STAG代码：使用格林函数进行全相对论超跃迁阵计算

N. M. Gill[a]、C. J. Fontes[a]、C. E. Starrett[a]

[a]洛斯阿拉莫斯国家实验室，美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮政信箱*1663*号，邮编*87545*

arXiv:2305.00921v1 [physics.plasm-ph] 1 May 2023

摘要

要计算涵盖广泛等离子体条件（即温度、密度和元素）的不透明度，需要详细了解等离子体构型空间和电子结构。对于由较重元素组成的等离子体，相对论效应会显著影响电子结构和不透明度谱的细节。我们将此前介绍的超组态和超跃迁阵计算能力 [N. M. Gill 等，JPB，56，015001（2023）] 扩展至全相对论形式。超组态中采用束缚-连续混合超壳层，体现了在稠密等离子体不透明度计算中一致处理束缚电子和连续态电子的重要性；我们还进一步讨论这些影响，并将与状态方程以及束缚电子和连续态电子之间电子关联相关的问题纳入讨论。

关键词：不透明度、超组态、相对论原子结构、格林函数 s

1. 引言

理解光与等离子体离子之间的相互作用，对于理解和模拟许多系统的动力学至关重要，这些系统包括恒星内部 [1, 2, 3], 惯性约束聚变内爆 [4, 5], 以及高能量密度实验，例如在桑迪亚国家实验室 Z装置 [6, 7]开展的实验。对这类相互作用进行建模所需的最重要物理量之一是辐射不透明度，它衡量等离子体吸收特定能量光线的概率。理论预测与实验测得的不透明度之间近期出现的差异，促使人们寻求更完善的等离子体理论建模方法 [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18]。

当将等离子体建模为由相互独立的离子组成的系统时，计算不透明度需要了解每个离子可能存在的所有原子组态。等离子体的统计性质通过热力学状态变量来描述，利用这些变量可以求得每种原子组态的布居数（即等离子体离子处于由某一给定原子组态描述的状态的概率）。将组态布居数与各组态对应的光吸收截面结合起来，即可构建整个等离子体的不透明度光谱。

为了解决等离子体环境（例如连续态电子的存在、离子之间的碰撞与关联等）会影响原子组态的原子结构这一事实，人们发展了量子平均原子模型（AA），用于描述等离子体离子的平均电子结构 [19, 20, 21]。大多数 AA 模型依赖于所谓的离子球方法，该方法将离子视为球形空腔，其中电子分布于相互独立的束缚态和连续谱量子态中在这些量子态中，电子的占据通常由与等离子体自洽计算得到的热力学状态相对应的费米统计决定（即电子态、这些态的占据数以及热力学状态变量均通过自洽计算得到）。

通过粗略但隐式地纳入等离子体效应，AA 计算只需进行一次原子结构计算，便可用平均方式描述等离子体的电子结构。用单一的平均电子结构表示所有原子组态，在确定状态方程等热平均量时已取得显著成效 [19, 22, 23, 24, 25], ，但由单一平均电子结构生成的光谱不透明度缺少必要的光谱细节，无法用于定量比较 [14, 15, 26]。

为了利用对大量组态进行平均的优势，同时仍能使用平均后的电子结构生成合理的不透明度谱，Bar-Shalom及其同事提出了超组态（SCs）和超跃迁阵列（STAs）的概念 [26]。超组态（SCs）简单来说就是组态的集合，其分组范围可以从将所有相关组态纳入单个超组态（这等同于AA模型），到每个超组态仅包含一个组态（这等同于所谓的组态平均模型）。每个超组态都有相应的电子结构，用于近似其所有组成组态的热平均电子结构。STA形式体系能够近似给定超组态中所有组成组态的光谱响应相关统计性质（即，STA形式体系近似组态平均光谱的统计矩）。精确定义的超组态与

电子邮箱： ngill@lanl.gov (N.M.Gill)

STA技术相结合，能够得到与需要显式列出所有相关组态的方法结果相近的不透明度谱 [26, 27, 28, 29, 30, 31, 32]。

本文报告了对洛斯阿拉莫斯国家实验室此前介绍的组态和STA代码 [32]所做的改进。此前介绍的功能采用了束缚-连续混合超壳层这一新颖形式体系；该形式体系通过格林函数方法计算混合超壳层的电子结构，从而在一致的理论基础上将连续态电子结构与束缚电子态纳入其中。近期的改进扩展了代码功能，使其能够对组态电子结构及其光谱响应进行完全相对论处理。完全相对论和非相对论功能均已集成到基于格林函数的超跃迁阵列（STAG）代码中。

第2节简要介绍对参考文献 [32] 中所述形式体系的扩展，以纳入相对论效应。第3节给出结果，以铁等离子体为例，展示相对论与非相对论STA光谱之间的差异，从而验证代码功能。第4节重申此前展示的对束缚态和连续态进行一致处理所产生的影响，并讨论为提高不透明度形式体系中这种一致性而应纳入的其他物理因素。

