arXiv:2303.03444v1 [astro-ph.SR] 6 Mar 2023

光电离与不透明度

A K Pradhan[1,2,3]
[1] 天文学系， [2] 化学物理项目， [3] 生物物理研究生项目，俄亥俄州立大学，美国俄亥俄州哥伦布市 43210

2022年9月

摘要。不透明度决定辐射在物质介质中的输运。在等离子体源中，原子不透明度的主要贡献来自束缚-束缚线跃迁，以及进入连续态的束缚-自由光电离。本文回顾了基于 R 矩阵方法的先进光电离计算理论方法；该方法应用于不透明度计划、铁计划，并用于解决此前尚未解决的问题：电子碰撞、斯塔克效应（电微场）、多普勒效应（热运动）以及芯激发导致的自电离共振展宽。R 矩阵不透明度计算需要海量原子数据，且计算复杂度前所未有。研究表明，在高能量密度（HED）等离子体中，由于自电离共振线型显著衰减，光电离截面会呈现三维的能量—温度—密度依赖性。因此，微分振子强度和单色不透明度会在能量上重新分布，从而显著影响罗斯兰平均不透明度和普朗克平均不透明度。

1. 引言

从物理角度而言，不透明度取决于所有可能的内禀光-原子相互作用，这些相互作用会吸收、散射或重新发射来自光源并被观测者接收的光子。此外，不透明度还取决于光源和介质的外部条件。近年来，已有许多关于不透明度的理论和实验研究（即 [1, 2, 3]）。虽然光电离与所有等离子体源中的不透明度都息息相关，但我们尤其关注高能量密度（HED）环境，例如恒星内部和实验室聚变装置；这类环境的特点是温度和密度同时较高，通常为 $T > 10^6 K$ ，密度为 $N > 10^{15}$ cm^{-3}。计算得到的原子截面和跃迁概率会受到等离子体效应的显著扰动。

单色不透明度由四项组成：束缚-束缚（bb）、束缚-自由（bf）、自由-自由（ff）和散射（sc）：

$$\kappa_{ijk}(\nu) = \sum_k A_k \sum_j F_j \sum_{i,i'} [\kappa_{bb(}(i, i'; \nu) + \kappa_{bf}(i, \epsilon_{i'}; \nu) + \kappa_{ff}(\epsilon_i, \epsilon'_{i'}; \nu) + \kappa_{sc}(\nu)] \, . (1)$$

在公式（1）中， A_k 表示给定原子的元素丰度 k、其电离分数 F_j、 i 以及初始束缚态和最终束缚态/连续态 $i\,i'$； ϵ 表示电子能量

处于连续态中。为确定出射辐射，定义了调和平均 κ_R，即罗斯兰平均不透明度（RMO），其中单色不透明度为 $\kappa_{ijk}(\nu)$

$$\frac{1}{\kappa_R} = \frac{\int_0^\infty g(u)\kappa_\nu^{-1} du}{\int_0^\infty g(u) du} \quad \text{with} \quad g(u) = u^4 e^{-u}(1-e^{-u})^{-2}. \tag{2}$$

这里，$g(u)$ 是包含受激发射的普朗克函数的导数，$\kappa_{bb}(i,i') = (\pi e^2/m_e c) N_i f_{ii'} \phi_\nu$，以及 $\kappa_{bf} = N_i \sigma_\nu$。因此，$\kappa_\nu$ 取决于 bb 振子强度、bf、光电离截面 σ_ν，以及给出能级布居数 N_i 的状态方程（EOS）。我们介绍采用耦合通道或密耦合（以下简称 CC）近似、通过 R矩阵（RM）方法实现的大规模计算，用于式（1）中的不透明度，主要涉及：（i） bb 跃迁概率，以及（ii） bf 光电离截面。

在这篇综述中，我们聚焦于 bf-不透明度，尤其关注共振现象；这些现象表现为大量自电离共振系列，在实际应用所涉及的整个能量范围内主导着光电离截面。

2. 光电离

离子 X^{+z} 的光电离（PI），其中离子电荷为 z，进入（e + 离子）连续态的过程是

$$X^{+z} + h\nu \rightarrow X^{+z+1} + e. \tag{3}$$

光电离还包含一种间接过程：通过形成自电离的双激发态产生共振，随后衰变进入连续态，

$$h\nu + X^{+Z} \rightleftharpoons (X^{+Z})^{**} \rightleftharpoons X^{+Z+1} + e \tag{4}$$

自电离共振的无限系列分布于整个光电离截面中，通常在较低能量范围内占主导，并涵盖并趋近于对应剩余离子激发能级的电离阈值，这些阈值位于（e +ion）连续态中。计算等离子体不透明度需要大量所有束缚能级的光电离截面值。需要（e + ion）系统中每个束缚能级的总光电离截面（σ_{PI}），包括基态和所有激发态。不过在实际计算中，我们考虑 n（SLJ）< 10，并对阈值以下相对较少的能量点进行近似。总 σ_{PI} 对应于所有电离通道的贡献之和，这些通道使剩余离子处于基态及各种激发态。

