

# 太阳辐射/对流区域边界处的碳、氮、氧元素的电子碰撞电离研究\*

侯永<sup>1)2)†</sup> 罗青波<sup>1)2)</sup> 梁欣<sup>1)2)</sup> 曾交龙<sup>1)3)</sup> 袁建民<sup>1)2)4)</sup>

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) (浙江工业大学理学院, 杭州 310023)

4) (吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

(2025 年 8 月 25 日收到; 2025 年 10 月 17 日收到修改稿)

太阳辐射层与对流层边界区域 ( $T \approx 180$  eV,  $n_e \approx 9 \times 10^{22}$  cm<sup>-3</sup>) 是太阳内部能量传输方式从辐射主导对流主导转变的关键界面, 也是研究高温稠密等离子体物理的天然实验室. 这一区域的物理特性决定了恒星演化模型的可靠性与能量传输机制的稳定性, 特别是高温稠密等离子体中强烈的碰撞电离会改变电子数密度分布, 进而影响能量的输运过程. 本文发展了一种耦合等离子体环境效应来计算原子结构的新方法: 通过将计算原子结构的 Flexible Atomic Code (FAC) 与超网链 (hypernetted-chain, HNC) 近似相结合, 在原子波函数计算中引入电子-电子、电子-离子关联函数来考虑等离子体中屏蔽效应, 系统研究了极端条件下电子碰撞电离的物理机制. 基于扭曲波近似的计算表明, 考虑等离子体环境效应时, 碳、氮和氧元素的电子碰撞电离截面较自由原子模型显著增强, 同时电离阈值出现明显下降的现象. 研究发现这种增强效应主要源于离子间强耦合导致的原子势场重叠和自由电子屏蔽引起的束缚态能级移动. 本研究直接将离子结构引入电子结构计算的哈密顿量中, 所获得的电离参数可直接用于改进太阳内部辐射输运模型, 为惯性约束聚变等极端条件等离子体研究提供了理论支持.

**关键词:** 辐射/对流区域边界, 环境效应, 电子碰撞电离, 超网链近似

**DOI:** 10.7498/aps.75.20251144

**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251144

## 1 引言

辐射不透明度是描述光与物质相互作用的重要参数, 对于它的研究来源于天体物理学<sup>[1-3]</sup>, 用于描述恒星内部核反应区域所产生的辐射能量向表面传播过程中与物质相互作用的过程, 直接反映了恒星内部的结构及其演化过程. 辐射不透明度的计算不仅取决于光跃迁、光电离、韧致辐射、电子散射等微观过程, 还受到电子碰撞过程所决定的电离

平衡的影响. 在高温稠密等离子体中, 电子碰撞电离过程截面是求解粒子输运方程、非平衡演化过程的基础参数, 决定了等离子体中的自由电子密度、电荷态分布以及辐射的输运过程. 太阳是离地球最近的恒星, 也是地球能量的主要来源, 关于它的详细研究对于了解广阔的恒星世界具有普遍意义. 在太阳结构的研究中, 通常将太阳球体分为核心、辐射层、对流层、光球层、色球层以及日冕区. 其中, 太阳的辐射层与对流层边界 (温度  $T \approx 180$  eV, 电子密度  $n_e \approx 9 \times 10^{22}$  cm<sup>-3</sup>) 是太阳内部结构和动

\* 科学挑战计划 (批准号: TZ2025013) 和国家自然科学基金 (批准号: 11974424) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yonghou@nudt.edu.cn

力学的一个关键区域, 此处的等离子体状态参数对于理解能量传输机制至关重要. 在该区域内由于热量的积累以及温度梯度的变陡, 会导致该区域对光子的吸收能力急剧增强, 即不透明度出现一个显著的峰值, 从而对太阳结构的建模产生较大影响<sup>[4]</sup>. 此外, 对于太阳来说, 除了核心区域的化学组成略有不同外, 太阳其他区域的化学组成是一样的, 其中氢、氦约占总质量的 98%, 其他元素约占总质量的 2%, 而在重元素中, 碳、氮、氧又占据了大部分. 因此, 研究太阳辐射/对流区域边界碳、氮、氧元素的电子碰撞电离过程, 对等离子体的电离平衡和辐射不透明度有决定性作用, 也对天体物理的研究具有重要的物理意义.

早期对于电子碰撞电离的理论研究, 都是基于稀薄等离子体环境情况下, 采用自由原子模型来进行理论计算. 在这种等离子体条件下, 等离子密度比较低, 原子或者离子结构与等离子体环境的耦合效应可以忽略不计. 基于稀薄等离子体情况的电子碰撞电离实验<sup>[5-9]</sup>已经发展了很多能够合理计算电子碰撞电离截面的方法, 并开展了不同原子的电子碰撞电离过程的研究, 比如使用 Lotz 半经验方程<sup>[10]</sup>研究了  $\text{Se}^{2+}$  的电子碰撞电离过程、R 矩阵赝态 (R-matrix with pseudostates, RMPS) 和含时密耦合 (time-dependent close-coupling, TDCC) 以及收敛密耦合 (convergent close-coupling, CCC)<sup>[11,12]</sup>研究了 Mg 和  $\text{Al}^+$  的电子碰撞电离过程、库仑波恩交换 (Coulomb-Born exchange, CBE) 近似<sup>[13]</sup>研究了  $\text{Au}^{50+}$  的电子碰撞电离过程、两体碰撞偶极 (binary-encounter-dipole, BED) 近似<sup>[14]</sup>研究了氢原子、氦原子的电子碰撞电离过程以及细致能级扭曲波方法<sup>[15]</sup>研究了  $\text{W}^{6+}$  的电子碰撞电离过程等. 基于自由原子情况下的电子碰撞电离的参数研究, 目前已经取得巨大进步并逐渐完善.

对于广泛存在于恒星内部<sup>[16-18]</sup>、惯性约束聚变<sup>[19]</sup>以及强激光与固体靶相互作用<sup>[20]</sup>等各种情景下产生的高温、稠密等离子体来说, 电子结构及其动力学过程受到离子间耦合、自由电子屏蔽等周围环境的影响是无法忽略的, 这将对热稠密等离子体的基本参数带来较大影响. 近些年来, 随着超强 X 射线光源的快速发展<sup>[4,21-23]</sup>, 人们能够在实验上测量热稠密等离子体的各种物理性质, 也推进了热稠密等离子体电子碰撞电离过程<sup>[24]</sup>的研究. 在针对热稠密等离子体中的原子结构及其动力学过程, 建立合

理的物理模型来描述带电粒子之间的相互作用是研究电子碰撞电离最重要的一步. 人们对于热稠密等离子体环境中的电子碰撞电离过程已经开展了大量的理论研究工作, 比如在考虑等离子体中自由电子的屏蔽效应对电子碰撞电离影响时, 采用的 Debye-Hückel (DH) 模型<sup>[25-27]</sup>. 考虑到在热稠密等离子体中散射电子的瞬时空间局域化, 我们课题组分别发展了考虑了动量展宽的波函数<sup>[28]</sup>和衰减的扭曲波函数<sup>[29]</sup>来描述散射电子, 研究了热稠密的  $\text{Mg}^{7+}$  的电子碰撞电离过程, 计算结果与实验<sup>[24]</sup>都能够很好地吻合, 这些理论模型计算结果也表明了等离子体环境效应会在很大能量范围内改变电子碰撞电离截面. 最近, Johnson 等<sup>[30]</sup>基于平均原子模型采用扭曲波考虑了散射电子的交换效应, 研究了稠密状态下 Li, Na, Mg, Al 等元素的电子碰撞电离截面, 并且发现了共振现象. 由于热稠密等离子体中的环境效应对电子碰撞电离影响的复杂性, 目前还没有统一的处理方式来描述热稠密等离子体中的电子碰撞电离过程, 还处于探索阶段.

