arXiv:2304.01298v1 [astro-ph.GA] 3 Apr 2023

文章

使用 PyNeb 进行原子数据评估：Fe II 和 Fe III 的辐射与电子碰撞激发率 [FeII] 和 [Fe III]

Claudio Mendoza [1], José E. Méndez-Delgado [2], Manuel Bautista [3], Jorge García-Rojas [4,5] 和 Christophe Morisset [6]

[1] 委内瑞拉科学研究所（IVIC）物理中心，委内瑞拉加拉加斯 1020 [2] 海德堡大学天文中心天文计算研究所，德国海德堡 D-69120；jemd@uni-heidelberg.de [3] 西密歇根大学物理系，美国密歇根州卡拉马祖 MI 49008；manuel.bautista@wmich.edu [4] 加那利天体物理研究所（IAC），西班牙拉拉古纳 E-38205；astroyorch@gmail.com [5] 拉拉古纳大学天体物理系，西班牙拉拉古纳 E-38206 [6] 墨西哥国立自治大学天文学研究所，墨西哥恩塞纳达 22860；chris.morisset@gmail.com* 通讯作者：claudiom07@gmail.com；电话： +1-269-370-8465

摘要： 我们使用 PyNeb 1.1.16 Python 软件包，评估可用于 [Fe II] 和 [Fe III], 光谱建模的原子数据集，这些数据集列出了能级能量、*A* 值和有效碰撞强度。我们根据原始来源重建了大多数数据集，并纳入新的数据集，以便与观测值和测量基准进行比较。对于 [Fe III], , 我们得出了明确结论，可以据此选定默认数据集；而对于 [Fe II], , 碰撞数据显著的温度依赖性则成为一项障碍。这种依赖性主要源于 $3d^7\ a^4F_{9/2}$亚稳能级的临界密度异常低，而该密度对辐射数据和碰撞数据都高度敏感；不过，不能排除该能级由恒星连续谱荧光泵浦激发的可能性。PyNeb 新版本（1.1.17）现已发布，其中包含经过评估的数据集。

关键词： 星云建模；天体物理软件；等离子体诊断；原子数据库；原子数据评估

check for updates

C引用： Mendoza, C.; Méndez-Delgado, J. E.; Bautista, M.; García-Rojas, J.; Morisset, C. 原子D数据评估与 PyNeb：R辐射与电子碰撞E激发 [Fe II] 和 [Fe III]的速率。*P*重印本**2023**，*1*，0。https://doi.org/

A 学术编辑：Alexander Kramida

版权： © 2023 作者所有。许可方：MDPI，瑞士巴塞尔。本文为开放获取文章，依据知识共享署名（CC BY）许可协议（https://creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/）的条款和条件发布。

1. 引言

PyNeb[1] [1,2] 是一种广泛使用的 Python 工具，用于分析星云等离子体中的发射线，以确定温度、密度和化学丰度 [3]。它主要通过处理包含辐射速率和碰撞速率的大型原子数据库来求解统计平衡方程；因此，PyNeb 的诊断潜力直接取决于该数据库的准确性。在这方面，其数据整理策略基于选择推荐的默认数据集，同时保留对辐射文件和碰撞文件历史档案的访问，而不是将其丢弃。这一独特方案使建模人员能够估算由于原子参数分散而导致的等离子体诊断和化学丰度不确定性。此外，它还为原子数据评估提供了灵活的环境；此前，该环境已被有效用于基准检验类氮离子和类磷离子中辐射速率的准确性，以及类碳离子中的有效碰撞强度 [4] , 并确定原子数据影响对密度诊断的作用 [5]。

作为对 [4], 的后续研究，我们运用 PyNeb 的功能评估与 [Fe II] 和 [Fe III] 跃迁阵列相关的辐射速率和碰撞速率。这些离子会在 H II区、行星状星云和类星体的光学与红外光谱中产生禁戒线，可用于确定等离子体条件和铁丰度；后者尤其适用于研究尘埃颗粒生命周期中的耗竭因子 [6–8]。这些铁跃迁阵列也有助于研究新生恒星外流所产生的激波等离子体；这些外流会形成明亮的赫比格–哈罗（HH）天体，并扰动恒星吸积 [9–11]。高分辨率

这类 HH天体的光谱，例如 HH 202S [9] 和猎户星云中的 HH 204 [11]，由紫外—可见光高分辨率阶梯光栅光谱仪（波段范围为 3100–10,400 Å） [12] 获取，为 Fe II 和 Fe III 原子数据提供了观测基准。这两个 HH天体的光学发射光谱主要由来自 θ^1 Ori C 的光电离主导； θ^1 Ori C 是猎户星云的主要电离源，因此可将这两个天体视为小尺度 H II区 [10]。

由于 Fe II 在天体物理学中的重要性，自早期采用半经验方法计算禁戒 [13] 和电偶极允许 [14] 跃迁的A值（辐射跃迁概率）以及使用扭曲波方法计算电子碰撞强度 [15,16]以来，人们一直高度关注用于该系统光谱建模的辐射和碰撞速率。本文无意评估这大量数据，而是着重关注完整、准确的数据集，以模拟星云等离子体中观测到的 [Fe II] 和 [Fe III]的光谱。

IRON 项目[2] 采用R矩阵方法 [17] 以及 SUPERSTRUCTURE [18],CIV3 [19], 和 HFR [20]等相对论多组态结构程序，对铁离子的精细结构光谱建模所需的辐射和碰撞数据开展了具有里程碑意义的系统计算。对于 Fe II 和 Fe III，计算了允许线和禁戒线的A值 [21–23] ，以及红外、光学和紫外跃迁的电子碰撞有效碰撞强度（ECS） [24–26]。尽管这些R矩阵计算最初是在LS 耦合下进行，随后通过代数变换转为中间耦合，但针对这些离子种类 [27–31]较新的散射计算采用了基于 Breit–Pauli 哈密顿量（BPRM [32], BSR [33]）和 Dirac–Fock 哈密顿量（DARC [34]）的R矩阵实现。在某些情况下，例如基态组态内能级的碰撞激发，研究人员采用多种R矩阵实现计算了低温有效碰撞强度：中间耦合框架变换（ICFT， [35]）、BPRM 和 DARC，以获得不确定度估计 [36]。

使用 CIV3 对 Fe II 和 Fe III[37–43] 中允许跃迁和禁戒跃迁的 gf 值（加权振子强度）及 A 值进行的大量多组态 Breit–Pauli（MCBP）计算表明，通过拟合实验能级能量对哈密顿矩阵进行微调修正，可以得到更准确的组态展开。然而，对于一些采用相当的多组态方法并同样实施微调修正计算的跃迁（例如 [23,44,45]），其 A 值仍存在显著差异（大于 20–30%）；这些差异源于强烈的组态混合、双激发表示，以及涉及闭合的 $3p^6$ 和开放的 $3d^n$亚壳层的细微芯价电子关联。

由于 Fe II 辐射数据的离散程度很大，实验人员和天文观测者一直致力于测量精确的辐射参数，例如寿命和分支比，以确定A值和gf值；然而，他们中的大多数研究针对的是涉及奇宇称态的允许跃迁。研究人员采用时间分辨非线性激光诱导荧光技术测量了 21 个 Fe II 能级的寿命，精度达到 2–3%；通过分支比测量，报告的绝对A值在强跃迁和弱跃迁中的误差分别不超过 6% 和 26% [46]。研究人员利用实验室和太阳光谱多重线以及理论精细结构比，确定了 142 条 Fe II 谱线的精确gf值，确保振子强度误差不再妨碍恒星丰度研究 [47]。研究人员测量了 121 条紫外 Fe II 谱线（2250– 3280 Å）的分支比，并结合已发表的寿命数据推导出gf值，并将其用于测定太阳和贫金属星 HD 84937 [48] 的铁丰度。所得结果与铁标准太阳丰度吻合良好。另一方面，唯一为推导跃迁概率而对 [Fe II] 偶宇称亚稳态进行的寿命测量，是 FERRUM 项目利用激光探测技术对储存离子束开展的测量；其分支比则由天体物理光谱推导得出 [49–51]。观测值与理论分支比之间持续存在的差异

表明， [Fe II] 谱线或可用于测定消光。

在本次数据评估中，我们修订了 PyNeb 1.1.16 中提供的 Fe II 和 Fe III 原子数据集，即能级、*A* 值和有效碰撞强度（ECS）。在大多数情况下，我们根据来源重建原子模型，并将速率映射到 NIST能级结构。我们将能级数量重新规范到预设值，以便对理论数据集与基准数据进行一一对应比较，并与 HH 202S 和 HH 204 光谱以及上述实验数据进行比较。我们还为 PyNeb数据库扩充了新的数据集，主要目标是将其作为新版本 PyNeb 1.1.17 的默认数据集。

我们在第 PyNeb2 节简要介绍其文件结构和方法，2并在第 3 节评估 Fe III 和 FeII 的数据并展开讨论，4 节随后给出结论，见第5。

2. PyNeb

本文简要介绍 PyNeb 软件包， [4], 尤其是其面向对象架构。离子对象通过 Atom 类表示，并可通过 atomicData管理器调用一组方法。对于能级、*A* 值和有效碰撞强度（ECS），PyNeb 有三种文件类型：

• *xxx*_levels.dat：列出离子种类的NIST能级xxx</style};
• *xxx*_原子_参考.dat：列出<样式 id='8'>A值，用于<样式 id='10'>xxx 离子在参考 数据集所包含的能级之间的跃迁;
• *xxx*_碰撞_*ref*.dat：列出了数据集 *xxx* 中离子*ref* 不同能级之间跃迁的有效碰撞强度。

可以使用函数 getLevelsNIST() 获取特定离子（例如 Fe III）的 NIST能级 打印输出：

```
# 调用PyNeb Python模块 import
pynebas pn # 列出 Fe III 的 NIST 能级  =
pn.getLevelsNIST('Fe3') print(levels)
```

目前可通过以下方式获取所有 Fe III 原子和碰撞文件的列表：

```
pn.atomicData.getAllAvailableFiles('Fe3')
```

['* 铁_三_原子_Q96_J00.dat', '* 铁_
三_碰撞_Z96.dat', '铁_三_原子_
BBQ10.dat', '铁_三_原子_
NP96.dat', '铁_三_碰撞_BB14.dat', '
铁_三_碰撞_BBQ10.dat']

其中，建议使用的默认文件以星号标记。用户可以通过该函数轻松访问其他文件，以替换默认文件。

```
pn.atomicData.setDataFile('fe_三_原子_BBQ10.dat')
pn.atomicData.setDataFile('fe_三_碰撞_BBQ10.dat')
```

现在可以使用新的原子数据集创建 Fe III 离子。

```
pn.atomicData.getDataFile('Fe3') Fe3=
pn.Atom('Fe',3,NLevels=34)
```

并应用一系列方法来确定其部分等离子体性质：

```
# 温度为 T = 1.0e4 K 时跃迁 2-1 的发射率，以及电子密度为 = 1.0e4 cm-3 时
Fe3.getEmissivity(tem=1.0e4,den=1.0e4,lev_i=2,lev_j=1) # 温度为 T = 1.0e4
K 时波长为 4658.17 A 的跃迁的发射率 # 以及电子密度为 = 1.0e4 cm-3 时
Fe3.getEmissivity(tem=1.0e4,den=1.0e4,wave=4658.17) # 温度为 T = 1.0e4
K 时各能级的临界密度 Fe3.getCritDensity(1.0e4) # 温度为 T = 1.0e4 K 且电子
密度为 = 1.0e4 cm-3 时的能级布居数 Fe3.getPopulations(tem=1.0e4, den=1.
0e4)
```

在上面的离子实例化命令中，optionNLevels 选项指定原子模型的能级数，可以是总能级数（默认值），也可以是一个精简的能级集合。

PyNeb 手册中列出了完整的方法清单。Atom 类还可处理离子的原子性质，例如指定温度下的 ECS。

```
# 温度为 T = 1.0e4 K 时，跃迁 2-1 的碰撞强度
Fe3.getOmega(1.0e4,2,1)
```

此函数很有用，因为它会返回指定输入温度下的插值结果，从而能够比较不同 ECS 数据集；这些数据集的表列温度范围各不相同。原始温度数组和 ECS 数组可通过以下命令列出：

```
# 原始温度数组和碰撞强度数组 Fe3.getTemArray()
Fe3.getOmegaArray()
```

3. 铁三

3.1. PyNeb 中的 *Fe*III 原子数据集

PyNeb 1.1.16 中的 Fe III 原子模型包含 34 个精细结构能级（能量 E $< 60,000\ \mathrm{cm}^{-1}$），来自 $3d^6$ 和 $3d^5 4s$ 电子组态，其属性取自 NIST 服务器（2017 年 4 月）。因此，未纳入能量为 E $> 77,000\ \mathrm{cm}^{-1}$ 的 $3d^6$ b $^1D_2$ 和 b $^1S_0$ 能级；而在 $3d^5 4s$ 组态中，仅纳入能量较低的 $^7S_3$ 和 $^5S_2$。这两种偶宇称组态的能级之间的跃迁是电偶极（E1）禁戒跃迁，因此通过电四极（E2）和磁偶极（M1）算符发生。原子模型中的能级数量（本例中为 34 个）所导致的光谱拟合缺陷，将通过与包含 144 个能级的扩展模型进行比较来考察（见第 3.2 节）。

在计算原子离子的精确辐射速率（*A* 值）和碰撞速率（ECS）时，电子关联（组态相互作用，CI）和相对论耦合是两种基本相互作用。下面简要介绍用于计算 PyNeb 1.1.16 中可用数据集的数值方法和近似方法。

原子_NP96 ——采用多组态 Breit–Pauli（MCBP）代码 SUPERSTRUCTURE [22]，在全面的组态相互作用框架下计算了电四极跃迁和 M1 跃迁的 A 值。

碰撞_Z96 ——ECS 是通过包含 $3d^6$, $3d^5 4s$ 和 $3d^5 4p$ 组态的 83 项非相对论 R 矩阵计算得到的。随后通过代数重耦合，获得了 219 个精细结构能级的 ECS [25]。

原子_Q96_J00 —采用泡利-哈特里-福克 HFR 程序计算 $3d^6$ 组态 [44] 内辐射跃迁的*A*值。通过组态相互作用展开生成波函数，并调节静电积分和自旋-轨道积分，使其符合光谱能级能量。$3d^5 4s\ ^7S_3$ 和 $^5S_2$ 能级的*A*值则采用经过经验调整的斯莱特参数 [52]，独立使用 HFR 计算得到。

原子_BBQ10, 碰撞_BBQ10—采用包含赝轨道（4*f*、5*s*、5*p*和 5*d*）的 36 组态组态相互作用展开，使用 MCBP AUTOSTRUCTURE 原子结构程序 [27,53]计算*A*值。通过引入项能修正，对波函数进行微调。基于使用 GRASP92 多组态狄拉克-哈特里-福克结构程序 [54]在扩展平均能级近似下构建的 3 组态靶，采用狄拉克-库仑*R*矩阵程序包（DARC）计算了 ECS。

碰撞_BB14 —采用 ICFT *R* 矩阵方法，基于包含 136 个项（322 个精细结构能级）的靶态表示计算了有效碰撞强度 [28]。该 MCBP 三组态靶由 AUTOSTRUCTURE 使用 Thomas–Fermi–Dirac–Amaldi 模型势生成。

*3.2. Fe*III 修订和新增原子数据集

本研究旨在修订 PyNeb 中现有的数据集、纳入新的数据集，并实施数据评估流程。为此，我们从原始来源收集数据、核验其一致性，并新增了原子文件和碰撞文件。首先，我们引入了一个新的能级文件 fe_iii_levels.dat，其中包含更新后的光谱测量数据（精度有所提高，并新增了 $3d^6\ b\ ^1D_2$ 等能级），数据来自 NIST 数据库（2022年7月） [55]。下文列出修订和新增的原子数据集，并作简要说明；现在会在数据集标签后附加后缀“_*n*”，其中 *n* 表示原子模型中的能级数。为比较数据，我们已将所有 FeIII 数据集统一为 34 个能级；但为估算模型收敛情况，我们将部分模型扩展至 144 个能级。

一个重要问题是，如何处理理论报告和光谱学报告中缺失的能级，因为 PyNeb 能级文件基于 NIST 数据库，而该数据库在较高能量范围内并不完整。在光谱建模中，衰变率为零的能级可能会导致数值问题；因此，我们将原子模型中的能级数量限制为那些既经过计算又经过测量的能级。从用户的角度来看，建模周转时间也是一个重要问题；因此，原子模型中的能级数量还必须考虑这一点。

原子_Q96_34——与第3.1 节所述的 atom_Q96_J00 数据集相比，主要差异在于涉及 $3d^5 4s\ ^7S_3$ 和 $^5S_2$ 能级的跃迁的*A*值。atom_Q96_J00 中从 $^7S_3$ 上能级衰变的跃迁，其辐射速率设为*A* = 0.0；而从 $^5S_2$ 衰变的跃迁，其辐射速率则采用经过经验调整的斯莱特参数，通过 HFR 计算得出 [52]。在本数据集中，涉及这些能级的跃迁的辐射速率已更新为 atom_BB14_34中的*A*值。鉴于表1中 $^5S_2 - {}^5D_J$ 跃迁的*A*值呈现出很大的离散性，这一选择在某种程度上具有任意性。我们还将采用 HFR 和 AUTOSTRUCTURE、通过大规模组态相互作用计算得到的*A*值（atom_FBQh16 和 atom_FBQa16）纳入比较 [45]；然而，这些数据集不够完整，无法用于模拟碰撞激发星云谱线，因此在本次数据评估中不再进一步考虑。