光电离截面中的自电离共振会因等离子体密度和温度而展宽消失，从而增强连续背景，后文将对此进行讨论。然而，在吸收光谱中仍可观察到强而孤立的共振。此外，一类自电离共振对应于离子实内部的强偶极跃迁，称为核激发（PEC）或 Seaton 共振，与双电子复合的逆过程相对应 [5, 7]。

光电离的跃迁矩阵 $S =< \Psi_F||\mathbf{D}||\Psi_B >$ 由束缚态和连续态波函数计算得到，并通过上述表达式给出谱线强度。光电离截面为

$$\sigma_{PI} = \frac{4\pi}{3c}\frac{1}{g_i}\omega S, \tag{5}$$

其中， ω 是以里德伯单位表示的入射光子能量。

2.1. 不透明度计划与 R 矩阵方法

采用 RM 方法进行的天体物理不透明度计算始于不透明度计划（约 1983 年）[4, 5, 6, 7]。RM 不透明度代码旨在计算大规模且精确的束缚-束缚（bb）跃迁振子强度，以及束缚-自由（bf）光电离截面。研究者投入了大量精力，精确描绘自电离共振轮廓的形状、高度、能量范围和大小；这些特征由（e + ion）系统中的众多耦合通道决定。

在耦合通道R矩阵方法中，整个（e + ion）系统可用靶离子或芯态的本征函数以及一个自由电子

$$\Psi(E) = \mathcal{A}\sum_i \chi_i\theta_i + \sum_j c_j\Phi_j \ . \tag{6}$$

χ_i 是在特定 S_iL_i 态下的靶离子波函数， θ_i 是自由电子波函数， Φ_j 是系数为 c_j 的束缚通道关联函数（即[5, 7]）。标记为 $S_iL_ik_i^2\ell_i(SL\pi)$的耦合通道； k_i^2 是入射动能。相比之下，现行不透明度模型采用的扭曲波近似忽略了式 6 中对通道的求和，因此不像 RM 方法那样以第一性原理方式考虑耦合效应，因为复杂离子可能涉及数百乃至数千个耦合通道。原则上，这种近似意味着扭曲波方法忽略了量子叠加以及在自电离共振轮廓中显现的干涉。

对于电子-离子波函数 $\Psi_B(SL\pi; E)$ 和 $\Psi_F(SL\pi; E')$，其 + 组态的 bb、 bf 跃迁矩阵元，以及束缚态 B 和 B' 的谱线强度（原子单位）分别为

$$S(B; B') = |\langle\Psi_B(E_B)||\mathbf{D}||\Psi_{B'}(E_{B'})\rangle|^2. \tag{7}$$

在计算不透明度时，我们考虑偶极算符 D，因为非偶极跃迁通常不是重要的贡献项。末态连续态表示为 $\Psi_F(E')$，初态表示为 $\Psi_B(E)$，则光电离截面为

$$\sigma_\omega(B; E') = \frac{4}{3}\frac{\alpha\omega}{g_i}|\langle\Psi_B(E_B)||\mathbf{D}||\Psi_F(E')\rangle|^2. \tag{8}$$

ω 是光子频率， E' 是出射电子的光电子能量。Breit-Pauli R矩阵（BPRM）在中间耦合下，采用对耦合方案 $S_iL_l(J_i)l_i(K_i)s_i(J\pi)$ [11], ，通过 Breit-Pauli（BP）哈密顿量将相对论效应纳入 BPRM 代码所处理的（e + 离子）系统，其中态 S_iL_i

分裂为精细结构能级 $S_iL_iJ_i$。因此，通道数是相应 LS 耦合情形的数倍。IP研究通常基于 BPRM代码，例如数据库 NORAD [10]中大量的辐射和碰撞数据。

2.2. 不透明度的R矩阵计算

用于不透明度计算的 R-矩阵代码与原始的 R-矩阵代码 [6, 5, 7]有很大差异，是在其基础上扩展而来的。后来，OP代码在铁计划 [8] 下进一步扩展，以便在Breit-Pauli近似 [11]中纳入相对论效应和精细结构。俄亥俄州立大学又对RM不透明度代码进行了进一步改编和扩展，以实现完整的RM不透明度计算 [12, 3]。图1展示了俄亥俄超级计算中心（OSC）的RM代码流程图。首先使用原子结构代码SUPERSTRUCTURE [17] 和CIV3 [18], ，获得芯离子态准确的组态相互作用表示。接下来，使用两个 R-矩阵代码STG1和STG2，为CC近似下耦合的积分微分方程生成多极积分和代数系数，这些方程对应于(e + 离子)哈密顿量。在BPRM代码中，RECUPD代码对 LSJ 对耦表示进行重耦合，并显式纳入精细结构。总(e + 离子)哈密顿量矩阵在STGH中对角化。由此获得的 R-矩阵基函数和偶极矩阵元将输入代码STGB以求取束缚态波函数B，输入代码STGF以求取连续态波函数，输入跃迁代码STGBB bb ，并输入代码STGBF以计算光电离截面。还可以使用代码STGF(J)获得电子碰撞激发碰撞强度。