为了发展描述热稠密等离子体中电子碰撞电离过程的模型, 本文首先采用超网链 (hypernetted-chain, HNC) 近似<sup>[31-35]</sup>得到的电子-电子、电子-离子的关联函数, 来考虑热稠密等离子体环境中自由电子的屏蔽效应和离子之间的耦合效应, 并将其植入到计算孤立原子结构的 FAC (Flexible Atomic Code)<sup>[36]</sup>的中心势场中, 在离子球模型的基础上通过自洽迭代求解 Dirac 方程给出收敛的电子结构; 随后, 采用 FAC 程序包中的扭曲波 (distorted wave, DW) 近似<sup>[37]</sup>计算电子碰撞电离截面, 该模型在孤立原子情形下与实验测量结果<sup>[5]</sup>符合良好; 在此基础上, 系统研究了热稠密等离子体环境中碳、氮、氧元素的电子碰撞电离截面, 并与基于自由原子模型的计算结果进行对比分析; 最后, 在考虑了热稠密等离子体环境的 FAC 计算原子结构的基础上, 采用 DW 近似在太阳辐射/对流区域边界处的物理条件计算了 C, N, O 元素的电子碰撞电离截面数据.

## 2 理论方法

电子碰撞电离截面主要取决于两个核心因素: 系统的电子结构与描述碰撞强度的矩阵元. 为此, 本文的理论研究路径如下: 首先, 通过离子、自由

电子的关联函数来刻画热稠密环境效应, 并将其内嵌至 FAC<sup>[36]</sup> 中, 从而形成自洽地描述热稠密等离子体中的电子结构; 然后, 结合 FAC 中内置的扭曲波近似来计算碰撞矩阵元<sup>[36]</sup>; 最后, 在此基础上获得电子碰撞电离截面, 系统分析热稠密环境效应对碰撞电离截面的影响规律.

## 2.1 电子结构的计算

在孤立原子情况下, 波函数  $\Psi(r)$  通过相对论 Dirac 方程得到:

$$H^{\text{DC}}\Psi(r) = E\Psi(r), \quad (1)$$

其中, 具有  $N$  个电子的原子或离子相对论哈密顿量  $H^{\text{DC}}$  为

$$H^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N H_{\text{D}}(i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2)$$

而基矢态  $\Phi_v$  是由  $N$  个单电子 Dirac 自旋量  $\varphi_{nkm}$  的乘积反对称和得到:

$$\varphi_{nkm} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(r)\chi_{km}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{nk}(r)\chi_{-km}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

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

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) P_{n\kappa}(r) &= \alpha \left[ \varepsilon_{n\kappa} - V(r) + \frac{2}{\alpha^2} \right] Q_{n\kappa}(r), \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right) Q_{n\kappa}(r) &= \alpha [-\varepsilon_{n\kappa} + V(r)] P_{n\kappa}(r), \end{aligned} \quad (4)$$

式中,  $\alpha$  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.

为了包含组态相互作用效应, 原子态被构造为具有相同对称性的原子组态的线性组合:

$$\Psi(J\pi) = \sum_j^{n_a} a_j \Phi_j(J\pi), \quad (5)$$

其中,  $n_a$  为原子组态的个数,  $a_j$  是基矢  $\Phi_j$  的展开系数.

标准的 FAC<sup>[36]</sup> 只适用于孤立原子结构的计算, 对于一个处于等离子环境中的原子或离子, 需要考虑离子间、自由电子-自由电子的关联效应对离子结构的中心势场影响. 为此, 将基于 HNC 近

似得到的电子、离子关联函数引入到单电子中心势场<sup>[38-40]</sup> 中, 表示为

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{Z}{r} + \int \frac{\rho_b(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + V_{xc}[\rho_b(r) + \rho_e^0] \\ &\quad - V_{xc}[\rho_e^0] - \frac{\rho_e^0}{\beta_{ee}} \int C_{ee}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) h_{ie}(r') d^3r' \\ &\quad - \frac{\rho_i^0}{\beta_{ie}} \int C_{ie}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) h_{ii}(r') d^3r'. \end{aligned} \quad (6)$$

方程 (6) 第一行前四项为孤立离子情况下的势能贡献, 分别代表束缚电子与核的库仑势、束缚电子之间的库仑排斥势、束缚电子之间的量子交换关联势. 量子交换关联势是通过局域密度近似<sup>[41]</sup> 计算得到的. 后两行分别为等离子体环境中的自由电子与离子的相互作用以及离子与离子之间的相互作用.

在上述中心势场  $V(r)$  的表达式中,  $Z$  为核电荷数,  $\rho_b(r)$  为束缚电子密度, 定义如下:

$$\rho_b(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_j l_j [P_j^2(r) + Q_j^2(r)], \quad (7)$$

其中,  $l_j$  为  $j$  态的占据数. 对于均匀分布的自由电子密度  $\rho_e^0$ , 离子通过球边界  $r_b = (3/(4\pi\rho_i^0))^{1/3}$  处的非均匀分布自由电子密度  $\rho_f(r)$  给出,  $\rho_i^0$  为等离子体中离子数密度. 非均匀分布的自由电子密度  $\rho_f(r)$  是在 Thomas-Fermi 近似<sup>[42,43]</sup> 下, 同时考虑满足 Fermi-Dirac 分布得到的:

$$\begin{aligned} \rho_f(r) &= \frac{1}{\pi^2} \int_{k_0(r)}^{\infty} k^2 dk \\ &\quad \times \frac{1}{\exp\{[\sqrt{k^2 c^2 + c^4} - c^2 - V(r) - \mu]/k_B T_e\} + 1}, \end{aligned} \quad (8)$$

式中,  $k_0(r) = [2V(r)c^2 + V^2(r)]^{1/2}/c$ ,  $c$  和  $\mu$  分别是光速和电子的化学势. 对于核电荷为  $Z$  的离子来说,  $\mu$  通过离子球的电中性来确定化学势:

$$\int_0^{r_b} 4\pi r^2 [\rho_b(r) + \rho_f(r)] dr = Z. \quad (9)$$

对于方程 (6) 中心势场  $V(r)$  中各种粒子之间的关联函数计算如下. 因为电子结构在整个计算过程中已经要求自洽地计算, 所以电子-离子的总关联函数  $h_{ie}(r)$  直接通过离子周围自由电子密度来定义:

$$h_{ie}(r) = \frac{\rho_f(r)}{\rho_e^0} - 1, \quad (10)$$

其中  $\rho_f(r)$ ,  $\rho_e^0$  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. 为了更快速地完成电子、离子结构的自洽场计算, HNC 近似<sup>[31-35]</sup>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-电子的关联函数  $C_{ee}(r)$  和  $h_{ee}(r)$ , 以及离子-离子的关联函数  $C_{ii}(r)$  和  $h_{ii}(r)$ . 方程如下:

$$h_{ab}(r) = \exp[-\beta_{ab}V_{ab}(r) + h_{ab}(r) - C_{ab}(r)] - 1, \quad (11)$$

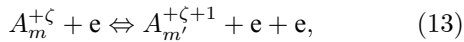
式中, 下标  $a$  和  $b$  表示  $e$  或  $i$ .  $V_{ab}(r)$  表示  $a$  粒子和  $b$  粒子之间的相互作用势. 在本文的计算中,  $V_{ie}(r)$  为等离子体环境下单电子有效势  $V(r)$ , 而  $V_{ee}(r)$  和  $V_{ii}(r)$  分别采用 Deutsch 势<sup>[44]</sup> 和 Yukawa 势<sup>[45]</sup>, 其中离子的平均电离度依赖于电子结构的计算. 对于电子-电子和离子-离子关联函数的完全求解还需要耦合 Ornstein-Zernike (OZ) 关系<sup>[46]</sup>:

$$h_{ab}(r) = C_{ab}(r) + \sum_c n_c \int d\mathbf{r}' C_{ac}(\mathbf{r}') h_{cb}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (12)$$

从而与 (11) 式形成闭合关系来完成自洽迭代求解, 其中  $n_c$  为  $c$  类粒子的密度.