表1. *A*值比较：$3d^5 4s\ {}^5S_2 - 3d^6\ {}^5D_J$ 跃迁，涉及 [铁三]。 J00 中的*A*值采用半相对论 HFR 程序，并使用经验斯莱特参数 [52]计算，所得数据纳入 atom_Q96_J00 数据集（见第3.1节）。下文将介绍用于计算 atom_BBQ10_34和 atom_BB14_34 中辐射数据的方法。atom_FBQh16 和 atom_FBQa16 中的*A*值分别采用 HFR 和 AUTOSTRUCTURE，通过大规模组态相互作用计算得到 [45]。

J	λ_{air} (Å)	A 值 (s^{-1})				
		J00	BBQ10_34	BB14 34_	FBQh16	FBQa16
4	2438.28	22.2	25.7	38.4	32.0	31.6
3	2464.48	16.0	18.7	28.0	23.3	23.1
2	2483.01	11.0	12.8	19.1	15.9	15.8
1	2495.01	6.4	7.43	11.1	9.29	9.22
0	2500.93	2.0	2.44	3.66		

碰撞_Z96_34 ——与原始出版物相关的补充数据中列出的 ECS [25] 直接从 CDS 下载，用于构建新文件（计算详情见第 3.1 节）。

碰撞_Z96_144 ——碰撞_Z96_34数据集已扩展，纳入了来自 $3d^6$,$3d^5 4s$ 和 $3d^5 4p$ 组态的 144 个能级，$E < 121$为 500 cm^{-1}。在更高能量下，报告的实测和计算能级列表开始出现不一致。尽管预计这一模型扩展不会影响碰撞激发星云谱线，但如果 $3d^5 4p$ 能级的布居产生电偶极跃迁阵列，则可能与之相关。

原子_DH09_34 ——*A*值已通过 MCBP程序 CIV3 [19,56]在涵盖单激发和双激发 [38]的组态相互作用方案中计算，涉及 $3d^6$ 组态能级之间的电四极跃迁和磁偶极跃迁。为提高准确度，对哈密顿矩阵的对角元素进行了微调，使其符合实验能量。与原子_Q96_34类似，涉及 $3d^5 4s\ {}^7S_3$ 和 $^5S_2$ 能级跃迁的*A*值取自原子_BB14_34。

原子_BBQ10_34，碰撞_BBQ10_34 —*A*-值和有效碰撞强度下载自 XSTAR 数据库 [57], ，并重新构建了 PyNeb 原子和碰撞数据文件。

原子_BB14_34，碰撞_BB14_34 —计算得到的 *A*-值和有效碰撞强度取自`crlike_nrb13#fe2.dat adf04` 文件，该文件下载自OPEN-ADAS[3] 数据库。有效碰撞强度计算的详情 [28] 见第3.1节。`adf04`文件未提供辐射数据的来源信息，因此我们假定这些数据是靶计算的副产品。

原子_BB14_144，碰撞_BB14_144 —BB14_34模型已扩展至包含 144 个能级，涵盖 $3d^6$, $3d^5 4s$ 和 $3d^5 4p$ 组态，能量为$E < 121$，500cm^{-1}。

*3.3. Fe*III 观测基准数据

3.3.1. *A* 值比率基准

众所周知，来自共同上能级的两条谱线的强度比可表示为

$$\frac{I(j,i)}{I(j,i')} = \frac{A(j,i)}{A(j,i')} \times \frac{\lambda(j,i')}{\lambda(j,i)} \tag{1}$$

实现对理论 *A*值比 $A(j,i)/A(j,i')$ 的观测基准。该测量为观测强度和计算的辐射速率的准确性提供了指示，标示出应从光谱拟合中排除的不可靠谱线。

在表2 和3中，我们将 HH 202S 和 HH 204 [9,11] 的观测谱线强度比与*A*-值比进行比较，后者来自 BBQ10_34、BB14_34、DH09_34和 Q96_34

原子文件。HH 202S 的观测强度比相对不确定度通常大于 HH 204。尽管两者的光谱质量相当，但 HH204 是在光度观测条件下观测的，因此绝对定标误差略小；此外，HH 204 的积分发射覆盖面积是 HH 202S 的两倍，且曝光时间更长。

对于这两个源，来自 $3d^6\ a\ ^3F/or$ 或更低能级、并终止于基态组态 $3d^6\ a\ ^5D$ 内某个能级的跃迁（波长为$\lambda > 4600$ Å），其观测强度比通常更准确（误差小于 15%）。对于来自更高能级的跃迁，所列不确定性最高可达 70%。另一方面，除原子_BBQ10_34中差异显著的情况外，大多数理论比值的偏差在 10% 以内：$I(\lambda3286)/I(\lambda8729)$；$I(\lambda3366)/I(\lambda9960)$；以及$I(\lambda3357)/I(\lambda8838)$。总体而言，理论比值均落在观测比值的误差范围内，只有 HH 202S 中一些存疑的谱线（$\lambda8729$，受地球大气吸收影响）以及 HH 204 中的谱线例外（$\lambda\lambda4080$，4097 与 O II 谱线混合；$\lambda\lambda7078$，7088、9204 为误认）。

表 2。 HH202S 中观测值 (Obs) 的 [Fe III] 谱线强度比与 BBQ10_34、BB14_34、DH09_34 和 Q96_34 原子文件中的 *A* 值所估算的谱线强度比的比较；这些跃迁具有共同上能级。观测强度比最低有效位的误差标注在括号内。

谱线1			谱线2		Obs	BBQ10_34	BB14 34_	DH09 34_	Q96_34
上能级	下能级	λ_{air}(Å)	下能级	λ_{air}(Å)	谱线强度比				
$3d^6\ ^3D_3$	$3d^6\ ^5D_4$	3239.79	$3d^6\ ^5D_3$	3286.24	4(1)	3.58	3.59	3.28	3.60
$3d^6\ ^3D_3$	$3d^6\ ^5D_3$	3286.24	$3d^6\ a\ ^3P_2$	8728.84	2.0(5)	4.88	3.12	3.80	3.29
$3d^6\ ^3D_1$	$3d^6\ ^5D_1$	3355.50	$3d^6\ ^5D_0$	3366.22	1.6(8)	1.13	1.12	1.16	1.14
$3d^6\ ^3D_1$	$3d^6\ ^5D_0$	3366.22	$3d^6\ a\ ^3P_1$	9959.85	5(4)	9.07	5.42	6.37	5.54
$3d^6\ ^3D_2$	$3d^6\ ^5D_2$	3334.95	$3d^6\ ^5D_1$	3356.59	1.2(2)	1.14	1.15	1.20	1.18
$3d^6\ ^3D_2$	$3d^6\ ^5D_1$	3356.59	$3d^6\ a\ ^3P_2$	8838.14	4.1(8)	6.01	4.28	4.39	4.19
$3d^5 4s\ ^7S_3$	$3d^6\ ^5D_4$	3322.47	$3d^6\ ^5D_3$	3371.35	1.4(3)	1.38	1.37		
$3d^5 4s\ ^7S_3$	$3d^6\ ^5D_3$	3371.35	$3d^6\ ^5D_2$	3406.11	2.2(5)	2.33	2.31		
$3d^6\ ^3G_3$	$3d^6\ ^5D_3$	4046.49	$3d^6\ ^5D_2$	4096.68	2.3(8)	2.27	2.45	2.56	2.53
$3d^6\ ^3G_4$	$3d^6\ ^5D_4$	4008.34	$3d^6\ ^5D_3$	4079.69	3.8(7)	3.15	3.63	3.62	3.92
$3d^6\ a\ ^3F_2$	$3d^6\ ^5D_3$	4667.11	$3d^6\ ^5D_2$	4734.00	0.29(4)	0.28	0.28	0.29	0.28
$3d^6\ a\ ^3F_2$	$3d^6\ ^5D_2$	4734.00	$3d^6\ ^5D_1$	4777.70	2.0(3)	2.06	2.07	2.09	2.08
$3d^6\ a\ ^3F_3$	$3d^6\ ^5D_4$	4607.12	$3d^6\ ^5D_3$	4701.64	0.19(3)	0.18	0.18	0.19	0.17
$3d^6\ a\ ^3F_3$	$3d^6\ ^5D_3$	4701.64	$3d^6\ ^5D_2$	4769.53	2.8(3)	2.89	2.90	2.93	2.94
$3d^6\ a\ ^3F_4$	$3d^6\ ^5D_4$	4658.17	$3d^6\ ^5D_3$	4754.81	5.3(6)	5.28	5.40	5.32	5.49
$3d^6\ a\ ^3P_1$	$3d^6\ ^5D_2$	5011.41	$3d^6\ ^5D_0$	5084.85	5.9(9)	5.72	6.12	5.97	5.95
$3d^6\ ^3H_4$	$3d^6\ ^5D_4$	4881.07	$3d^6\ ^5D_3$	4987.29	5.4(7)	4.99	5.33	5.50	5.76
$3d^6\ a\ ^3P_2$	$3d^6\ ^5D_3$	5270.57	$3d^6\ ^5D_1$	5412.06	11(2)	10.2	11.4	11.4	11.0

表3。 HH204 中观测到的 [Fe III] 谱线强度比（观测值），针对共享共同上能级的跃迁，与根据 BBQ 10_34、BB14_34、DH09_34 和 Q96_34原子文件中的*A*值估算的结果进行比较。观测强度比最低有效位的误差以括号标出。

谱线1			谱线2		Obs	BBQ10_34	BB14 34_	DH09 34_	Q96_34
上能级	下能级	λ_{air}(Å)	下能级	λ_{air}(Å)	谱线强度比				
$3d^6\ ^3D_3$	$3d^6\ ^5D_4$	3239.79	$3d^6\ ^5D_3$	3286.24	3.6(9)	3.58	3.59	3.28	3.60
$3d^6\ ^3D_3$	$3d^6\ ^5D_3$	3286.24	$3d^6\ ^5D_2$	3319.27	1.0(4)	1.35	1.36	1.47	1.41
$3d^6\ ^3D_3$	$3d^6\ ^5D_2$	3319.27	$3d^6\ a\ ^3P_2$	8728.84	3.1(8)	3.62	2.30	2.59	2.35
$3d^6\ ^3D_1$	$3d^6\ ^5D_1$	3355.50	$3d^6\ ^5D_0$	3366.22	1.5(3)	1.13	1.12	1.16	1.14
$3d^6\ ^3D_2$	$3d^6\ ^5D_2$	3334.95	$3d^6\ ^5D_1$	3356.59	1.2(3)	1.14	1.15	1.20	1.18
$3d^6\ ^3D_2$	$3d^6\ ^5D_1$	3356.59	$3d^6\ a\ ^3P_2$	8838.14	5.3(7)	6.01	4.28	4.39	4.19
$3d^6\ ^1I_6$	$3d^6\ ^3H_6$	9701.87	$3d^6\ ^3H_5$	9942.38	1.4(2)	1.58	1.54	1.56	1.55
$3d^54s\ ^7S_3$	$3d^6\ ^5D_4$	3322.47	$3d^6\ ^5D_3$	3371.35	1.5(2)	1.38	1.37		
$3d^54s\ ^7S_3$	$3d^6\ ^5D_3$	3371.35	$3d^6\ ^5D_2$	3406.11	1.7(2)	2.33	2.31		
$3d^6\ ^3G_3$	$3d^6\ ^5D_3$	4046.49	$3d^6\ ^5D_2$	4096.68	3.4(9)	2.27	2.45	2.56	2.53
$3d^6\ ^3G_4$	$3d^6\ ^5D_4$	4008.34	$3d^6\ ^5D_3$	4079.69	4.4(4)	3.15	3.63	3.62	3.92
$3d^6\ a\ ^3F_2$	$3d^6\ ^5D_3$	4667.11	$3d^6\ ^5D_2$	4734.00	0.29(1)	0.28	0.28	0.29	0.28
$3d^6\ a\ ^3F_2$	$3d^6\ ^5D_2$	4734.00	$3d^6\ ^5D_1$	4777.70	2.1(1)	2.06	2.07	2.09	2.08
$3d^6\ a\ ^3F_3$	$3d^6\ ^5D_4$	4607.12	$3d^6\ ^5D_3$	4701.64	0.18(1)	0.18	0.18	0.19	0.17
$3d^6\ a\ ^3F_3$	$3d^6\ ^5D_3$	4701.64	$3d^6\ ^5D_2$	4769.53	2.9(1)	2.89	2.90	2.93	2.94
$3d^6\ a\ ^3F_4$	$3d^6\ ^5D_4$	4658.17	$3d^6\ ^5D_3$	4754.81	5.3(2)	5.28	5.40	5.32	5.49
$3d^6\ a\ ^3P_1$	$3d^6\ ^5D_2$	5011.41	$3d^6\ ^5D_0$	5084.85	5.9(4)	5.72	6.12	5.97	5.95
$3d^6\ ^3H_4$	$3d^6\ ^5D_4$	4881.07	$3d^6\ ^5D_3$	4987.29	6.1(2)	4.99	5.33	5.50	5.76
$3d^6\ a\ ^3P_2$	$3d^6\ ^5D_3$	5270.57	$3d^6\ ^5D_1$	5412.06	10.8(5)	10.2	11.4	11.4	11.0

3.3.2. [Fe III] 光谱拟合

沿用 [4], 我们利用 PyNeb用于发射线建模的方法，进一步建立观测基准，以评估第 3.1 和 3.2 节所述原子数据集的准确性。为此，我们再次使用明亮的 HH 202S 和 HH204 源的高分辨率光谱。

按照 [58] 的方法，对所有可靠谱线进行最小二乘拟合，得到 HH 天体的电子温度和密度。每条谱线的理论发射率和观测强度分别以跃迁组的发射率总和和强度总和进行归一化。拟合度量定义为

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(I_i - \epsilon_i)^2}{N\sigma_{I_i}^2}\,, \tag{2}$$

其中，N 为谱线数，I_i 和 ϵ_i 分别为归一化强度和发射率，$\sigma_{I_i}^2$ 为归一化强度的方差 [59]。理论发射率未考虑显式误差。使用 Python 函数 scipy.optimize.minimize 进行最小二乘最小化，在 χ^2 收敛过程中未发现退化现象。

PyNeb 提供两种方法来计算 Fe III 中能级 $i = 6$ 和 $j = 2$ 之间谱线（例如 λ5270.57）的发射率，温度和电子密度分别为(T_e, n_e)。例如，可使用原子数据集 atom_Q96_J00 和碰撞数据集 coll_Z96。运行这两种方法（e1 和 e2）的 Python 命令如下：

```
# 调用 PyNeb Python模块import pyneb as pn# 选择辐射和碰撞
数据集pn.atomicData.setDataFile('fe_iii_atom_Q96_J00.dat')
pn.atomicData.setDataFile('fe_iii_coll_Z96.dat')# 实例化 Fe
IIIFe3=pn.Atom('Fe',3)# 检查数据文件print(Fe3)# 计算并打印两
种发射率e1=Fe3.getEmissivity(tem=1.e4,den=1.0e4,wave=5270.
57)e2=Fe3.getEmissivity(tem=1.e4,den=1.0e4,lev_i=6,lev_j=2)
print(e1,e2)
```

在本研究中，我们测试了整个光谱中电偶极跃迁和电四极跃迁的一致性，以避免错误的谱线识别，但发现电四极跃迁避免了能级数量较多的原子模型中波长相同的跃迁问题。

在 HH 202S 和 HH 204 的光谱拟合中，由于存在以下问题，少数谱线被排除：

- 误认： $\lambda\lambda$7078、7088、9204
- 谱线混叠或地球大气污染 [9]: $\lambda\lambda$4080, 4097, 4925, 4931, 4987, 8729, 8838
- 较小的A值（$\lesssim 10^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$）： $\lambda\lambda$4008, 4047.