与DW 方法和原子结构计算相比，R矩阵计算极为复杂，需要投入大量计算工作量和资源。尤其是，内壳层跃迁往往是对不透明度贡献最大的因素。但由于计算限制以及当时可用的高性能计算平台的能力有限，OP 工作无法完成这些计算，只有外壳层辐射跃迁例外，它们采用 RM 或 BPRM 方法计算。因此，OP不透明度计算大多采用较简单的 DW 方法；其他不透明度模型也采用类似的 DW 型方法，这些方法同样忽略通道耦合，因而无法从头考虑束缚-自由连续谱中的自电离共振。一个显著的例子是核激发（PEC）共振（或 Seaton共振） [5, 7],的重要作用；这些共振与强偶极跃迁相关（即 [12, 3] 对于 Fe XVII）。

尽管付出了前所未有的努力并取得了进展，OP-RM研究仍面临若干当时难以克服的困难，限制了原子计算的范围。首先，这些限制源于计算限制，进而使人们无法考虑重要的物理效应，也无法对原子不透明度进行完整的R矩阵计算。OP 的主要特点和不足如下：(I) 计算采用 LS耦合，忽略了相对论精细结构；(II) 靶或(e + 离子)系统中靶离子（或离子实）的密耦合波函数展开仅包含

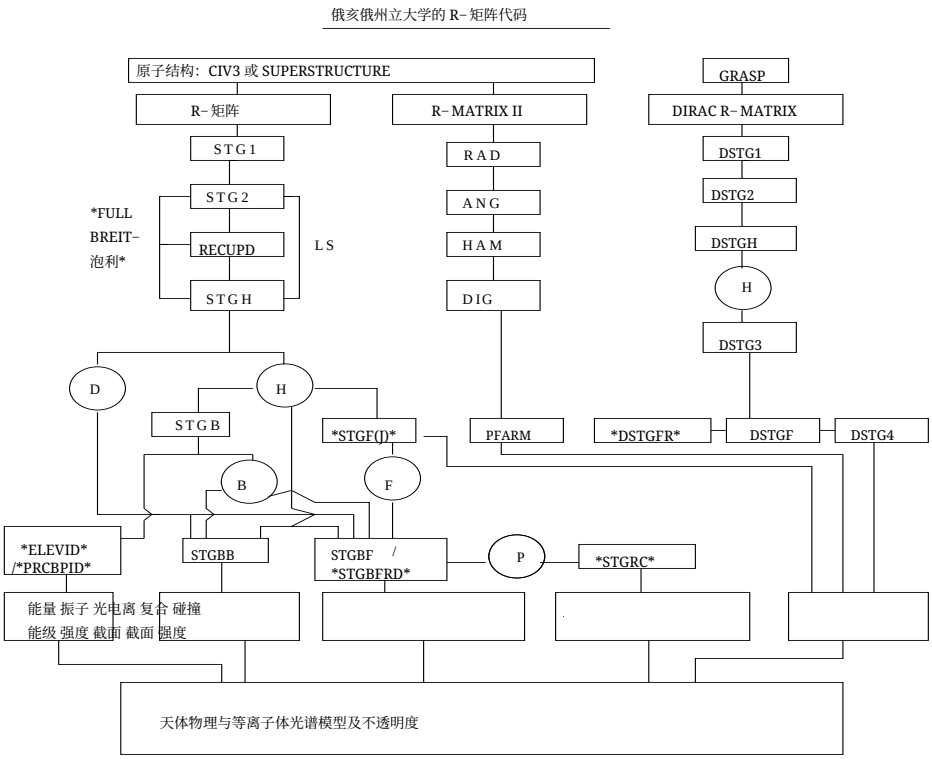


图 1. 用于不透明度计算的 R矩阵代码。生成的原子数据会进一步通过一套状态方程、等离子体展宽和不透明度代码进行处理，以获得各温度和密度下的单色不透明度和平均不透明度 [20]。

少数基态组态的 LS 项；(III) 由于靶离子展开受到限制，无法纳入内壳层激发，因此无法描述内层壳层能级向剩余(e + 离子)系统连续态中的大量共振发生的光激发；(IV) 束缚-自由光电离截面中的自电离共振仅在少数激发靶项范围内得到刻画；(V) 未计算具有较大轨道角动量-自旋量子数的总角动量和自旋(e + 离子)对称性。所有这些因素对于实现完整、收敛且准确的不透明度计算都至关重要。如前所述，OP 工作最初采用 *R*-矩阵代码开展，但波函数展开非常小（e +离子）系统通常仅限于离子实的基态组态。因此，OP 不透明度仅纳入了少部分 R矩阵数据。相反，大部分不透明度贡献是使用原子结构代码和畸变波（下文简称 DW）近似计算得到的，这与其他不透明度模型 [6-10]类似。

首个完整的R矩阵计算（为后续不透明度计算奠定基础）针对Fe XVII 离子开展；该离子对于确定太阳对流区底部（BCZ）的不透明度至关重要（[12], , 下文简称NP16）。通过日震学已精确测定，太阳对流区底部的太阳半径为0.713±0.001 R⊙。

针对不透明度的R矩阵计算还揭示了其他新的物理问题。需要解决三个主要问题：（A）大型耦合通道波函数展开的收敛性，这些展开是纳入不透明度光谱中足够多原子结构所必需的；（B）高 $n\ell$ 贡献的完备性，直至 $n \equiv \infty$；以及（C）共振线型的衰减，这既源于自电离的内禀展宽（以第一性原理方式纳入R矩阵计算），也源于温度和密度所导致的外禀等离子体效应；对于束缚-束缚线不透明度，通常也会考虑这类等离子体效应。