## 2.2 电子碰撞电离截面的计算

电子碰撞电离过程是热稠密等离子体中最重要的原子过程之一, 描述等离子体环境中的自由电子撞击一个离子并把离子中的一个束缚电子激发到连续态的过程. 该物理过程可以表示为



这里  $m$  和  $m'$  为离子的状态;  $\zeta, \zeta + 1$  为离子的电荷态;  $e$  为连续态的电子. 描述电子碰撞电离截面已经有许多种计算方法, 本文使用扭曲波 (DW) 近似<sup>[37]</sup> 来计算电子碰撞电离截面, 并将计算结果与 CBE 近似<sup>[10]</sup> 和 BED 近似<sup>[11]</sup> 的解析方法进行了比较, 为了便于计算结果的说明, 下面分别对这三种方法给出简单的理论描述.

在扭曲波 (DW) 近似框架下, 电子碰撞电离的微分截面随出射电子能量的变化关系由以下方程描述<sup>[47]</sup>:

$$\sigma(\varepsilon_0, \varepsilon) = \frac{1}{k_0^2 g_0} \Omega_{01}, \quad (14)$$

其中,  $\varepsilon_0$  和  $k_0$  分别为入射电子的能量和动量,  $\varepsilon$  为出射电子的能量,  $g_0$  为初态的简并度. 碰撞强度  $\Omega_{01}$  为

$$\begin{aligned} \Omega_{01} = 2 \sum_{\kappa, J_T, k, \alpha_0, \beta_0} Q^k(\alpha_0 \kappa; \beta_0 \kappa) \\ \times \langle \psi_0 \| Z^k(\alpha_0, \kappa) \| \psi_1, \kappa; J_T \rangle \\ \times \langle \psi_0 \| Z^k(\beta_0, \kappa) \| \psi_1, \kappa; J_T \rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

式中,  $\kappa$  为出射电子的相对论角量子数;  $J_T$  是末态出射电子的总耦合角动量量子数;  $Z^k(\alpha_0, \kappa)$ ,  $Z^k(\beta_0, \kappa)$  表示张量,  $k$  为张量的秩;  $\alpha_0, \beta_0$  为单电子态;  $\psi_0$  和  $\psi_1$  分别表示靶的初态和末态. 径向波函数求和部分计算  $Q^k$ <sup>[48]</sup> 表示为

$$\begin{aligned} Q^k(\alpha_0 \kappa; \beta_0 \kappa) = \sum_{\kappa_0, \kappa_1} [k]^{-1} P^k(\kappa_0 \kappa_1; \alpha_0 \kappa) \\ \times P^k(\kappa_0 \kappa_1; \beta_0 \kappa). \end{aligned} \quad (16)$$

除了  $Q^k$  外, 方程 (15) 中的角向部分<sup>[49]</sup> 可以通过 Racah 解耦方程进行化简, 从而得到碰撞强度  $\Omega_{01}$  的最终表达式, 这里不进行详细的讨论. 最后, 根据微分截面方程对出射电子能量  $\varepsilon$  进行积分, 得到最终的电子碰撞电离总截面为

$$\sigma(\varepsilon_0) = \int_0^{(\varepsilon_0 - I)/2} \sigma(\varepsilon_0, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (17)$$

式中,  $I$  为电离能,  $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 + I + \varepsilon$  满足能量守恒, 其中  $\varepsilon_1$  为散射电子的能量.

不同于 DW 近似下的详细计算, CBE 近似来自对 DW 近似计算的简化, 如果一个原子或者离子中的组态相互作用被限制在具有相同主量子数  $n$  的复合体上, 那么此时  $Q^k(\alpha_0 \kappa; \beta_0 \kappa)$  就会简化为  $Q^k(\alpha_0 \kappa; \alpha_0 \kappa) \equiv Q_R$ , 然后利用 Bar-Shalom, Klapisch 以及 Oreg 的因式分解法<sup>[37]</sup> 能够得到一个计算非常快速并且相对精确的参数化方程:

$$Q_R = A \ln(\mu) + D \left(1 - \frac{1}{\mu}\right)^2 + \left(\frac{c}{\mu} + \frac{d}{\mu^2}\right) \left(1 - \frac{1}{\mu}\right), \quad (18)$$

式中,  $\mu = \varepsilon_0/I$ ;  $A, D, c, d$  分别为拟合参数. 通过修正的 Bethe 极限确定  $A$ , 然后对不同的人射电子能量积分得到总的电子碰撞电离截面.

BED 近似理论是结合 Mott 截面<sup>[50]</sup> 和二元相遇截面<sup>[51]</sup> 推导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<sup>[52]</sup>. 在 BED 近似下需要用到束缚-自由的微分振子强度  $df(\omega)/d\omega$ , 它与 Bethe 系数相关, 但比 DW 近似计算的径向积分要简单得多. 在 BED 近似下得到的半经验方程为

$$\sigma_i(t) = \frac{S}{t+u+1} \left[ D(t) \ln t + \left( 2 - \frac{N_i}{N} \right) \times \left( \frac{t-1}{t} - \frac{\ln t}{t+1} \right) \right], \quad (19)$$

其中,  $D(t)$  的定义为

$$D(t) \equiv N^{-1} \int_0^{(t-1)/2} \frac{1}{\omega+1} \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega, \quad (20)$$

式中,  $N$  为壳层内的电子数, 角标  $i$  为壳层的序数;  $S = 4\pi\alpha_0^2 N (R/I)^2$ ,  $\alpha_0$  为玻尔半径,  $R$  为里德伯能量;  $\mu = U/I$ ,  $U$  为壳层内电子的动能;  $t = \varepsilon_0/I$ ;  $\omega = \varepsilon/I$ ;  $N_i \equiv \int_0^\infty \frac{df(\omega)}{d\omega} d\omega$ .

### 3 结果与讨论

#### 3.1 孤立情况下电子碰撞电离截面的计算

为了探究 FAC 计算孤立原子的电子碰撞电离截面的合理度, 以及分析不同模型近似下计算电子碰撞截面的差异, 本文针对 Fogle 等<sup>[5]</sup>的实验, 计算了碳、氮、氧元素的类铍离子的电子碰撞电离截面. Fogle 等在 Oak Ridge 国家实验室的电子-离子交叉束装置<sup>[53,54]</sup>中进行了电子碰撞电离的实验, 他们通过 10 GHz 的 CAPRICE-type 电子回旋共振离子源产生了类铍离子, 其中采用  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  和  $\text{O}_2$  作为工作气体. 离子源的微波功率为 15—50 W, 工作气体的气压大约为  $10^{-6}$  Torr (1 Torr  $\approx$  133.32 Pa). 对于 Fogle 等实验测量的类铍离子的电离截面主要涉及了两个贡献, 一个是电子碰撞电离的直接贡献, 另一个是电子碰撞激发-自电离的间接贡献, 后者对于电离截面的贡献相对较小. 此外对于类铍离子的组态不仅存在基态  $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$ , 还存在亚稳态  $1s^2 2s^1 2p^1 \ ^3P_0$ , Fogle 等<sup>[5]</sup>的实验测量是包含基态与亚稳态离子的混合束流的总电离截面, 其中,  $\text{C}^{2+}$ 基态与亚稳态的比例分别为 54% 和 46%;  $\text{N}^{3+}$ 基态与亚稳态的比例分别为 70% 和 30%;  $\text{O}^{4+}$ 基态与亚稳态的比例分别为 76% 和 24%.