2. 理论描述

相对论原子组态由有效哈密顿量的独立电子本征态占据情况定义。这些本征态可由主量子数（n）、角量子数（l）和总角动量量子数（$j = l \pm \frac{1}{2}$）表征。每组唯一的 nlj 量子数通常称为一个轨道，它具有自身的能量和波函数。-这些轨道被整数个电子占据的情况唯一确定了每一种原子组态（C），即

$$C = \prod_s (n_s l_s j_s)^{q_s}\,, \tag{1}$$

其中，乘积遍历所有可能的轨道，q_s 表示轨道s的占据数，其取值可以是从 0 到该轨道统计权重的任意整数，$g_s = 2j + 1$。

一个组态（Ξ）是一组组态 [26], ，我们根据所谓超壳层（即一组轨道）的占据情况来定义超组态，也就是说。

$$\Xi = \prod_\sigma \left(\prod_{s\in s_\sigma} n_s l_s j_s \right)^{q_\sigma} = \prod_\sigma \sigma^{q_\sigma}\,, \tag{2}$$

其中，σ 表示一个超壳层，q_σ 是每个超壳层的整数占据数，s_σ 是每个超壳层所包含的轨道集合。通常，将特定轨道集合s_σ定义为一个超壳层时，会使该超壳层中束缚最深与束缚最弱的轨道之间的轨道能量差小于系统的热能$k_B T$。

我们的方法还采用一种束缚态与连续谱混合超壳层，将靠近正能连续谱的一些负能轨道以及所有连续态轨道纳入其中。这种所谓的连续谱超壳层使我们能够在电子结构计算中平滑地捕捉压致电离现象：由于等离子体密度效应，靠近连续态边缘的束缚轨道会离域化，并作为连续谱共振重新出现。

定义了一个组态后，与该组态相关的电子结构（即轨道能量和波函数）可通过求解相对论密度泛函理论（DFT）方程确定（更多信息请参见参考文献 [21, 33, 34, 35, 25, 32]）。求解这些方程所需的组成部分是有效势 V_{eff}和电子密度，$n(\vec{r})$。有效势根据电子密度定义如下：

$$V_{eff}(\vec{r}) = -\frac{Z}{r} + \int_{V_{ion}} d\vec{r'} \frac{n(\vec{r'})}{|\vec{r} - \vec{r'}|} + V^{xc}(\vec{r})\,, \tag{3}$$

其中，Z 是核电荷，V_{ion} 是离子球体积，V^{xc} 是交换-相关势，它是电子密度的泛函。

每个组态的电子密度根据各组成超壳层的贡献定义为：

$$n(\vec{r}) = \sum_\sigma n_\sigma(\vec{r}) + n_c(\vec{r})\,, \tag{4}$$

其中，n_σ 是与各个束缚超壳层相关的电子密度，n_c 是与混合连续谱超壳层相关的电子密度。

束缚超壳层的电子密度根据轨道波函数定义为

$$n_\sigma(r) = \sum_{s\in s_\sigma} f(E_{n_s l_s j_s}, \mu_\sigma) \frac{2j_s + 1}{4\pi r^2} \left[P^2_{n_s l_s j_s}(r) + Q^2_{n_s l_s j_s}(r) \right], \tag{5}$$

其中，P (Q) 是径向波函数的大（小）分量，f 是费米-狄拉克函数，μ_σ 是有效化学势，通过调节该势直至满足以下条件：

$$q_\sigma = \int_0^{R_{IS}} dr\,(4\pi r^2) n_\sigma(r)\,. \tag{6}$$

连续谱超壳层的电子密度定义为

$$n_c(r) = \int_{E_{\min}}^{\infty} dE\, f(E,\mu) \sum_{l,j} \frac{2j+1}{4\pi r^2} \left[P^2_{E,l,j}(r) + Q^2_{E,l,j}(r) \right], \tag{7}$$

其中，E_{min} 是连续谱超壳层中包含的束缚最深态的能量，而 μ 是连续谱化学势；调节 μ 使其满足以下条件，即。

$$Z - \sum_\sigma q_\sigma = \int_0^{R_{IS}} dr\,(4\pi r^2) n_c(r)\,. \tag{8}$$

实际上，为了得到方程 7 的另一种形式，即，娱乐官方网站

$$n_c(r) = -\frac{1}{\pi}\Im \int_{E_{min}}^{\infty} dE\, f(E,\mu)\, Tr\, G(r,E)\,, \qquad (9)$$

其中G 是与有效哈密顿量相关联的格林函数。这种替代形式使我们能够沿复围道对能量进行积分，从而显著提高计算的数值效率和稳健性 [35, 25, 32]。

迭代求解方程 3–9，直至获得收敛的电子密度（以及相应的轨道能量和波函数）。该迭代过程需要对 V_{eff}作出初始猜测，我们采用 TARTARUS 代码 [35, 25] 中 AA 计算所提供的 V_{eff}。

除了采用相对论电子结构之外，标准 STA 方程的形式与其非相对论形式保持不变。我们采用标准 STA 公式 [26, 27, 32]，以及 Gilleron 和 Pain [36, 37, 38] 的高效配分函数例程。

3. 非相对论计算与相对论计算的比较

除了在相对论电子结构计算中获得对原子系统更完善的物理描述之外（例如纳入自旋轨道相互作用） [39]，比较相对论 STA 不透明度与其非相对论对应结果的光谱分辨率，可以看出进行相对论 STA 计算的重要性。在由给定的 *nl* 轨道产生的不同 *nlj*轨道之间置换电子的能力，可显著扩大用于描述等离子体的组态空间；而这个更大的空间会使更多组态之间出现更多谱线。