已对若干铁离子开展R矩阵光电离计算 [16]。特别是，针对决定太阳对流区底部铁不透明度的铁离子，已进行了大规模截面和跃迁概率计算：Fe XVII 、Fe XVIII、Fe XIX 、Fe XX 和Fe XXI （即将发表；S.N. Nahar，私人通信）。

2.3. R矩阵与扭曲波方法

现行不透明度模型采用 DW 近似或其变体，基于与连续态耦合的原子结构计算。针对原子计算中所包含的电子组态所指定的各能级之间所有可能的束缚-束缚和束缚-自由跃迁，计算其振子强度和光电离截面。然而，由于 DW 近似仅考虑初态与末态之间的耦合，因此忽略了涉及其他能级的束缚态和连续态波函数展开之间复杂的干涉，也忽略了嵌入连续态中的自电离共振的精细线型。DW模型采用独立共振近似，将束缚-束缚跃迁概率与其和连续态的耦合独立处理。除原子计算相对简单之外，DW模型的优势在于可以采用成熟的等离子体谱线展宽处理方法。

另一方面，R矩阵不透明度计算在计算上耗费巨大且十分耗时。然而，正如早先的 OP-RM研究所证明的，尽管其研究范围受到严重限制，耦合效应仍然十分重要。束缚-自由连续态中的不透明度主要由自电离共振决定，近期完成的研究已对此有所证明（例如 [12, 3, 19]。在 DW模型中忽略精细共振线型而导致不透明度缺失，最重要的后果是未能充分考虑自电离共振的内禀展宽及其外禀等离子体展宽。现已证明，自电离共振在连续态中的展宽远大于谱线，因此会显著提高不透明度 [12, 3]。

近期的研究（[14], D21）通过纳入比NP16a更多的组态，扩展了铁的 XVII R矩阵计算。尽管这证实了我们早先关于

光电离截面的结果，D21并未考虑自电离共振的等离子体展宽，因此未能通过R矩阵计算对束缚-自由不透明度作出完整描述（下文将讨论）。D21中未展宽的截面似乎与我们的结果相似，但他们没有将其与先前发表的铁 XVII 数据进行详细比较；这些数据可从电子数据库NORAD[10]公开获取。此外，D21报告的Rosseland平均不透明度比OP2005低10%，这与其他DW模型的结果相悖；后者的不透明度最高约为其1.5倍（[12, 3],可能是因为铁的束缚能级数量不完整 XVII 。

3. 内壳层和外壳层激发

内壳层激发的 DW 数据基于预先指定的电子组态，与原子结构计算一样较为简单，可将共振视为连续态中的束缚能级而轻易计算得出。虽然 OP 不透明度是利用 DW 数据计算的，但 OP 原子代码最初是为实现 RM 方法而开发的；由于计算限制，该方法未能贯彻实施。最重要的是，该方法无法用于计算内壳层激发所导致的不透明度，而这类激发是不透明度的主要贡献来源，因为复杂离子中的大多数电子都处于闭壳层中，且其激发能高于第一电离阈值，从而产生一系列自电离共振，尤其是离子实 [12, 19] 中强偶极内壳层跃迁导致的 PEC 共振。另一方面，不透明度模型中更简单得多的 DW 处理易于实现，但对重要共振现象的处理并不准确。本文对 Fe XVII 的 RM 和 DW 计算进行了广泛比较，并在 [12, 13] 中讨论了其对等离子体不透明度的影响。

4. 共振的等离子体展宽

尽管谱线展宽早已得到研究，且其处理方法通常会常规地纳入不透明度模型（即 [5]），但迄今尚未考虑自电离共振线型的等离子体展宽。为了确定总微分振子强度的分布以及束缚-自由连续谱的结构，必须像 RM方法中那样，详细描述光电离截面中自电离共振的形状、高度、能量和大小随密度和温度变化而发生的衰减。

自电离共振与束缚-束缚谱线有着根本区别，因为它们与具有内禀量子力学自电离宽度的准束缚能级相关。正如其他研究所示并将在下文讨论的那样，展宽对平均不透明度有显著贡献，可使罗斯兰平均不透明度提高 1.5 至 3 倍 [19]。然而，谱线展宽过程和公式仍有待发展；本文概述了一种理论处理和计算算法（详情将在其他地方介绍）。能级 i 的卷积束缚-自由光电离截面

可写为:

$$\sigma_i(\omega) = \int \tilde{\sigma}(\omega')\phi(\omega', \omega)d\omega', \tag{9}$$

其中， σ 和 $\tilde{\sigma}$ 分别为等离子体展宽和未展宽的自电离共振结构的截面， ω 为光子能量（全文均采用里德伯原子单位），而 $\phi(\omega', \omega)$是以总宽度 Γ 表示的归一化洛伦兹线型因子，该总宽度由纳入计算的所有自电离展宽过程产生:

$$\phi(\omega', \omega) = \frac{\Gamma(\omega)/\pi}{x^2 + \Gamma^2}, \tag{10}$$

其中， $x \equiv \omega - \omega'$。与谱线展宽的关键区别在于，(e $+$ 离子)系统中的自电离共振对应于多个通道中由激发芯离子能级定义的离散化连续态之间的量子力学干涉，也正是由这种干涉产生。RM方法（即 [6, 5, 7]）对(e $+$ 离子)系统中的自电离共振进行描述，其线型通常是不对称的（不同于通常呈对称形状的谱线线型）。

