Draft version February 2, 2023 年使用
AASTeX631 默认样式排版

arXiv:2302.00228v1 [physics.atom-ph] 1 Feb 2023

氮的能级与跃迁数据的扩展多组态狄拉克–哈特里–福克计算 I

M. C. Li,[1] W. Li,[2] P. Jönsson,[3] A. M. Amarsi

[1] School of Electronic Information and Electrical Engineering, Huizhou University, Huizhou, China 516007
[2] Key Laboratory of Solar Activity, National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100012, China
[3] Department of Materials Science and Applied Mathematics, Malmö University, SE-205 06 Malmö, Sweden
[4] Theoretical Astrophysics, Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Box 516, SE-751 20 Uppsala, Sweden

摘要

准确而全面的原子数据对于恒星大气及其他天体的光谱分析至关重要。本文给出了中性氮的能级、寿命和跃迁概率。氮是宇宙中丰度第六高的元素。计算采用完全相对论的多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法和相对论组态相互作用方法，涵盖最低的 103 个态，直至并包括 $2s^2 2p^2 5s$。本文的理论能量与实验数据高度吻合，平均相对差异为 0.07%。此外，本文的跃迁概率与现有实验和理论数据也吻合良好。我们还通过重新分析太阳氮丰度，进一步验证本文数据与实验结果的一致性；Babushkin 规范和库仑规范所得结果相差不超过 2%，即 0.01 dex。我们根据 Babushkin 规范与库仑规范下跃迁速率之差的统计分析，估算了计算所得跃迁数据的不确定度。本文计算的 1701 个电偶极跃迁中，有 83 个（536 个）的不确定度小于 5%（10%）。

关键词：原子数据；太阳丰度

1. 引言

氮是宇宙中丰度第六高的元素（Asplund等，2021），其丰度是研究恒星结构与演化（Hirschi 2007；Aerts等，2014；Maeder等，2014）、球状星团（Spite等，2022）和星系（Belfiore等，2017；Masseron & Gilmore 2015；Schiavon等，2017；Vincenzo & Kobayashi 2018；Esteban等，2020）的重要诊断指标。通过恒星光谱学测量恒星大气中的氮丰度，对这一研究至关重要。对于光谱型为 O、B、A 和 F 的热星，通常使用近红外和红外 N I 谱线，这些谱线源自涉及组态 $2p^2(^3P)3s$、$2p^2(^3P)3p$、$2p^2(^1D)3s$、$2p^2(^3P)3d$ 和 $2p^2(^1D)3p$ 的跃迁（Takeda & Takada-Hidai 1995；Przybilla & Butler 2001）。在较冷的恒星（包括太阳）中也能探测到一些较弱的 N I谱线（Kolecki & Wang 2022）；这些谱线与 NH、CN 等分子诊断一起，被用于确定太阳氮丰度（Lambert 1978；Grevesse等，1990；Amarsi等，2020、2021）。

高质量的氮原子数据I 对于可靠的恒星光谱分析不可或缺。在过去30年间，针对氮原子I跃迁数据开展了数十项实验和理论研究。这些测量和计算已发表论文的完整列表可从NIST原子跃迁概率文献数据库（Kramida 和 Fuhr, 2010年）中检索。例如，在实验方面，研究人员使用壁稳定电弧光源，对源自3s-3p、3s-4p、3p-3d和4d-5s跃迁阵列的可见光和红外谱线进行了跃迁概率和线强度测量，相关研究由Musielok 等人（1995年）、Bac-lawski 等人（2002年）、Bac-lawski 和 Musielok（2010年、2008年）以及Bridges 和 Wiese（2010年）开展。这些测量的相对不确定度据称不超过15%。采用相同方法，Goldbach 和 Nollez（1991年）以及Goldbach

通讯作者：W. Liwxli@nao.cas.cn

等人（1992年）分别测量了90–125 nm区域内19条谱线和120–200 nm区域内18条谱线的振子强度。此外，还有一些采用不同技术进行的寿命和振子强度实验测量（Bengtsson 等人，1992年；Dumont 等人，1974年；Catherinot 和 Sy，1979年；Copeland 等人，1987年；Bromander 等人，1978年）。

在理论方面，已有数十项关于中性氮激发能和跃迁数据的理论研究发表。例如，Hibbert 等（1991）采用组态相互作用方法，计算了若干双重态和四重态之间电偶极允许跃迁及互组合跃迁的激发能和振子强度。Tong 等（1994）、Tachiev与Froese Fischer（2002）以及Froese Fischer 与 Tachiev（2004）采用多组态 Hartree-Fock 和 Breit-Pauli（MCHF-BP）方法，开展了中性氮振子强度的计算。Tong 等（1994）仅报告了低能四重态之间跃迁的振子强度，而Tachiev与Froese Fischer（2002）和Froese Fischer 与 Tachiev（2004）则计算了所有截至 $2s^22p^23d$ 的能级及其寿命，并给出了这些能级之间的跃迁数据。在这些理论结果中，MCHF-BP 值（Tachiev 和 Froese Fischer（2002）；Froese Fischer 与 Tachiev（2004））总体上比其他结果更符合实验结果。近期，Bautista 等（2022）结合多种方法，即基于 Thomas-Fermi-Dirac-Amaldi 中心势的 AUTOSTRUCTURE、赝相对论 Hartree-Fock 方法和多组态 Dirac-Hartree-Fock方法（MCDHF），计算了 gf-值。这些值对应的两条谱线为 8683 °A 和 8629 °A，可用于诊断太阳氮丰度。

在本研究中，我们对属于 $2s^22p^3$，$2s2p^4$，$2s^22p^2nl(n=3,4,l=\mathrm{s,p,d,f})$、以及 $2s^22p^25s$ 组态的中性氮中的 103 个最低态进行了大规模从头算计算，获得其激发能和电偶极（E1）跃迁参数（跃迁速率、线强度和加权振子强度）。计算采用全相对论 MCDHF 和组态相互作用（RCI）方法，并通过通用相对论原子结构程序包 GRASP2018[1] (Froese Fischer 等，2019年) 实现。

2. 理论与计算

2.1. 理论

在 GRASP 程序中实现的多组态狄拉克-哈特里-福克方法（Froese Fischer 等，2016年）中，原子本征态表示为一个原子态，它由具有相同宇称 P 和角动量量子数的组态态函数（CSFs）的线性组合表示 JM:

$$\Psi(\gamma PJM)=\sum_i c_i\Phi(\gamma_i PJM) \tag{1}$$

组态态函数（CSFs）是 jj-耦合的多电子函数，由单电子狄拉克轨道的反对称化乘积构成。量 c_i 和 γ_i 分别是混合系数和用于唯一确定每个组态态函数所需的附加标记。通过求解多组态狄拉克-哈特里-福克方程，可使狄拉克轨道的径向部分以及目标态的展开系数 c_i 均优化至自洽；这些方程由对目标态的加权平均能量应用变分原理导出。在后续的相对论组态相互作用（RCI）计算中，利用多组态Dirac–Hartree–Fock方法优化所得的轨道基组，纳入更高阶的电子-电子相互作用，例如与频率无关的 Breit 相互作用，以及以自能（SE）和屏蔽真空极化（VP）形式出现的主要量子电动力学效应（Grant 2007）。

两个态 $\gamma' P' J'$ 和γPJ之间的 E1 跃迁数据（跃迁概率和加权振子强度）以电偶极跃迁算符 $\mathrm{T}^{(1)}$的约化矩阵元表示。根据公式1，这些矩阵元可写为

$$\langle\Psi(\gamma PJ)\|\mathrm{T}^{(1)}\|\Psi(\gamma' P' J')\rangle=\sum_{i,j} c_i c'_j\langle\Phi(\gamma_i PJ)\|\mathrm{T}^{(1)}\|\Phi(\gamma'_j P' J')\rangle. \tag{2}$$

其中，c_i 和 c_j 分别是上能级和下能级组态态函数（CSFs）的展开系数。采用 Brink-and-Satchler 约定，方程2 中的约化矩阵元可表示为自旋角系数 $d^{(1)}_{ab}$ 和算符强度的函数:

$$\langle\Phi(\gamma_i PJ)\|\mathrm{T}^{(1)}\|\Phi(\gamma'_j P' J')\rangle=\sum_{a,b} d^{(1)}_{ab}\langle n_a l_a j_a\|\mathrm{t}^{(1)}\|n_b l_b j_b\rangle \tag{3}$$

[1]另请参阅由 CompAS 合作组维护的开源 GitHub 代码库：https://github.com/compas/grasp。

其中

$$\langle n_a l_a j_a \| \mathrm{t}^{(1)} \| n_b l_b j_b \rangle = \left(\frac{(2j_b+1)\omega}{\pi c} \right)^{1/2} (-1)^{j_a - 1/2} \begin{pmatrix} j_a & 1 & j_b \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \overline{M_{ab}} \tag{4}$$

这里， n、 l和 j 分别是自旋轨道 a 和 b 的主量子数、轨道量子数和角量子数， $\hbar\omega$ 是电磁能量，而 M_{ab} 是由 Grant (1974年）定义的辐射跃迁积分。对于电型多极矩， M_{ab}积分可写为 $M_{ab}(G) = M^e_{ab} + GM^l_{ab}$（见Grant (1974年）中的公式 4.10），其中M^e_{ab}是库仑规范积分， M^l_{ab}是纵向部分，而 G是规范参数。对应于非相对论理论中速度和长度算符形式的两种常见选择，分别是库仑（$G = 0$）和 Babushkin（$G = \sqrt{2}$）规范。