图 1 给出了 C, N 和 O 元素的类铍离子电子碰撞电离截面计算结果, 其中图 1(a)—(c) 分别表示的是  $\text{C}^{2+}$ ,  $\text{N}^{3+}$  和  $\text{O}^{4+}$  的结果, 并与 Fogle 等<sup>[5]</sup>的实验结果、平均组态扭曲波理论 (configuration-average distorted wave, CADW)<sup>[55]</sup> 以及赝态 R-matrix (R-matrix with pseudostates, RMPS) 近似<sup>[56]</sup> 计算结果进行了比较. 计算中, 依据实验推断

的基态  $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$  和亚稳态  $1s^2 2s^1 2p^1 \ ^3P_0$  的比例, 计算了总电离截面. 从图 1(a) 可以看出, Fogle 等使用 CADW<sup>[55]</sup> 计算的结果高估了实验数据, 但是他们使用赝态 RMPS 近似<sup>[56]</sup> 计算结果与实验符合得较好. 本文使用 FAC 中的 DW 近似计算的阈值能量偏低, 但整体趋势和实验基本一致; CBE 近似给出了较合理的阈值能量, 但在低能区高估了电离截面, 而在高能渐进区域又有所低估; 对于 BED 近似, 在整个能量范围内均与实验数据符合较好. 采用 DW 近似时能量阈值偏低主要来源于对  $1s^2 2s^1 2p^1 \ ^3P_1$  组态能量的计算偏差. 进一步结合 BED 与 CBE 近似分析, DW 在高能区截面偏低的原因是由于其未如 BED 和 CBE 方法那样引入 Bethe 极限<sup>[52]</sup> 进行修正. 在图 1(b) 中, 展示了  $\text{N}^{3+}$  的电子碰撞电离截面. 在低能区域, 除了 DW 近似与 BED 近似与 Fogle 等的实验数据吻合外, 其他的理论模型均高估了电子碰撞电离截面; 而在其他能量区间, DW, CBE 和 BED 近似与 Fogle 等实验截面较为一致. 图 1(c) 比较了三种近似下计算  $\text{O}^{4+}$  的电子碰撞电离截面与实验结果, 在所列出的理论模型中, DW 近似得到的电离截面在中低能量区间与 Fogle 等的实验测量值基本一致, 但在高能区域明显偏低; 而其他的理论模型都只在高能渐进行为处与实验一致. 由于 CBE 近似是在 DW 近似的基础上通过简化计算并引入 Bethe 极限所获得的解析形式, 综合这三种离子 (C, N, O) 截面的计算结果可以看出, DW 方法在高能区对所有离子均呈现系统性偏低, 进一步证实未包含 Bethe 极限修正是导致该偏差的主要原因. 基于孤立情况下电子碰撞电离截面的系统计算与分析, 本文后续将采用 DW 近似作为计算电子碰撞电离截面的主要方法, 并结合超网络 (HNC) 近似计算电子、离子间关联函数, 并将其用于修正的 FAC 来自洽计算电子结构, 从而深入探究等离子体环境中的电子屏蔽及离子关联对电子碰撞电离过程的影响.

#### 3.2 等离子体环境中电子碰撞电离截面的计算

与孤立情况下离子中的电子结构不同, 热稠密等离子体环境中的电子结构会受到自由电子屏蔽、离子间关联的影响. 但由于电子碰撞电离截面直接依赖于电子结构的计算, 因而热稠密等离子体环境效应会间接影响电子碰撞电离过程. 为了计算热稠密

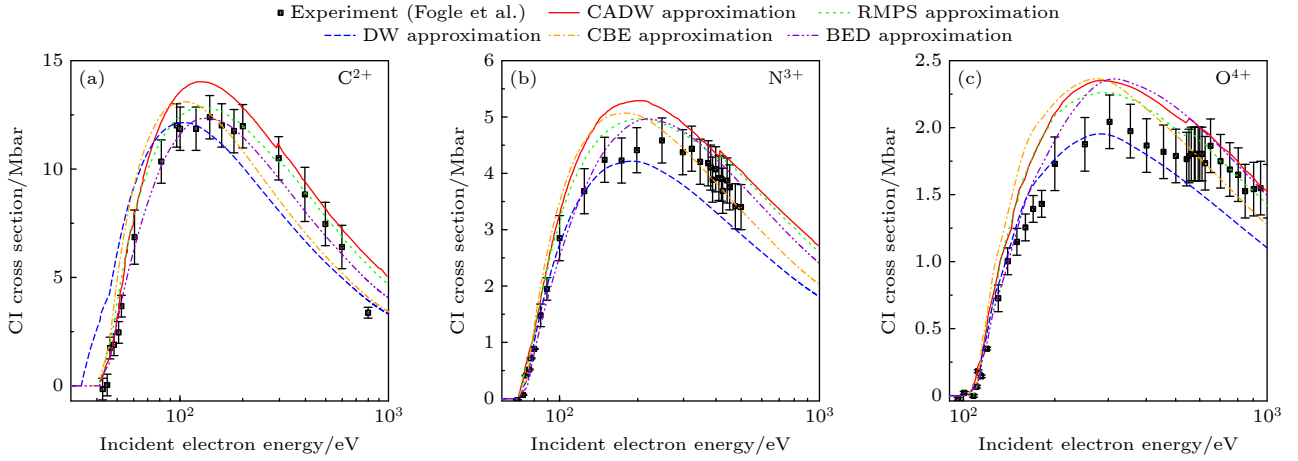


图1 孤立情况下,类铍离子电子碰撞电离截面随着入射电子能量变化的关系 (a)  $C^{2+}$ 的结果; (b)  $N^{3+}$ 的结果; (c)  $O^{4+}$ 的结果. 带有误差的黑色正方形是Fogle等<sup>[5]</sup>实验测量的结果;红色实线和绿色点线是Fogle等分别采用组态平均扭曲波(CADW)近似<sup>[55]</sup>与静态R-matrix(RMPS)近似<sup>[56]</sup>计算的理论结果;蓝色虚线、橙色点-虚线和紫色点-点-虚线是本文分别采用DW近似、CBE近似和BED近似理论计算的结果

Fig. 1. The electron impact ionization cross section of beryllium-like ions as a function of incident electron energy for the isolation ion: (a) The case of  $C^{2+}$ ; (b) the case of  $N^{3+}$ ; (c) the case of  $O^{4+}$ . The black squares with error bars<sup>[5]</sup> represent the experimental measurements by Fogle et al.. The red solid and green dotted lines represent the theoretical results calculated by Fogle et al. by using the CADW approximation<sup>[55]</sup> and the RMPS<sup>[56]</sup> approximation, respectively. The blue dashed, orange dotted-dashed, and violet dotted-dotted-dashed lines represent the theoretical results calculated in this paper using the DW, CBE, and BED approximation, respectively.