给定与共振结构对应的 N 个芯离子能级,

$$\sigma(\omega) = \sum_i^N \left[\int \tilde{\sigma}(\omega') \left[\frac{\Gamma_i(\omega)/\pi}{x^2 + \Gamma_i^(\omega)} \right] d\omega' \right]. \tag{11}$$

对于 $x \equiv \omega' - \omega$，求和遍及包含在$N$能级RM波函数展开中的所有激发阈值 E_i，其对应的总阻尼宽度 Γ_i 由所有展宽过程产生。线型 $\phi(\omega', \omega)$以每个连续态能量 ω为中心，对变量 ω' 进行卷积，并相对于每个激发芯离子阈值 i 定义。在当前公式中，我们将能量与相对于每个阈值 $\omega' \to \nu_i$ 的有效量子数关联，从而将总宽度写为:

$$\begin{aligned} \Gamma_i(\omega, \nu, T, N_e) = \Gamma_c(i, \nu, \nu_c) + \Gamma_s(\nu_i, \nu_s^*) \\ + \Gamma_d(A, \omega) + \Gamma_f(f - f; \nu_i, \nu_i'), \end{aligned} \tag{12}$$

分别涉及碰撞 Γ_c、斯塔克 Γ_s、多普勒 Γ_d和自由-自由跃迁 Γ_f 宽度，以及下文定义的其他参数。我们假设采用洛伦兹线型因子，同时涵盖电子碰撞导致的碰撞展宽和离子微观电场导致的斯塔克展宽；这两种展宽在高能量密度等离子体中占主导地位。由于碰撞线型的翼部延伸范围远宽于x^{-2}，而热多普勒展宽的范围较短，为 $exp(-x^2)$，斯塔克展宽的范围为 $x^{-5/2}$ （参见 [5, 19]），因此这一近似应当有效。在方程（11）中，积分限 $\mp\infty$ 因而替换为 $\mp\Gamma_i/\sqrt{\delta}$；选择$\delta$ 以确保洛伦兹线型能量范围内的归一化精确。对于每个截面和每个芯离子阈值，在用于标定所有自电离共振结构的表列能量网格中，对每个能量 ω 通过求解方程（1–3）进行卷积。计算采用以下表达式:

$$\Gamma_c(i, \nu) \;=\; 5 \left(\frac{\pi}{kT} \right)^{1/2} a_o^3 N_e G(T, z, \nu_i)(\nu_i^4/z^2), \tag{13}$$

其中，T、 N_e 、 z和 A 分别表示温度、电子密度、离子电荷和原子量； ν_i 对应于给定的芯离子阈值 i ： $\omega \equiv E = E_i - \nu_i^2/z^2$ 为连续变量。高斯因子 [19] $G(T, z, \nu_i) = \sqrt{3}/\pi[1/2 + ln(\nu_i kT/z)]$ 引入另一个因子（n_x/n_g）^{4}，用于 Γ_c，以纳入相对于基态组态 n_g 具有激发芯能级 n_x 的双激发自电离能级（例如，Fe XVIII $n_x = 3$，相对于基态组态 $n_g = 2$为 4）。对于复杂系统的斯塔克效应，有两种处理方法：一种是合并电子和离子微扰，另一种是分别处理（参见本文采用的方法 [5, 19]）。激发的里德伯能级近似为类氢，斯塔克效应呈线性，离子微扰是主要的展宽效应；不过，随着密度 ν_i^4 增加，碰撞展宽的影响也会日益显著（方程 13）。给定 n-复合体的总斯塔克宽度为 $\approx (3F/z)n^2$，其中 F 为等离子体电微场。假设主要的离子微扰体为质子，且密度等于电子密度，则取 $F = [(4/3)\pi a_o^3 N_e)]^{2/3}$，这与 Mihalas-Hummer-D¨appen 状态方程的表述一致 [5]。

$$\Gamma_s(\nu_i, \nu_s^*) = [(4/3)\pi a_o^3 N_e]^{2/3}\nu_i^2. \tag{14}$$

在使用方程（12）时，引入斯塔克电离参数 $\nu_s^* = 1.2 \times 10^3 N_e^{-2/15} z^{3/5}$，使得当 $\nu_i > \nu_s^*$ 时，自电离共振可被视为完全溶解于连续态中（这类似于等离子体电离束缚能级时的 Inglis-Teller 系限）。如表 1 所示，后文将给出采用和不采用 ν_s^* 的计算结果。多普勒宽度为：

$$\Gamma_d(A, T, \omega) = 4.2858 \times 10^{-7}\sqrt{(T/A)}, \tag{15}$$

其中， ω 不是通常意义上的谱线中心，而是取为每个自电离共振的能量。方程（5）中的最后一项 Γ_f 考虑了满足 ν_i、 ν_i' 条件的自电离能级之间的自由-自由跃迁，因此