我们首先在表 4中考察使用 PyNeb 1.1.16 中可用原子数据集进行的光谱拟合（见第 3.1 节）。对于 BBQ10、BB14 和 Z96 这三个碰撞数据集，我们依次使用三个原子数据集进行拟合：BBQ10、NP96 和 Q96_J00。对于 HH 202S，我们得到的平均温度和密度分别为 $T_e = (7 \pm 1) \times 10^3\,\mathrm{K}$ 和 $n_e = (6 \pm 5) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，这表明原子数据带来了较大的不确定性。尤其是，碰撞数据集_BB14 平均给出了值得怀疑的低温度（$5.4 \times 10^3\,\mathrm{K}$）和高密度（$1.3 \times 10^5\,\mathrm{cm}^{-3}$）。总体而言，拟合质量较差，

其中最佳结果是原子_BBQ10–碰撞_Z96，数值为 $\chi^2 = 1.74$。HH 204 的拟合结果同样不理想：$T_e = (8 \pm 2) \times 10^3$ K) 和 $n_e = (5 \pm 4) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$；最佳结果（$\chi^2 = 16.9$）来自文件组合原子_BBQ10–碰撞_Z96。

表 4. 使用 PyNeb 1.1.16 中可用的辐射（atom）和碰撞（coll）数据集，对 HH 202S 和 HH204 的 [Fe III] 观测光谱进行温度和密度拟合。

数据集		HH 202S			HH 204		
Atom	**Coll**	温度$_e$(10^3 开尔文)	n_e(10^4 厘米$^{-3}$)	χ^2	温度$_e$(10^3 K)	n_e(10^4 cm^{-3})	χ^2
BBQ10	BBQ10	7.99	1.92	12.0	9.77	1.53	66.9
NP96	BBQ10	8.37	3.79	13.9	10.5	2.24	57.2
Q96_J00	BBQ10	7.80	1.96	14.4	9.60	1.36	58.1
BBQ10	BB14	5.26	13.1	14.9	5.95	11.3	88.7
NP96	BB14	5.54	16.8	15.3	6.15	10.5	60.2
Q96_J00	BB14	5.26	8.54	15.8	5.95	5.51	60.4
BBQ10	Z96	7.34	2.52	1.74	8.53	1.70	16.9
NP96	Z96	7.44	7.09	15.2	9.54	4.20	69.9
Q96_J00	Z96	7.35	2.55	12.0	8.79	1.68	37.7

类似地，我们通过使用不同的原子—碰撞数据文件对进行一组拟合，来对第3.2节所述的修订数据集和新数据集进行基准测试：四个辐射数据集和三个碰撞数据集（见表5）。改进相当显著；HH 202S 的平均温度和密度现在为 $T_e = (7.9 \pm 0.3) \times 10^3$ K 和 $n_e = (2.1 \pm 0.3) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，HH 204 的平均温度和密度则为 $T_e = (8.9 \pm 0.6) \times 10^3$ K 和 $n_e = (1.5 \pm 0.3) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$。使用原子_DH09_34–碰撞_Z96_34 和原子_Q96_34–碰撞_Z96_34 数据集对，可获得 HH 202S 的出色拟合；修订后的碰撞_BB14_34 有效碰撞强度数据集现在给出了更合理的温度（$\sim 8 \times 10^3$ K）和密度（$\sim 2 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$）。我们发现，碰撞_BB14 与碰撞_BB14_34 在涉及 a ^{3}PJ、a ^{3}FJ 和 a $^1G_4$能级的跃迁中，有效碰撞强度存在值得怀疑的差异；此外，对于 $E > 43,000\,\mathrm{cm}^{-1}$ 的能级，碰撞_BB14 中的有效碰撞强度为 $\Upsilon(j, i) = 0.0$。我们还发现，碰撞_BBQ10 和碰撞_BBQ10_34 中，跃迁至 $3d^5 4s\,^7S_3$ 能级的有效碰撞强度存在差异，这是由于 [27] 在论文发表后进行了改进。另一方面，扩展后的原子_BB14_144、碰撞_BB14_144和碰撞_Z96_144数据集，正如预期，在这些等离子体条件下不会造成差异。

温度和密度的离散度现已分别控制在 6% 和 20% 以内，我们的平均值与观测论文 [9,11] 中采用的数值相符，分别为 HH 204 的 $T_e = (8.760 \pm 0.180) \times 10^3$ K 和 $n_e = (1.354 \pm 0.121) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，以及 HH 202S 的 $n_e = (1.743 \pm 0.236) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$。论文未给出后者采用的温度，但我们的平均值与其 T_e([S II]) $= (8.25 \pm 0.54) \times 10^3$ K、T_e([Ar III]) $= (8.26 \pm 0.41) \times 10^3$ K 和 T_e(He I) $= (7.95 \pm 0.20) \times 10^3$ K 相符。

表5。使用改进或新增的辐射（原子）和碰撞（coll）数据集，对 HH 202S 和 HH204 的 [Fe III] 观测光谱进行温度和密度拟合。

数据集		HH 202S			HH 204		
Atom	**Coll**	温度$_e$(10^3 K)	ne(10^4 厘米$^{-3}$)	χ^2	温度$_e$(10^3 K)	ne(10^4 cm^{-3})	χ^2
BBQ10_34	BBQ10_34	7.68	1.94	6.31	9.49	1.51	47.6
BB14 34_	BBQ10_34	8.24	1.80	3.84	9.91	1.44	28.1
DH09 34_	BBQ10_34	7.94	1.31	2.24	9.25	0.82	21.8
Q96_34	BBQ10_34	7.97	1.66	3.54	9.39	1.19	35.6
BBQ10_34	BB14 34_	7.83	2.17	5.57	9.01	2.16	50.0
BB14_34	BB14_34	8.47	2.14	4.56	9.03	1.49	33.2
DH09_34	BB14_34	8.18	1.78	3.23	9.00	1.16	9.95
Q96_34	BB14 34_	8.12	1.91	3.97	8.97	1.49	11.9
BBQ10_34	Z96 34_	7.34	2.51	1.74	8.53	1.71	16.9
BB14_34	Z96_34	7.94	2.32	2.54	8.23	1.61	28.5
DH09_34	Z96_34	7.71	1.97	0.68	8.34	1.30	4.36
Q96_34	Z96 34_	7.68	2.24	1.00	8.11	1.73	4.62
BB14_144	BB14_144	8.47	2.12	4.57	9.03	1.49	33.2
BB14_144	Z96_144	7.94	2.33	2.54	8.24	1.61	28.5

3.3.3. 线比诊断

线比诊断广泛用于星云天体物理学，以确定等离子体的热力学性质（温度、密度和离子丰度）。其依据的假设是，观测到的线强度比等同于理论发射率比

$$\frac{I(j,i)}{I(j,i')} = \frac{\epsilon(j,i)}{\epsilon(j,i')} \,. \tag{3}$$

使用经过基准验证的 [Fe III]，原子数据集，我们探究原子数据散布对线比温度和密度变化特征的影响。

一种常用的 [Fe III] 发射率比，可用于确定 $3 \leq \log n_e \leq 6$ 范围内的等离子体密度，即 I(λ4658)/I(λ4702)（例如参见 [10,11]）。图1展示了该比值对原子数据的依赖关系。左图中，我们选用 atom_DH09_34 数据集，并绘制 I(λ4658)/I(λ4702) 随密度的变化曲线，对比三种碰撞数据集：BBQ10_34、BB14_34 和 Z96_34。在低密度区域（$\log n_e < 4$）差异很大，尤其是碰撞数据集 coll_BBQ10_34 的结果（在 $\log n_e < 3$ 时比 coll_Z96_34 低 40%）。右图中，我们选用 coll_Z96_34 数据集，并绘制四种原子数据集对应的发射率比：DH09_34、BBQ10_34、BB14_34 和 Q96_34。差异没有那么大，其中 atom_BBQ10_34 偏离最大（在 $\log n_e < 3$ 时低 $\sim$ 15%）。

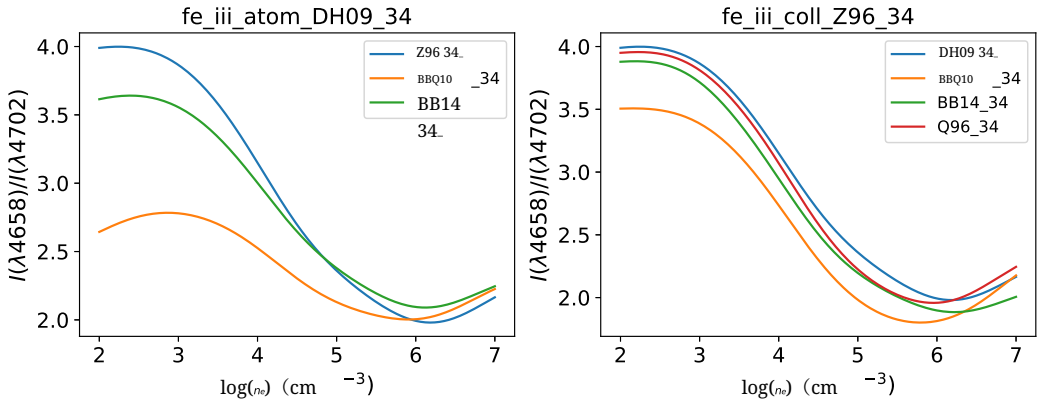


图1. 不同原子数据集下，$T_e = 79 \times 10^3$ K 时 [Fe III] $I(\lambda4658)/I(\lambda4702)$ 发射率比的密度变化。**左图**：atom_DH09_34 数据集与三个碰撞数据集（Z96_34、BBQ10_34 和 BB14_34）。**右图**：coll_Z96_34数据集与四个原子数据集（DH09_34、BBQ10_34、BB14_34 和 Q96_34）。

对于 $\log n_e \leq 3$，发射率比 I(λ4658)/I(λ4702) 几乎不受密度影响，主要取决于相关原子能级的有效碰撞强度。为根据碰撞数据集造成的差异，辨别该区域内可靠的数值，我们从 DESIRED 数据库（Méndez-Delgado 等人，未发表）中选取以下低密度源：30 Doradus [60]；Sh 2-311 [61]；M20 [62]；M17 [63]；HII-1、HII-2、UV-1 [64]；K932、NGC 5461、NGC 604、NGC 2363、NGC 4861、NGC 1741-C、NGC 5447、VS44、H1013 [65]；NGC 3125、POX 4、TOL 1924-416、TOL 1457-262、NGC 6822 (HV)、NGC 5408 [66]；Sh 2-100、Sh 2-288 [67]；NGC 5471、NGC 5455 [68], Sh 2-152 [69]；以及 N44C、N11B、N66A、NGC 1714、IC 2111、N81 [70]。随后，我们在图 2 中绘制观测到的谱线强度比随 [S II] 密度的变化。尽管数据存在离散，I(λ4658)/I(λ4702) > 3.5 呈现出明确的趋势，这将进一步支持碰撞数据集 coll_BB14_34 和 coll_Z96_34 的可靠性。

关于一个实用的 [铁三] 温度诊断，我们选择$I(\lambda4658)/I(\lambda3240)$，因为它受密度和原子数据变化的影响较小。图3展示了该发射率比随温度的变化，所用的原子–碰撞网格与密度诊断中相同。曲线表明，该比值对所选碰撞数据集和辐射数据集的依赖性较弱。

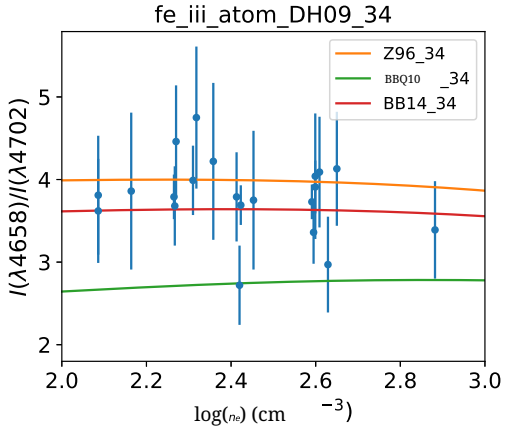


图 2. 几个低密度源的观测值 [Fe III] $I(\lambda4658)/I(\lambda4702)$ 线强度比随 [S II] 密度的变化。还展示了使用 PyNeb 通过 atom_DH09_34 数据集和三个碰撞数据集（BBQ10_34、BB14_34 和 Z96_34）确定的理论发射率比。

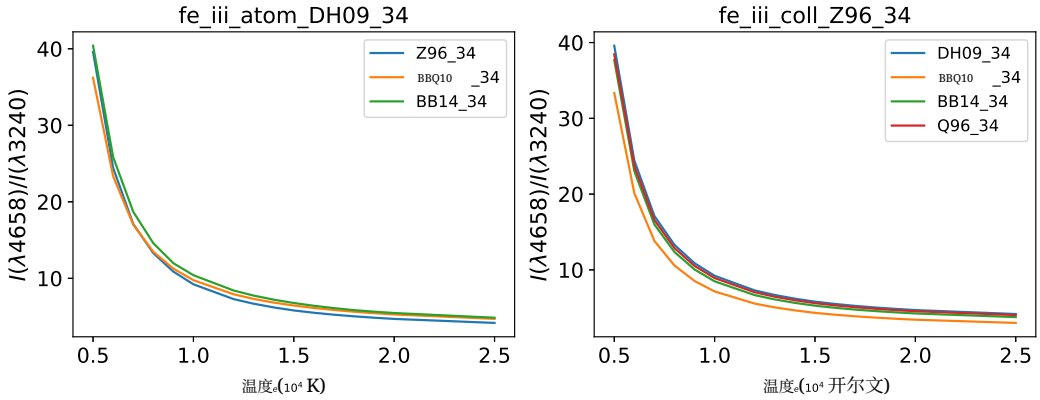


图3. [Fe III] $I(\lambda4658)/I(\lambda3240)$ 发射率比随温度的变化，$n_e = 2.1 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，不同原子数据集的比较。**左图**：原子数据集_DH09_34，搭配三个碰撞数据集（Z96_34、BBQ10_34和BB14_34）。**右图**：碰撞数据集_Z96_34，搭配四个原子数据集（DH09_34、BBQ10_34、BB14_34和Q96_34）。

一个相关的问题是，分别根据 I(λ4658)/I(λ4702) 和 I(λ4658)/I(λ3240) 线比得到的密度和温度估计，是否与第3.3.2节所述光谱拟合得到的估计相符。以 HH202S 为例，观测到的 I(λ4658)/I(λ4702) 为 $= 2.81$，I(λ4658)/I(λ3240) 为 $= 13.6$。在密度诊断中，我们将温度设为 $T_e = 7.9 \times 10^3$ K，得到原子_DH09_34–碰撞_Z96_34 这一组合的密度为 $n_e = 2.34 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，以及原子_DH09_34–碰撞_BB14_34这一组合的密度为 $n_e = 1.86 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$；这两个值分别与拟合得到的 $n_e = 1.97 \times 10^4\mathrm{cm}^{-3}$ 和 $n_e = 1.78 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$较为接近。然而，如果指定原子_DH09_34–碰撞_BBQ10_34这一组合，理论上的 I(λ4658)/I(λ4702) 为 < 2.78，便无法据此诊断 HH 202S 的密度。此外，若将密度设为 $n_e = 2.1 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，则根据温度诊断，原子–碰撞对 DH09_34–Z96_34、DH09_34–BBQ10_34 和 DH09_34–BB14_34 分别得到 7.89×10^3 K、7.95×10^3 K 和 8.33×10^3 K，与光谱拟合得到的 7.71×10^3 K、7.94×10^3 K 和 8.18×10^3 K 相符。

*3.4. 3d*3d^6 和 *3d*3d^{5}4s 能级的辐射寿命

如前所述，[Fe III] 星云光谱显示了 3d^6 和 3d^{5}4s 组态能级之间的跃迁。PyNeb Fe III 原子模型基于最低的 34 个能级，能量低于$E < 60,000\ \mathrm{cm}^{-1}$；也就是说，截断点设在 3d^{5}4s 能级组起始处之前。因此，在本次寿命分析中，我们不考虑能量为 77,044.67 cm^{-1} 的 3d^6 b^{1}D$_2$ 能级，以及理论估算能量为$E > 99,000\ \mathrm{cm}^{-1}$、未被观测到的 3d^6 ^{1}S$_0$ 能级。对于 3d^{5}4s 组态，仅考虑能量较低的 ^{7}S$_3$ 和 ^{5}S$_2$ 能级。

图4比较了由原子数据集 BB14_34、BBQ10_34、DH09_34 和 Q96_34 中 A值推导出的辐射寿命。对于每个能级，我们计算了这四个数据集相对于平均值的寿命差异。总体而言，这些差异在 0.1 dex 以内，但原子数据集 BB_ 中有五个能级、BBQ_ 中有九个能级，以及 DH_ 和 Q_ 中各有两个能级例外。值得注意的是，3d^6 ^{3}HJ 能级存在较大的差异（最大达∼ 0.8 dex），这会影响根据 λλ4881、4987、4924、5032、4986 谱线强度推导出的物理条件和 Fe^{2+} 丰度。此外，原子数据集 BB_中的 3d^6 b ^{3}PJ 能级，以及 BBQ_中的 3d^6 a ^{3}P$_2$ 和 a ^{1}G$_4$ 能级，其寿命低了近 0.2 dex。这两个数据集在 3d^{5}4s ^{7}S$_3$ 和 ^{5}S$_2$ 能级上的差异也十分显著。令人宽慰的是，原子数据集 DH_和 Q_的寿命彼此吻合：除存在问题的 ^{3}HJ 能级外，差异均在 20% 以内。这项比较得出的大多数结论都与 [27]一致。

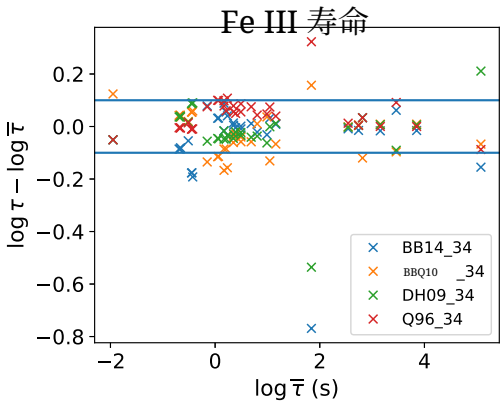


图4。 根据原子数据集 BB14_34、BBQ10_34、DH09_34 和 Q96_34 原子文件中的A值计算得到的 Fe III 辐射寿命比较。对于每个能级，将这些数据集相对于平均值的寿命差异作为平均值的函数绘制出来。