图1比较了铁等离子体在 180 eV 和 0.1 g/cm^3 条件下，由不同组态定义产生的 2p → 3s 跃迁的束缚-束缚 STA 不透明度。带有“×”符号的黑色曲线表示由组态 $1s^2\,2s^2\,2p^6\,(3s3p\,3d)^2$, 产生的跃迁对应的非相对论 2p → 3s STA，红色虚线表示由等效相对论组态产生的跃迁对应的相对论 STA （即与组态 $1s^2\,2s^2\,(2p_{1/2}\,2p^{3/2})^6\,(3s3p_{1/2}\,3p_{3/2}\,3d_{3/2}\,3d^{5/2})^2$ 相关联的 $2p_{3/2}$ → 3s 和 $2p_{1/2}$ → 3s STA）。2p$_{3/2}$ → 3s 和 2p$_{1/2}$ → 3s 相对论 STA 的能量差异显著，因此红色虚线在图1中呈现出两个不同的特征。这种能量

这种分裂源于狄拉克方程中纳入了自旋轨道相互作用。对于比铁轻的元素，理论预测，随着原子序数降低，这两个相对论能量将逐渐趋于简并，而两个相对论 STA 之和将形成一个与单个非相对论 STA 相同的特征。对于较重的元素，能量间隔会随原子序数增加而增大，两个相对论 STA 的差异也将比图中所示更加明显。

通过减小超壳层的大小来细化组态，可以进一步提高光谱分辨率。例如，如果按照 nl 分组方案定义超壳层，就能显著提高光谱分辨率，但代价是计算中需要显式处理更多组态。蓝色点划线采用了这种超壳层定义，其中 2p$_{1/2}$ 和 2p$_{3/2}$ 轨道被纳入同一个超壳层，3p$_{1/2}$ 和 3p$_{3/2}$、以及 3d$_{3/2}$ 和 3d$_{5/2}$ 轨道对也采用了类似的处理。不过需要指出的是，要覆盖红色曲线用单个组态所覆盖的同一组态空间，这种定义需要六个显式组态（例如 $1s^2\,2s^2(2p_{1/2}\,2p^{3/2})^6\,(3s)^0(3p_{1/2}\,3p^{3/2})^1\,(3d_{3/2}\,3d^{5/2})^1$）。从图1可以看出，nl 分组组态的 STA 能量和方差能够出色地捕捉组态平均跃迁阵列的统计特性（例如，由 $1s^2\,2s^2(2p^{1/2})^2(2p^{3/2})^4\,(3s)^0(3p^{1/2})^1(3p^{3/2})^0(3d^{3/2})^1$ 和 $1s^2\,2s^2(2p^{1/2})^2(2p^{3/2})^3(3s)^1\,(3p^{1/2})^1(3p^{3/2})^0(3d^{3/2})^1$ 等组态之间的跃迁所产生的跃迁阵列），这些跃迁阵列以绿色实线表示。值得注意的是，平均程度越高的曲线，其中心越接近最强的组态平均谱线；STA 能量的这一特性表明，单次 STA 计算便能捕捉底层跃迁阵列按强度加权的平均值。对于更复杂的组态，其组成组态的数量轻易就可能达到数十亿，此时 STA 技术等统计方法是捕捉众多可能跃迁阵列影响的唯一途径。

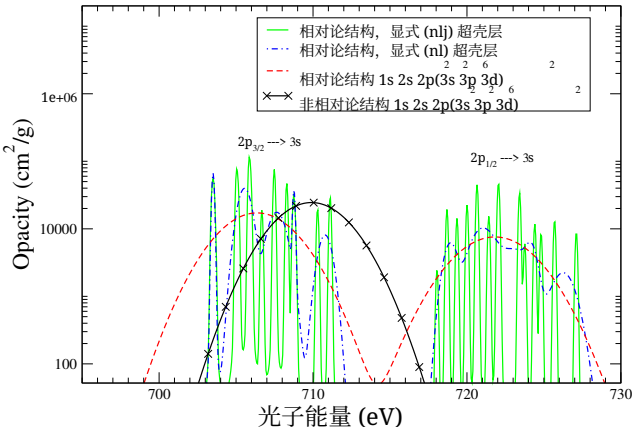

图1：图中比较了 180 eV、0.1 g/cm^3，下铁等离子体的各种束缚-束缚 STA 不透明度，这些不透明度均与 $2p_{3/2}$ → 3*s* 和 $2p_{1/2}$ → 3*s* 跃迁有关。对于所示组态，非相对论结果以黑色实线（带有“×”符号）表示；由于 $2p^{3/2}$ 和 $2p^{1/2}$ 轨道简并，因此呈现为单条曲线。红色虚线表示与前述相同组态相关的相对论 STA 特征，但此处自旋轨道分裂产生了两个不同的 STA。若将粗粒化组态中的电子在按*nl*分组的超壳层之间重新排列，则得到蓝色点划线，此时对应六个不同组态。将电子在按*nlj*分组的超壳层之间重新排列，所得描述等同于采用组态平均方法处理 15 个不同的相对论组态，以绿色实线表示。