$$X_i + e(E_i, \nu_i) \longrightarrow X_i' + e'(E_i', \nu_i'). \tag{16}$$

对于 $+ve$ 能量的自电离能级 E_i、 $E_i' > 0$，大量自由-自由跃迁概率可使用 RM 或原子结构代码（即 [15]）计算。

我们采用了一项大规模 Breit-Pauli R矩阵（BPRM）计算的新结果，其中包含 218 个精细结构能级，主要由离子实 Fe $n \leq 4$ 能级构成（将在其他地方报告）。总共考虑了 587 个 Fe XVII 束缚能级（$E < 0$），其主要组态为 $1s^2 2s^2 2p^6(^1S_0)$ $1s^2 2s^p 2p^q n\ell, [SLJ]$ $(p, q = 0 - 2,\ n \leq 10,\ \ell \leq 9,\ J \leq 12)$。在针对 (e $+$ Fe XVIII) $\rightarrow$Fe XVII 系统的 R 矩阵计算中，纳入的离子实 Fe XVII 能级为：$1s^2 2s^2 2p^5(^2P^o_{1/2}$, $_{3/2})$ $1s^2 2s^2 2p^q, n\ell, [S_i L_i J_i]$ $(p = 4, 5,\ n \leq 4, \ell \leq 3)$。自电离共振的里德伯系列对应于 $(S_i L_i J_i)$ $n\ell$, $n \leq 10, \ell \leq 9$，有效量子数定义为连续变量 $\nu_i = z/\sqrt{(E_i - E)}$ $(E > 0)$，覆盖直至最高 Fe XVIII离子实能级的整个能量范围； $n = 2$、3、4 个芯能级的范围为 E=0-90.7 里德伯（[12]）。Fe XVII BPRM 计算对 454 个具有自电离共振结构的束缚能级，在 $\sim$40,000 个能量点上分辨束缚-自由截面。鉴于有 217 个激发芯能级的

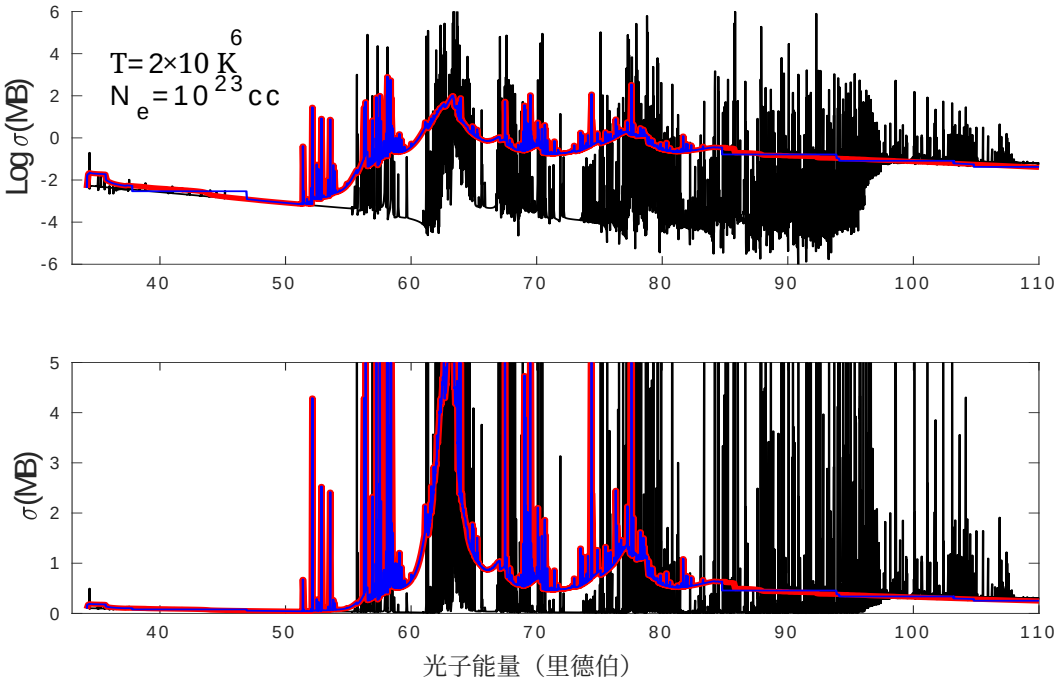


图2。由于自电离共振的等离子体展宽，高度激发束缚能级 $2s^2 2p^5 3p\ ^2D_2$ Fe XVII $\longrightarrow$ e $+$ Fe XVIII 的能量-温度-密度相关光电离截面：未展宽——黑色曲线；展宽——红色和蓝色曲线（见正文）。上图：在直至离子实 Fe XVIII 的最高电离阈值的完整能量范围内的 Logσ (MB)；下图：最大自电离结构能量范围内的线性标度 σ_{PI}。