库仑规范（A_C）与 Babushkin 规范（A_B）下跃迁速率的一致性，通常被视为计算数据准确性的内部指标，尤其是在没有实验结果可用时。跃迁速率 A_B 与 A_C之间的相对差异 $\mathrm{d}T$定义为（Froese Fischer 2009；Ekman 等, 2014）

$$\mathrm{d}T = \frac{|A_\mathrm{B} - A_\mathrm{C}|}{\max(A_\mathrm{B}, A_\mathrm{C})}. \tag{5}$$

需要强调的是，$\mathrm{d}T$ 以统计方式估算谱线组的不确定度。

2.2. 计算方案

计算采用扩展最优能级（EOL）方案（Dyall et al. 1989），对偶宇称态和奇宇称态进行加权平均。这些态属于 $\{2s2p^4, 2s^22p^2nl(n = 3,4, l = \mathrm{s, d})、2s^22p^25s\}$偶宇称组态，以及 $\{2s^22p^3, 2s^22p^2nl(n = 3,4, l = \mathrm{p, f})\}$ 奇宇称组态。在多组态狄拉克–哈特里–福克计算中，这些目标组态被纳入多参考（MR）组。

按照例如 Papoulia 等人 (2019年) 和Li 等人(2021年) 所采用的组态态函数生成策略，多组态狄拉克–哈特里–福克计算基于组态态函数展开，并对来自较深亚壳层的轨道激发施加限制。通过从预先定义的多参考组态中已占据的亚壳层向轨道活性组逐步进行单激发和双激发（SD），生成并系统地扩展组态态函数（Olsen 等人 1988；Sturesson 等人 2007；Froese Fischer 等人 2016年）。

在本文的计算中，MR组态中 $n = 1$ 壳层的轨道定义为芯轨道，其余轨道定义为价轨道。根据这些定义，通过允许价轨道向活性轨道组进行单、双激发（SD），并限制来自 $n = 2$ 壳层的激发至多为一次，将价—价（VV）电子相关纳入计算。

获得MCDHF轨道基组后，随后进一步扩展MR组，并将其用于后续的RCI计算，如表1所示。扩展后的MR组包含可产生 LSJ耦合组态态函数、且权重大于0.05的组态。通过允许从扩展MR组中各组态的价层和$1s^2$ 内层进行SD替换，考虑了核价电子相关效应；同时限制从$1s^2$, 到最终活性组 {11s、10p、10d、10f、7g、6h}的激发至多为一次。最终偶数态和奇数态展开分别包含13 431 751个和17 662 086个组态态函数，分布于不同的 J 对称性。

表1. 活性空间构造概要。第二列和第三列中的组态分别表示RCI计算中的目标态和扩展目标MR组。 N_{CSFs} 表示最终RCI计算中偶宇称态和奇宇称态总展开所包含的组态态函数数目。

宇称	MR	RCI中的扩展MR	N_{CSFs}
Even	$2s2p^4, 2s^22p^23s$ $2s^22p^23d, 2s^22p^24s$ $2s^22p^24d, 2s^22p^25s$	$2s2p^3np(3 \le n \le 5)$ $2p^4nl(3 \le n \le 5, l = \mathrm{s, d})$	13 431 751
Odd	$2s^22p^3, 2s^22p^23p$ $2s^22p^24p, 2s^22p^24f$	$2s2p^3nl(3 \le n \le 5,\ l = \mathrm{s,\ d})$ $2p^44f,\ 2s2p^4np(3 \le n \le 5)$	17 662 086

3. 结果与讨论

3.1. 能量和寿命

表2展示了最低103个态的计算能量及其在 LS耦合下相应的波函数组成。对本征态的标记依据从 jj耦合变换到 LSJ耦合后展开系数最大的 LSJ耦合组态态函数确定，所用方法见Gaigalas等人（2017）。值得注意的是，对于与$2s^2 2p^2 4f$组态相关的态， LSJ耦合可能并非最佳描述方式；美国国家标准与技术研究院原子光谱数据库（NIST-ASD）（Kramida等人，2021年）在对这些态进行标记时采用了 JK耦合。表2还列出了NIST-ASD提供的相应实验能量，以及Babushkin（硼，B）和库仑（碳，C）形式下的辐射寿命。与NIST-ASD的能量相比，我们注意到两对能级——#74-75（$2p^2 4d\ ^4P_{5/2}$ 和 $^2F_{5/2}$）及#80-82（$2p^2 4d\ ^4D_{1/2}$ 和 $^4P_{1/2}$）——按能量排序发生了倒置。进一步检查LS组成后发现，这些态强烈混合，主成分占比约为40%–60%，次要成分占比约为30%–40%；因此，依据展开系数进行的传统标记对它们的描述可能不够准确。由于其余能级的计算能量与NIST-ASD数据符合良好，我们依据各对称性内的能量排序，将这两对能级与实验能量进行了匹配。请注意，表2第二列中这两对能级（即#74-75和#80-82）的标记与NIST-ASD数据中的标记相反。

表 2. 能量（单位：cm^{-1}）以及在 Babushkin（τ_B）和库仑（τ_C规范下的寿命（单位：s），对应于中性氮最低的 103 个能级 I。能级以基态为参照，并与 NIST 原子光谱数据库（Kramida等人 2021年）的结果进行比较。第二列中的标记由第三列中给出的最大展开系数组成成分确定。此表的完整内容可通过电子版获取。

No.	态	LS-组态	$E_{\rm RCI}$	$E_{\rm NIST}$	ΔE	τ_B	τ_C
1	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^\circ_{3/2}$	0.91	0	0.000	0		
2	$2s^2\ 2p^3\ ^2D^\circ_{5/2}$	0.89	19426	19224.464	-201		
3	$2s^2\ 2p^3\ ^2D^\circ_{3/2}$	0.89	19435	19233.177	-201		
4	$2s^2\ 2p^3\ ^2P^\circ_{1/2}$	$0.85 + 0.03\ 2p^5\ ^2P^\circ$	29142	28838.920	-304		
5	$2s^2\ 2p^3\ ^2P^\circ_{3/2}$	$0.85 + 0.03\ 2p^5\ ^2P^\circ$	29143	28839.306	-303		
6	$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 3s\ ^4P_{1/2}$	$0.82 + 0.12\ 2s\ 2p^4\ ^4P$	83332	83284.070	-48	2.44E-09	2.44E-09
7	$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 3s\ ^4P_{3/2}$	$0.82 + 0.12\ 2s\ 2p^4\ ^4P$	83366	83317.830	-48	2.42E-09	2.42E-09
8	$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 3s\ ^4P_{5/2}$	$0.81 + 0.12\ 2s\ 2p^4\ ^4P$	83413	83364.620	-49	2.40E-09	2.39E-09
9	$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 3s\ ^2P_{1/2}$	0.95	86187	86137.350	-50	2.10E-09	2.10E-09
10	$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 3s\ ^2P_{3/2}$	0.95	86270	86220.510	-50	2.10E-09	2.10E-09
...	...	...	...	...	...	...	

NOTE—第三列给出了 LS耦合下的波函数组成（最多列出三个 LS分量，其对总波函数的贡献率为> 0.02及以上）。 ΔE表示多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算值与NIST 原子光谱数据库汇编值之间的差值，即 $\Delta E = E_{\rm NIST} - E_{\rm RCI}$。请注意，第二列中给出的两对能级（#74-75和#80-82）的标记与NIST 原子光谱数据库数据中的标记相反。

本文计算的能级与实验值的比较结果如图1所示。如图1左图所示，我们计算的能量与 NIST 汇编的实验能量非常吻合，平均相对差异为 0.07%。理论与实验之间最大的相对差异为 1.05%，出现在基态组态 $2s^2 2p^3$ 的双重态项所属能级中。其余 98 个能级的计算激发能相对差异小得多，平均为 0.03%。图1右图显示了 NIST 原子光谱数据库数值与本文计算数据之间的能量差 $\Delta E = E_{\rm NIST} - E_{\rm RCI}$，并将其绘制为激发能 $E_{\rm RCI}$的函数。可以看出，最大误差出现在基态能级，其能量比 NIST 原子光谱数据库数值高约 200–300 cm^{-1} 。这些 ΔE 值的均方根（rms）约为 67 cm^{-1}。用线性拟合结果校正计算得到的激发能后，这些 ΔE 值的均方根（rms）降至 28 cm^{-1}，系统误差为激发能的 0.26%。

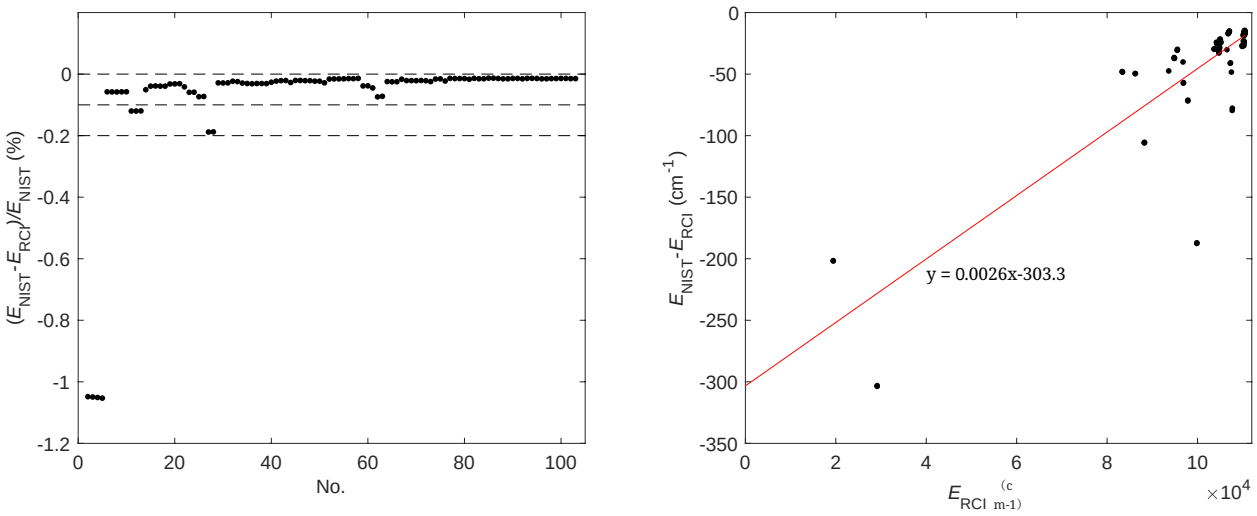


图 1. 当前计算的激发能与 NIST 原子光谱数据库中可用数值的比较。左图显示各能级的相对差异，右图显示绝对差异以及本文计算的能量。左图中的虚线从上到下分别表示 0.2%、0.1% 和 0.0% 的相对偏差。右图中的红色实线是对图中散点数据进行的线性拟合。