3.5. 辐射寿命的$3d^5 4p$ 能级

除偶宇称能级外，原子数据集_BB14_144 包含 44 个属于 $3d^5 4p$ 构型的奇宇称能级。其辐射寿命可与采用包含大量组态相互作用的计算（单激发和双激发延伸至A值，并包括 $n \leq 5$、$\ell \leq 3$和 6p，以及从 3s 和 3p 亚壳层进行的选择性激发）通过MCBP 代码 CIV3 [39]得出的寿命进行比较。如图5所示，原子数据集 BB_的寿命平均短 0.15 dex。差异较大的能级属于 $3d^5(^4P)4p\ ^3P^o$、$3d^5(^4P)4p\ ^5P^o$和 $3d^5(^4D)4p\ ^5F^o$ 光谱项。

3.6. 有效碰撞强度

如表5所示，我们有三个修订后的碰撞数据集，其中包含 [Fe III] 34能级原子模型的 ECS：Z96_34、BBQ10_34 和 BB14_34。在图 6 中，我们以后一数据集为参照，对比了温度为 $T = 10^4$ K 时的这些数据。总体而言，大多数跃迁的数据吻合较好，但其他若干跃迁则存在巨大差异。涉及 $3d^5(^6S)4s\ ^7S_3$ 能级的跃迁存在问题。例如，在图 6（右图）中，我们排除了碰撞数据集_Z96_34 中类型为 $3d^5(^6S)4s\ ^7S_3 - 3d^6\ ^1L_J$ 的跃迁，因为这些跃迁的 ECS 值为 $\Upsilon = 0.0$；此外，碰撞数据集_Z96_34 中自旋为 $\Delta S = 3/2$ 的跃迁，其 ECS 异常小（$\log \Upsilon < -4$）。这些缺陷可能源于 [25] 所采用的非相对论方法。另一方面，如 [28], 中所述，碰撞数据集_BBQ10_34 和碰撞数据集_BB14_34的 ECS 主要差异，是前者在指认 $3d^5(^6S)4s\ ^7S_3$ 与相邻的 $3d^6\ ^3G_3$ 能级时出现了混淆。类型为 $3d^6\,a\,^3P_J - 3d^6\ ^3H_{J'}$ 和 $3d^6\,b\,^1G_4 - 3d^6\ ^5D_J$的跃迁也存在显著差异。

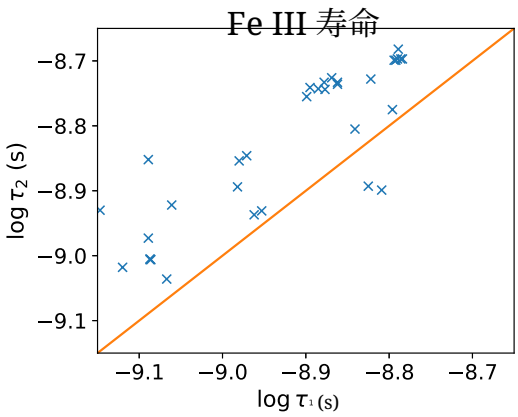


图 5。 比较 $3d^5 4p$ 构型中铁三 的 44 个能级的辐射寿命，这些寿命源自 原子_BB14_144 （τ_1）以及参考文献 [39] （τ_2）。

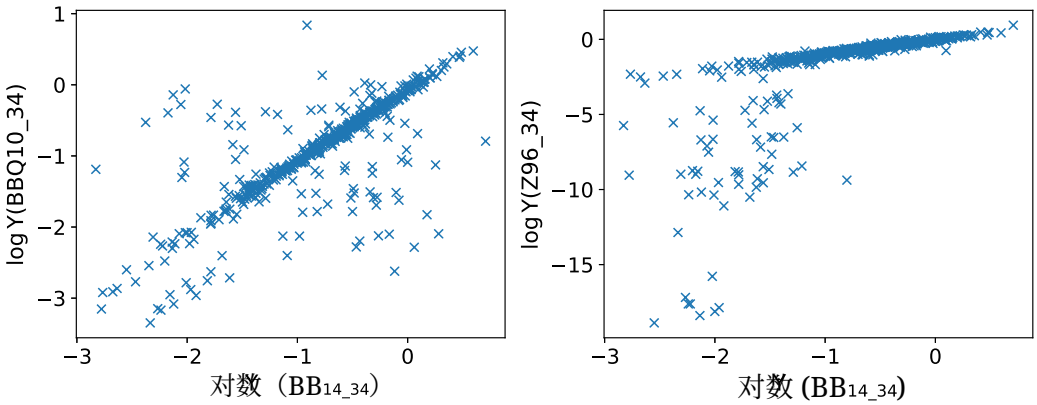


图 6. 与 coll_BB10_34 相比， [Fe III] 在温度 $= 10^4$ K 下，coll_BBQ10_34 和 coll_Z96_34 数据集中的有效碰撞强度（ECS）对比。

*3.7. Fe*三 讨论

本次原子数据评估的第一步，是比较观测到的线强度比与共同上能级跃迁对应的理论*A*值比（见第3.3.1节）。这一过程能迅速初步揭示观测谱线的误认、谱线混合和污染（例如地球大气或仪器造成的污染），以及固有的计算困难，例如强烈的价电子-芯电子关联、双激发耦合和强烈的组态相互作用混合。因此，理论比值之间的一致性，以及观测比值与理论比值之间的一致性，都具有重要启示。

尽管 HH202S 和 HH 204 的光谱质量相当，但前者报告的观测误差平均比后者更大（36 % 对比 12%）。理论*A*值比值之间的比较，以及与观测对应值的比较表明，理论比值的总体准确度约为 20–30%，但第3.3.1 节中指出的异常理论离群值除外，这些异常值被认为是由前述计算困难造成的。

第 3.3.2 节中进行的光谱拟合凸显了建模代码中一个常见的缺陷：将辐射或碰撞数据集映射到能级编号不同的原子模型时容易出错，如数据集 coll_BB14 的情况所示，最终导致文件弃用。四种修订后的 原子 数据集（BBQ10_34、BB14_34、DH09_34、Q96_34）和三种 碰撞 数据集（BBQ10_34、BB14_34、Z96_34）给出的温度和密度似乎具有可比性，其误差带

分别为 6% 和 20%；这些结果也与通过 [Fe III] 线比诊断（例如 I(λ4658)/I(λ4702) 和 I(λ4658)/I(λ3240)，见第 3.3.3 节）以及 [9,11] 中报告的其他离子诊断得到的估算值相当吻合。然而，使用 coll_BBQ10_34 计算的密度敏感比值 I(λ4658)/I(λ4702)，与低密度（$\log n_e \lesssim 3$）星云源中观测到的比值不符（见图 2）。

如3.4节所示，使用 BBQ10_34、BB14_34、DH09_34和 Q96_34 原子数据集中的A值计算得到的 $3d^6$ 和 $3d^54s$ 组态能级的辐射寿命，彼此相差不超过 ~ 0.1 dex，但 $3d^6\ ^3H_J$ 和 $3d^54s\ ^7S_J$,$^5S_2$除外。不过，结构计算得出的A值之间吻合最佳（$\sim 20\%$），即 atom_DH09_34 和 atom_Q96_34，而非与散射靶相关的值。这可能是由于各类计算中所采用的组态相互作用展开的收敛性和准确度不同所致。例如，在 Fe III 中计算涉及 $3d^6$ 和 $3d^54s$ 组态能级的跃迁辐射寿命时，结构计算无需纳入奇宇称组态；而在 Fe III 散射靶中，则必须考虑一组精简的、包含两种宇称类型的组态。对于 $3d^54p$ 能级的寿命（见3.5节），也可以作类似解释：与耗时较长的 MCBP 结构计算 [39]相比，atom_BB14_144 给出的寿命平均更短。

第 3.6 节的 ECS 比较主要发现是，某些 log_Z96_34 ECS 与碰撞_BB14_34 之间的跃迁存在显著差异 $\Upsilon < -1$（见图 6），这可能是由于计算前一个数据集时采用了非相对论 R矩阵方法。碰撞 [25]BBQ10_34 与碰撞_BB14_34 之间较大的 ECS 差异主要源于能级错配。

分析这些数据比较和光谱拟合的结果后，我们将 PyNeb 1.1.17 中用于 [Fe III] 的默认数据集设为原子_BB14_144 和碰撞_BB14_144 文件，而碰撞_BBQ10 和碰撞_BB14 文件已弃用。弃用的文件仍可通过命令 pn.atomicData.includeDeprecatedPath() 使用。原子_BBQ10 和碰撞_Z96 文件仍保持启用，碰撞_BBQ10_34、原子_BB14_144、原子_DH09_34和原子_Q96_34 文件则已纳入。

4. 铁II

与 Fe III 原子数据评估类似，我们采用观测基准评估 PyNeb 1.1.16 中可用的 Fe II 原子数据集，直接转录原始资料中的数据，并建立新的模型。此版本 PyNeb 中的 NIST能级与数据库在 2022 [55] 年 7 月所列的相同。

4.1. PyNeb 中的 *Fe*II 原子数据集

PyNeb 1.1.16 中可用的 Fe II 数据集如下：

原子_VVKFHF99，碰撞_VVKFHF99 ——这些数据集列出了 80 个能级之间跃迁的辐射速率和碰撞速率，这些能级的能量为能量 $< 44{,}760\ \mathrm{cm}^{-1}$，汇编自不同来源 [71]。偶极允许跃迁和禁戒跃迁的A值分别来自 [21] 和 [23]，。有效碰撞强度主要来自 [24]；然而，无法获取原始数据，因此自旋变化跃迁 $\Delta S = 2$ 的A值和有效碰撞强度均未列出。

原子_B15，碰撞_B15 —A值及 52 个能级中属于 $3d^7$, $3d^64s$ 和 $3d^54s^2$ 组态的跃迁的有效碰撞强度（能量 $< 31{,}500\ \mathrm{cm}^{-1}$） [29]。$A$值采用多通道 Breit–Pauli 原子结构代码 AUTOSTRUCTURE 计算，使用了不同的展开和轨道优化策略，并对 Thomas–Fermi–Dirac–Amaldi 势进行了偶极修正。通过拟合实验项能来调整项能修正，从而进行微调。有效碰撞强度采用 Dirac–Coulomb R矩阵程序包 DARC [34] 计算，所用靶态由全相对论原子结构代码 GRASP0 [54]生成，采用包含 329 个能级的六组态展开。

原子_SRKFB19，碰撞_SRKFB19 —*A*值及 250 个能级的有效碰撞强度，来源为以下组态：$3d^7$, $3d^6 4s$、$3d^5 4s^2$,$3d^6 4p$ 和 $3d^5 4s4p$ 组态 [31]。*A*值采用 GRASP0 在 20 组态展开下计算；有效碰撞强度则采用 DARC，使用包含 716 个能级的靶态表示计算。

*4.2. Fe*II 修订和新增原子数据集

为便于比较，模型均归一化至52个能级（$E < 31$，500 cm^{-1}），即原子_B15中考虑的能级数；该模型包含$3d^6 4p$能级组出现之前最后一个偶宇称四重态项。两个数据集扩展为173个能级（$E < 66$，100 cm^{-1}），在NIST能级列表中未测量能级开始出现之前截断；另扩展为225个能级（$E < 73$，800 cm^{-1}），以讨论一些能级指认不一致的问题。尽管VVKFHF99中包含来自 [24]的ECS，但我们没有单独考虑其数据集，因为该数据集排除了其原子模型中的双重态项。

原子_QDZa96，原子_QDZh96 ——对$3d^6 4s$、$3d^7$, 和$3d^5 4s^2$ [23]组态的63个能级之间跃迁计算了电四极跃迁和磁偶极跃迁的*A*值。使用Breit–Pauli SUPERSTRUCTURE [18]（QDZa96）和Pauli HFR [20]（QDZh96）原子结构代码进行了大规模组态相互作用展开。这些数据集并不完整，无法用于PyNeb光谱建模，因为它们未包含诸如$a\,^4F - a\,^6D$和$a\,^2P - a\,^6D$之类的跃迁；因此，这些数据集仅用于辐射数据比较。

原子_VVKFHF99_52，碰撞_VVKFHF99_52 —VVKFHF99 数据集包含 *A*值和第4.1 节所述的ECS，数据集已缩减至偶宇称组态中的52个能级。

原子_DH11_52 —采用 MCBP 结构代码 CIV3 [42]，在大规模组态相互作用框架下，计算了 $3d^6 4s$、$3d^7$, 和 $3d^5 4s^2$组态的能级间跃迁的电四极跃迁和磁偶极跃迁 *A*值。通过微调波函数，使其符合实验能量。

原子_B15_52，碰撞_B15_52 —第 *A*节所述 B15 计算的数据（4.1 值和 ECS）直接从 CDS 下载，并据此重建了数据集。

原子_TZ18_52，碰撞_TZ18_52 —采用闭合耦合 *B*样条 Breit–Pauli *R*矩阵方法，计算了 $3d^6 4s$、$3d^7$, $3d^5 4s^2$, $3d^6 4p$ 和 $3d^5 4s4p$ 组态中 340 个能级的 *A*值和 ECS [30]。采用 Hartree–Fock 方法构建组态相互作用靶表示。通过拟合实验能量，在结构和散射计算中引入了半经验微调。散射计算的最终哈密顿量包含自旋轨道项。

原子_SRKFB19_52，碰撞_SRKFB19_52 ——SRKFB19 计算所得的辐射和碰撞数据已在第4.1节中说明。新文件根据`adf04_DARC716_2.10.18`文件（Cathy Ramsbottom 私人通信）中提取的数据构建，并缩减至52个能级。

原子_SRKFB19_173，碰撞_SRKFB19_173，原子_TZ18_173，碰撞_TZ18_173 ——SRKFB19 和 TZ18 数据集已扩展至173个能级（能量 < 66，100 cm^{-1}），以检验模型收敛性。

原子_SRKFB19_225、原子_TZ18_225 ——理论数据集SRKFB19和TZ18已扩展至225个能级（E < 73，800cm^{-1}），以揭示总轨道角动量量子数L $= 5$ 的能级所涉及的项指认不一致（见表6）。与NIST及其他理论数据集相比，原子_SRKFB19_225中，21, 430.36和21, 581.62 cm^{-1}（$a\,^4H$）以及26, 170.18和26, 352.77 cm^{-1}（$b\,^2H$）能级的项指认互换了。由于不同数据集中各能级的总角动量量子数J相同，如果涉及这些能级的跃迁的A值相近，那么这种不一致的项标记便无关紧要。然而，如表7所示，事实并非如此，差异最高可达一个数量级。在奇宇称的$z\,^4H^o$和$y\,^2H^o$能级中也发现了类似的混淆，而在这种情况下，它们甚至在能量上也存在错置

（见表6）。这类指认差异可能是由于低电离系统中具有较高轨道角动量（L $>$ 4 例如）的项存在强烈的组态相互作用混合，而GRASP0多组态狄拉克–哈特里–福克结构程序难以对其进行解析。

表6。 NIST能量（cm^{-1}）与不同铁II 原子数据集中所列能级的对比（见第$L = 5$ 节），展示了总轨道角动量量子数 原子 的能级（见第4.2节）。在原子_SRKFB19_225中发现了有疑问的能级指认。

能级	NIST	SRKFB19 225_	TZ18 225_	DH11 52_	B15 52_	QDZh96
$3d^7$ a $^2H_{11/2}$	20,340.25	20,340.25	20,327.91	20,340.30	20,340.30	20,340
$3d^7$ a $^2H_{9/2}$	20,805.76	20,805.76	20,824.99	20,805.77	20,805.77	20,806
$3d^6(^3H)4s$ a $^4H_{13/2}$	21,251.58	21,251.58	21,283.52	21,251.61	21,251.61	21,252
$3d^6(^3H)4s$ a $^4H_{11/2}$	21,430.36	26,170.17	21,433.70	21,430.36	21,430.36	21,430
$3d^6(^3H)4s$ a $^4H_{9/2}$	21,581.62	26,352.77	21,560.17	21,581.64	21,581.64	21,582
$3d^6(^3H)4s$ a $^4H_{7/2}$	21,711.90	21,711.90	21,671.63	21,711.92	21,711.92	21,712
$3d^6$（^3H）4s b $^2H_{11/2}$	26,170.18	21,430.36	26,186.48	26,170.18	26,170.18	26,170
$3d^6$（^3H）4s b $^2H_{9/2}$	26,352.77	21,581.61	26,331.50	26,352.77	26,352.77	26,353
$3d^6(^3H)4p$ z $^4H^o_{13/2}$	60,837.56	60,837.55	60,832.43			
$3d^6(^3H)4p$ z $^4H^o_{11/2}$	60,887.61		60,880.58			
$3d^6$（^3H）4p z $^4H^o_{9/2}$	60,989.44		61,012.21			
$3d^6(^3H)4p$ z $^4H^o_{7/2}$	61,156.83	61,156.82	61,178.84			
$3d^6(^3H)4p$ z $^2H^o_{11/2}$	65,363.61	65,363.60	65,333.65			
$3d^6(^3H)4p$ z $^2H^o_{9/2}$	65,556.27	65,556.26	65,551.82			
$3d^6(^3G)4p$ y $^4H^o_{13/2}$	66,411.71	66,411.70	66,306.76			
$3d^6(^3G)4p$ y $^4H^o_{11/2}$	66,463.54	66,463.54	66,602.84			
$3d^6(^3G)4p$ y $^4H^o_{9/2}$	66,589.04	66,589.03	66,733.10			
$3d^6(^3G)4p$ y $^4H^o_{7/2}$	66,672.34	66,672.32	66,705.11			
$3d^6(^3G)4p$ y $^2H^o_{11/2}$	67,516.33	67,516.32	67,942.69			
$3d^6(^3G)4p$ y $^2H^o_{11/2}$		67,709.96				
$3d^6(^3G)4p$ y $^2H^o_{9/2}$	68,000.79	68,000.77	67,609.99			
$3d^6(^3G)4p$ y $^2H^o_{9/2}$		68,201.16				
$3d^6$（$^1G2$）4p x $^2H^o_{9/2}$	72,130.38	72,130.36	72,407.94			
$3d^6(^1G2)4p$ x $^2H^o_{11/2}$	72,261.74	72,261.73	71,962.96			
$3d^6(^1I)4p$ w $^2H^o_{11/2}$	73,603.54	73,603.53	73,435.97			
$3d^6(^1I)4p$ w $^2H^o_{9/2}$	73,751.28	73,751.27	73,868.28			