Fe XVIII，对每个能量点进行卷积，或对每个 (T,N_e) 对进行约 10^9 次卷积。

图 2 展示了未展宽的光电离截面（黑色）以及等离子体展宽后的结果（红色和蓝色，分别表示不含和含斯塔克电离截断）的详细结果。温度-密度为 T=2×10^6K 和 $N_e = 10^{23}$cm^{-3}时，Fe XVII 的激发束缚能级为 $2s^2 2p^2\ ^3D_2$。上图面板以 Log$_1$0 标度显示截面，下图面板则以线性标度显示，聚焦于具有最高、最强自电离共振的能量区域。图中显而易见的主要特征如下。(i) 自电离共振表现出显著的等离子体展宽，多条重叠里德伯系列也被涂抹开来。在$n\ l$ 较高的较窄共振会溶解到连续态中，而较强的低nl 共振则保留其不对称形状，但高度和宽度均有所减小。(ii) 在 $N_e = 10^{23}$cm^{-3} 下，接近太阳内部对流区底部的条件时，共振结构不仅会展宽，其强度也会发生偏移，并在由每个能量 $\hbar\omega$ 处的总宽度 $\Gamma(\omega, \nu_i, T, N_e)$（式 12）决定的宽广范围内重新分布。(iii) 斯塔克电离截断（蓝色曲线）会产生阶梯状结构，代表共振完全溶解到连续态后形成的平均结果。(iv) 积分自电离共振强度守恒，且图 2 中三条曲线的积分强度通常彼此相差在 5-10% 以内。研究发现，等离子体展宽前后的 R矩阵不透明度之比可达 1.6 倍甚至更高（[19]）；近期针对其他离子的研究表明，该比值可达 3 倍。

新不透明度计算的规模和重要性显而易见：使用 R矩阵不透明度代码，明确计算了 Fe XVII 的 454 个束缚能级、Fe XVIII 的 1154 个能级以及 Fe XIX 的 899 个能级的光电离截面。随后，针对太阳和恒星内部或高能量密度等离子体源中的各种关注温度和密度，分别进行等离子体展宽计算。

5. 能量依赖性

用于计算不透明度的不同近似方法会得出差异很大的光电离截面。量子亏损法和中心场近似等简单方法，只能给出没有特征结构的背景截面。里德伯系列中的高-n能级在足够高的能量下表现为类氢系统，光电离截面可用克拉默公式近似（见 [7]）

$$\sigma_{PI} = (\frac{8\pi}{3^{1.5}_C})\frac{1}{n^5\omega^3}. \tag{17}$$

OP 工作中使用式 17 对高能区域的光电离截面进行外推。然而，如图 3 所示，这种方法并不准确。在高能下，内层壳层和亚壳层会发生电离，因此计算总光电离截面时也必须计入它们的贡献。在内层（亚）壳层电离阈值处，光电离截面会出现明显的向上跃升或边缘，并有所增强。图 3 展示了相对论扭曲波（RDW）计算结果以及克拉默公式式 17 的结果。RDW 结果未包含共振，与具有共振结构的 OP 结果不同；这种差异出现在电离阈值附近相对较小的能量区域。

6. 从收敛性到完备性

NP16 工作 [12] 还指出，BPRM 光电离计算中靶组态和能级的展开应足够完备，才能确保束缚-自由不透明度达到收敛。准确性和完备性的判据是：(i) 波函数展开的收敛性（式 6）；(ii) 光电离截面、单色不透明度和平均不透明度相对于可能数量庞大的多重激发组态的完备性。

尽管 NP16 证明了在 RM计算中纳入 n=2、3、4 个 Fe XVIII靶离子能级时的收敛性，但并未纳入可能影响高能行为的更高激发组态。因此，后续开展了采用 DW 方法的研究并与之进行比较，以确定高-$n\ell$ 组态对不透明度 [15]的影响。

在原子结构-DW 计算中，指定激发组态很简单，但在 RM 计算中则更复杂且间接。例如，为了研究更多激发组态的作用，在 NP16 BPRM 计算中得到 454 个 Fe XVII 束缚能级的基础上，又补充了 $> 50\,000$ 高n, ℓ “topup”

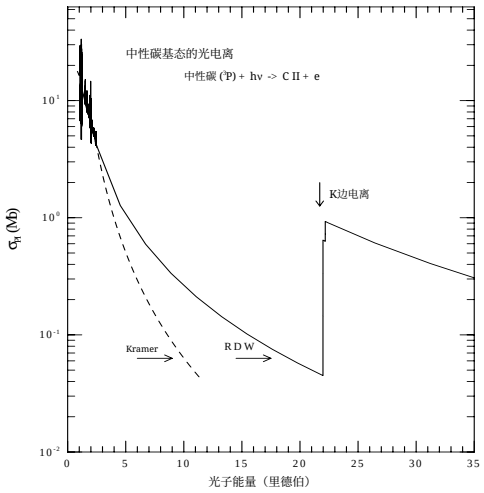


图 3. H.L. Zhang 使用相对论扭曲波（RDW）代码计算的中性碳基态光电离截面 σ_{PI}，$1s^2 2s^2 2p^2\ ^3P$（详见 [7]），与 Kramer氢样公式（方程 17）进行比较。大幅跃升是由内层 $1s$ 壳层的光电离，即 K边所致。极低能量处的共振结构来自不透明度计划中的耦合通道R矩阵计算。

能级，以计算不透明度和 R矩阵不透明度。对计算得到的 454 个严格束缚能级（负本征能量）的光电离截面，计入了嵌入其中的自电离共振；在畸变波计算中，这些共振被视为不同的能级。因此，总能级数与之相当，以确保完备性。