表3将本文计算得到的寿命与其他理论结果及可获得的实验值进行了比较。Babushkin 形式和库仑形式下的计算寿命彼此相差不超过 2.6%。与 Hibbert 等（1991）的 CIV3 计算结果以及 Froese Fischer 与 Tachiev（2004）的 MCHF-BP 计算结果相比，8 个寿命值中有 7 个吻合极佳，两两之间的相对差异小于 7%。对于 $2p^2(^3P)4s\ ^2P$ 项，本文所得寿命约为 CIV3 结果的一半，但与 MCHF-BP 值吻合，相对差异小于 6%，且与 Dumont 等人（1974）的实验值更加一致。除 $2p^2(^3P)3p\ ^4P^o_{5/2}$ 和 $2p^2(^3P)4s\ ^2P$ 能级外，计算寿命值与实验值也吻合良好。对于 $2p^2(^3P)3p\ ^4P^o_{5/2}$ 能级，所有理论寿命与实验值均有显著差异，而 Bromander 等人（1978）和 D´esesquelles（1970）的两个实验值彼此相差 30%。相反，采用三种不同方法，即多组态Dirac–Hartree–Fock方法、MCHF-BP 和 CIV3 得到的理论结果彼此吻合，相差不超过 8%。对于 $2p^2(^3P)4s\ ^2P$ 态，所有理论值均高于 Dumont 等人（1974）得到的实验结果。本文预测的寿命与 MCHF-BP 计算结果（Froese Fischer 与 Tachiev，2004）吻合良好，而 Hibbert 等（1991）的数值高于其他结果。因此，欢迎针对这些能级开展新的寿命实验测量。

3.2. 跃迁参数

Babushkin 规范下的 E1 跃迁数据，例如波长(λ)、跃迁速率(A)、线强度(S)、加权振子强度 (gf)，列于表 4。需要指出的是，表 4 中的波长是根据 NIST 原子光谱数据库汇编的实验能级计算得到的，跃迁参数 A 和 gf 也已根据 NIST 原子光谱数据库中的波长值进行了调整。

如第 2.1 节所述，$\mathrm{d}T$ 值可用于评估跃迁参数的准确性。前者列于表 4 的最后一列。我们还研究了 $\mathrm{d}T$ 值随跃迁速率大小 A 的分布。在表5 中，根据 A 值的大小，将跃迁分为五组，并列出每组 $\mathrm{d}T$ 值的统计结果，即平均值 $\langle \mathrm{d}T \rangle$ 以及相应的标准差 σ。$\langle \mathrm{d}T \rangle$ 和 σ 的定义如下：

$$\langle \mathrm{dT} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{n} \mathrm{d}T_i}{n} \tag{6}$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (\mathrm{d}T_i - \langle \mathrm{dT} \rangle)^2}{(n-1)}} \tag{7}$$

表3. 实验值与计算寿命的比较（单位：ns，B ＝Babuskin形式，C ＝库仑形式）。某一项的寿命为对应不同 J 值的寿命平均值。实验值的表示法，例如44(2)，表示 44 ± 2。

态或项	本工作		其他计算	实验
	B	C		
$2p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	39.8	40.3	37.9[a]; 37.12[b]	44(2)[c]; 43(3)[d]
$2p^2(^3P)3p\ ^4S_{3/2}$	25.3	25.5	24.1[a]; 23.26[b]	26.0(1.5)[c]; 23.3(2.3)[e]
$2p^2(^3P)3p\ ^4P_{5/2}$	33.4	33.9	31.6[a]; 31.22[b]	39[f]; 55(5)[g]
$2s2p^4\ ^4P$	6.90	6.75	6.77[a]; 7.14[b]	7.3(0.7)[h]; 7.4(0.4)[i]; 7.0(0.2)[j] 7.1(0.4)[f]; 5.5(1.5)[k], 9.9(1.0)[l]; 7.2(0.7)[m]
$2p^2(^3P)3s\ ^4P$	2.42	2.42	2.48[a]; 2.59[b]	2.35(0.23)[f,h]; 2.4(0.1)[j]; 2.2(0.4)[l]; 2.5(0.3)[m]
$2p^2(^3P)3s\ ^2P$	2.10	2.10	2.13[a]; 1.95[b]	1.9(0.3)[h,m]; 2.3(0.4)[h]; 2.2(0.1)[j] 1.7(0.4)[l]; 1.9(0.4)[l]; 2.28(0.2)[f]
$2p^2(^1D)3s\ ^2D$	2.57	2.58	2.44[a]; 2.44 [b]	2.27(0.3)[h]; 2.26(0.3)[h]; 2.65(0.3)[f] 2.6(0.1)[j]; 2.5(0.4)[k]; 2.2(0.3)[m]
$2p^2(^3P)4s\ ^2P$	8.52	8.75	8.02[a]; 18.8[b]	6.2[h]

NOTE—[a] Froese Fischer 与 Tachiev（2004年）； [b] Hibbert 等（1991）； [c] Bengtsson 等（1992年）； [d] Copeland 等（1987年）； [e] Catherinot 与 Sy（1979年）； [f] D´esesquelles（1970）； [g] Bromander 等人（1978年）； [h] Dumont 等人（1974年）； [i] Smith 等（1970）； [j] Berry 等（1971）； [k] Mallow 与 Burns（1972）； [l] Hutchison（1971）； [m] Lawrence 与 Savage（1966）

表4. 本文计算得到的中性氮电偶极跃迁数据。表中列出了上能级和下能级、真空波长、$\lambda_{vac.}$、跃迁概率、 A、线强度、 S （单位为 $a_0^2e^2$原子单位）、加权振子强度 log(gf)，以及 A 值两种规范之间的相对差异 dT和精度等级（精度），其中包括：A（不确定度 $\leq$ 3%）、B+ （3% $<$ 不确定度 $\leq$ 7%）、B（7% $<$ 不确定度 $\leq$ 10%）、C+ （10% $<$ 不确定度 $\leq$ 18%）、C（18%< 不确定度 $\leq$ 25%）、D+ （25% $<$ 不确定度 $\leq$ 40%）、D（40% $<$ 不确定度 $\leq$ 50%）和E（50% $>$ 不确定度）。本表完整内容可通过电子版获取。

上能级	下能级	λ (Å)	A_B (s^{-1})	A_C (s^{-1})	log(gf)$_B$	log(gf)$_C$	S_B	S_C	dT	Acc. dT& A	Acc. $gf_{\rm RCI}$& $gf_{\rm NIST-ASD}$
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^2D_{5/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	905.221	1.444E+06	1.623E+06	-2.973	-2.922	3.172E-03	3.565E-03	0.110	C+	C
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^2D_{3/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	905.411	4.649E+05	5.202E+05	-3.641	-3.592	6.813E-04	7.623E-04	0.106	C+	D+
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^4D_{5/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	905.786	1.657E+07	1.861E+07	-1.913	-1.862	3.647E-02	4.096E-02	0.110	C+	B
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^4D_{3/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	905.834	3.476E+07	3.898E+07	-1.767	-1.717	5.101E-02	5.719E-02	0.108	C+	B
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^4P_{1/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	905.914	5.361E+07	6.005E+07	-1.880	-1.830	3.935E-02	4.407E-02	0.107	C+	B
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^4D_{1/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	906.207	3.201E+07	3.588E+07	-2.103	-2.054	2.352E-02	2.636E-02	0.108	C+	C+
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^4P_{3/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	906.432	4.903E+07	5.510E+07	-1.617	-1.566	7.209E-02	8.101E-02	0.110	C+	B
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^2F_{5/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	906.619	2.562E+07	2.893E+07	-1.722	-1.670	5.655E-02	6.385E-02	0.114	C+	B
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^4P_{5/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	906.731	3.759E+07	4.248E+07	-1.556	-1.503	8.298E-02	9.377E-02	0.115	C+	B
$2s^2\ 2p^2(^3P)\ 4d\ ^2P_{1/2}$	$2s^2\ 2p^3\ ^4S^o_{3/2}$	907.069	1.240E+06	1.416E+06	-3.514	-3.457	9.139E-04	1.043E-03	0.124	C+	D+
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

NOTE—A_B、log(gf)$_B$ 和 S_B 分别表示 Babushkin（B）形式下的跃迁速率、加权振子强度和线强度。 A_C、log(gf)$_C$ 和 S_C 分别表示库仑（C）形式下的跃迁速率、加权振子强度和线强度。

其中， n 是各组中的跃迁数。

从表5可以看出，较强的跃迁通常对应较小的 dT 值，而较弱的跃迁则对应相对较大的 dT 值。这是意料之中的，因为这些较弱的跃迁主要是非预期的、 LS禁戒 E1 跃迁，例如互组合跃迁和双电子单光子跃迁。由于大贡献之间存在显著抵消，这类跃迁的计算颇具挑战性，参见例如Ynnerman和Froese Fischer(1995年)。抵消效应可由