作为非相对论方法与完全相对论方法之间差异的最后一个示例，我们展示了不透明度-

对 180 eV 和 0.16 g/cm^3 下铁等离子体的完整描述见图 2。这些模型使用相同的按 nl 分组的超壳层定义，直至一个包含所有剩余轨道的价超壳层；也就是说，超组态形式为 $(1s)^{q_1}(2s)^{q_2}(2p)^{q_3}(3s)^{q_4}(3p)^{q_5}(3d)^{q_6}(4s\,4p\,4d\ldots)^{q_7}$。可以看到，红色实线所示的相对论 STA 填补了黑色虚线所示的非相对论 STA 曲线中许多较低的不透明度窗口。这种填补是由于 $nl \rightarrow n'l'$ 跃迁阵列分裂为对应的 $nlj \rightarrow n'l'j'$ 跃迁阵列，使非相对论不透明度分布到更多谱线上。总体而言，这一现象会降低相对论计算中的不透明度峰值，并抬高谱线簇之间的窗口。

该情况下从桑迪亚 Z-设施获得的实验结果如图 2 [7, 12] 中的蓝色点线所示。在束缚-自由不透明度以及束缚-束缚特征之间的窗口区域中观察到的模型预测与实验之间的差异，与其他比较结果一致，例如参考文献 [7, 12, 14, 15, 32]。此外，比较结果中还存在差异，这是因为本文所示 STAG 结果的物理谱线展宽仅包含多普勒展宽和自然展宽，而仪器展宽以及斯塔克展宽和电子碰撞展宽（在这些条件下它们主导物理展宽）并未被纳入。

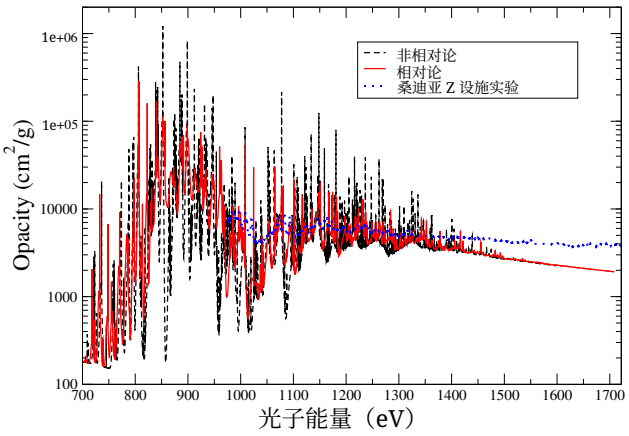

图 2：比较了温度为 180 eV、密度为 0.16 g/cm^3 的铁等离子体在非相对论和相对论 STA 计算下的不透明度。黑色虚线表示非相对论结果，红色实线表示相对论结果。两种计算采用相同的 SCs 定义，但在相对论计算中，j 分辨轨道之间缺乏简并性，导致不透明度分布在远多于非相对论计算的谱线上。桑迪亚 Z装置实验结果以蓝色点线表示。实验谱线与计算谱线之间的差异，与实验结果和其他模型预测之间观察到的差异一致。

4. 连续谱对不透明度影响的讨论

我们之前的工作 [32]表明，与连续态电子相关的电子结构的影响可能会导致显著的差异

不透明度方面的差异。本节将简要讨论这些差异的重要性以及在不透明度形式体系中对连续谱电子进行更加一致的处理，如何进一步改善对等离子体性质的描述。

如方程9的讨论中所述，格林函数形式体系使我们能够将积分路径从实能量轴移至延伸到复平面上半部的围道 [40, 35, 25, 32]。图3展示了在120 eV、密度为0.5 g/cm^3 的铁等离子体中，沿一条平坦复围道顶部（即复能量的虚部固定为$z = E + i\gamma$）时，与AA电子结构相关的态密度（DOS）。围道在复能量平面虚部方向延伸得越远，DOS（以及所有其他感兴趣的被积函数）就会变得越宽。尖锐特征的展宽也包括负能量处的束缚态；这些束缚态沿实能量轴时在能量上窄至无穷小。连续态边缘以一条红色竖线标出；在该边缘之外，我们仍能看到强而窄的谱线，即所谓的连续态共振。对图3中的三条曲线分别积分，并适当地闭合围道，所得结果相同。因此，我们采用离实能量轴最远的曲线，因为它更平滑，而且用很少的网格点便能对其进行数值求解。

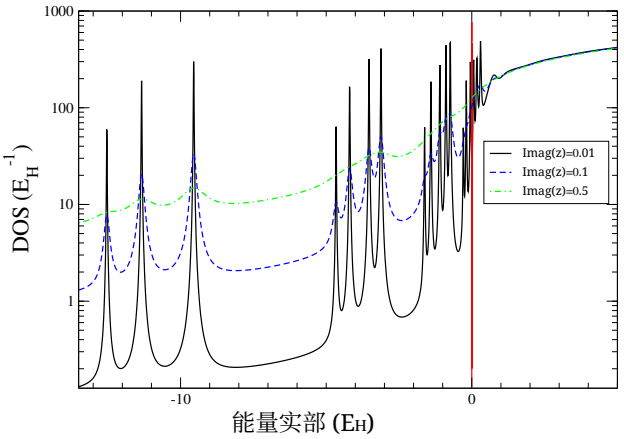

图3：展示了在 120 eV、密度为 0.5 g/cm^3 的铁等离子体 AA电子结构的复围道顶部的态密度。黑色实线表示仅偏离实能量轴 0.01 E_H 的态密度，因此特征会略微展宽，呈现出它们在实能量轴上的形态。蓝色虚线表示偏离实能量轴 0.1 E_H 的态密度，尖锐特征大多已展宽为平滑特征，尤其是在连续态边缘附近。绿色点划线表示偏离实能量轴 0.5 E_H 的态密度；这条大幅展宽的曲线只需很少的网格点即可在数值上分辨。