然而，与主要的 BPRM 截面相比，大量高度激发组态对不透明度的贡献很小，而且只影响无共振的背景截面。因此，可使用较简单的 DW 方法计算补充贡献，而不会降低精度，以补充 R矩阵计算。近期研究表明，补充贡献对 R矩阵不透明度的贡献不超过 5% [20]。

7. 求和规则与振子强度分布

总 bb 和积分 bf 振子强度，对所有可能的束缚-束缚跃迁和束缚-自由跃迁求和时，必须符合将振子强度定义为分数激发概率的要求，即 $\sum_j f_{ij} = N$，其中 N是活性电子的数量。但 f求和规则虽能确保完备性，却不能确保原子计算本身的准确性。这取决于微分振子 df/dE强度或光电离截面 σ_{PI}的精确能量分布。也就是说：如果将氢样近似用于复杂原子，它显然满足 f求和规则，但结果显然不准确。如本文所述，RM方法主要关注 df/dE在 bf连续态中的情况

基于对自电离共振线型的完整刻画。

最终结果是，RMO 取决于单色不透明度的能量分布，该分布是在给定温度下与普朗克函数进行卷积得到的。与 OP 结果相比，RM Fe XVII 单色不透明度的分布截然不同，并且平滑得多，没有明显的剧烈变化；这些变化主要源于将共振作为 *bb* 谱线处理，即使在扭曲波不透明度模型中以微扰方式纳入了有限的自电离展宽。实验上也观察到更为平坦的不透明度分布，这与理论不透明度模型形成对比；后者在“不透明度窗口” [21, 22, 12, 3]处表现出更大的不透明度下降。

8. 结论

本文综述了与不透明度相关的光电离研究。文章讨论了当前最先进的 R 矩阵计算，并将其与目前用于不透明度模型的畸变波数据进行了比较。同时还介绍了通道耦合、自电离共振展宽、高能行为以及振子强度求和规则等原子和等离子体效应。

现有的天体物理学丰丰元素光电离和跃迁概率的 OP 与 IP 辐射数据，已存档于 TOPbase 和 TIPbase 数据库中。OP 不透明度和辐射加速度可通过 OPserver[9] 在线获取。NORAD 数据库（位于俄亥俄州立大学）提供近 100 种原子和离子的 R矩阵数据，这些数据来自最新且更准确的计算 [10]。

致谢

I w感谢 Sultana Nahar 提供 Fe XVII 原子数据并参与讨论 .

参考文献

[1] Mendoza, C.,《原子》2018, 6, 28。[2] Pain, J-C and Croset P.,《原子》2023, 11, 27。[3] Pradhan,A.K., 2018,《天文学会太平洋会议丛书》515, 79-88[4] Seaton, M. J., Yu, Y., Mihalas, D., & Pradhan, A. K., 1994,《皇家天文学会月刊》266, 805[5] 不透明度计划，不透明度计划团队，物理学会出版社，第 1 卷（1995），第 1 卷（1995）[6] P.G. Burke, 2011,《原子碰撞的R矩阵理论》，施普林格原子、光学与等离子体物理学丛书。[7] Pradhan A.K., Nahar S.N.《原子天体物理学与光谱学》，2011，剑桥大学出版社。[8] Hummer DG, Berrington KA, Eissner W, Pradhan AK, Saraph HE, Tully JA,《天文学与天体物理学》1993; 279, 298-309[9] TOPbase, TIPbase: Mendoza C, Seaton MJ, Buerger P, Bellorin P, Melendez M, Gonzalez J, Rodriguez LS, Palacios E, Pradhan AK, Zeippen CJ, 2007,《皇家天文学会月刊》，378, 1031 (http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/topbase.html

[10] Nahar SN, NORAD：Nahar-OSU 辐射原子数据，http://norad.astronomy.osu.edu，俄亥俄州立大学[11] Berrington, K.A., Eissner, W., Norrington, P.H. .RMATRIX1：贝尔法斯特原子 R 矩阵代码。《计算物理通讯》1995 92, 290-420[12] Nahar S.N., Pradhan A.K.,《物理评论快报》2016 116, 249502-294507。[13] Nahar S.N., Pradhan, A.K., Chen, G.-X and Eissner, W.《物理评论 A》2011, 83, 053417。[14] Delahaye FD, Ballance CP, Smyth RT and Badnell NR,《皇家天文学会月刊》，2021, 508, 421-432。[15] Zhao L, Eissner W, Nahar SN, Pradhan AK, 2018,《天文学会太平洋会议丛书》515, 89-92。[16] Nahar SN, 2018,《天文学会太平洋会议丛书》515, 93-103[17] Eissner W, Jones M, Nussbaumer H. 1974,《计算物理通讯》8, 270-306[18] Hibbert, A, 1974,《计算物理通讯》9 141[19] Pradhan AK, 2023, 天体物理学预印本：https://arxiv.org/pdf/2301.07734.pdf[20] Pradhan AK, Nahar SN, Eissner W, Zhao L（准备中）。[21] Bailey, J etal. , 2015,《自然》, 517, 56-59[22] Nagayama, T etal. , 2019,《物理评论快报》, 122, 235001-1-6