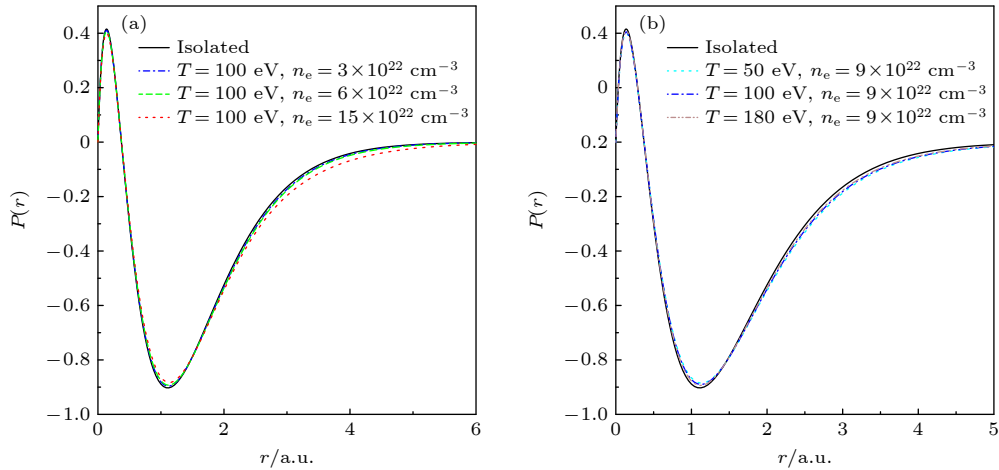


图2 热稠密等离子体中 $C^{2+}$ 的 $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$ 组态2s束缚电子径向波函数 (a)  $T = 100$  eV时,径向波函数随等离子体密度的变化; (b)  $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 时,径向波函数随等离子体温度的变化. 黑色实线为孤立情况下的计算结果

Fig. 2. Radial wave function of the 2s bound electron in the  $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$  configuration of  $C^{2+}$  in hot dense plasmas: (a) Variation of the radial wave function with the plasma density at  $T = 100$  eV; (b) variation of the radial wave function with plasma temperature at  $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . The black solid line represents the result calculated for the isolated case.

等离子体中电子碰撞电离截面, 本文首先探究了环境效应对电子结构的影响. 图2给出了 $C^{2+}$ 的 $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$ 组态中2s轨道的单电子径向波函数随等离子体温度、密度变化情况, 图2(a)给出了孤立离子情况以及温度 $T$ 为100 eV, 电子数密度 $n_e$ 分别为 $3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $15 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 的计算结果. 图2(b)给出了孤立离子情况以及电

子数密度 $n_e$ 为 $9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , 温度 $T$ 分别为50 eV, 100 eV, 180 eV的结果. 在计算过程中, 等离子体环境中离子和自由电子的屏蔽势用通过HNC近似计算得到的关联函数来表示. 从图2(b)可以看出, 相对于孤立离子情况下2s轨道电子波函数, 热稠密等离子体环境中自由电子屏蔽、离子间的关联效应使得原子核对束缚电子的吸引变弱, 束缚态的

波函数更向外延展. 在相同的等离子体温度下, 等离子体密度越高, 束缚电子波函数向外延展得越明显; 在相同的等离子体密度下, 等离子体的温度越低, 束缚电子波函数向外延展得越明显. 这是因为等离子体的温度越低、密度越高, 热稠密等离子体中的带电离子耦合就越强, 环境效应带来的屏蔽就越强, 因此相对于孤立离子结构, 热稠密等离子体中的电子结构变化更明显.

基于上述对电子结构的计算结果, 本文使用了DW近似<sup>[37]</sup>开展了 $C^{2+}$ 的 $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^1$ 电子碰撞电离截面计算, 结果如图3所示. 可以看出, 等离子环境中的屏蔽效应不仅会导致截面的阈值能量减小, 而且还会导致截面的增强. 在相同的等离子体温度下, 随着等离子体密度的增加, 电离阈值能量下降得越多, 电子碰撞电离截面增强得越多; 在相同的等离子体密度情况下, 随着等离子体温度的减少, 电离阈值能量下降得越多, 电子碰撞电离截面增强得越多. 这是因为伴随着等离子体密度增加、温度降低, 热稠密等离子体的耦合强度增强, 电离能下降越来越大, 同时束缚电子波函数越来越向外延展, 从而导致电子碰撞电离过程更容易发生.

考虑到热稠密等离子体环境效应的影响, 本文计算了碳元素在太阳辐射/对流区域边界处典型条件 $T = 180 \text{ eV}$ ,  $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 下不同离子价态的电子碰撞电离截面, 如图4所示. 为了清晰展示热稠密等离子体环境效应对电离截面的具体贡

献, 首先计算了仅考虑离子、自由电子所带来的屏蔽效应的电离截面(虚线, 标记为no\_IPD), 在此基础上, 进一步考虑热稠密等离子体环境所引起的电离能下降(ionization potential depression, IPD)效应对截面(点线, 标记为IPD)的综合影响, 并与孤立原子情况下的计算结果(实线, 标记为isolated)进行对比. 由于高价态离子与低价态离子的电子碰撞电离截面数值差异显著, 图4(a)展示了 $C^+$ (黑色)、 $C^{2+}$ (红色)和 $C^{3+}$ (绿色)的电子碰撞电离截面; 图4(b)给出了 $C^{4+}$ (蓝色)和 $C^{5+}$ (橙色)的电子碰撞电离截面. 由图4可知, 太阳辐射/对流区域边界处条件下的电子屏蔽效应以及离子关联效应对碳元素各个价态离子的电子碰撞电离截面具有显著的影响. 以 $C^+$ 的计算结果为例, 孤立情况下入射电子的能量阈值大约为24 eV, 而仅考虑了等离子体的屏蔽效应时阈值能量出现明显下降, 约为18 eV. 相应地, 孤立情况的电子碰撞电离截面的峰值为34 Mbar, 而考虑了屏蔽效应的电子碰撞电离截面的峰值变为50 Mbar. 这一变化趋势清晰地表明等离子体中的屏蔽效应通过波函数和能级移动, 已明显改变了电离碰撞截面. 为了和孤立原子模型比较, 在考虑了屏蔽效应的基础上, 采用两步模型(two-step)<sup>[57]</sup>计算了热稠密等离子体的IPD, 给出了屏蔽效应+电离能下降对电离截面的影响, 如图4中点线所示. 可以看出, 相对于虚线, 点线的结果在近阈值区域进一步增强, 表明在屏蔽

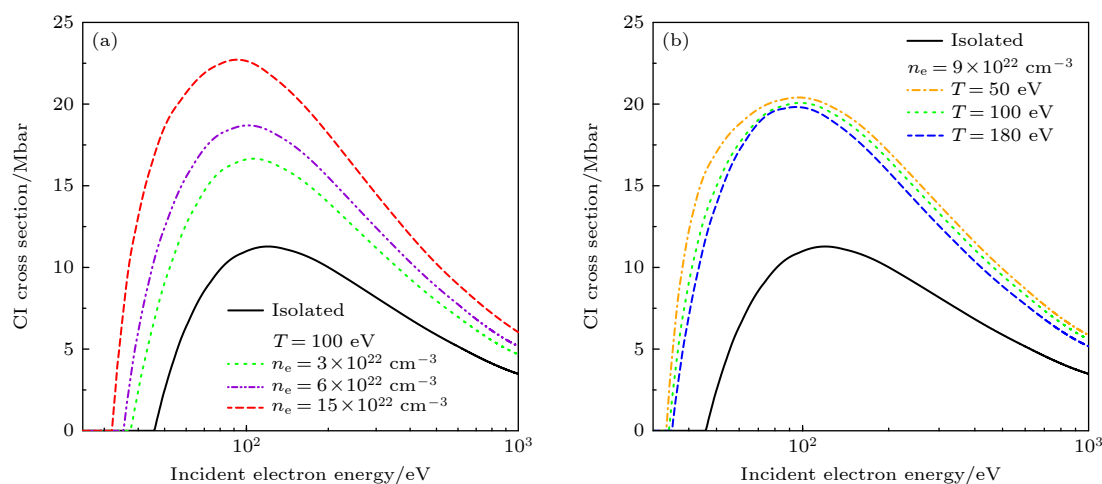


图3 随着入射电子能量变化,  $C^{2+}$ 的 $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^1$ 的电子碰撞电离截面 (a) 温度 $T$ 为100 eV、不同电子密度的碰撞电离截面计算结果; (b) 电子密度 $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、不同温度的碰撞电离截面计算结果. 黑色实线为孤立情况下的计算结果

Fig. 3. Electron impact ionization cross section of  $1s^2 2s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s^2 2s^1$  of  $C^{2+}$  as a function of incident electron energy. (a) The collision ionization cross sections with temperature  $T$  of 100 eV and different electron densities; (b) the collision ionization cross sections with electron density  $n_e = 9 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  and different temperatures. The black solid line represents the result calculated for the isolated case.