表5. 计算所得跃迁速率的 dT 统计结果。根据 A 值（单位：s^{-1}）的大小，将跃迁分为五组。每组跃迁的数量（No.）、平均 dT（⟨dT⟩）和标准差（σ）均已列出。最后三行给出了所有 $A \geq 10^2 s^{-1}$ 的跃迁中，dT 分别小于 0.2、0.1 和 0.05 的跃迁比例（%）。

组	No.	$\langle dT \rangle$	σ
$< 10^0$	68	65.77	0.35
$10^0 - 10^2$	199	26.65	0.25
$10^2 - 10^4$	422	17.70	0.20
$10^4 - 10^6$	670	9.42	0.12
$> 10^6$	342	4.51	0.08
$dT < 20$		84.31	
$dT < 10$		66.04	
$dT < 5$		51.74	

抵消因子（CF）表示。当 CF 小于约 0.1 或 0.05 时，计算得到的线强度预计会有较大的不确定性（Cowan 1981）。对于本文计算的 LS允许跃迁，905 个跃迁中有 537 个对应的 CF 大于 0.05；而对于 LS禁戒跃迁，796 个跃迁中仅有 167 个满足这一条件。对于大多数强跃迁，$A > 10^6$ s^{-1}的平均 $\langle dT \rangle$ 小于 0.05（$\sigma = 0.08$）。最后三行还对具有不同 dT 值的跃迁比例进行了统计分析：dT 分别小于 0.2、0.1 和 0.05 的跃迁比例为 84.3%、66.0% 和 51.7%。

图 2 展示了所有满足 T s $A > 10^2$ 的 E1 跃迁的 d^{-1}值分布。与表 5中的结果一致，较强的跃迁对应较小的 dT 值，且大多数跃迁的 dT 值均在 0.2 以内。图 T 中所示的所有本文结果 E1 跃迁的平均 d2 为 0.107（$\sigma = 0.18$）。

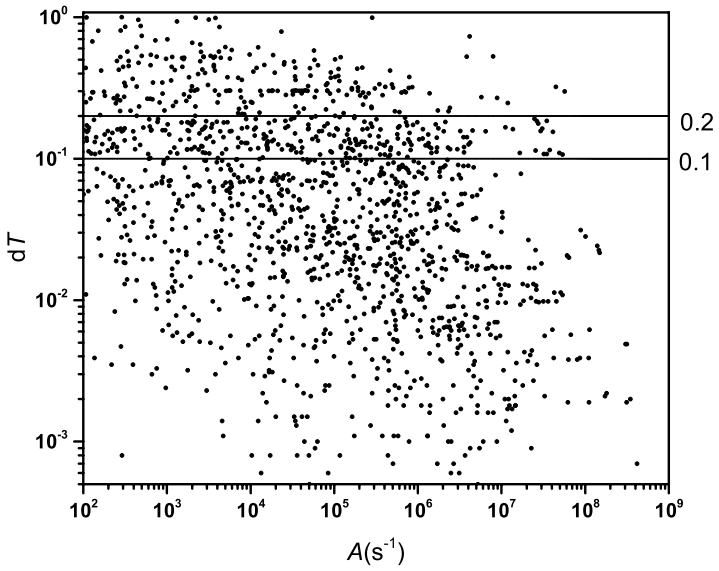


图 2. dT 值与跃迁率 A （单位为 s^{-1}）的分布。实线表示巴布斯金规范与库仑规范之间 0.1 和 0.2 的相对差异。请注意，x 轴和 y 轴均采用对数刻度。

然而，为每条跃迁估算不确定度并非易事，目前已有多种方法用于估算计算所得跃迁速率的不确定度（Kramida 2014；Froese Fischer 2009；Ekman等，2014；El-Sayed 2021；Gaigalas等，2020）。本研究采用两种方法估算不确定度。第一种方法称为 dT&A 方法，具体步骤如下：1. 将跃迁

根据 A 值分组，即 $A < 10^0\ \mathrm{s}^{-1}$、$10^0 \le A < 10^2\ \mathrm{s}^{-1}$、$10^2 \le A < 10^3\ \mathrm{s}^{-1}$、$10^3 \le A < 10^4\ \mathrm{s}^{-1}$、$10^4 \le A < 10^5\ \mathrm{s}^{-1}$、$10^5 \le A < 10^7\ \mathrm{s}^{-1}$ 和 $A \ge 10^7\ \mathrm{s}^{-1}$。2. 确定每组的平均 $\mathrm{d}T_{\mathrm{av}}$。3. 每条跃迁对应的不确定度百分比等于 $\max(\mathrm{d}T, \mathrm{d}T_{\mathrm{av}})$。第二种方法采用 Kramida（2013）提出的流程，通过比较 gf_{RCI}与 NIST 原子光谱数据库的结果来评估计算所得跃迁概率的精度，我们将其称为 $gf_{\mathrm{RCI}}\&gf_{\mathrm{NIST-ASD}}$ 方法。对属于特定精度等级的跃迁数量进行统计分析，并在图 3 中展示通过上述两种方法得到的百分比。

作为比较，图中还显示了根据 $\mathrm{d}T$ 值获得的不同不确定度类别的百分比分布图 3。可以看出，采用 $\mathrm{d}T$ 指标时，高精度等级所占比例从 45% 降至 5%；采用 $\mathrm{d}T\&A$ 方法时则降至 0，而采用 $gf_{\mathrm{RCI}}\&gf_{\mathrm{NIST-ASD}}$ 方法时为 0。这表明，仅使用 $\mathrm{d}T$ 值估算精度可能会低估不确定度。对于每个跃迁，$\mathrm{d}T\&A$ 方法和 $gf_{\mathrm{RCI}}\&gf_{\mathrm{NIST-ASD}}$ 方法得出的精度等级列于表4最后两列。

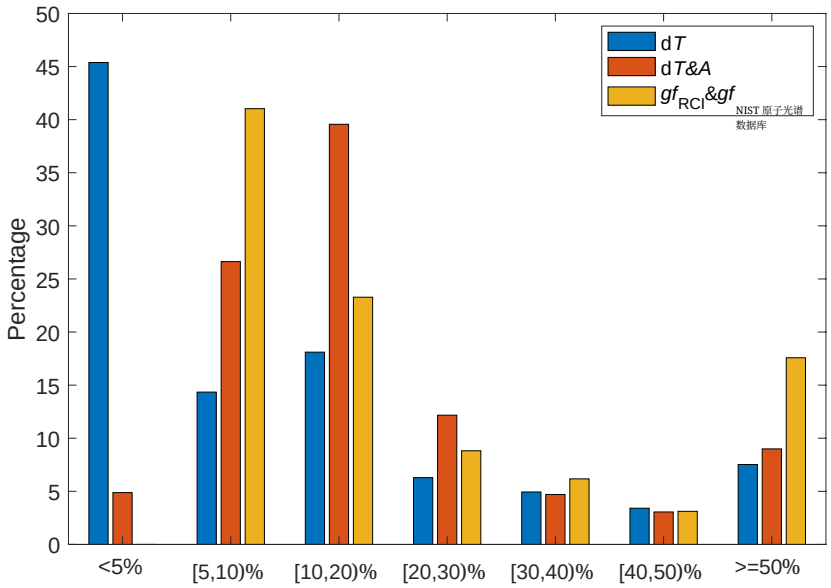


图 3. 基于 $\mathrm{d}T$ 值（蓝色）、$\mathrm{d}T\&A$ 方法（红色）以及 $gf_{\mathrm{RCI}}\&gf_{\mathrm{NIST-ASD}}$ 方法（黄色）得到的所有跃迁在不同不确定度类别中的百分比分布，数据取自 Kramida (2013)。

还可以通过与先前的计算和实验结果比较，估算计算所得跃迁参数的精度。图 4 展示了本文结果的 $\log(gf)$ 值与 NIST 原子光谱数据库结果的比较。请注意，比较时仅使用 NIST 原子光谱数据库中不确定度标记为 C 及以上的数值。这些 NIST 原子光谱数据库数值由 Wiese 等人(1996) 和Wiese 与 Fuhr (2007) 根据Tachiev与Froese Fischer(2002) 的结果汇编；此外还包括Musielok 等人(1995) 和Hibbert 等人(1991年) 的结果。可以看出，对于大多数跃迁，本文计算得到的 $\log(gf)$ 结果与 NIST 原子光谱数据库中的数值相当吻合。

在图 5中，我们将计算得到的 $\log(gf)$ 值与另外两项计算的结果进行比较：一项是 Hibbert 等人(1991年) 使用 CIV3 程序完成的计算，另一项是 Tachiev与Froese Fischer (2002年) 使用 MCHF-BP 方法得到的结果。如图所示，对于大多数跃迁，本文计算的 $\log(gf)$ 值与其他来源的结果差异较小。将本文的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用结果与 Tachiev与Froese Fischer (2002年) 的 MCHF-BP 计算结果（NIST 原子光谱数据库采用了该结果）进行比较，334 个跃迁中有 304 个（261 个）在 25%（10%）以内一致。例外是 $\log(gf) < -5$ 较弱的跃迁。305 个跃迁中有 181 个与 Hibbert 等人(1991年) 的结果在 25% 以内一致。看来，对于同时有两项理论结果的跃迁，即 Hibbert 等人(1991年) 和 Tachiev与Froese Fischer (2002年) 的结果，本文的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用结果与后者更为一致。

在表6中，将计算得到的跃迁概率与以下实验结果进行了比较：Musielok 等人（1995年）和Bridges 和 Wiese （2010年）。理论结果来自Hibbert 等人（1991年）和Tachiev