通过稳健、高效的复围道方案，能够以平等的方式捕捉和处理束缚态与连续谱共振，使我们的实现能够在统一框架下表示束缚-连续混合超壳层和纯束缚态超壳层。这种方法使我们能够为组态计算电子结构，在压致电离条件附近保持稳定，并对系统中的所有电子（包括连续态）进行一致的交换与关联处理。这种一致处理的影响可从不同的不透明度中看出。

图4所示的光谱展示了在120 eV和3.6 g/cm^3 下，使用三种不同的连续态电子模型计算得到的铁等离子体不透明度。红色点划线曲线对应于使用均匀电子气表示连续态电子，这代表了最简单且物理准确性最低的模型。采用自由电子气模型是为了展示连续态电子密度不存在极化时的极限情况，因此体现了连续态电子对束缚电子结构最弱的屏蔽。绿色虚线曲线对应于对连续态采用半经典托马斯–费米（TF）近似，该模型在组态和STA计算中最为常用。TF模型预测连续谱对束缚态具有更强的屏蔽作用。完整的连续谱处理（以黑色实线曲线表示）对连续态和束缚态采用了一致的框架，正如第2节和参考文献 [32]所述。图4中的数据此前已在参考文献 [32], 中展示；在此我们进一步讨论导致不同模型之间出现明显差异的物理和模型影响。

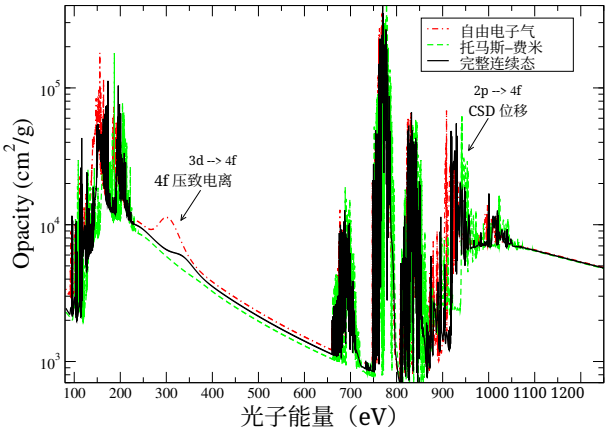

图4：图中展示了采用不同连续态电子处理方法的组态计算模型所得到的铁在 120 eV 和 3.6 g/cm^3 下的不透明度光谱。红色点划线表示连续谱以均匀电子气表示的超组态计算结果，这种处理对束缚态的等离子体屏蔽最弱。绿色虚线表示连续谱以托马斯–费米近似表示的超组态计算结果，该近似以半经典方式描述连续谱，会高估等离子体屏蔽。黑色实线采用完整连续谱模型，该模型在电子结构中一致地处理束缚电子和连续态电子。标出了 $3d \rightarrow 4f$ 跃迁的位置，以说明 $4f$ 电子的压致电离对不透明度光谱的影响。标出了 $2p \rightarrow 4d$ 跃迁，以说明不同模型导致的 CSD 位移会使不透明度该部分中最显著的特征发生偏移。

应用完整连续态模型时，由于等离子体密度效应，一些超组态的 $4f$ 轨道不再是负能量束缚态，而是以尖锐共振的形式出现在超组态态密度中。当弱屏蔽自由

采用电子气模型后，以连续态电子屏蔽表示的等离子体密度效应减弱，因此，$4f$ 轨道在所有超组态中都以束缚态存在。所有超组态中均存在这些轨道，这一点可从图4中看出，其中$3d \rightarrow 4f$ 束缚-束缚跃迁十分明显。在托马斯–费米模型中，更强的屏蔽会导致所有超组态中的$4f$ 轨道发生离域化，因此光谱中不会出现 $3d \rightarrow 4f$ 跃迁。

使用不同方法处理连续态电子的另一个重要影响，体现在等离子体的电荷态分布（CSD）上。图4右侧标出的显著 $2p \rightarrow 4d$特征在各模型中有所不同，主要是因为模型之间电子结构的差异导致超组态（SCs）布居数发生变化，进而使等离子体模型的电荷态分布发生偏移。图5展示了用于计算图4中不透明度的等离子体模型的电荷态分布。显然，自由电子气模型的屏蔽较弱，导致等离子体电离程度较低；而托马斯–费米模型则高估了电离程度，导致电荷态分布更宽。电荷态分布的这一偏移会传递到用于计算不透明度谱线强度的超组态布居数上，因此我们可以看到图4中标出的束缚-束缚特征发生了偏移。

