed on the self-consistent description of atomic structure within the ion correlation model using the hypernetted-chain (HNC) approximation, as well as on the evaluation of EII cross sections via the distorted-wave (DW) approximation. Key findings include the following: for ionization potential depression (IPD), the two-step model aligns more closely with the Stewart-Pyatt (SP) model under weak coupling, but agrees better with the Ecker-Kröll (EK) model in the strong-coupling regime. For EII cross sections, the Debye-Hückel model yields the strongest screening and the largest cross sections, followed by the ion-sphere model and then the ion-correlation model. In addition, the momentum relaxation effect is found to enhance EII cross sections by up to an order of magnitude and thus cannot be overlooked. The review also discusses recent advances and key challenges, and provides an outlook on promising directions for future research.

Keywords: hot dense plasma, strong coupling effect, atomic structure, electron impact ionization

DOI: [10.7498/aps.75.20260920](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260920)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260920](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260920)

* Project supported by the National Key Laboratory of Computational Physics, China (Grant No. JK2025-02) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11974424, 12404332, and 12274384).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: yonghou@nudt.edu.cn