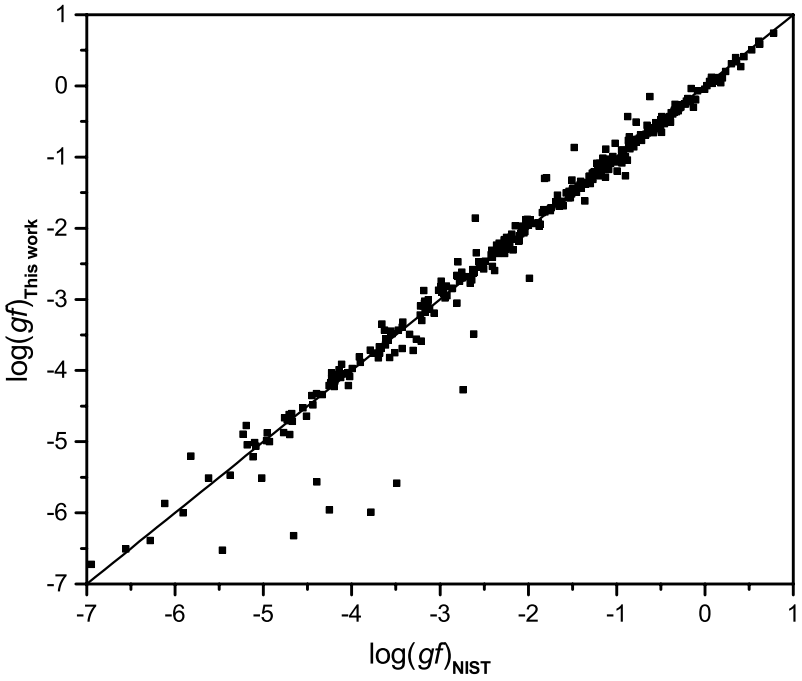


图4. 比较 本文结果计算所得的 log(gf) 值与 NIST-AS 中可查得结果的比较 D.

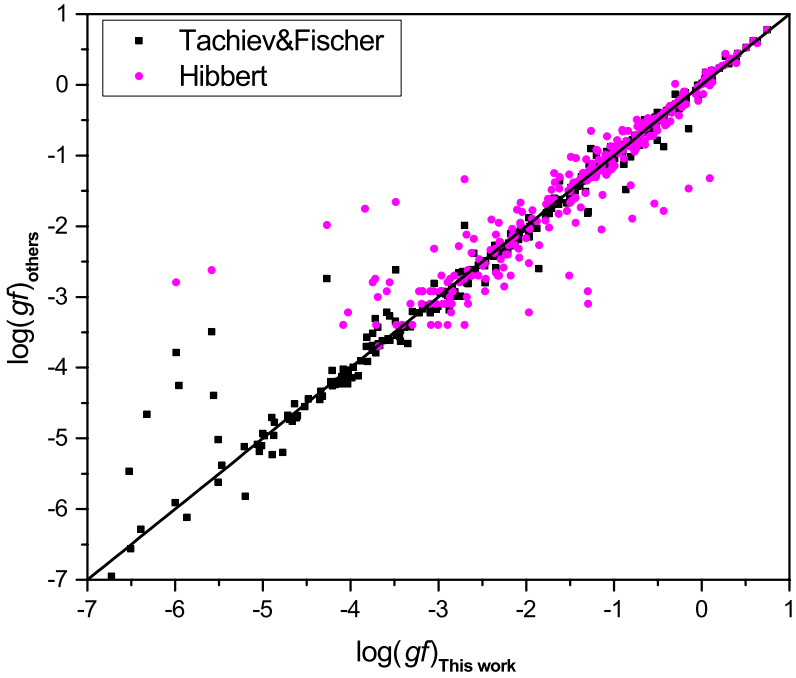


图5. 本文结果计算所得 log(gf) 值与 Tachiev与Froese Fischer (2002年) 和 Hibbert 等人(1991年) 的值的比较。

Froese Fischer（2002）的结果（如有）也列出以供比较。多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用跃迁速率的估计不确定度 dT 列于括号中。从表6可以看出，当该多重态同时有 Musielok 等（1995）和 Bridges & Wiese (2010) 的两组实验结果时，对于 $2p^2(^3P)3p \rightarrow 2p^2(^3P)3s$ 跃迁，本文结果与后者的符合程度略好；而对于 $2p^2(^3P)3d \rightarrow 2p^2(^3P)3p$ 跃迁，情况则较为复杂。对于允许的 $2p^2(^3P)3p \rightarrow 2p^2(^3P)3s$ 跃迁，本文结果与两组实验结果以及 MCHF-BP（Tachiev与Froese Fischer 2002）和 CIV3（Hibbert 等人 1991）的数据均高度吻合。对于 $2p^2(^3P)3d\ ^4P \rightarrow 2p^2(^3P)3p\ ^4D^o$ 跃迁，本文结果与 Bridges & Wiese (2010) 的实验值比与 Musielok 等（1995）的实验值符合得更好。对于来自 $2p^2(^3P)3d\ ^4P_{5/2}$ 和 $^2F_{5/2}$ 能级的跃迁，本文计算所得跃迁速率与 Bridges & Wiese (2010) 的实验值相差很大，偏差达70%；而（Tachiev与Froese Fischer 2002）的数值似乎与相应实验结果更为吻合。仔细检查表2所列的波函数组成后发现，这两个能级之间存在强烈混合。要准确计算这种强相互作用能级的辐射性质非常困难。

表6。将实验值所得的跃迁速率与本文结果的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算结果及其他计算结果进行了比较。本文的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算结果采用 Babushkin 规范。括号中的数值表示 Babushkin 规范与库仑规范之间的相对差异。请注意，MCHF计算的数值取自 NIST数据库。括号内不带 % 的数字表示相对于所列末位数字的不确定度，例如，25.31(114) 表示 25.31 ± 1.14。

跃迁数组	Term	$g_u - g_l$	跃迁率 A (10^6 s^{-1})				
			多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用	Tachiev 和 Fischer[a]	Hibbert 等人[b]	Musielok 等人[c]	Bridges 和 Wiese[d]
$2p^2(^3P)3p - 2p^2(^3P)3s$	$^4D^o - {}^4P$	8 - 6	23.95(1.30%)	25.31(114)	25.96	22.1(24)	23.2(19)
		6 - 4	17.85(1.30%)	18.81(88)	19.25	16.7(18)	17.29(138)
		4 - 2	10.95(1.29%)	11.52(55)	11.79	10.4(11)	10.67(85)
		6 - 6	6.167(1.25%)	6.546(351)	6.725	5.95(71)	5.96(48)
		4 - 4	12.19(1.27%)	12.88(62)	13.20	11。7（13）	12.04(96)
		2 - 2	20.51(1.27%)	21.61(97)	22.11	19.7(22)	20.0(16)
		4 - 6	0.907(1.21%)	0.965(59)	0.993	0.88(12)	
		2 - 4	3.554(1.24%)	3.761(194)	3.857	3.24(39)	3.70(30)
$2p^2(^3P)3p - 2p^2(^3P)3s$	$^4P^o - {}^4P$	6 - 6	21.43(1.69%)	22.63(155)	23.07	22.1(27)	
		4 - 4	4.975(1.64%)	5.233(365)	5.312	5。02(60)	
		2 - 2	4.424(1.73%)	4.684(314)	4.771	4.85(58)	
		4 - 6	12.40(1.71%)	13.12(92)	13.41	13。4(16)	
		2 - 4	24.79(1.69%)	26.19(175)	26.67	26.5(32)	
		6 - 4	7.751(1.74%)	8.220(566)	8.385	7.86(94)	
		4 - 2	11.84(1.71%)	12.53(84)	12.74	12.2(15)	
$2p^2(^3P)3p - 2p^2(^3P)3s$	$^4S^o - {}^4P$	4 - 6	18.34(0.99%)	19.61(94)	20.17	19.0(21)	17.91(143)
		4 - 4	11.20(0.96%)	11.96(52)	12.36	12。3(14)	11.83(85)
		4 - 2	5.295(0.94%)	5.649(229)	5.856	5。63(62)	5.71(46)
$2p^2(^3P)3p - 2p^2(^3P)3s$	$^2D^o - {}^2P$	6 - 4	25.73(0.03%)	25.19(170)	26.79	25.5(31)	
		4 - 2	21.87(0.03%)	21.39(154)	22.63	21.9(26)	
		4 - 4	3.820(0.04%)	3.741(250)	4.043	3.88(50)	