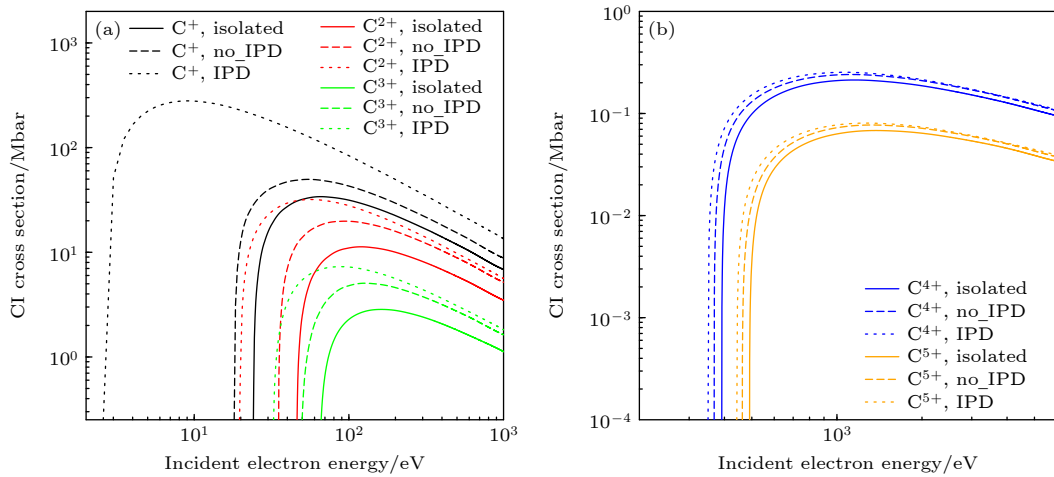


图4 碳元素在孤立情况下以及在  $T = 180$  eV,  $n_e = 9 \times 10^{22}$  cm $^{-3}$  的太阳辐射/对流区域边界处条件下, 随着入射电子能量变化的电子碰撞电离截面 (a) 黑色、红色和绿色分别为  $C^+$ ,  $C^{2+}$  和  $C^{3+}$  的碰撞电离截面计算结果; (b) 蓝色和橙色分别为  $C^{4+}$  和  $C^{5+}$  的碰撞电离截面计算结果. 计算中分别考虑了在孤立情况 (isolated)、屏蔽效应 (no\_IPD) 和屏蔽效应+电离能 (IPD) 下降情况下对碰撞电离截面的影响, 图中分别采用实线、虚线和点线表示

Fig. 4. The electron impact ionization cross sections of carbon under isolated conditions and at the solar radiation/convection zone boundary ( $T = 180$  eV,  $n_e = 9 \times 10^{22}$  cm $^{-3}$ ) as functions of incident electron energy: (a) Black, red, and green lines represent the calculated results for  $C^+$ ,  $C^{2+}$ , and  $C^{3+}$ , respectively; (b) blue and orange lines correspond to  $C^{4+}$  and  $C^{5+}$ , respectively. Here, the solid line represents the calculation results in the isolated case, the dashed line represents the calculation results considering the screening effect at the boundary of the solar radiation/convective region, and the dotted line represents the calculation results further considering the ionization potential depression on the basis of the dashed line.

效应的基础上, 考虑了 IPD 效应后进一步扩大了与孤立原子模型之间的差异. 从图4的计算结果中, 还能够观察到随着离子价态的逐渐升高, 电子碰撞电离截面的阈值能量越来越大并且截面变得越来越小. 主要原因是这里针对的是基态离子最外层电子的电子碰撞电离截面, 随着离子价态的提高, 对应的最外层束缚电子受到核的吸引也会越来越强, 导致电子碰撞电离过程越来越难发生.

通过对太阳辐射/对流区域条件下的碳元素的电子碰撞电离截面进行计算, 并与孤立离子情况下的结果对比可以发现, 处于太阳辐射/对流区域边界处条件下的等离子体中电子屏蔽效应和离子关联效应对电子碰撞电离有着显著的影响. 为了不再重复与孤立离子情况下结果的对比, 图5直接给出氮、氧元素在太阳辐射/对流区域边界处条件下的各个离子价态的电子碰撞电离截面. 图5(a)给出了  $N^+$ ,  $N^{2+}$ ,  $N^{3+}$  和  $N^{4+}$  的计算结果; 图5(b)给出了  $O^+$ ,  $O^{2+}$ ,  $O^{3+}$ ,  $O^{4+}$  和  $O^{5+}$  的计算结果; 图5(c)给出了  $N^{5+}$ ,  $N^{6+}$ ,  $O^{6+}$  和  $O^{7+}$  的计算结果. 图5中氮、氧元素随着离子价态的变化, 其电子碰撞电离截面展现的变化规律与图4的碳元素一致. 从图5(c)还可以发现, 对于具有相同束缚电子个数、不同元素的离子 (紫色实线  $N^{5+}$  和粉色虚线  $O^{6+}$ 、蓝色点

线  $N^{6+}$  和棕色点-虚线  $O^{7+}$ ), 随着核电荷数的逐渐变大, 电子碰撞电离的阈值能量逐渐增大并且截面逐渐减小. 原因在于, 核电荷数的增加会导致核对束缚电子的吸引增强, 电子碰撞电离过程会越来越难发生. 从图4和图5还能够发现, 在太阳辐射/对流区域边界处条件下,  $C^+$  的电子碰撞电离截面约为  $C^{2+}$  的 2.5 倍、 $C^{3+}$  的 12.5 倍、 $C^{4+}$  的 100 倍、 $C^{5+}$  的 700 倍;  $N^+$  的电子碰撞电离截面约为  $N^{2+}$  的 5 倍、 $N^{3+}$  的 10 倍、 $N^{4+}$  的 32 倍、 $N^{5+}$  的 500 倍、 $N^{6+}$  的 1500 倍;  $O^+$  的电子碰撞电离截面大概为  $O^{2+}$  的 3 倍、 $O^{3+}$  的 11 倍、 $O^{4+}$  的 20 倍、 $O^{5+}$  的 60 倍、 $O^{6+}$  的 1200 倍、 $O^{7+}$  的 3000 倍. 根据电离平衡条件可知, 虽然在太阳辐射/对流区域边界处条件下的碳、氮、氧元素低价态离子的含量会很低, 但由于相对于高价态离子截面要大很多, 在整个电离平衡方程的计算过程中也要考虑低价态离子的贡献.