表7。 *A*-值：来自 $3d^6 4s\ a\ {}^4H_J$ 和 $3d^6 4s\ b\ {}^2H_J$ 能级（$J = 9/2$ 和 11/2）的跃迁，对应 [FeII] 在不同原子数据集中列出的上能级；这些数据集显示原子SRKFB19 225中存在较大差异。_ _

λ_{air} (Å)	*A*-值（s^{-1}）					
	SRKFB19 225 TZ18 225_	_	DH11 52_	B15 52_	QDZa96	QDZh96
4114.48	1.52×10^{-2}	1.44×10^{-1}	1.61×10^{-1}	1.05×10^{-1}	7.80×10^{-2}	1.03×10^{-1}
4178.96	7.45×10^{-4}	3.26×10^{-2}	2.02×10^{-2}	1.89×10^{-2}	9.95×10^{-3}	1.56×10^{-2}
4211.11	1.81×10^{-2}	5.40×10^{-2}	5.93×10^{-2}	3.15×10^{-2}	3.37×10^{-2}	4.44×10^{-2}
4251.45	6.12×10^{-3}	2.86×10^{-2}	1.96×10^{-2}	1.33×10^{-2}	1.28×10^{-2}	1.87×10^{-2}
5111.64	4.68×10^{-1}	1.01×10^{-1}	1.07×10^{-1}	1.19×10^{-1}	1.20×10^{-1}	1.31×10^{-1}
5220.08	8.90×10^{-2}	1.09×10^{-1}	1.11×10^{-1}	1.32×10^{-1}	1.34×10^{-1}	1.44×10^{-1}
5261.63	$1.62 \times 10^{+0}$	3.25×10^{-1}	3.39×10^{-1}	3.95×10^{-1}	4.01×10^{-1}	4.29×10^{-1}
5333.66	8.85×10^{-1}	2.68×10^{-1}	2.78×10^{-1}	3.23×10^{-1}	3.32×10^{-1}	3.51×10^{-1}

4.3. 观测与光谱基准

鉴于铁II这一离子具有广泛的天体物理学兴趣，因此在实施观测与光谱基准方面展现出有趣的可能性。人们关注的不仅是禁戒线光谱，也包括涉及奇宇称组态 $3d^6 4p$ 和 $3d^5 4s4p$ 中能级的允许跃迁阵列；这些能级可能通过恒星连续谱的荧光泵浦而布居 [72–74]。活动星系核中的 Fe II 紫外发射尚未得到充分理解，这阻碍了类星体分类方案和铁丰度估计 [75]。

4.3.1. *A*值比率基准评估

在表 8 和 9中，我们比较了 HH 202S 和 HH204 光谱中涉及从共同上能级出发的跃迁的观测谱线强度比与相应的 *A*值比（见公式（1）），这些数据来自 原子 数据集 B15_52、DH 11_52、TZ18_52、SRKFB19_52、QDZa96 和 QDZh96。在比较过程中，我们必须指出，atom_SRKFB19_52 给出的某些 *A*值比与观测值及其他理论值均存在令人担忧的差异；因此，该辐射数据集的可靠性值得怀疑。

表8。 HH202S光谱中来自共同上能级的 [Fe II] 跃迁线强度比（观测值）与根据以下原子数据集中的*A*值估算的结果进行比较：B15_52(T1)；DH11_52 (T2)；TZ18_52 (T3)；SRKFB19_52 (T4)；QDZa96 (T5)；QDZh96 (T6)。观测强度比最低有效位的误差标示在括号内。

谱线1			谱线2		Obs	T1	T2	T3	T4	T5	T6
上能级	下能级	λ_{air}(Å)	下能级	λ_{air}(Å)	谱线强度比						
b ^{2}H$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4178.96	a ^{4}F$_{5/2}$	4251.45	1.3(9)	1.44	1.05	1.16	0.12	0.79	0.85
b ^{2}H$_{11/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4114.48	a ^{4}F$_{7/2}$	4211.11	2.4(8)	3.42	2.78	2.73	0.86	2.37	2.37
a ^{4}G$_{7/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	4319.62	a ^{4}F$_{3/2}$	4372.43	2.4(8)	2.00	1.95	1.97	1.88	1.98	1.96
a ^{4}G$_{9/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4177.20	a ^{4}F$_{7/2}$	4276.84	0.28(8)	0.24	0.21	0.23	0.29	0.25	0.24
a ^{4}G$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4276.84	a ^{4}F$_{5/2}$	4352.78	2.1(6)	2.16	2.15	2.24	2.07	2.21	2.19
a ^{4}G$_{11/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4243.97	a ^{4}F$_{7/2}$	4346.86	5(1)	4.40	4.54	4.67	4.24	4.60	4.59
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{9/2}$	4287.39	a ^{6}D$_{7/2}$	4359.33	1.3(3)	1.37	1.37	1.38	1.35	1.37	1.38
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4359.33	a ^{6}D$_{5/2}$	4413.78	1.4(3)	1.44	1.43	1.44	1.42	1.42	1.44
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	4413.78	a ^{6}D$_{3/2}$	4452.10	1.6(4)	1.58	1.57	1.58	1.56	1.57	1.58
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4452.10	a ^{6}D$_{1/2}$	4474.90	2.2(7)	2.07	2.06	2.06	2.05	2.06	2.06
b ^{4}F$_{3/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4509.61	a ^{4}F$_{5/2}$	4950.76	0.4(2)	0.31	0.40	0.38	0.11	0.28	0.28
b ^{4}F$_{3/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	4950.76	a ^{4}F$_{3/2}$	5020.24	0.9(4)	0.96	0.97	0.98	0.95	0.97	0.97
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4432.45	a ^{6}D$_{5/2}$	4488.75	0.6(3)	0.36	0.36	0.36	0.36	0.37	0.36
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	4488.75	一个 ^{6}D$_{3/2}$	4528.38	3(2)	3.44	3.44	3.43	3.38	3.42	3.45
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4528.38	a ^{4}F$_{7/2}$	4874.50	0.3(2)	0.23	0.30	0.28	0.09	0.22	0.21
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4874.50	a ^{4}F$_{5/2}$	4973.40	1.3(5)	1.25	1.24	1.27	1.26	1.26	1.24
b ^{4}F$_{5/2}$	一个 ^{4}F$_{5/2}$	4973.40	a ^{4}F$_{3/2}$	5043.53	1.5(7)	2.01	2.07	1.99	1.61	1.93	1.97
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4457.95	a ^{6}D$_{5/2}$	4514.90	4(2)	4.30	4.35	4.32	4.22	4.30	4.34
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	4514.90	a ^{4}F$_{9/2}$	4774.73	0.6(3)	0.46	0.60	0.56	0.19	0.44	0.42
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4774.73	a ^{4}F$_{7/2}$	4905.35	0.6(2)	0.58	0.58	0.60	0.72	0.59	0.59
b ^{4}F$_{9/2}$	一个 ^{6}D$_{9/2}$	4416.27	一个 ^{6}D$_{7/2}$	4492.64	7(2)	7.61	7.54	7.70	7.41	7.60	7.74
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4492.64	a ^{4}F$_{9/2}$	4814.54	0.15(5)	0.14	0.19	0.17	0.07	0.13	0.12
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4814.54	a ^{4}F$_{7/2}$	4947.39	7(2)	7.57	6.35	7.00	0.88	7.09	7.17
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4947.39	a ^{4}D$_{7/2}$	6809.24	4(2)	3.49	3.22	3.07	70.2	3.98	4.16
b ^{4}P$_{3/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	4728.07	a ^{4}F$_{7/2}$	5158.01	0.9(3)	1.23	1.83	2.00	0.57	1.29	1.19
b ^{4}P$_{3/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	5158.01	a ^{4}F$_{5/2}$	5268.89	3(1)	1.57	1.56	1.57	1.48	1.57	1.56
a ^{4}H$_{7/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	5296.84	a ^{4}F$_{3/2}$	5376.47	0.3(1)	0.32	0.34	0.34	0.13	0.34	0.34
a ^{4}H$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	5220.08	a ^{4}F$_{5/2}$	5333.66	0.4(1)	0.42	0.41	0.42	0.10	0.41	0.42
a ^{4}H$_{11/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	5111.64	a ^{4}F$_{7/2}$	5261.63	0.32(6)	0.31	0.32	0.32	0.30	0.31	0.31
a ^{2}D2$_{3/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4889.71	a ^{4}F$_{5/2}$	5412.68	3(1)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
a ^{2}D2$_{3/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	5412.68	a ^{4}F$_{3/2}$	5495.84	2(1)	1.89	1.91	1.90	1.89	1.89	1.90
b ^{4}P$_{5/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	5273.36	a ^{4}F$_{7/2}$	5433.15	3(1)	3.32	2.88	3.19	3.27	3.28	3.26
a ^{2}D2$_{5/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	5527.35	a ^{4}F$_{5/2}$	5654.87	10(4)	9.26	9.09	9.19	9.12	9.06	8.98
a ^{2}G$_{7/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	7172.00	a ^{4}F$_{5/2}$	7388.17	1.4(3)	1.35	1.35	1.36	1.32	1.35	1.35
a ^{2}G$_{9/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	7155.17	a ^{4}F$_{7/2}$	7452.56	3.1(5)	3.17	3.22	3.23	3.10	3.19	3.24
a ^{4}P$_{1/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	9033.49	a ^{4}F$_{3/2}$	9267.55	0.8(2)	0.77	0.78	0.78	0.50	0.78	0.78
a ^{4}P$_{3/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	7686.93	a ^{4}F$_{7/2}$	8891.93	0.27(7)	0.26	0.83	0.44	0.40	0.36	0.44
a ^{4}P$_{3/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	8891.93	a ^{4}F$_{5/2}$	9226.63	1.7(3)	1.76	1.79	1.78	0.88	1.78	1.80
a ^{4}P$_{5/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	7637.52	a ^{4}F$_{7/2}$	9051.95	0.5(1)	0.59	1.96	1.08	0.18	0.89	1.15
一个 ^{4}P$_{5/2}$	一个 ^{4}F$_{7/2}$	9051.95	一个 ^{4}F$_{5/2}$	9399.04	7(2)	5.13	5.32	5.21	2.64	5.46	5.67

表9. HH204 光谱（观测值）中源自共同上能级的跃迁的 [Fe II] 线强度比，与根据以下原子数据集的*A*值估算的结果进行比较：B15_52(T1)；DH11_52 (T2)；TZ18_52 (T3)；SRKFB19_52 (T4)；QDZa96 (T5)；QDZh96 (T6)。观测强度比最低有效位的误差以括号标出。

谱线1			谱线2		Obs	T1	T2	T3	T4	T5	T6
上能级	下能级	λ_{air}(Å)	下能级	λ_{air}(Å)	谱线强度比						
a ^{2}F$_{7/2}$	a ^{4}D$_{7/2}$	5163.96	a ^{2}G$_{9/2}$	8715.80	9(2)	7.50	10.5	11.1	2.81	6.73	7.48
b ^{2}H$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4178.96	a ^{4}F$_{5/2}$	4251.45	1.2(2)	1.44	1.05	1.16	0.12	0.79	0.85
b ^{2}H$_{11/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4114.48	a ^{4}F$_{7/2}$	4211.11	2.6(2)	3.42	2.78	2.73	0.86	2.37	2.37
a ^{4}G$_{5/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	3968.27	a ^{4}F$_{5/2}$	4305.90	7(1)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
a ^{4}G$_{5/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	4305.90	a ^{4}F$_{3/2}$	4358.37	0.56(8)	0.44	0.42	0.44	0.48	0.46	0.45
a ^{4}G$_{7/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	4319.62	a ^{4}F$_{3/2}$	4372.43	2.0(2)	2.00	1.95	1.97	1.88	1.98	1.96
a ^{4}G$_{9/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4177.20	a ^{4}F$_{7/2}$	4276.84	0.25(2)	0.24	0.21	0.23	0.29	0.25	0.24
a ^{4}G$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4276.84	a ^{4}F$_{5/2}$	4352.78	2.1(1)	2.16	2.15	2.24	2.07	2.21	2.19
a ^{4}G$_{11/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4243.97	a ^{4}F$_{7/2}$	4346.86	4.9(2)	4.40	4.54	4.67	4.24	4.60	4.59
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{9/2}$	4287.39	a ^{6}D$_{7/2}$	4359.33	1.39(6)	1.37	1.37	1.38	1.35	1.37	1.38
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4359.33	a ^{6}D$_{5/2}$	4413.78	1.42(6)	1.44	1.43	1.44	1.42	1.42	1.44
a ^{6}S$_{5/2}$	一个 ^{6}D$_{5/2}$	4413.78	a ^{6}D$_{3/2}$	4452.10	1.55(6)	1.58	1.57	1.58	1.57	1.57	1.58
a ^{6}S$_{5/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4452.10	a ^{6}D$_{1/2}$	4474.90	2.0(1)	2.07	2.06	2.06	2.05	2.06	2.06
b ^{4}F$_{3/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4509.61	a ^{4}F$_{5/2}$	4950.76	0.42(9)	0.31	0.40	0.38	0.11	0.28	0.28
b ^{4}F$_{3/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	4950.76	a ^{4}F$_{3/2}$	5020.24	1.4(3)	0.96	0.97	0.98	0.95	0.97	0.97
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4432.45	a ^{6}D$_{5/2}$	4488.75	0.49(7)	0.36	0.36	0.36	0.36	0.37	0.36
b ^{4}F$_{5/2}$	一个 ^{6}D$_{5/2}$	4488.75	一个 ^{6}D$_{3/2}$	4528.38	3.6(7)	3.44	3.44	3.43	3.38	3.42	3.45
b ^{4}F$_{5/2}$	一个 ^{6}D$_{3/2}$	4528.38	a ^{4}F$_{7/2}$	4874.50	0.25(5)	0.23	0.30	0.28	0.09	0.22	0.21
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4874.50	a ^{4}F$_{5/2}$	4973.40	1.4(1)	1.25	1.24	1.27	1.26	1.26	1.24
b ^{4}F$_{5/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	4973.40	一个 ^{4}F$_{3/2}$	5043.53	1.9(3)	2.01	2.07	1.99	1.61	1.93	1.97
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{6}D$_{9/2}$	4382.74	a ^{6}D$_{7/2}$	4457.95	0.19(2)	0.20	0.21	0.20	0.20	0.21	0.20
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4457.95	a ^{6}D$_{5/2}$	4514.90	4.3(4)	4.30	4.35	4.32	4.22	4.30	4.34
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	4514.90	a ^{4}F$_{9/2}$	4774.73	0.56(6)	0.46	0.60	0.56	0.19	0.44	0.42
b ^{4}F$_{7/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4774.73	a ^{4}F$_{7/2}$	4905.35	0.57(4)	0.58	0.58	0.60	0.72	0.59	0.59
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{6}D$_{9/2}$	4416.27	a ^{6}D$_{7/2}$	4492.64	7.7(5)	7.61	7.54	7.70	7.41	7.60	7.74
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{6}D$_{7/2}$	4492.64	a ^{4}F$_{9/2}$	4814.54	0.15(1)	0.14	0.19	0.17	0.07	0.13	0.12
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	4814.54	a ^{4}F$_{7/2}$	4947.39	7.8(5)	7.57	6.35	7.00	0.88	7.09	7.17
b ^{4}F$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	4947.39	a ^{4}D$_{7/2}$	6809.24	3.2(4)	3.49	3.22	3.07	70.21	3.98	4.16
b ^{4}P$_{3/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	4728.07	a ^{4}F$_{5/2}$	5268.89	2.3(4)	1.93	2.85	3.14	0.84	2.02	1.85
a ^{4}H$_{7/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	5296.84	a ^{4}F$_{3/2}$	5376.47	0.36(5)	0.32	0.34	0.34	0.13	0.34	0.34
a ^{4}H$_{9/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	5220.08	a ^{4}F$_{5/2}$	5333.66	0.44(5)	0.42	0.41	0.42	0.10	0.41	0.42
a ^{4}H$_{11/2}$	一个 ^{4}F$_{9/2}$	5111.64	a ^{4}F$_{7/2}$	5261.63	0.34(3)	0.31	0.32	0.32	0.30	0.31	0.31
a ^{2}D2$_{3/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	4889.71	a ^{4}F$_{3/2}$	5495.84	12(2)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
b ^{4}P$_{5/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	5273.36	a ^{4}F$_{7/2}$	5433.15	2.7(2)	3.32	2.88	3.19	3.27	3.28	3.26
b ^{4}P$_{5/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	5433.15	a ^{4}D$_{7/2}$	7764.71	7(1)	7.22	5.64	4.88	22.63	7.01	7.42
a ^{2}G$_{7/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	6896.17	a ^{4}F$_{7/2}$	7172.00	0.10(1)	0.10	0.09	0.09	0.09	0.10	0.09
a ^{2}G$_{7/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	7172.00	a ^{4}F$_{5/2}$	7388.17	1.34(9)	1.35	1.35	1.36	1.32	1.35	1.35
a ^{2}G$_{9/2}$	a ^{4}F$_{9/2}$	7155.17	a ^{4}F$_{7/2}$	7452.56	3.2(2)	3.17	3.22	3.23	3.10	3.19	3.24
a ^{4}P$_{1/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	7665.28	a ^{6}D$_{1/2}$	7733.13	2.8(7)	3.26	3.31	3.28	4.44	3.26	3.28
a ^{4}P$_{1/2}$	a ^{6}D$_{1/2}$	7733.13	a ^{4}F$_{5/2}$	9033.49	0.11(2)	0.10	0.32	0.17	0.10	0.14	0.17
a ^{4}P$_{1/2}$	a ^{4}F$_{5/2}$	9033.49	a ^{4}F$_{3/2}$	9267.55	0.75(7)	0.77	0.78	0.78	0.50	0.78	0.78
a ^{4}P$_{3/2}$	a ^{6}D$_{5/2}$	7686.93	a ^{6}D$_{1/2}$	7874.23	7(1)	7.06	7.31	7.05	11.24		
a ^{4}P$_{3/2}$	a ^{6}D$_{1/2}$	7874.23	a ^{4}F$_{7/2}$	8891.93	0.03(1)	0.04	0.11	0.06	0.04		
a ^{4}P$_{3/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	8891.93	a ^{4}F$_{5/2}$	9226.63	1.7(2)	1.76	1.79	1.78	0.88	1.78	1.80
a ^{4}P$_{5/2}$	a ^{6}D$_{3/2}$	7926.88	a ^{4}F$_{7/2}$	9051.95	0.05(1)	0.04	0.14	0.08	0.00		
a ^{4}P$_{5/2}$	a ^{4}F$_{7/2}$	9051.95	a ^{4}F$_{5/2}$	9399.04	5.4(6)	5.13	5.32	5.21	2.64	5.46	5.67