表 6 *continued on next page*

表 6 *(continued)*

跃迁数组	Term	$g_u - g_l$	跃迁率 A (10^6 s^{-1})				
			多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用	Tachiev 和 Fischer[a]	Hibbert 等人[b]	Musielok 等人[c]	Bridges 和 Wiese[d]
$2p^2(^3P)3p - 2p^2(^3P)3s$	$^2P^o - ^2P$	4 - 4	26.38(0.35%)	26.78(32)	27.52	25.2(30)	
		2 - 2	20.63(0.37%)	21.45(00)	21.58	19。8(24)	
		2 - 4	10.58(0.32%)	10.75(12)	11.08	9.70(116)	
		4 - 2	4.772(0.37%)	4.871(42)	5.106	4.64(60)	
$2p^2(^3P)4p - 2p^2(^3P)3s$	$^2P^o - ^2P$	4 - 4	1.024(9.36%)			0。749(105)	
		2 - 2	0.895(9.61%)			0。672（94）	
		2 - 4	0.368(8.63%)			0。269(40)	
		4 - 2	0.207(9.67%)			0.240(36)	
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^2P - ^2S^o$	4 - 2	26.19(1.19%)	32.08(590)	32.72	28.7(37)	
		2 - 2	26.02(1.27%)	31.97(583)	32.65	30.0(39)	
$2p^2(^3P)4d - 2p^2(^3P)3p$	$^2P - ^2S^o$	4 - 2	4.054(12.61%)			3.58(50)	
		2 - 2	4.221(12.95%)			3.64(51)	
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^4F - ^4D^o$	10 - 8	36.11(0.98%)	38.96(315)	39.05	37.5(49)	
		8 - 6	31.62(0.98%)	34.11(280)	34.17	31.9(42)	
		6 - 4	27.94(0.97%)	30.15(262)	30.17	28.5(37)	36.9(55)
		4 - 2	25.92(0.98%)	28.05(237)	27.94	26。2(34)	
		8 - 8	3.479(0.90%)	3.833(427)	3.991	3.97(52)	4.42(44)
		6 - 6	6.663(0.99%)	7.317(782)	7.606	7.31(95)	7.58(68)
		4 - 4	9.067(0.96%)	9.833(782)	9.936	9.89(129)	10.3(9)
		6 - 8	0.218(0.01%)	0.239(29)	0.237	0.326(46)	0.256(31)
		4 - 6	0.518(0.80%)	0.564(51)	0.579	0。413(58)	
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^4P - ^4D^o$	6 - 8	0.570(6.85%)	0.822(169)	0.668	1。39(18)	0.842(109)
		4 - 6	0.179(13.75%)	0.223(102)	0.048	0.450(63)	0.236(35)
		2 - 4	0.150(13.72%)	0.183(98)		0。311(44)	0.152(23)
		6 - 6	0.606(2.53%)	1.394(850)	2.471	2.28(30)	1.304(130)
		4 - 4	1.845(2.37%)	2.015(518)	2.787	3.64(47)	2.15(19)
		2 - 2	1.649(3.59%)	1.828(484)	2.999	2.93(38)	1.91(25)
		6 - 4	0.529(0.25%)	0.348(179)	0.332	0.760(106)	0.406(45)
		4 - 2	0.358(1.97%)	0.407(117)	0.707	0.758(106)	0.407(41)
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^4D - ^4D^o$	8 - 8	9.264(1.29%)	10.28(124)	10.02	8。82(115)	
		6 - 6	5.149(1.75%)	5.730(704)	4.900	4.79(62)	
		4 - 4	2.963(2.20%)	3.330(526)	2.408	2.99(39)	
		2 - 2	3.366(2.09%)	3.829(610)	2.640	3.22(42)	
		6 - 8	2.675(0.07%)	2.965(404)	3.243	2。58(34)	
		4 - 6	4.030(0.32%)	4.496(540)	4.717	4。10(53)	
		2 - 4	4.821(0.76%)	5.414(621)	5.603	4。77(62)	
		8 - 6	0.577(1.30%)	0.699(111)	0.751	0。534(75)	
		6 - 4	0.989(1.66%)	1.179(185)	1.115	1.09(14)	
		4 - 2	1.194(1.89%)	1.40(23)	1.151	1。16(15)	

表 6 *continued on next page*

表 6 *(continued)*

跃迁数组	Term	$g_u - g_l$	跃迁率 A (10^6 s^{-1})				
			多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用	Tachiev 和 Fischer[a]	Hibbert 等人[b]	Musielok 等人[c]	Bridges 和 Wiese[d]
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^4P - ^4P^o$	6 - 6	2.976(1.05%)	3.928(159)	3.069	2.37(31)	
		2 - 2	5.353(0.57%)	5.397(924)	9.480	3.39(44)	
		4 - 6	3.721(0.79%)	3.757(363)	2.740	2.29(30)	
		2 - 4	6.649(0.89%)	6.751(701)	4.178	4.01(52)	
		6 - 4	4.829(0.65%)	7.16(160)	10.01	4.18(54)	
		4 - 2	8.942(0.70%)	9.027(793)	11.03	5。55(72)	
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^4D - ^4P^o$	8 - 6	24.10(0.27%)	25.46(66)	25.11	23。5(31)	
		6 - 4	12.38(0.18%)	13.20(80)	11.08	12.3(16)	
		4 - 2	6.058(0.10%)	6.541(706)	4.249	6.07(79)	
		6 - 6	11.88(0.43%)	12.35(66)	13.40	11.3(15)	
		4 - 4	15.14(0.36%)	15.91(42)	15.40	15.2(20)	
		2 - 2	17.97(0.25%)	19.11(120)	14.53	17。8(23)	
		4 - 6	3.254(0.48%)	3.332(347)	4.332	3.24(42)	
		2 - 4	7.305(0.42%)	7.553(747)	10.10	7.16(93)	
$2p^2(^3P)5s - 2p^2(^3P)3p$	$^4P - ^4P^o$	6 - 6	1.811(8.10%)			1.75(25)	
		4 - 4	0.392(7.87%)			0。445(67)	
		2 - 2	0.348(7.72%)			0.365(55)	
		4 - 6	0.917(7.44%)			0.937(141)	
		2 - 4	1.838(7.46%)			1.94(29)	
		6 - 4	0.758(8.37%)			0.738(111)	
		4 - 2	1.019(8.08%)			0。979(147)	
$2p^2(^3P)5s - 2p^2(^3P)3p$	$^2P - ^2D^o$	4 - 6	2.252(3.43%)			1.79(25)	
		2 - 4	3.086(7.70%)			2.85(40)	
		4 - 4	0.193(1.44%)			0.230(35)	
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^2F - ^4D^o$	6 - 6	1.719(0.57%)	1.064(481)	0.420	2.26(32)	1.34(16)
		8 - 6	0.595(1.00%)	0.609(331)	0.527	1。08(15)	0.646(78)
		6 - 4	0.268(2.32%)	0.485(687)	0.555	0.810(113)	0.462(55)
$2p^2(^3P)3d - 2p^2(^3P)3p$	$^2F - ^4P^o$	6 - 4	3.564(0.62%)	1.289(1182)	0.160	1。03(14)	

NOTE—[a] Tachiev & Froese Fischer (2002年); [b] Hibbert 等人(1991年); [c] Musielok 等人 (1995年); [d] Bridges 和 Wiese (2010年)

如表 6 所示，当跃迁有三个理论值可用时，本文的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用结果似乎与 Musielok 等人 (1995 年) 得到的实验值符合得更好。本文计算的 72 个跃迁中，有 50 个与 Musielok 等人 (1995 年) 的结果相差在 10% 以内，而 Hibbert 等人(1991年)(Tachiev与Froese Fischer (2002年)) 的理论数据中，分别有 33 个（37 个）跃迁的差异在同一范围内。

此外，还有一些线强度测量 S。图6中，将选定的计算 S 值与 Bac-lawski 等人（2002年）以及 Bac-lawski 与 Musielok（2008年）的实验结果进行了比较。图中还列出了 Hibbert 等（1991年）以及 Froese Fischer 与 Tachiev（2004年）的理论结果。请注意，Bac-lawski 等人（2002年）以及 Bac-lawski 与 Musielok（2008年）给出了多重态内的相对线强度（归一化为 100）。因此，图6中用于比较的所有理论值都是多重态中各跃迁的线强度占比，每个多重态的总和为 100。本文结果和 MCHF-BP 的计算 S 值

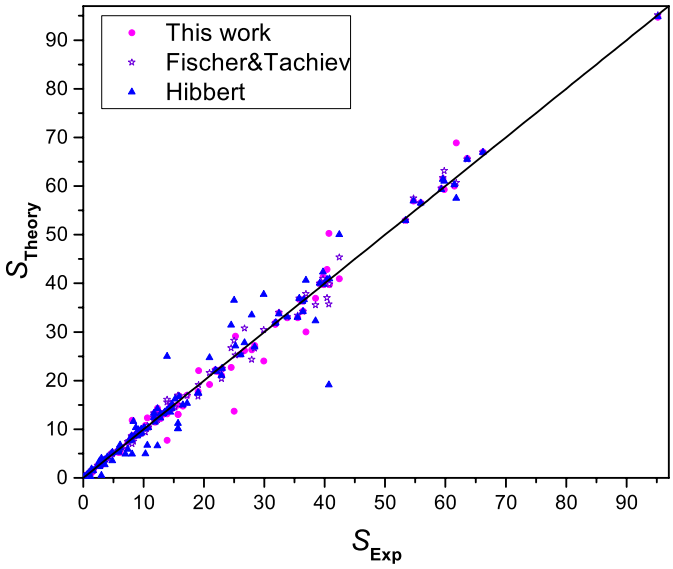


图6. 理论相对线强 S与 Bac-lawski 等人发表的相应实验结果的比较（(2002年）以及 Bac-lawski 与 Musielok(2008年）。

计算结果由 Froese Fischer 与 Tachiev (2004年) 得出，与实验值的吻合程度远好于 Hibbert 等人 (1991年) 的 CIV3 计算结果。 S 本文结果的值对于大多数跃迁而言，都在实验测量的不确定度范围内。

3.3. 通过太阳光谱进行验证

太阳是我们了解最深入的恒星，其参数受到严格约束（Pr˘sa 等，2016年），并且我们拥有高质量的出射强度观测（Delbouille与Roland，1995年；Neckel，1999；Doerr 等，2016年），以及对光球层的真实模拟（Nordlund 等，2009年；Pereira 等，2013）。因此，分析太阳强度光谱为检验本文计算的准确性提供了另一种方法。

为此，我们考察 Amarsi等 (2020年）的研究。作者使用先进的模型大气和辐射转移方法，对太阳盘心强度光谱中的 5 条中性氮 谱线 进行了详细分析。通过这项分析，他们测量了每条谱线以及所有谱线的平均太阳氮丰度。按照惯例，该丰度以氮原子核相对于氢原子核的对数数密度（加上一个偏移量）表示： $A(\mathrm{N}) \equiv \log_{10}(N_{\mathrm{N}}/N_{\mathrm{H}}) + 12$。他们采用了 Tachiev与Froese Fischer (2002年）给出的跃迁概率。初步而言，他们的结果可以通过以下方式调整，以计入新的原子数据：

$$A(\mathrm{N})_{\mathrm{new}} = A(\mathrm{N})_{\mathrm{Tachiev}} + \Delta_{\mathrm{new}} \tag{8}$$