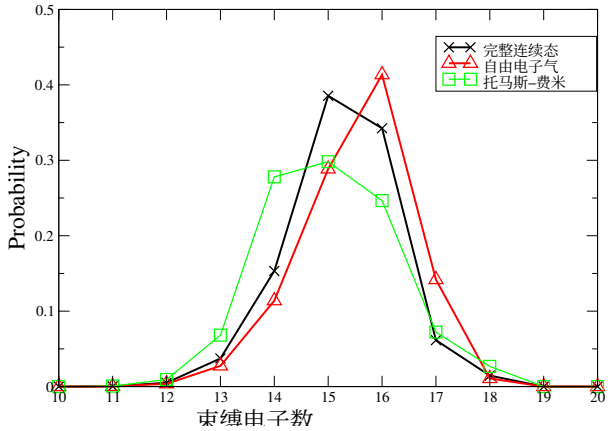

图5：展示了 120 eV、密度为 3.6 g/cm^3 的铁等离子体的电荷态分布。不同曲线对应于与图4所示不透明度相关的电荷态分布。

尽管本研究表明，在计算致密等离子体的电子结构及其产生的不透明度时，对束缚电子和连续态电子进行一致处理十分重要，但这些计算仍有一些物理问题尚未解决。需要指出的是，我们的超组态布居数是使用仅与束缚电子相关的配分函数确定的。这样做是为了确保我们的计算与低密度极限下传统的孤立原子计算保持一致。然而，为了在等离子体状态方程中建立完全一致的束缚态与连续态框架，应将连续态的自由能纳入超组态配分函数。可以通过采用标准的非相互作用费米子方法估算连续态电子的自由能[41], , 以近似方式实现这一点；但这种近似方法会忽略更精细的束缚态配分函数近似中所包含的电子-电子关联[36, 37, 38, 42]。

最后，为了更准确地估算与每个组态相关的平均能量，采用斯莱特积分近似束缚电子之间的相关性。

[39, 26, 27]。这些斯莱特积分对于提高跃迁的STA能量至关重要，但所有STA矩的计算公式都只考虑了束缚电子之间的相关性。例如，给定离化阶段内的束缚-束缚跃迁能量应趋近于与活性轨道相关的束缚-自由边缘。然而，图4中的光谱显示，$3d \rightarrow 4f$ 跃迁的能量高于表观的$3d$ 束缚-自由边缘。这种在能量上的物理不准确且不连续的行为，源于未能以一致的方式处理束缚-束缚跃迁能量与束缚-自由跃迁能量之间的相关性。已有研究表明，采用不准确但一致的独立粒子近似来计算跃迁能量时，这种差异会消失 [32]。传统的STA计算通过假定束缚电子与连续态电子之间的斯莱特积分为零来近似束缚-自由边缘。对于低密度系统，这或许是合理的近似；但在高密度等离子体中，束缚电子与连续态电子之间存在显著相关性，我们的计算中电子结构的变化也证明了这一点。

STAG代码中开发并实现的功能表明，在电子结构计算以及超壳层定义中保持束缚电子与连续谱电子的一致性，可能会导致高密度等离子体的吸收率光谱出现差异。然而，在计算等离子体状态方程时纳入类似的束缚态与连续谱一致性，以及纳入准确描述跃迁能量所需的电子关联，是否会缩小或加剧图4所示的差异，目前尚不清楚。未来工作的重点将是研究这些问题。

5. 结论

我们介绍并展示了将此前开发的组态和 STA 代码功能扩展至 STAG 代码中的全相对论模式。相对论和非相对论 STA 不透明度的比较显示，在相对论框架中显式处理按 j 分辨的轨道，带来了预期的光谱分辨率提升。我们扩展了对先前展示工作的讨论，指出在密集等离子体的 SC 电子结构计算中，一致地处理束缚电子和连续态电子十分重要 [32]。以下两点值得注意：(1) 使用不同连续态电子模型时观察到的 CSD 表观位移，没有在等离子体状态方程中一致地处理连续态自由能；恰当地纳入这部分自由能，可能会显著改变用于构建不透明度的布居数。(2) STA 跃迁能修正仅涉及对束缚电子间关联的近似处理，因此在束缚-自由边缘附近，束缚-束缚跃迁能会出现表观不准确。

致谢

我们感谢 T. Nagayama 提供铁的实验数据。本研究得到了 LANL 的 ASC PEM原子物理项目的资助。LANL 由 Triad National Security, LLC 负责运营，根据美国能源部国家核安全管理局的合同编号 89233218NCA000001 开展工作。