## 4 结 论

本文首先结合 Fogle 等的实验, 使用 FAC 计算了孤立情况下碳、氮、氧元素类铍离子的电子碰撞截面, 探究了 FAC 中的扭曲波 (DW) 近似、CBE 交换近似以及 BED 近似对电子碰撞电离截

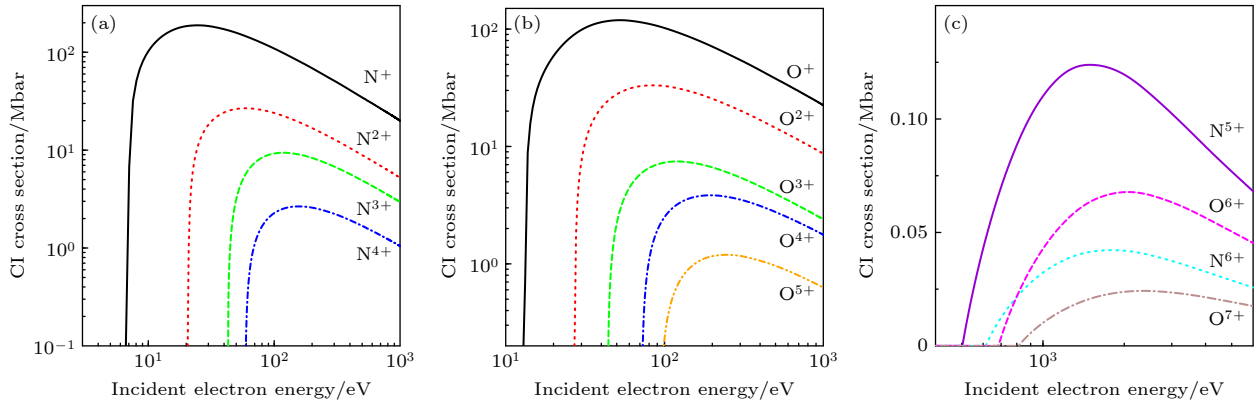


图5 氮、氧元素在  $T = 180$  eV,  $n_e = 9 \times 10^{22}$  cm $^{-3}$  的太阳辐射/对流区域边界处条件下, 随着入射电子能量变化的电子碰撞电离截面 (a)  $N^+$ ,  $N^{2+}$ ,  $N^{3+}$  和  $N^{4+}$  的计算结果; (b)  $O^+$ ,  $O^{2+}$ ,  $O^{3+}$ ,  $O^{4+}$  和  $O^{5+}$  的计算结果; (c)  $N^{5+}$ ,  $N^{6+}$ ,  $O^{6+}$  和  $O^{7+}$  的计算结果

Fig. 5. Electron impact ionization cross sections for nitrogen and oxygen at the solar radiation/convection zone boundary ( $T = 180$  eV,  $n_e = 9 \times 10^{22}$  cm $^{-3}$ ) as functions of incident electron energy: (a) Results for  $N^+$ ,  $N^{2+}$ ,  $N^{3+}$ , and  $N^{4+}$ , respectively; (b) results for  $O^+$ ,  $O^{2+}$ ,  $O^{3+}$ ,  $O^{4+}$ , and  $O^{5+}$ , respectively; (c) results for  $N^{5+}$ ,  $N^{6+}$ ,  $O^{6+}$ , and  $O^{7+}$ , respectively.

面的影响; 并选取了与实验结果符合较好的 DW 近似, 讨论了环境效应对电子碰撞电离截面的影响. 然后, 从原子结构的计算出发, 通过 HNC 近似考虑了等离子环境效应下自由电子的屏蔽效应以及离子之间的关联效应, 使用修改的 FAC 在离子球模型的基础上自洽迭代求解了 Dirac 方程, 进一步计算了等离子体环境中的电子碰撞电离截面. 结果表明, 考虑等离子环境中屏蔽效应会降低电子碰撞电离的阈值能量以及提升电子碰撞电离截面, 并且等离子体温度越低, 等离子体密度越高, 等离子体环境的屏蔽效应就越强, 电子碰撞电离的阈值能量越低导致碰撞电离截面越大. 最后, 给出了碳、氮、氧元素各个价态的离子在太阳辐射/对流区域边界处条件下的电子碰撞电离截面. 通过对碳元素的分析可知, 该区域中的自由电子屏蔽效应与离子关联效应相比于孤立情况会提升 20% 至 100% 的电子碰撞电离截面, 表明该区域的环境效应对碰撞电离截面的影响是无法忽略的. 通过考虑太阳辐射/对流区域边界处条件下自由电子的屏蔽效应和离子之间的关联效应, 更新了热稠密等离子体中碳、氮、氧元素各个价态的电子碰撞电离截面, 为该区域电离平衡、状态方程等物理量提供了全新的基本参数.

## 参考文献

- [1] Guenther D B, Demarque P, Kim Y C, Pinsonneault M H 1992 *APJ* **387** 372
- [2] Bahcall J N, Ulrich R K 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 297
- [3] Basu S, Grevesse N, Mathis S, Turck-Chièze S 2015 *Space Sci. Rev.* **196** 49
- [4] Bailey J E, Nagayama T, Loisel G P, et al. 2015 *Nature* **517** 56
- [5] Fogle M, Bahati E M, Bannister M E, Vane C R, Loch S D, Pindzola M S, Ballance C P, Thomas R D, Zhaunerchyk V, Bryans P, Mitthumsiri W, Savin D W 2008 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **175** 543
- [6] Woodruff P R, Hublet M C, Harrison M F A, Brook E 1978 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **11** L679
- [7] Falk R A, Stefani G, Camilloni R, Dunn G H, Phaneuf R A, Gregory D C, Crandall D H 1983 *Phys. Rev. A* **28** 91
- [8] Loch S D, Witthoef M, Pindzola M S, Bray I, Fursa D V, Fogle M, Schuch R, Glans P, Ballance C P, Griffin D C 2005 *Phys. Rev. A* **71** 012716
- [9] Loch S D, Colgan J, Pindzola M S, Westermann M, Scheuermann F, Aichele K, Hathiramani D, Salzborn E 2003 *Phys. Rev. A* **67** 042714
- [10] Alna'washi G A, Aryal N B, Baral K K, Thomas C M, Phaneuf R A 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 135203
- [11] Ludlow J A, Ballance C P, Loch S D, Pindzola M S, Griffin D C 2009 *Phys. Rev. A* **79** 032715
- [12] Bray I, McNamara K, Fursa D V 2015 *Phys. Rev. A* **92** 022705
- [13] Fontes C J, Sampson D H, Zhang H L 1993 *Phys. Rev. A* **48** 1975
- [14] Kim Y K, Rudd M E 1994 *Phys. Rev. A* **50** 3954
- [15] Ma L L, Zhang S P, Zhang F J, Li M J, Jiang J, Ding X B, Jie L Y, Zhang D H, Dong C Z 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 123401 (in Chinese) [马莉莉, 张世平, 张芳军, 李麦娟, 蒋军, 丁晓彬, 顾录有, 张登红, 董晨钟 2024 物理学报 **73** 123401]
- [16] Kritcher A L, Swift D C, Döppner T, et al. 2020 *Nature* **584** 51
- [17] Giammichele N, Charpinet S, Fontaine G, et al. 2018 *Nature* **554** 73
- [18] Bethkenhagen M, Witte B B L, Schörner M, Röpke G, Döppner T, Kraus D, Glenzer S H, Sterne P A, Redmer R 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 023260
- [19] Hurricane O A, Callahan D A, Casey D T, et al. 2014 *Nature* **506** 343
- [20] Seddon E A, Clarke J A, Dunning D J, Masciovecchio C, Milne C J, Parmigiani F, Rugg D, Spence J C H, Thompson N R, Ueda K, Vinko S M, Wark J S, Wurth W 2017 *Rep. Prog. Phys.* **80** 115901