其中，修正项 Δ_{new} 为

$$\Delta_{\mathrm{new}} = \log(gf)_{\mathrm{Tachiev}} - \log(gf)_{\mathrm{new}}\,. \tag{9}$$

表7 给出了 N gf 中五条允许谱线的 log(gf) 值，这些谱线被（Amarsi等 2020年）使用。表中列出了本文结果计算得到的库仑形式和 Babuskin 形式的 log(gf) 值。可以看到，对于这五条跃迁谱线，本文计算得到的库仑形式和 Babuskin 形式的 log(gf) 值非常一致，dT值小于 0.02。我们还考察了最后两个层级计算结果中波长和振子强度的收敛情况。所有五个跃迁的波长均收敛至 0.1% 以内；最后两个层级计算所得振子强度之差分别为：744.229 nm 对应 0.0002，821.633 nm 和 868.34 nm 对应 0.01，862.923 nm 对应 0.001，1010.89 nm 对应 0.005。Musielok 等人（1995年）和 Bridges 和 Wiese （2010年）报告了这些谱线跃迁概率的实验测量；所得的

表7。 用于丰度分析的五条谱线的 log(gf) 值比较，见 Amarsi等 (2020年)。B =Babuskin形式和 C = 库仑形式。

上能级	下能级	λ_{air}/nm	log(gf) 本文结果 B	本文结果 C	Tachiev 和 Fischer[a]	Hibbert 等人[b]	Bautista 等人[c]	Musielok 等人[d]	Bridges 和 Wiese[e]
$2p^2(^3P)3p\ ^4S^o_{3/2}$	$2p^2(^3P)3s\ ^4P_{3/2}$	744.229	−0.429	−0.433	−0.403	−0.386		−0.39 ± 0.049	−0.41 ± 0.035
$2p^2(^3P)3p\ ^4P^o_{5/2}$	$2p^2(^3P)3s\ ^4P_{5/2}$	821.633	0.116	0.108	0.138	0.147		0.13 ± 0.053	
$2p^2(^3P)3p\ ^2P^o_{3/2}$	$2p^2(^3P)3s\ ^2P_{3/2}$	862.923	0.070	0.068	0.077	0.090	0.057 ± 0.046	0.051 ± 0.052	
$2p^2(^3P)3p\ ^4D^o_{5/2}$	$2p^2(^3P)3s\ ^4P_{3/2}$	868.340	0.084	0.079	0.106	0.116	0.14 ± 0.047	0.054 ± 0.047	0.069 ± 0.035
$2p^2(^3P)3d\ ^4F_{5/2}$	$2p^2(^3P)3p\ ^4D^o_{3/2}$	1010.89	0.410	0.406	0.444	0.443		0.42 ± 0.056	0.53 ± 0.065

NOTE—该表列出：上、下组态及其光谱项；空气中波长 λ_{air}；加权振子强度 log(gf)。 [a]Tachiev与Froese Fischer (2002年); [b] Hibbert 等人(1991年); [c]Bautista 等人 (2022); [d]Musielok 等人 (1995年); [e]Bridges 和 Wiese (2010年)。

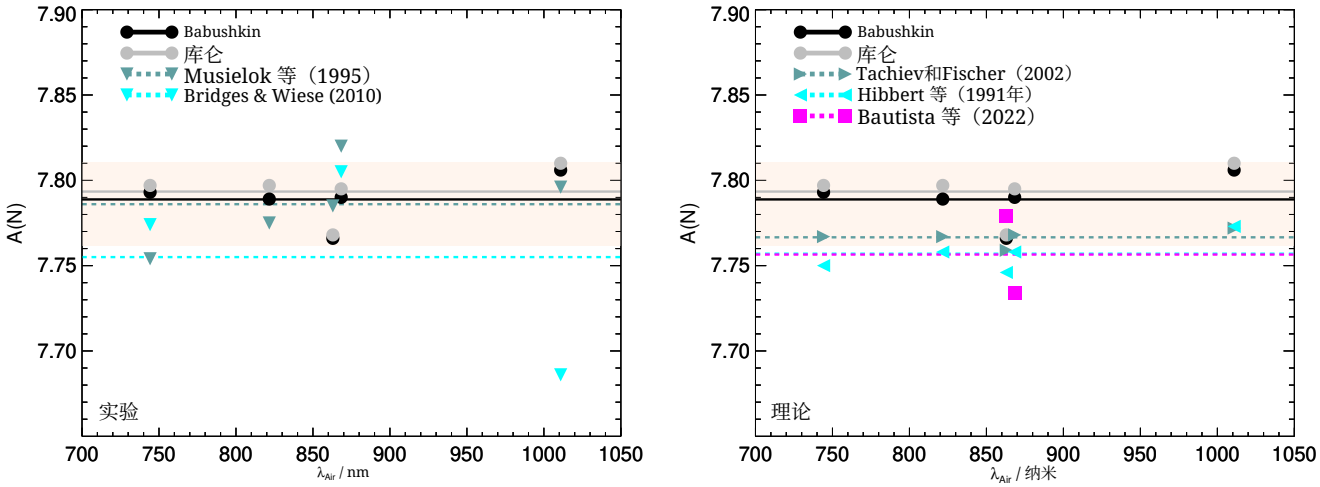


图 7。利用表 7 中给出的不同跃迁概率推得的太阳氮丰度。两个面板均展示了基于本文计算的理论跃迁数据所得的结果。左侧面板还包括基于 Musielok 等人(1995年)和Bridges 和 Wiese (2010年)的实验数据所得的结果；右侧面板则包括基于 Tachiev与Froese Fischer (2002年)、Hibbert 等人(1991年)和Bautista 等人(2022)的理论数据所得的结果。水平线表示根据每组数据推得的平均丰度。两个面板中的阴影区域均表示基于 Musielok 等人(1995年)实验数据所得结果的标准差范围，并以平均值为中心。

log(gf) 值列于表 7 的最后两列。在所有情况下，我们的理论值以及 Tachiev与Froese Fischer （2002）的结果均落在实验值的估计不确定度范围内。Hibbert 等人 （1991年）先前的计算所得 log(gf) 值大于 821.633 nm 和 868.340 nm 谱线的实验测定值，而 Bautista 等人 （2022）给出的 868.340 nm 谱线推荐值略高于实验结果。

图 7 根据太阳氮丰度，使用方程 8 和 9对表 7 中的数据进行了比较。上图比较了基于本文结果的计算与基于 Musielok 等人（1995年）和 Bridges 和 Wiese （2010年）实验测量的结果。可以看到，本文计算所得的太阳氮平均丰度（无论采用哪种规范）都与 Musielok 等人 （1995年）的结果吻合良好。有趣的是，这项分析揭示，Bridges 和 Wiese （2010年）给出的 1010.89 nm 谱线的跃迁概率被显著高估了，因为该值意味着太阳氮丰度显著低于其他 NI 谱线所推得的丰度。

图 7 下图比较了基于本文结果的计算与基于以下理论计算的结果：Tachiev与Froese Fischer (2002年）、Hibbert 等人(1991年）以及Bautista 等人(2022）。可以看出，本文结果计算出的平均太阳氮丰度（无论采用哪种规范）都显著高于其他三个数据集的结果。具体而言，这项分析表明，波长为 868.340 nm 的谱线的跃迁概率（据此推算的太阳氮丰度明显低于其他 N

Bautista 等人（2022）给出的结果可能被高估了，因为对于其他所有理论跃迁概率数据集而言，这一结果所暗示的太阳氮丰度都显著低于其他 NI 谱线所暗示的丰度。

我们的新计算表明，根据中性氮I 谱线得到的 A(N) $= 7.79$，Babushkin规范和库仑规范的结果彼此一致，精确到0.01 dex。这比基于Tachiev与Froese Fischer (2002年)给出的跃迁概率、由Amarsi等 (2020年)得出的结果高0.02 dex。若同时考虑分子谱线的结果（A(N) $= 7.89$；Amarsi等 2021年），我们的平均太阳氮丰度为7.84，比Asplund等 (2021年)给出的结果高0.01 dex。因此，Amarsi等 (2021年)讨论的原子谱线和分子谱线推得的丰度之间相当大的差异，很可能并非由中性氮I的跃迁概率误差造成。

4. 结论

在本研究中，我们对中性氮I最低的103个态进行了多组态Dirac–Hartree–Fock方法和补充的相对论组态相互作用计算，扩展了早期最先进计算所采用的模型。我们系统地计算并给出了激发能、寿命、波长、线强度、跃迁速率和加权振子强度。

将激发能与 NIST 原子光谱数据库提供的实验数据进行比较后，计算得到的能级的平均相对差异为 0.07%。通过比较库仑形式与 Babuskin 形式下计算所得跃迁速率的相对差异 dT，并与以往的理论和实验结果进行广泛比较，评估跃迁数据的准确性。对 E1 跃迁的不确定度 dT 进行了统计分析，估算得出，$A > 10^2$ s^{-1} 的跃迁的平均 dT 为 0.107（$\sigma = 0.18$），而 $A > 10^6$ s^{-1}的跃迁则为 0.045（$\sigma = 0.08$）。实验结果与本文的理论跃迁性质总体吻合良好，例如振子强度、跃迁速率和线强度。但对于某些较弱的跃迁，例如互组合跃迁，存在显著差异。这类跃迁受强烈的抵消效应影响，无法在本文的计算中得到恰当处理。需要改进方法，以进一步降低相应跃迁数据的不确定度。

此外，本文的原子数据还用于分析太阳氮丰度。我们的新数据表明，基于五条氮I 谱线得到的平均太阳氮丰度为 A(N)$=$ 7.79，Babushkin规范和库仑规范所得结果相差仅0.01 dex。该丰度与Musielok 等人（1995年）根据实验测量得到的结果吻合良好，但高于其他理论数据集的结果。然而，根据原子谱线和分子谱线推导出的丰度之间仍存在较大差异（A(N)$=$ 7.89，Amarsi等（2021年）），而且这可能并非由氮I 跃迁概率的误差所致。