在两种情况下，观测到的谱线强度比与相应的理论值差异很大：$I(\lambda3968.27)/I(\lambda4305.90)$ 和 $I(\lambda4889.71)/I(\lambda5412.68)$。这是因为较强的 [Fe II] $\lambda\lambda$3968.66、4889.62 谱线被误认成较弱的 [Fe II]$\lambda\lambda$3968.27、4889.71 谱线；这些谱线来自不同的原子跃迁。

不包括原子_SRKFB19_52，A值比在表 8 和 9 中均相差不超过 $\sim 20-25\%$，但 HH 202S 中有两种情况例外：$I(\lambda7637.52)/I(\lambda9051.95)$ 和 $I(\lambda7686.93)/I(\lambda8891.93)$；HH204 中也有一种情况例外：$I(\lambda7733.13)/I(\lambda9033.49)$。这些情况是由 A 值量级为 $\lesssim 10^{-3}$ 且数值不确定性较大的谱线造成的。大多数理论比值都在估计的观测误差范围内，只有那些涉及受能级混合效应显著影响的 A 值的比值例外；这种效应在 Fe II [40] 中很常见。

4.3.2. [Fe II] 光谱拟合

与 [Fe III]（见第3.3.2节）类似，我们使用 PyNeb 的理论发射率，对亮天体 HH202S 和 HH 204 的高分辨率光谱中可靠的 [Fe II] 谱线进行拟合，并通过最小二乘法针对电子温度和密度进行优化。每条谱线的理论发射率和观测强度分别归一化为发射率总和与强度总和。

在对 HH202S 和 HH204 进行光谱拟合时，主要由于观测问题而排除了一些谱线 [9,11]：$\lambda\lambda$4413.78、4416.27、4452.10、4509.61、4514.90、4528.38、4889.71 和 4905.35；对后一个天体还排除了 $\lambda\lambda$4276.84、4319.62、4359.33、4452.10、7665.28、9399.04 和 9997.49。由于错误识别，λ4382.74 这条谱线也存在疑问。

我们在表10 中展示了使用PyNeb 1.1.16 中可用原子数据集进行光谱拟合的结果。与 [FeIII]（见第3.3.2节）不同，优化过程并不总能达到所需精度（例如，HH204 的 SRKFB19），而且密度变化可能没有最小值，也可能取决于初始输入值。温度离散度令人担忧，尤其是 HH 204 的拟合，其 χ^2值较大。

表10。 [Fe II] HH202S 和 HH 204 观测光谱的温度和密度拟合，采用 PyNeb 1.1.16 当前可用的辐射（原子）和碰撞（碰撞）数据集。

数据集		HH 202S			HH 204		
Atom	**Coll**	温度$_e$(10^3 K)	ne(10^4 厘米$^{-3}$)	χ^2	温度$_e$(10^3 K)	ne(10^4 cm^{-3})	χ^2
B15	B15	13.0	6.43	4.40	24.6	3.92	90.8
VVKFHF99	VVKFHF99	9.87	1.52	7.80	12.8	0.98	105.
SRKFB19	SRKFB19	18.8	2.67	19.6			

修订后的 Fe II 原子模型和新建的 Fe II 原子模型包括四个辐射（原子）文件和四个碰撞（碰撞）文件，均归一化至52个能级。HH 202S 和 HH 204 的光谱拟合见表 11，其中每个碰撞数据集似乎都会对应一组不同的温度和密度组合（温度$_e$、n_e）。对于 HH 202S，单位分别为 10^3 K 和 10^4 cm^{-3}，

碰撞_B15_52：（12.0 ± 0.1，6.3 ± 0.6）**碰撞_**
TZ18_52：（8.3 ± 0.4，3.9 ± 0.5）**碰撞_**
SRKFB19_52：（10.3 ± 0.6，2.4 ± 0.3）**碰撞_**
VVKFHF99_52：（10.2 ± 0.7，1.6 ± 0.2）

原子数据导致的温度和密度散布都异常宽广，而只有来自碰撞_TZ18_52，温度$_e$ = （8.3 ± 0.4） $\times 10^3$ K 与通过 [FeIII] 拟合确定的结果一致：温度$_e$ = （7.9 ± 0.3） $\times 10^3$ K（见第3.3.2节）。另一方面，

表 11. 使用改进后的新辐射（原子）和碰撞（coll）数据集，对 HH 202S 和 HH204 中 [Fe II] 观测光谱进行温度和密度拟合。

数据集		HH 202S			HH 204		
Atom	Coll	温度$_e$(10^3 K)	n_e(10^4 厘米$^{-3}$)	χ^2	温度$_e$(10^3 K)	n_e(10^4 cm^{-3})	χ^2
B15_52	B15_52	11.6	5.99	1.51	16.5	3.90	67.0
DH11_52	B15_52	13.4	6.00	4.60	22.7	4.00	94.7
TZ18_52	B15_52	11.4	5.98	1.94	17.1	3.69	70.1
VVKFHF99 _52	B15_52	11.7	7.12	2.10	17.4	3.52	75.5
TZ18_52	TZ18_52	7.94	3.29	7.90	11.2	2.63	154.
B15_52	TZ18_52	8.14	4.10	7.37	11.5	3.62	145.
DH11_52	TZ18_52	8.92	3.95	9.06	13.1	3.02	160.
VVKFHF99 _52	TZ18_52	8.09	4.43	7.37	11.8	3.95	147.
B15_52	SRKFB19 _52	10.0	2.05	2.20	14.5	0.89	85.8
DH11_52	SRKFB19 _52	11.1	2.58	4.77	17.3	0.89	96.3
TZ18_52	SRKFB19 _52	9.91	2.21	2.75	15.2	1.15	84.7
VVKFHF99 _52	SRKFB19 _52	10.1	2.73	2.71	15.6	1.24	90.4
VVKFHF99 _52	VVKFHF99 _52	9.92	1.66	7.79	12.7	0.89	106.
B15_52	VVKFHF99 _52	9.85	1.43	7.19	12.1	0.81	88.3
DH11_52	VVKFHF99 _52	11.2	1.75	12.5	16.7	0.93	164.
TZ18_52	VVKFHF99 _52	9.94	1.47	7.70	13.0	0.79	101.
TZ18_173	TZ18_173	7.81	3.29	7.91	10.4	1.51	40.2
TZ18_173	SRKFB19 _173	9.75	2.32	2.84	15.5	1.19	64.2

密度 $n_e = (2.1 \pm 0.3) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$ 通过 [Fe III] 拟合得到，与碰撞_SRKFB19_52的结果相符：（2.4 ± 0.3）× 10^4 cm^{-3}；碰撞_VVKFHF99_52的结果也相符：（1.6 ± 0.2）× 10^4 cm^{-3}。对于 HH204,

碰撞_B15_52： $(18.4 \pm 0.3, 3.8 \pm 0.2)$**碰撞_**
TZ18_52： $(11.9 \pm 0.1, 3.3 \pm 0.6)$**碰撞_**
SRKFB19_52： $(15.7 \pm 0.1, 1.0 \pm 0.2)$**碰撞_**
VVKFHF99_52： $(13.6 \pm 0.2, 0.85 \pm 0.07)$

因此，温度显著高于 [Fe III] 值 温度$_e = (8.9 \pm 0.6) \times 10^3$ K，而 [Fe III] 密度 $n_e = (1.5 \pm 0.3) \times 10^4$ cm^{-3}则有利于碰撞_SRKFB19_52。

这种令人困惑的情况可能导致不同的分析。例如，在图7中，我们绘制了 HH202S 中各谱线的归一化理论发射率与归一化观测强度之比，并将其表示为跃迁上能级能量的函数。左图中的光谱采用原子_TZ18_52 和碰撞_TZ18_52数据集进行拟合，得到较低的温度$T_e = 7$。94 × 10^3K 和密度$n_e = 3$。29 × 10^4cm^{-3}。对于上能级能量为$E < 2 \times 10^4$ cm^{-1}的跃迁，大于和小于 1.0 的比值数量大致相等；而在更高能量下，大于 1.0 的比值数量逐渐减少。这种行为与 [73], 图4所示的情况相似，可解释为等离子体模型缺少恒星连续谱荧光泵浦所致的特征。

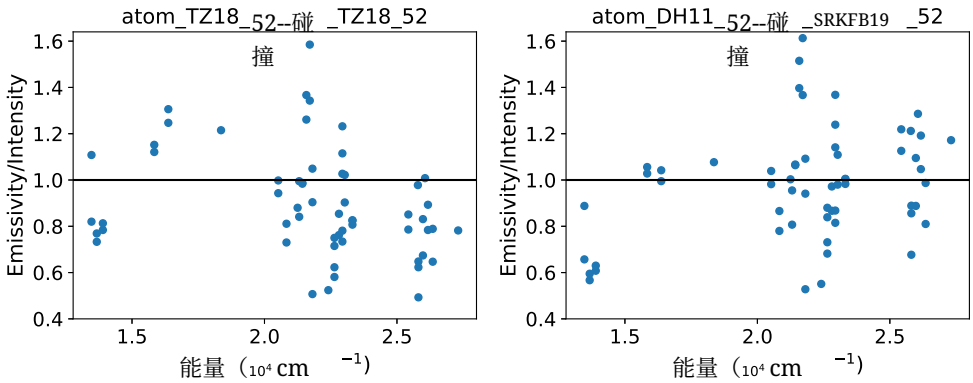


图 7. HH202S 中各谱线的归一化理论发射率与观测强度之比随跃迁上能级能量的变化。**左图**：使用原子数据集 atom_TZ18_52 和碰撞数据集 coll_TZ18_52 进行光谱拟合，参数为温度$_e = 7.94 \times 10^3$ K 和$n_e = 3.29 \times 10^4$ cm^{-3}。**右图**：使用原子数据集 atom_DH11_52 和碰撞数据集 coll_SRKFB19_52 进行光谱拟合，参数为温度$_e = 11.1 \times 10^3$ K 和$n_e = 2.58 \times 10^4$ cm^{-3}。

右图中的光谱拟合采用原子_DH11_52 和碰撞_SRKFB19_52数据集进行，得到较高的温度T_e = 11。1 × 10^{3}K 和相近的密度n_e = 2。58 ×10^{4}cm^{-3}；然而，并未出现缺少连续谱泵浦特征的情况。因此，表11 中的各种高温，可能反映了在未考虑所有能级布居机制的情况下对光谱进行拟合的尝试。

另一种解读方式是考察各能级的临界密度。在图8中，我们绘出了使用原子数据集 atom_TZ 18_52 计算得到的 [Fe II] 最低 52 个能级在温度$_e$ = 10^4 K 时的临界密度，并比较了三种碰撞数据文件：B15_52、SRKFB19_52 和 TZ18_52。对于索引为i > 10的能级，使用 coll_B15_52计算得到的临界密度高出一倍；对于i > 35，三者的结果均有显著差异。一个重要特征是 3d^7 a ^{4}F$_{9/2}$ 亚稳能级（能级i = 6）的临界密度较低（log $\rho_{\rm crit}$ < 2.6）。当电子密度为n_e = 2 × 10^4 cm^{-3}时，即使温度低至温度$_e \approx 7 \times 10^3$ K，该能级的布居也可能高于基态能级；因此，该能级在 [Fe II]的光谱形成中起主导作用。

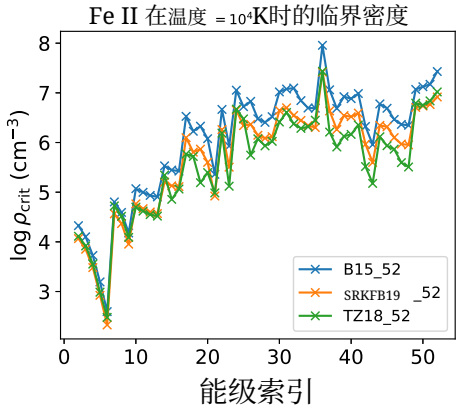


图 8. [Fe II] 下部52个能级的临界密度，采用来自碰撞数据集 B15_52、SRKFB19_52 和 TZ18_52 的有效碰撞强度以及来自原子_TZ18_52 的A值，在温度 = 10^4 K 下预测得出。

此外，在图 9中，我们绘出了 3d 能级^7 a ^{4}F$_{9/2}$ 的临界密度随温度的变化，并使用了不同的原子数据集。右侧面板展示了使用碰撞数据集_TZ18_52 和三个 原子 文件（TZ18_52、B15_52和 DH 11_52）计算得到的结果。尽管辐射数据的影响极大，但对于 $T_e > 5 \times 10^3$ K，其大致与温度

无关。左侧面板中，临界密度使用原子数据集_TZ18_52 以及三个碰撞数据集（B15_52、SRKFB19_52和 TZ18_52）计算得出。碰撞数据的影响不如辐射数据显著，但会随温度而变化。

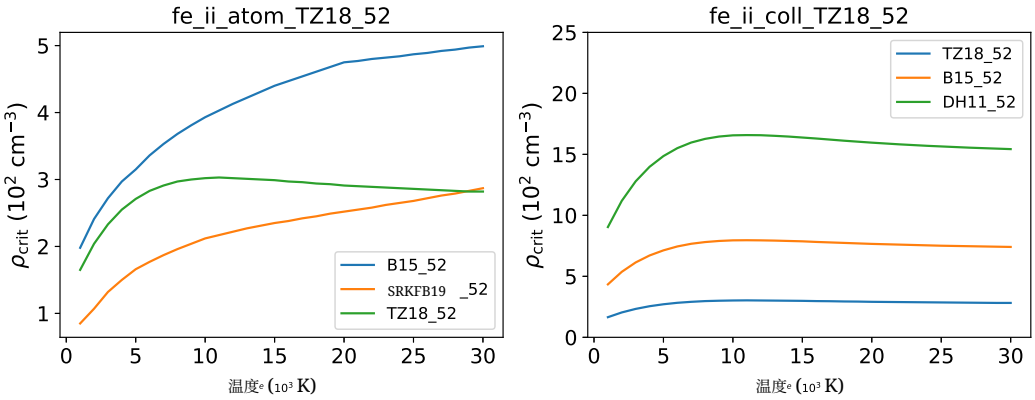


图 9. 采用不同原子数据集计算的 Fe II $3d^7\,a\,^4F_{9/2}$ 能级的临界密度随温度的变化。**左图**：原子_TZ18_52 文件和三个碰撞数据文件：B15_52、SRKFB19_52和 TZ18_52。**右图**：碰撞_TZ18_52 文件和三个原子文件：TZ18_52、B15_52和 DH11_52。