- [21] Vinko S M, Ciricosta O, Cho B I, et al. 2012 *Nature* **482** 59
- [22] Ciricosta O, Vinko S M, Chung H K, et al. 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 065002
- [23] Cho B I, Engelhorn K, Vinko S M, et al. 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 245003
- [24] Van den Berg Q Y, Fernandez-Tello E V, Burian T, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 055002
- [25] Jung Y D, Yoon J S 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 3549
- [26] Jung Y D 1998 *Phys. Plasmas* **5** 536
- [27] Li B W, Jiang J, Dong C Z, Wang J G, Ding X B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5274 (in Chinese) [李博文, 蒋军, 董晨钟, 王建国, 丁晓彬 2009 物理学报 **58** 5274]
- [28] Zeng J, Ye C, Liu P, Gao C, Li Y, Yuan J 2022 *Int. J. Mol. Sci.* **23** 6033
- [29] Zhang P, Jin Y, Zan X, Liu P, Li Y, Gao C, Hou Y, Zeng J, Yuan J 2021 *Phys. Rev. E* **104** 035204
- [30] Johnson W R, Nilsen J, Cheng K T 2024 *High Energy Density Phys.* **53** 101153
- [31] Wünsch K, Hilse P, Schlanges M, Gericke D O 2008 *Phys. Rev. E* **77** 056404
- [32] Bredow R, Bornath T, Kraeft W D, Redmer R 2013 *Contrib. Plasma Phys.* **53** 276
- [33] Schwarz V, Bornath T, Kraeft W D, Glenzer S H, Höll A, Redmer R 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 324
- [34] Bezukrovniy V, Schlanges M, Kremp D, Kraeft W D 2004 *Phys. Rev. E* **69** 061204
- [35] Baus M, Hansen J P 1980 *Phys. Rep.* **59** 1
- [36] Gu M F 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675
- [37] Bar-Shalom A, Klapisch M, Oreg J 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1773
- [38] Saumon D, Starrett C E, Kress J D, Clerouin J 2012 *High Energy Density Phys.* **8** 150
- [39] Hou Y, Bredow R, Yuan J M, Redmer R 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033114
- [40] Hou Y, Fu Y S, Bredow R, Kang D, Redmer R, Yuan J 2017 *High Energy Density Phys.* **22** 21
- [41] Dharma-Wardana M W C, Taylor R 1981 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14** 629
- [42] Feynman R P, Metropolis N, Teller E 1949 *Phys. Rev.* **75** 1561
- [43] Thøgersen M, Zinner N T, Jensen A S 2009 *Phys. Rev. A* **80** 043625
- [44] Deutsch C 1977 *Phys. Lett. A* **60** 317
- [45] Wang Y 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 017002
- [46] Jin Y, Zhang P, Li Y J, Hou Y, Zeng J L, Yuan J M 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 073102 (in Chinese) [金阳, 张平, 李永军, 侯永, 曾交龙, 袁建民 2021 物理学报 **70** 073102]
- [47] Zeng J L, Liu L P, Liu P F, Yuan J M 2014 *Phys. Rev. A* **90** 044701
- [48] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (California: University of California Press) pp214–236
- [49] Gaigalas G, Rudzikas Z, Fischer C F 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 3747
- [50] Mott N F 1930 *Proc. R. Soc. Lond. A* **126** 259
- [51] Vriens L 1969 *Case Studies in Atomic Collision Physics* (Vol. 1) (North-Holland Amsterdam: Press) p335
- [52] Bethe H 1930 *Ann. Phys.* **397** 325
- [53] Gregory D C, Dittner P F, Crandall D H 1983 *Phys. Rev. A* **27** 724
- [54] Bannister M E 1996 *Phys. Rev. A* **54** 1435
- [55] Brouillard F 2013 *Atomic Processes in Electron-ion and Ion-ion Collisions* (Vol. 145) (New York: Springer Science & Business Media Press) pp75–91
- [56] Bartschat K 1998 *Comput. Phys. Commun.* **114** 168
- [57] Son S, Thiele R, Jurek Z, Ziaja B, Santra R, 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031004

# Electron impact ionization of C, N, and O at boundary of solar radiation/convection zone\*

HOU Yong<sup>1)2)†</sup> LUO Qingbo<sup>1)2)</sup> LIANG Xin<sup>1)2)</sup>

ZENG Jiaolong<sup>1)3)</sup> YUAN Jianmin<sup>1)2)4)</sup>

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) (*College of Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China*)

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

( Received 25 August 2025; revised manuscript received 17 October 2025 )

## Abstract

The solar radiation-convection boundary ( $T \sim 180$  eV,  $n_e \sim 9 \times 10^{22}$  cm<sup>-3</sup>) marks the transition from radiative to convective energy transport, serving as a natural laboratory for hot dense plasmas. Its physical properties are crucial for stellar evolution and energy transport models, yet how electron-impact ionization (EII) is influenced by hot-dense environment effects—such as electron screening and ion correlation—remains unclear. To address this, we systematically calculate EII cross sections for C, N, and O ions under realistic solar boundary conditions, focusing on the role of environmental effects. We develop a novel computational framework that integrates hot-dense environment effects into atomic structure calculations: the Flexible Atomic Code (FAC) for atomic structure is combined with the Hypernetted-chain (HNC) approximation to capture electron–electron, electron–ion and ion–ion correlations, enabling self-consistent treatment of electron screening and ion correlation. Atomic wave functions are derived by solving the Dirac equation within the ion-sphere model, using a modified central potential that combines both free-electron screening and ion–ion interactions. EII cross sections are then computed via the distorted-wave (DW) approximation in FAC. The results demonstrate that the hot-dense environment effects significantly enhance the electron-impact ionization cross sections of C, N, and O, compared with those calculated under the free-atom model. Additionally, a notable reduction in the ionization threshold energy is observed. These effects are attributed to the overlap of atomic potentials due to strong ion coupling and the shift in bound-state energy levels caused by free-electron screening. For instance, under solar boundary conditions, the ionization cross section of C<sup>+</sup> is increased by up to 50%, with the ionization threshold decreasing from about 24 eV (isolated) to 18 eV (with screening). Similar enhancements are observed for nitrogen and oxygen ions across various charge states. By establishing updated ionization cross sections for C, N, and O ions under realistic solar interior conditions, this work provides fundamental parameters for improving radiation transport models, ionization balance calculations, and equation-of-state models in stellar interiors. The results underscore the necessity of incorporating hot-dense environment effects in the calculations of atomic processes in hot dense plasmas, which is of great significance for astrophysics and inertial confinement fusion research.

**Keywords:** radiation/convection zone boundary, environment effect, electron impact ionization, hypernetted-chain approximation

DOI: [10.7498/aps.75.20251144](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251144)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251144](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251144)

\* Project supported by the Science Challenge Project, China (Grant No. TZ2025013) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11974424).

† Corresponding author. E-mail: [yonghou@nudt.edu.cn](mailto:yonghou@nudt.edu.cn)

太阳辐射/对流区域边界处的碳、氮、氧元素的电子碰撞电离研究

侯永 罗青波 梁欣 曾交龙 袁建民

Electron impact ionization of C, N, and O at boundary of solar radiation/convection zone

HOU Yong LUO Qingbo LIANG Xin ZENG Jiaolong YUAN Jianmin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 010302 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251144

CSTR: 32037.14.aps.75.20251144

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251144>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

温稠密物质中不同价态离子分布对X-射线弹性散射光谱计算的影响

Influence of different charge-state ion distribution on elastic X-ray scattering in warm dense matter

物理学报. 2021, 70(7): 073102 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201483>

$W^{6+}$ 离子的电子碰撞电离研究

Theoretical investigation of electron-impact ionization of  $W^{6+}$  ion

物理学报. 2024, 73(12): 123401 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240408>

中高Z元素原子、离子的电子碰撞电离与激发截面快速计算方法

Fast computation approach of electron-impact ionization and excitation cross-sections for atoms and ions with medium- and high-Z elements

物理学报. 2024, 73(10): 103104 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240213>

采用薄靶方法测量低能电子致Al, Ti, Cu, Ag, Au元素K壳层电离截面与L壳层特征X射线产生截面

Measurements of K-shell ionization cross sections and L-shell X-ray production cross sections of Al, Ti, Cu, Ag, and Au thin films by low-energy electron impact

物理学报. 2022, 71(17): 173402 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220162>

超重元素Og( $Z = 118$ )及其同主族元素的电离能和价电子轨道束缚能

Ionization energy and valence electron orbital binding energy of superheavy element Og( $Z = 118$ ) and its homologs

物理学报. 2022, 71(21): 213201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220813>

托卡马克中新经典对流对钨杂质聚芯影响的模拟研究

Simulation of effect of neoclassical convection on tungsten impurity core accumulation in tokamak

物理学报. 2025, 74(13): 135206 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250384>