MCL谨此感谢广东省基础与应用基础研究基金[1]（2022A1515110043）以及惠州大学教授、博士科研基金（编号：158020137）提供的支持。[2]AMA和JG衷心感谢瑞典研究理事会（VR 2020-03940，2020-05467）的支持。我们[3]还要感谢匿名审稿人提出的宝贵意见，这些意见有助于改进原稿。[4]

参考文献

Aerts, C., Molenberghs, G., Kenward, M. G., & Neiner, C. 2014年,《天体物理学杂志》, 781, 88, doi: 10.1088/0004-637X/781/2/88Amarsi, A., Grevesse, N., Grumer, J., et al. 2020年,《天文学与天体物理学》, 636, A120 Amarsi, A. M., Grevesse, N., Asplund, M., & Collet, R. 2021年,《天文学与天体物理学》, 656, A113, doi: 10.1051/0004-6361/202141384Amarsi, A. M., Grevesse, N., Grumer, J., et al. 2020年,《天文学与天体物理学》, 636, A120, doi: 10.1051/0004-6361/202037890Asplund, M., Amarsi, A., & Grevesse, N. 2021年,《天文学与天体物理学》, 653, A141 Bac-lawski, A., & Musielok,J. 2008年,《定量光谱学与辐射传输》, 109, 2537

—. 2010,《光谱化学学报B辑：原子光谱》, 65,113 Bac-lawski, A., Wujec, T.,& Musielok, J. 2002,《物理学学报》, 65, 28 Bautista, M. A., Bergemann, M., CarvajalGallego, H., et al. 2022, arXiv 电子预印本, arXiv:2206.14095。https://arxiv.org/abs/2206.14095Belfiore, F., Maiolino, R., Tremonti, C., et al. 2017,《皇家天文学会月刊》, 469, 151, doi:10.1093/mnras/stx789Bengtsson, G., Larsson, J., Svanberg, S., & Wang,D.1992,《物理评论A》,45, 2712 Berry, H., Bickel, W., Bashkin,S., D´esesquelles,J., & Schectman, R. 1971,《美国光学学会杂志》, 61, 947

Bridges, J., & Wiese, W. 2010,《物理评论A》, 82, 024502 Bromander, J., Duric, N., Erman, P., & Larsson, M. 1978年,《物理学学报》, 17, 119, doi: 10.1088/0031-8949/17/2/010Catherinot, A., & Sy, A. 1979年,《物理评论A》, 20, 1511 Copeland, R. A., Jeffries, J. B., Hickman, A. P., & Crosley, D. R. 1987年,《化学物理学杂志》, 86, 4876 Cowan, R. D. 1981 年 , 原子结构与光谱理论第 3 卷（加利福尼亚大学出版社）Delbouille, L., & Roland, C. 1995, 收录于太平洋天文学会会议系列第81卷《实验室与天文高分辨率光谱》, 编者：A. J. Sauval、R. Blomme 和 N. Grevesse，32 D´esesquelles, J. 1970, 里昂第一大学，法国 Doerr, H. P., Vitas, N., & Fabbian, D. 2016,《天文学与天体物理学》, 590, A118, doi: 10.1051/0004-6361/201628570Dumont, P., Biemont, E., & Grevesse, N. 1974年,《定量光谱学与辐射传输》, 14, 1127 Dyall, K., Grant, I., Johnson, C., Parpia, F., & Plummer, E. 1989年,《计算物理通讯》, 55, 425 Ekman, J., Godefroid, M. R., & Hartman, H. 2014,《原子》, 2, 215 El-Sayed, F. 2021,《定量光谱学与辐射传输》, 276, 107930, doi: https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107930Esteban, C., Bresolin, F.,Garc´ıa-Rojas, J., & Toribio San Cipriano, L. 2020年,《皇家天文学会月刊》, 491, 2137 Froese Fischer, C. 2009,《物理学学报》, 2009, 014019 Froese Fischer, C., Gaigalas, G., J¨onsson, P., & Biero´n, J. 2019,《计算物理通讯》, 237, 184 Froese Fischer, C., Godefroid,M., Brage, T., J¨onsson, P., & Gaigalas, G. 2016,《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》, 49, 182004 Froese Fischer, C., & Tachiev, G. 2004,《原子数据与核数据表》, 87, 1 Gaigalas, G., Froese Fischer, C., Rynkun, P., & J¨onsson, P. 2017,《原子》, 5, 6, doi:10.3390/atoms5010006Gaigalas,G., Rynkun, P., Rad˘zi¯ut˙e, L., et al. 2020年,《天体物理学杂志增刊系列》, 248, 13, doi: 10.3847/1538-4365/ab881aGoldbach, C., L¨udtke, T., Martin, M., & Nollez, G. 1992,《天文学与天体物理学》, 266, 605 Goldbach, C., & Nollez, G. 1991年,《物理学杂志IV》, 1, C1 Grant, I. 1974年,《物理学杂志B：原子与分子物理》（1968–1987）, 7, 1458 Grant, I. P. 2007,《原子和分子的相对论量子理论：理论与计算》（施普林格）Grevesse, N., Lambert, D. L., Sauval, A. J., 等 1990,《天文学与天体物理学》, 232, 225 Hibbert, A., Biemont, E., Godefroid, M., & Vaeck, N. 1991,《天文学与天体物理学增刊》, 88, 505 Hirschi, R. 2007,《天文学与天体物理学》, 461, 571, doi: 10.1051/0004-6361:20065356Hutchison, R. B. 1971,《定量光谱学与辐射传输》, 11, 81 Kolecki, J. R., & Wang, J. 2022,《天文学杂志》, 164, 87, doi: 10.3847/1538-3881/ac7de3Kramida, A. 2013,《聚变科学与技术》, 63, 313, doi: 10.13182/FST13-A16437Kramida, A.2014,《原子》, 2,86, doi: 10.3390/atoms2020086Kramida, A., & Fuhr, J. 2010, NIST原子跃迁概率文献数据库（第9.0版）, 在线访问：https://doi.org/10.18434/T46C7N., 美国国家标准与技术研究院，盖瑟斯堡，马里兰州，美国 Kramida, A., Yu. Ralchenko, Reader, J., & and NIST ASD Team. 2021, NIST原子光谱数据库（第5.9版）, [在线]。可访问：https://physics.nist.gov/asd[2022, 4月 23]。美国国家标准与技术研究院，盖瑟斯堡，马里兰州。Lambert, D. L. 1978,《皇家天文学会月刊》, 182, 249, doi: 10.1093/mnras/182.2.249Lawrence, G., & Savage, B. D. 1966,《物理评论》, 141, 67 Li, W., Amarsi, A., Papoulia, A., Ekman, J., & J¨onsson, P. 2021,《皇家天文学会月刊》, 502, 3780 Maeder, A., Przybilla, N., Nieva, M.-F., 等 2014,《天文学与天体物理学》, 565, A39, doi: 10.1051/0004-6361/201220602Mallow, J., & Burns, J. 1972,《定量光谱学与辐射传输》, 12, 1081 Masseron, T., & Gilmore, G. 2015,《皇家天文学会月刊》, 453, 1855, doi: 10.1093/mnras/stv1731Musielok, J., Wiese, W. L., & Veres, G. 1995,《物理评论A》, 51, 3588 Neckel, H. 1999,《太阳物理学》, 184, 421, doi: 10.1023/A:1017165208013Nordlund, ˚A., Stein, R. F., & Asplund, M. 2009,《太阳物理学综述》, 6, 2, doi: 10.12942/lrsp-2009-2Olsen, J., Roos, B. O., Jo/rgensen, P., & Jensen, H. J. A. 1988,《化学物理学杂志》, 89, 2185 Papoulia, A., Ekman, J., Gaigalas, G., 等 2019,《原子》, 7, 106 Pereira, T. M. D., Asplund, M., Collet, R., 等 2013,《天文学与天体物理学》, 554, A118, doi: 10.1051/0004-6361/201321227

Pr˘sa, A., Harmanec, P.,Torres, G.,等 2016, 《天文学杂志》, 152, 41, doi: 10.3847/0004-6256/152/2/41Przybilla, N., & Butler, K. 2001, 《天文学与天体物理学》, 379, 955 Schiavon, R. P., Zamora, O., Carrera, R., 等 2017, 《皇家天文学会月刊》, 465, 501, doi: 10.1093/mnras/stw2162Smith, W. H., Bromander, J., Curtis, L., & Buchta, R. 1970, 《物理学学报》, 2, 211 Spite, M., Spite, F., Caffau, E., Bonifacio, P., & Fran¸cois, P. 2022, arXiv电子预印本, arXiv:2209.10219。 https://arxiv.org/abs/2209.10219Sturesson, L., J¨onsson, P., & Froese Fischer, C. 2007, 《计算物理通讯》, 177, 539 Tachiev, G., & Froese Fischer, C. 2002, 《天文学与天体物理学》, 385, 716

Takeda, Y., & Takada-Hidai, M. 1995年, 《日本天文学会刊物》, 47, 169; Tong, M., Froese Fischer, C., & Sturesson, L. 1994, 《物理学B：原子、分子与光学物理》, 27, 4819; Vincenzo, F., & Kobayashi, C. 2018, 《皇家天文学会月刊》, 478, 155; Wiese, W. L., & Fuhr, J. R. 2007, 《物理与化学参考数据期刊》, 36, 1287; Wiese, W. L., Fuhr, J. R., Deters, T. M., 等, 1996, 《物理与化学参考数据期刊》, 7, 157; Ynnerman, A., & Froese Fischer, C. 1995, 《物理评论A》, 51, 2020