表 11 还列出了使用扩展数据集组合原子_TZ18_173– 碰撞_TZ18_173 和原子_TZ18_173–碰撞_SRKFB19_173得到的拟合结果。对于 HH 202S 光谱，所得温度（单位为 10^3 K）、密度（单位为 $10^4\,cm^{-3}$）和 χ^2 值（T_e、n_e、χ^2）=(7.81, 3.29, 7.91) 和 (T_e、n_e、χ^2) =(9.75, 2.32, 2.84)，分别与原子_TZ18_52–碰撞_TZ18_52 和原子_TZ18_52–碰撞_SRKFB19_52 组合所得结果（T_e、n_e、χ^2）=(7.94, 3.29, 7.90) 和 (T_e、n_e、χ^2) =(9.91, 2.21, 2.75) 接近，正如预期。相比之下，对于 HH 204，原子_TZ18_173–碰撞_TZ18_173 和原子_TZ18_173–SRKFB19_173 组合中较小的 χ^2 值表明拟合有所改善：χ^2 = 40.2 和 64.2，而原子_TZ18_52– 碰撞_TZ18_52和原子_TZ18_52–碰撞_SRKFB19_52组合中的相应值为 χ^2 = 154. 和 84.7。此外，尽管碰撞_SRKFB19_52 和碰撞_SRKFB19_173对应的温度和密度接近，但碰撞_TZ18_52 和碰撞_TZ18_173 对应的密度差异显著，分别为 2.63 和 1.51。

4.3.3. 线比诊断

[Fe II] 在红外、近红外和光学波段中的线比诊断已在 [29]中进行了详尽讨论。利用 HH 202S 和 HH204 光谱中的谱线，我们研究了若干可用于密度诊断的线比，这些线比涉及“安全”的低能级，从而避免预测的荧光效应 [73]。由于温度诊断本质上依赖于能量更高的能级，因此在本次原子数据比较中，我们未对其进行讨论。

我们在图10 中选取发射率比$I(\lambda8892)/I(\lambda9267)$ 作为示例，该比值在 $3 \leq \log n_e \leq 5 cm^{-3}$ 范围内对密度敏感。左图展示了使用atom_TZ18_52 辐射数据集和多个碰撞 ECS 文件计算得到的发射率比，以突出其对碰撞数据集的依赖性。我们没有展示其在$\log n_e = 3$ 以下的变化，因为情况会变得更加复杂，辐射数据也会导致发散。图10 中还包括HH 202S中的观测强度比$I(\lambda8892)/I(\lambda9267) = 2.36 \pm 0.42$。除使用coll_TZ18_52 ECS计算得到的曲线外，该观测值似乎会削弱此比值在$\log n_e \gtrsim 4.5$处的诊断潜力，因为密度变化落在其误差带内。另一方面，如右图所示，在$T_e \approx 10^4$ K以上，该比值的温度依赖性通常较弱。

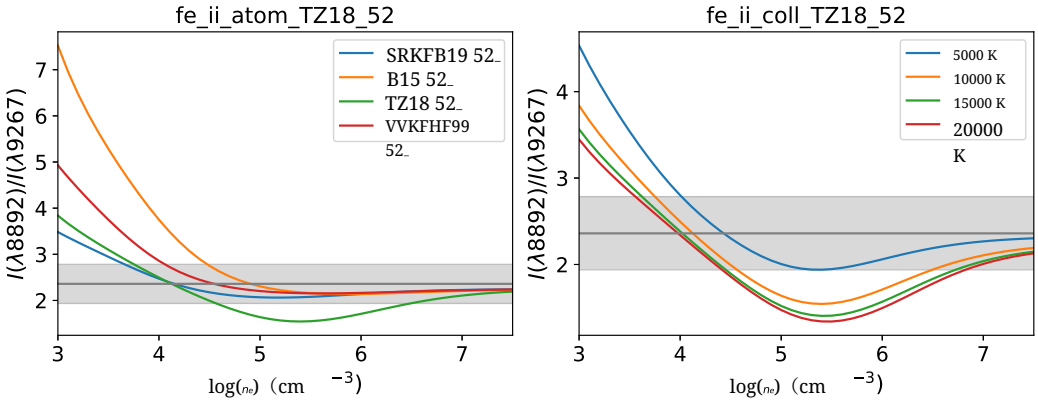


图10。 [Fe II] $I(\lambda 8892)/I(\lambda 9267)$ 使用不同原子数据集时发射率比的密度变化。HH202S 中的观测值比为 2.36 ± 0.42，以灰色带表示。**左图**：原子_TZ18_52 辐射数据集与四个碰撞数据集（SRKFB19_52、B15_52、TZ18_52、VVKFHF99_52）在温度$_e = 10^4$ K 下的结果。**右图**：原子_TZ18_52 和碰撞_TZ18_52数据集在四种电子温度下的结果。

如果用HH 202S中的这一观测线强度比来确定密度，对于94×10^4、1.32×10^4、1.41×10^4和$3.55 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$，碰撞数据集B15_52、TZ18_52、SRKFB19_52和VVKFHF99_52分别得到相应结果；这些结果与第4.3.2节的光谱拟合估计值相差较大：依次为5.98×10^4、3.29×10^4、2.21×10^4和$1.47 \times 10^4\mathrm{cm}^{-3}$。尽管如此，若考虑到碰撞数据集带来的较大不确定性，两种方法平均而言得到的密度诊断结果相近，但都不理想：$(4 \pm 3) \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$。

4.4. $3d^6 4s$、$3d^7$, 和$3d^5 4s^2$ 能级的辐射寿命

为比较 $^6 4s$、$3d^7$, 以及 $3d^5 4s^2$ 组态的能级寿命预测值，我们通过比较各数据集的相应差异15_52，11_52，18_52，19_52，以及 QDZa96 和 QDZh96 原子数据集的能级寿命预测值，再次为每个能级确定平均寿命（见图11）。该图中一个问题突出且易于辨认的情况是第一激发组态的最低能级 $3d^7\,a\,^4F_{9/2}$，其寿命最长（$\log\,\tau = 4.22$ s），且数值差异很大（~ 0.4 dex）。这是一个重要的亚稳能级，因为它在等离子体辐射与碰撞平衡中占主导地位，并为连续谱泵浦开辟了途径。总体而言，散布范围为 ~ 0.1 dex，但基于有问题的原子A值计算的寿命除外，这些值来自_SRKB19_52 数据集。

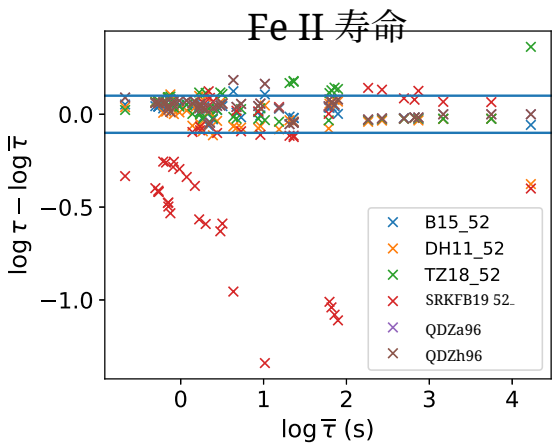


图 11。 [Fe II] 组态 $3d^6 4s$、$3d^7$, 和 $3d^5 4s^2$ 中各能级的辐射寿命，这些寿命由原子数据集 B15_52、DH11_52、TZ18_52、SRKFB19_52、QDZa96 和 QDZh96 中的A值计算得到。对于每个能级，将这些数据集相对于平均值的寿命差异绘制为平均值的函数。

若干 [Fe II] 亚稳能级的寿命已通过激光探测技术测得，并利用哈勃太空望远镜拍摄的船底座η星喷出物光谱中的分支比推导出 A值 [49–51]。实验测得的寿命与 PyNeb 原子数据集推导出的寿命对比如表 12 所示。原子_SRKFB19_52数据集给出的寿命与实验测量值及其他理论值均存在显著差异，因此未列入此表。$3d^6 4s\ b\ ^2H_{11/2}$ 能级的理论寿命存在较大散布。尽管 $3d^5 4s^2\ a\ ^6S_{5/2}$ 能级的理论值与实验结果符合良好，但 B15_52、DH11_52和 TZ18_52 给出的其余寿命通常比实验值长（最长达 33%）。总体而言，原子_QDZh96 与实验结果的符合度最高（$\lesssim 7\%$）。表 13 对比了实验和理论 A值。除 A(a $^4G_{9/2}$, a $^4F_{9/2}$) 和 A(b $^4D_{7/2}$, a $^4F_{7/2}$) 外，QDZh96 的数值均在实验误差范围内；这两项的理论 A值与实验值相差不超过 12%。实验值与其余理论数据的平均符合度约为 20%。

4.5. $3d^6(^5D)4p$ 奇宇称能级的辐射寿命

FeII 奇宇称能级 $3d^6(^5D)4p$ 的辐射寿命通过时间分辨非线性激光诱导荧光技术测得。该技术提升了信噪比，将不确定度降至 2–3% [46]。在表 14 中，我们将这些测量结果与根据 atom TZ18 173 和 atom RKFB19 173 的 A 值推导出的寿命进行比较。理论 _ _ _ _寿命与测量值的吻合度为 $\sim 30\%$，但平均而言比测量值短约 14%，且明显超出上述误差范围。

实验电偶极跃迁 A 值是利用表 14 中的寿命以及通过傅里叶变换光谱仪和高分辨率光栅光谱仪测定的分支比得出的；强、弱跃迁的精度分别为 6% 和 26% [46]。我们在图 *12* 中将这些测量结果与 atom_TZ18_173 和 atom_SRKFB19_173 的 A 值进行比较。前一组数据的 A 值的 $\log A > 6$ 与实验结果的差异在 0.3 dex 以内，而后一组则呈现出较大的差异（最高达 3 dex）。

4.6. Fe II gf值

142 条 Fe II 谱线的振子强度（gf 值）已根据实验室和计算数据推导得出，并使用来自太阳的精确光谱以及

表 12. [Fe II] 实验寿命（单位：秒）与根据修订后的 PyNeb 原子数据集计算出的寿命的比较。观测寿命的最低有效位误差以括号标出。

	实验			理论				
能级	参考文献 [49]	参考文献 [50]	参考文献 [51]	B15 52_	DH11 52_	TZ18 52_	QDZa96	QDZh96
$3d^5 4s^2$ a $^6S_{5/2}$	0.23(3)			0.241	0.233	0.225	0.262	0.220
$3d^6 4s$ a $^4G_{11/2}$			0.75(10)	0.909	0.960	0.934	0.774	0.706
$3d^6 4s$ a $^4G_{9/2}$		0.65(2)		0.849	0.862	0.876	0.755	0.694
$3d^6 4s$ b $^2H_{11/2}$		3.8(3)		5.31	3.71	4.18	6.59	5.20
$3d^6 4s$ b $^4D_{1/2}$			0.54(3)	0.592	0.627	0.632	0.616	0.550
$3d^6 4s$ b $^4D_{7/2}$	0.53(3)			0.548	0.578	0.575	0.568	0.501

表 13. 实验测得的A值（s^{-1}）与修订版 PyNeb 原子数据集中列出的值的比较，适用于 [Fe II] 中的跃迁。观测到的A值的最低有效位误差以括号标出。

		实验			理论				
上能级	下能级	λ_{air} (Å)	参考 [50]	参见 [51]	B15 52_	DH11 52_	TZ18 52_	QDZa96	QDZh96
a $^4G_{9/2}$	a $^4F_{9/2}$	4177.20	0.29(5)		0.16	0.14	0.14	0.18	0.19
	a $^4F_{7/2}$	4276.84	0.83(7)		0.66	0.65	0.65	0.75	0.82
	a $^4F_{5/2}$	4352.78	0.36(4)		0.31	0.31	0.29	0.35	0.38
a $^6S_{5/2}$	a $^6D_{9/2}$	4287.39	1.53(22)		1.50	1.55	1.62	1.37	1.65
	a $^6D_{7/2}$	4359.33	1.19(21)		1.11	1.15	1.19	1.02	1.22
	a $^6D_{5/2}$	4413.78	0.84(13)		0.78	0.81	0.84	0.73	0.86
	a $^6D_{3/2}$	4452.10	0.53(8)		0.50	0.52	0.54	0.47	0.55
	a $^6D_{1/2}$	4474.90	0.26(4)		0.24	0.25	0.26	0.23	0.27
b $^4D_{7/2}$	a $^6D_{9/2}$	3175.38	0.23(3)		0.21	0.24	0.21	0.19	0.21
	a $^4F_{9/2}$	3376.20	0.96(10)		0.88	0.77	0.81	0.85	0.98
	a $^4F_{7/2}$	3440.99	0.23(3)		0.30	0.27	0.28	0.29	0.33
	a $^4P_{5/2}$	5551.31	0.18(4)		0.15	0.14	0.14	0.15	0.18
	a $^4P_{3/2}$	5613.27	0.10(3)		0.078	0.069	0.075	0.081	0.093
a $^4G_{11/2}$	a $^4F_{9/2}$	4243.97		1.05(15)	0.85	0.81	0.84	1.02	1.12
	a $^4F_{7/2}$	4346.85		0.25(5)	0.20	0.18	0.18	0.23	0.25

贫金属星 [47]。这些 gf 值已与使用 MCBP程序 CIV3 并通过微调 [43] 进行广泛组态相互作用计算所得的数据进行了比较。此项计算包含来自 $3d^6 4s$、$3d^7$, $3d^5 4s^2$, $3d^6 4p$ 和 $3d^5 4s4p$ 组态的 262 个精细结构能级。总体而言，结果吻合良好，但少数表现异常的跃迁除外；这些跃迁容易受到难以通过计算加以约束的因素影响，例如组态相互作用混合导致的严重抵消。

表14。 比较 Fe II 的 $3d^6$（^5D）4p 能级的实验寿命（单位：ns）与根据修订后的 PyNeb 原子数据集所列 *A*值推导出的寿命。观测寿命最低有效位的误差以方括号标示。

	实验	理论	
能级	参考文献 [46]	TZ18_173	SRKFB19 _173
z $^6D^o_{9/2}$	3.68(7)	3.17	3.39
z $^6D^o_{7/2}$	3.67(9)	3.19	3.43
z $^6D^o_{5/2}$	3.69(5)	3.20	3.44
z $^6D^o_{3/2}$	3.73(7)	3.21	3.44
z $^6D^o_{1/2}$	3.68(11)	3.21	3.45
z $^6F^o_{11/2}$	3.20(5)	2.58	2.94
z $^6F^o_{9/2}$	3.28(4)	2.63	2.98
z $^6F^o_{7/2}$	3.25(6)	2.65	3.09
z $^6F^o_{5/2}$	3.30(5)	2.66	3.03
z $^6F^o_{3/2}$	3.45(12)	2.67	3.04
z $^6P^o_{7/2}$	3.71(4)	2.93	3.53
z $^6P^o_{5/2}$	3.75(10)	2.91	3.60
z $^6P^o_{3/2}$	3.70(12)	2.89	3.57
z $^4D^o_{7/2}$	2.97(4)	2.74	2.10
z $^4D^o_{5/2}$	2.90(6)	2.76	2.15
z $^4D^o_{3/2}$	2.91(9)	2.74	2.13
z $^4F^o_{9/2}$	3.72(10)	3.29	3.14
z $^4F^o_{7/2}$	3.59(10)	3.14	3.00
z $^4F^o_{5/2}$	3.55(8)	3.16	2.99
z $^4P^o_{5/2}$	3.27(6)	3.20	2.74
z $^4P^o_{3/2}$	3.23(9)	3.21	2.55

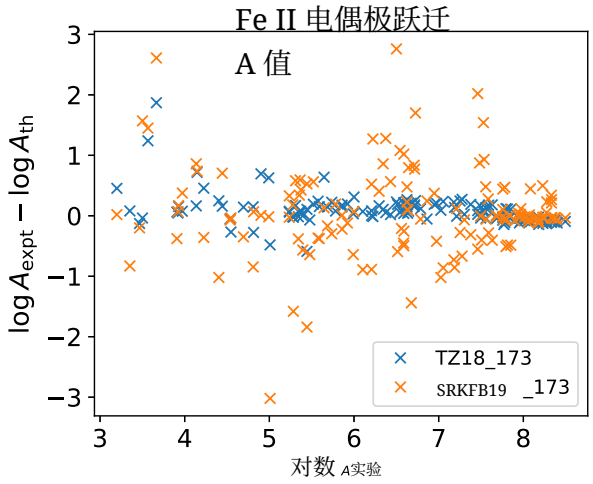


图12。 实验 *A*-值（s^{-1}）的比较，这些值对应于 Fe II 的 $3d^6(^5D)4p$ 能级产生的 E1 跃迁， [46] 与原子数据集 TZ18_173 和 SRKFB19_173 中的值进行比较。

在图13中，我们比较了观测到的 *gf*-值（MB09） [47] 与参考文献中的理论数据： [43]（DH14）、原子_TZ18_173和原子_SRKFB19_173。若排除问题跃迁，DH14 和原子_TZ18_173 与 MB09 的平均符合度在 0.2dex 以内。

另一方面，Datasetatom_SRKFB19_173 包含若干差异大于 0.5 dex 的跃迁。

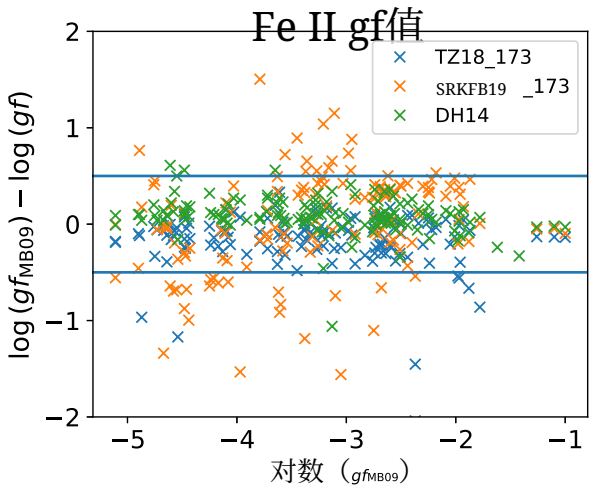


图13. 观测到的 gf-值比较：Fe II (MB09) [47] 与根据 atom 计算的结果_TZ18_173、atom_SRKFB 19_173和参考文献 [43](DH14) 得到的结果进行比较。