参考文献

[1] A. M. Serenelli, S. Basu, J. W. Ferguson, M. Asplund, 《新的太阳成分：重新审视太阳模型问题》, 《天体物理学杂志》705（2009年）L123–L127。[2] S. Salmon, J. Montalb´án, T. Morel, A. Miglio, M.-A. Dupret, A. Noels, 《检验不透明度和化学组成对麦哲伦星云B型恒星脉动激发的影响》, 《皇家天文学会月刊》422（4）（2012年）3460–3474。 arXiv:https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/422/4/3460/18606166/mnras0422-3460.pdf, doi:10.1111/j.1365-2966.2012.20857.x。URL https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2012.20857.x [3] R. Piron, T. Blenski, 《致密等离子体不透明度的平均原子模型计算：综述及其在白矮星研究中的潜在应用》, 《等离子体物理学贡献》58（2018年）30–41。[4] J. Nuckolls, L. Wood, A. Thiessen, G. Zimmerman, 《将物质激光压缩至超高密度：热核（ctr）应用》, 《自然》239（5368）（1972年）139–142。 doi:10.1038/239139a0。URL https://doi.org/10.1038/239139a0 [5] S. X. Hu, L. A. Collins, T. R. Boehly, Y. H. Ding, P. B. Radha, V. N. Goncharov, V. V. Karasiev, G. W. Collins, S. P. Regan, E. M. Campbell, 《惯性约束聚变应用中聚苯乙烯在极端条件下静态、输运和光学性质的第一性原理研究综述》, 《等离子体物理学》 25 5 2018 056306 arXiv:https: ( ) ( )。 , . //doi.org/10.1063/1.5017970 。URL https://doi.org/10.1063/1.5017970 [6] J. E. Bailey, G. A. Rochau, C. A. Iglesias, J. Abdallah, J. J. MacFarlane, I. Golovkin, P. Wang, R. C. Mancini, P. W. Lake, T. C. Moore, M. Bump, O. Garcia, S. Mazevet, 《温度高于150 eV的铁等离子体透射测量》, 《物理评论快报》99（2007年）265002。doi:10.1103/PhysRevLett.99.265002。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.265002 [7] J. E. Bailey, T. Nagayama, G. P. Loisel, G. A. Rochau, C. Blancard, J. Colgan, P. Cosse, G. Faussurier, C. J. Fontes, F. Gilleron, I. Golovkin, S. B. Hansen, C. A. Iglesias, D. P. Kilcrease, J. MacFarlane, R. C. Mancini, S. N. Nahar, C. Orban, J.-C. Pain, A. K. Pradhan, M. Sherrill, B. G. Wilson, 《铁不透明度的测量值高于预测值：太阳内部温度下的结果》, 《自然》517（2015年）56–59。[8] J. Colgan, D. P. Kilcrease, N. H. Magee, M. E. Sherrill, J. A. Jr., P. Hakel, C. J. Fontes, J. A. Guzik, K. A. Mussack, 《新一代洛斯阿拉莫斯不透明度表》, 《天体物理学杂志》817（2016年）116。[9] R. C. Mancini, 《类氖铁L壳层跃迁的谱线线型》, 《物理学杂志：会议系列》717（2016年）012069。 doi:10.1088/1742-6596/717/1/012069。URL https://doi.org/10.1088%2F1742-6596%2F717%2F1%2F012069 [10] R. M. More, S. B. Hansen, T. Nagayama, 《双光子过程产生的不透明度》, 《高能量密度物理》24（2017年）44–49。 doi:https://doi.org/10.1016/j.hedp.2017.07.003。URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574181817300654 [11] T. Nagayama, J. Bailey, R. Mancini, C. Iglesias, S. Hansen, C. Blancard, H. Chung, J. Colgan, P. Cosse, G. Faussurier, R. Florido, C. Fontes, F. Gilleron, I. Golovkin, D. Kilcrease, G. Loisel, J. MacFarlane, J.-C. Pain, G. Rochau, M. Sherrill, R. Lee, 《局域热力学平衡K壳层光谱学的模型不确定性》, 《高能量密度物理》 20 2016 17 22 doi:https://doi.org/10.1016/j.hedp. ( ) − . . 2016.05.001

URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574181816300490[12] T. Nagayama, J. E. Bailey, G. P. Loisel, G. S. Dunham, G. A. Rochau, C. Blancard, J. Colgan, P. Cosse, G. Faussurier, C. J. Fontes, F. Gilleron, S. B. Hansen, C. A. Iglesias, I. E. Golovkin, D. P. Kilcrease, J. J. MacFarlane, R. C. Mancini, R. M. More, C. Orban, J.-C. Pain, M. E. Sherrill, B. G. Wilson, 《恒星内部温度下L壳层不透明度的系统研究》, 《物理评论快报》122（2019年）235001。doi:10.1103/PhysRevLett.122.235001。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.235001[13] N. Gill, C. Starrett, 《用于计算致密等离子体光学性质的平均力散射势》, 《高能量密度物理》31（2019年02月）。doi:10.1016/j.hedp.2019.02.001。[14] N. R. Shaffer, C. E. Starrett, 《通过多重散射方法计算致密等离子体不透明度》, 《物理评论E》105（2022年）015203。doi:10.1103/PhysRevE.105.015203。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.105.015203[15] N. M. Gill, C. J. Fontes, C. E. Starrett, 《含时密度泛函理论在平均原子不透明度计算中的应用》, 《物理评论E》103（2021年）043206。doi:10.1103/PhysRevE.103.043206。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.103.043206[16] J. Zeng, C. Gao, P. Liu, Y. Li, C. Meng, Y. Hou, D. Kang, J. Yuan, 《电子局域化增强光子吸收，解释太阳内部缺失的不透明度》, 《中国科学：物理学、力学、天文学》65（3）（2021年）233011。doi:10.1007/s11433-021-1812-1。URL https://doi.org/10.1007/s11433-021-1812-1[17] G. Mondet, C. Blancard, P. Cosse, G. Faussurier, 《太阳混合物的不透明度计算》, 《天体物理学杂志增刊》220（1）（2015年）2。doi:10.1088/0067-0049/220/1/2。URL https://doi.org/10.1088/0067-0049/220/1/2[18] F. Delahaye, C. P. Ballance, R. T. Smyth, N. R. Badnell, 《使用R矩阵和畸变波方法计算的不透明度的定量比较：Fe XVII》, 《皇家天文学会月刊》508（1）（2021年）421–432。 arXiv:https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/508/1/421/40440686/stab2016.pdf doi: , 。URL https://doi.org/10.1093/mnras/stab2016[19] D. A. Liberman, 《凝聚态物质的自洽场模型》, 《物理评论B》20（1979年）4981–4989。doi:10.1103/PhysRevB.20.4981。URL http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.4981[20] B. F. Rozsnyai, 《任意温度和物质密度下的相对论 Hartree-Fock-Slater 计算》, 《物理评论A》5（1972年）1137。[21] N. D. Mermin, 《非均匀电子气的热性质》, 《物理评论》137 1965 1441 1443 doi:10.1103/PhysRev.137.A1441。URL http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.137.A1441[22] T. Blenski, K. Ishikawa, 《致密等离子体球形离子胞模型中的压致电离及相对论 Pauli 近似下的压强公式》, 《物理评论E》51（1995年）4869。[23] B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne, W. Isaacs, 《Purgatorio——Inferno 算法的新实现》, J. Quant. Spect. Rad. Trans. 99（2006年）658。[24] P. Sterne, S. Hansen, B. Wilson, W. Isaacs, 《平均原子 Purgatorio 代码中的状态方程、占据概率和电导率》, 《高能量密度物理》3（1）（2007年）278–282, 《高温致密物质的辐射性质》。doi:https://doi.org/10.1016/j.hedp.2007.02.037 。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574181807000420[25] C. Starrett, N. Gill, T. Sjostrom, C. Greeff, 《使用 Tartarus 构建覆盖范围广的状态方程：一种基于格林函数与轨道的混合平均原子代码》, Computer Physics Communications 235（2019年）50–62。doi:https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.10.002。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465518303503[26] A. Bar-Shalom, J. Oreg, W. H. Goldstein, D. Shvarts, A. Zigler, 《超跃迁阵列：一种用于高温致密等离子体光谱分析的模型》, 《物理评论A》40（1989年）3183–3193。 doi:10.1103/PhysRevA.40.3183。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.40.3183[27] A. Bar-Shalom, J. Oreg, 《超跃迁阵列模型中的光电效应》, 《物理评论E》54 1996 1850 1856 doi:10.1103/PhysRevE.54.1850。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.54.1850[28] T. Blenski, A. Grimaldi, F. Perrot, 《基于局域密度近似的超组态代码》, 定量光谱学与辐射传递杂志65 1 2000 91 100 doi:https://doi.org/10.1016/S0022-4073(99)00058-8。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407399000588[29] Q. Porcherot, J.-C. Pain, F. Gilleron, T. Blenski, 《一种用于高温等离子体不透明度细致与统计混合计算的一致方法》, 《高能量密度物理》7 4 2011 234 239 doi:https://doi.org/10.1016/j.hedp.2011.05.001。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574181811000528[30] M. Krief, A. Feigel, D. Gazit, 《一种用于计算局域热力学平衡等离子体不透明度的STA方法新实现》, 《Atoms》6 (3) (2018) 35。doi:10.3390/atoms6030035。URL https://www.mdpi.com/2218-2004/6/3/35[31] P. D. Aberg, D. Fenn, M. E. Foord, P. E. Grabowski, C. A. Iglesias, B. G. Wilson, 《Opus辐射不透明度代码：超跃迁阵列方法的新实现》, 技术报告（2020年8月）。doi:10.2172/1650424。URL https://www.osti.gov/biblio/1650424[32] N. M. Gill, C. J. Fontes, C. E. Starrett, 《利用格林函数、采用一致的束缚态与连续态电子处理进行不透明度超组态计算》, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》56 (1) (2023) 015001。doi:10.1088/1361-6455/acacd9。URL https://dx.doi.org/10.1088/1361-6455/acacd9[33] W. Kohn, L. J. Sham, 《包含交换与关联效应的自洽方程》, 《物理评论》140 1965 1133 1138 doi:10.1103/PhysRev.140.A1133。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133[34] A. H. MacDonald, S. H. Vosko, 《相对论密度泛函形式》, 《物理学杂志C：固体物理》12 (15) (1979年) 2977。doi:10.1088/0022-3719/12/15/007。URL https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/12/15/007[35] N. M. Gill, C. E. Starrett, 《Tartarus：相对论格林函数量子平均原子代码》, 《高能量密度物理》24 (2017年) 33–38。[36] F. Gilleron, J.-C. Pain, 《超组态方法中配分函数计算的稳定方法》, 《物理评论E》69 (2004) 056117。doi:10.1103/PhysRevE.69.056117。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.69.056117[37] B. G. Wilson, F. Gilleron, J.-C. Pain, 《超组态方法中配分函数计算的进一步稳定方法》, 《物理评论E》76 (2007) 032103。 doi:10.1103/PhysRevE.76.032103。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.76.032103[38] J.-C. Pain, F. Gilleron, B. G. Wilson, 《超组态方法中配分函数计算的优化递归关系》, 《高能量密度物理》37 2020 100891 doi:https://doi.org/10.1016/j.hedp.2020.100891。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574181820301233[39] R. Cowan, 《原子结构与光谱理论》, 洛斯阿拉莫斯基础与应用科学丛书，加州大学出版社，1981年。URL https://books.google.com/books?id=tHOXLrXkJRgC[40] C. Starrett, 《格林函数量子平均原子模型》, 《高能量密度物理》16 2015 18 22 doi:https://doi.org/10.1016/j.hedp.2015.05.001。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1574181815000439[41] J. Pain, G. Dejonghe, T. Blenski, 《超组态近似下研究高温致密等离子体电子性质的自洽模型》, 定量光谱学与辐射传递杂志99 (1) (2006年) 451–468, 〈高温致密物质的辐射性质〉。doi:https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2005.05.036。

网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407305001676[42] J.-C. Pain, 《超跃迁阵列：研究高温等离子体光谱性质的工具》, 《等离子体》 4 1 2021 42 64 doi:10.3390/ ()()-.. 网 plasma4010002
址 https://www.mdpi.com/2571-6182/4/1/2