表 15 列出了三个跃迁，DH14 的结果与 MB09 相比存在显著差异。数据集 atom_TZ18_173 和 atom_SRKFB19_173 的表现也没有好多少；因此，参考文献 [43] 提出的计算估算中受到抵消效应阻碍这一点得到了进一步印证。本表还列出了三个我们无法在 atom_TZ18_173或 atom_SRKFB 19_173 中识别出的跃迁；对于这些跃迁，DH14 与 MB09 的结果吻合得较为合理。

表15。 MB09 [47] 与原子_TZ18_173、原子_SRKFB19_173和DH14 [43]的gf值比较中存在问题的跃迁，显示出较大差异或未识别的谱线。

			MB09	TZ18_173	SRKFB19 _173	DH14
下能级	上能级	λ_{air} (Å)		$\log(gf)$		
$3d^6 4p\ z\ {}^4F^o_{5/2}$	$3d^5 4s^2\ c\ {}^4D_{3/2}$	6508.13	−3.45	−3.93	−2.56	−7.90
$3d^6 4s\ c\ {}^4F_{9/2}$	$3d^6 4p\ x\ {}^4G^o_{9/2}$	6433.81	−2.37	−3.82	−2.91	−4.41
$3d^6 4p\ z\ {}^4F^o_{7/2}$	$3d^5 4s^2\ c\ {}^4D_{5/2}$	6371.13	−3.13	−3.54	−2.48	−4.19
		4635.32	−1.42			−1.75
		4625.89	−2.35			−2.41
		4549.19	−1.62			−1.86

4.7. 铁II 分支比

分支比

$$BF_{ji} = \frac{I(j,i)}{\sum_i I(j,i)} = \frac{A(j,i)}{\sum_i A(j,i)} \tag{4}$$

对于源自 $3d^6(^5D)4p$ 组态能级的 121 条 Fe II 紫外谱线，已在铁氖和铁氩空心阴极放电灯的低电流光谱中测得。光谱由 UW 3 米阶梯光栅摄谱仪采集，其分辨本领为 250,000 [48]。我们在图 14 中，将这些分支比与原子_TZ18_173 和原子_SRKFB19_173 原子数据集中的 A 值推导出的分支比进行了比较。对于 $\log(BF^{expt}) > -2$ 的跃迁，原子_TZ18_173 推导的分支比与实验结果平均相差不到 30%，

而原子_SRKFB19_173则表现出显著更大的差异。然而，总体而言，大多数理论分支比都未达到实验误差棒所隐含的精度。

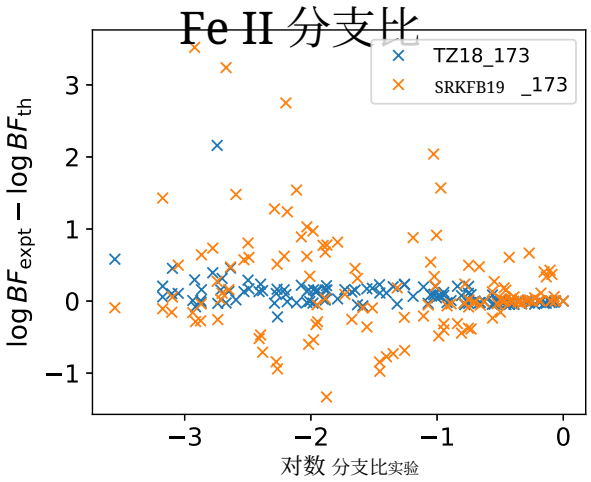


图 14。 FeII 实验分支比（BF^{expt}） [48] 与理论值（BF^{th}）的比较，理论值由原子_TZ18_173 和原子_SRKFB19_173得出。

4.8. [铁II] 有效碰撞强度

我们构建了三个修订后的碰撞数据集，其中包含 PyNeb 的 [FeII] 52 能级原子模型的有效碰撞强度：B15_52、TZ18_52 和 SRKFB19_52。我们在 T $= 10^4$ K 下计算了这三个数据集中每个跃迁的平均有效碰撞强度，并如图 15 所示，将对数差与该平均值进行了比较。碰撞_B15_52的有效碰撞强度似乎低于平均值，差异最大可达 $\Delta \log \Upsilon \approx -4$；而碰撞_SRKFB19_52 的结果高于平均值，离散范围在 1.0 dex 以内。最有意思的结果是，碰撞_TZ18_52 的有效碰撞强度平均值与平均值相差不到 0.5 dex。这一结果支持了光谱拟合中的发现（见表 11）：碰撞_B15_52 预测的电子密度较高，碰撞_SRKFB19_52 预测的较低，而碰撞_TZ18_52 则介于两者之间。

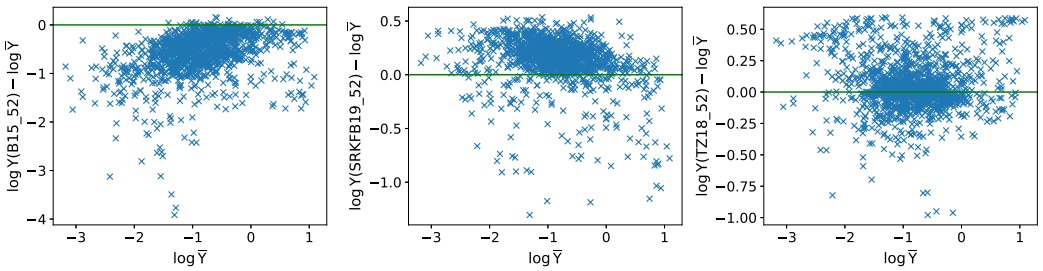


图 15. [Fe II] 有效碰撞强度对数差，温度为 温度 $= 10^4$ K；比较碰撞数据集 B15_52、SRKFB19_52 和 TZ18_52 中每个跃迁相对于平均值的差异。

鉴于 [铁II] 发射线对星际介质等离子体具有诊断潜力，近期已计算出低温下 $3d^6(^5D)4s\ a\ ^6D_J$ 基项各能级之间跃迁的精确有效碰撞强度 [36]。为估算不确定度，计算中采用了不同的靶模型和相对论*R*矩阵方法（BPRM、ICFT、DARC）。在图16中，我们将选定的有效碰撞强度与 [36] 的结果进行比较，碰撞数据集 B15_52、TZ18_52和 SRKFB19_52。为此，我们使用`PyNeb` `getOmega(T,j,i)` 函数，该函数可以

在输入温度T处对有效碰撞强度进行线性插值；若输入温度超出表列有效碰撞强度的温度范围，该函数则返回端点值。碰撞_B15_52和碰撞_SRKFB19_52 在 log$T$ $<$ 3 时即属此情况（见图 16）。正如预期，与碰撞_SRKFB19_52的结果最为吻合，不过仍有一些点落在误差范围之外。碰撞_B15_52 和碰撞_TZ18_52 在较高温度（log$T$ $>$ 4）下也存在较大差异。

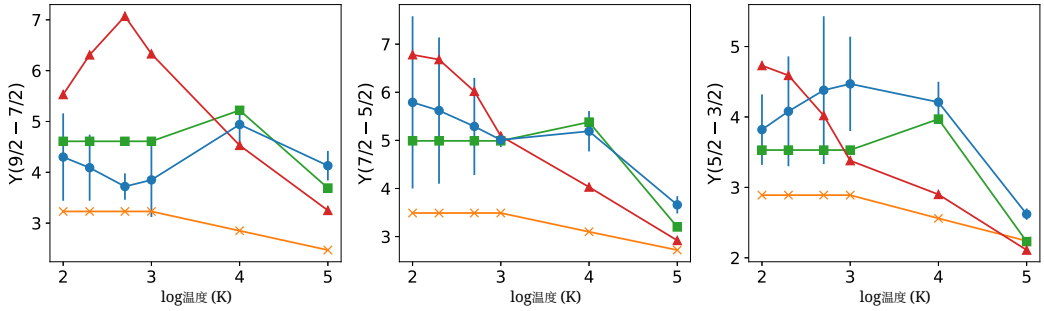


图16。 有效碰撞强度 Y(J − J') 跃迁 3d^6(^{5}D)4s a ^{6}D$_J$ − a ^{6}D$_{J'}$ 位于 [Fe II]的基项内。蓝色圆圈：参考文献 [36]。黄色叉号：碰撞_B15_52。绿色方块：碰撞_SRKFB19_52。红色三角形：碰撞 TZ18 52._ _

4.9. 铁II 讨论

在为 [FeII], 实现新数据集时，我们发现原子模型 atom_SRKFB19_225 中，总轨道角动量量子数 L = 5 的能级存在项错误指认（见表6）。表7进一步比较了来自 3d^{6}4s a ^{4}H$_J$ 和 3d^{6}4s b ^{2}H$_J$ （J = 9/2 和 11/2）能级跃迁的 A值，结果显示这些 A值与其他原子数据集（TZ 18_225、DH11_52、B15_52、QDZa96 和 QDZh96）存在较大差异。这表明数据有误；在第 4.3.1 节对观测和计算所得 A值比进行比较时，数据集 atom_SRKFB19_52 所呈现的差异也佐证了这一点。

这项比较还揭示了一些指认存疑的观测谱线（例如，$\lambda\lambda$3968.27、4889.71）以及不可靠的谱线强度比——例如，$I(\lambda7637.52)/I(\lambda9051.95)$、$I(\lambda7686.93)/I(\lambda8891.93)$和$I(\lambda7733.13)/I(\lambda9033.49)$——这是由于$A$值的数量级为 log$A$ $\lesssim -3$。理论A值比彼此相差不超过 20–25%；与观测谱线强度比相比，除少数受强烈能级混合影响的离群值外，理论值均落在误差范围内，正如 [40] 中所指出的。

我们发现了一些原子数据文件，即 atom_B15 和 coll_B15，其中的数据存在错误，这再次是由于映射到能级编号不同的原子模型时出现错误所致。采用多种多组态方法的数据生产者进一步加剧了这一问题，因为这些方法实现了多种不同的相对论哈密顿量（狄拉克–福克、布赖特–泡利、泡利）。这种多代码方法有助于评估辐射数据和碰撞数据的精度，但往往会导致能级结构的编号和指认相互冲突，难以重新映射。在原子计算中采用微调方法，使计算结果与实验能级顺序相匹配，可以在一定程度上缓解这一问题。

与 [Fe III], 不同，使用不同原子数据集进行光谱拟合所得结果的温度（6%）和密度（20%）不确定度均在可接受范围内，因而支持了这些数据集的可靠性；对于 [Fe II], , 碰撞数据集则导致约 15–20% 的温度变化，密度差异最大可达四倍。不过，coll_SRKFB19_52 与 coll_VVKFHF99_52所得温度和密度较为一致，这一点值得注意。这些结果似乎表明，对于 [Fe II], , 电子密度并不是一个合适的拟合参数；或者，如先前所提出的 [72–74], , 荧光连续谱泵浦可能是一种我们尚未考虑的能级布居机制。此外，能级 3d^7 a ^{4}F$_{9/2}$的临界密度极低

（见图8）以及该能级对辐射和碰撞数据集的敏感性（图 9），使其在 [Fe II] 光谱形成过程中发挥关键作用，尽管其较小的 A 值精度较差。

[Fe II] 线比密度诊断的潜力受到光谱拟合不匹配的影响，而荧光泵浦日益显著的作用则使温度诊断不宜采用。在第4.3.3节中，我们使用$I(\lambda 8892)/I(\lambda 9267)$ 比值来说明密度诊断面临的问题：在关注的范围内（$3 \leq \log n_e \leq 5 \mathrm{cm}^{-3}$），密度变化落在观测线强度误差带之内。与第 3.3.3 节分析 [Fe III] 密度诊断时所做的一样，若能获得包含 [Fe II] 探测结果的低密度电离星云观测样本，将有助于约束辐射参数和碰撞参数的预测。文献中缺少此类样本，使我们无法得出进一步结论。

我们对$3d^6 4s$、$3d^7$, 和$3d^5 4s^2$ 偶宇称能级，以及$3d^6 4p$和$3d^5 4s4p$奇宇称能级的计算辐射数据与测量值进行了广泛比较。关于偶宇称能级（见第4.4节），除特殊的$3d^7\,a\,{}^4F_{9/2}$ 亚稳能级外，计算得到的辐射寿命与测量值相差不超过0.1 dex；该亚稳能级的$\log \tau \sim 4\,\mathrm{s}$及其不确定度为0.4 dex。需要指出的是，原子_SRKB19_52 中的A值对其中一些能级给出的寿命值得怀疑（见图 11）。理论与实验的总体吻合度最高（$\sim 7\%$）的是原子_QDZh96数据集，而其他原子数据集（B15_52、DH11_52和TZ18_52）通常给出的寿命比实验值更长（最长达33%）。如 [40], 所讨论，$3d^6 4s\,b\,{}^2H_{11/2}$ 寿命的不确定度较大，是由能级混合估算不精确所致。根据实验寿命推导出的A值平均与理论数据集中的数值相差约20%。

已测得 $3d^6(^5D)4p$ 奇宇称能级的辐射寿命，精度为（2–3%） [46], ；第4.5 节将其与根据原子_TZ18_173和原子_SRKFB19_173 数据集得出的结果进行了比较。理论寿命与测量值的差异在 30% 以内，但平均而言比测量值短约 14%。此外，还根据这些寿命测量值推导出了电偶极跃迁 A 值，其中 $\log A > 6$ 与原子_TZ18_173 数据集的差异在 0.3 dex 以内，而原子_SRKFB19_173数据集中则存在更大的差异（最高达 3 dex）。此外，第4.6 节将观测到的 gf 值 [47] 与理论数据集推导出的结果进行比较，显示其与原子_TZ18_173数据集吻合良好（差异为 0.2 dex），而与原子_SRKFB19_173数据集的差异则超过 0.5 dex。第4.7节对测得的分支比 [48] 进行比较，也得到了类似结果：根据原子_TZ18_173 数据集中 $\log(BF^{\mathrm{expt}}) > -2$ 推导出的分支比，吻合度优于 30%；而原子_SRKFB19_173 数据集中的部分结果则存在较大差异。总体而言，理论辐射数据集的精度远不及实测寿命、A 值、gf 值和分支比所报告的精度。

第15图中第4.8 节对碰撞数据集的比较，从宏观层面衡量了整体 ECS 大小，这对临界密度具有直接影响。在这一比较中，我们利用三个碰撞数据集（B15_52、SRKFB19_52 和 TZ18_52）计算了每个跃迁的平均 ECS，随后绘制了各数据集的离散度。图15 显示，coll_TZ18_52 的离散度最小（在 0.5 dex 以内），而 coll_B15_52和 coll_SRKFB19_52 的差异更大，且分别主要呈负值和正值。图16 中展示的低温下 $3d^6(^5D)4s\,a\,{}^6D$ 基项内各跃迁存在的较大 ECS 差异，进一步表明 Fe II 碰撞数据的质量参差不齐。

通过对 Fe II 数据集开展的大量数据测试，我们发现 atom_SRKFB19_52 中的辐射数据存在错误，这确实可能对 coll_SRKFB19_52 数据产生影响。因此，我们将选择 atom_TZ18_173 和 coll TZ18 173 数据集作为 PyNeb 1.1.17 的默认数据集。_ _

5. 结论

我们对 PyNeb 1.1.16 中 [Fe III] 和 [Fe II] 的能级、原子数据及碰撞数据文件进行了全面评估，以考察其在星云光谱建模中的适用性，并确定软件包的默认数据集。在大多数情况下，我们根据原始数据来源重新构建了数据集，并纳入了最新发表的数据，从而在新版本 PyNeb 1.1.17 中为这些物种建立了更加可靠的原子数据库。

本数据评估包括：对使用紫外—可见光高分辨率阶梯光栅光谱仪观测的 HH 202S 和 HH 204 赫比格–哈罗天体的高分辨率光谱进行拟合 [9,11]；比较理论与观测谱线强度比；以及将结果与辐射寿命、A值、gf值和分支比的测量结果进行比较。观测谱线可能存在误认、谱线混叠，以及地球大气或仪器污染。另一方面，对于具有开放 $3d^n$ 亚壳层的铁族低电离离子，强组态混合、双激发表示，以及涉及闭合和开放亚壳层的微妙芯价电子关联，都会妨碍准确辐射数据的计算；因此，总体而言，我们不认为 A值的精度能优于 *20%*。同样，低温下的 *ECS* 受到复杂共振结构的影响，这些结构对靶模型和通道收敛十分敏感，严重限制了精度评估。

对于 Fe III，我们引入了一个来自 NIST 数据库的新能级文件，其中包含更完整的能级指认和更准确的能量。旧版能级文件已移至 deprecated 目录，并重命名为 fe_iii_levels_2023.dat。如第 3.2 节所述，我们实现了新的原子文件 Q96_34、DH09_34、BBQ10_34、BB14_34 和 BB14_144，以及碰撞数据文件 Z96_34、BBQ10_34、BB14_34、Z96_144 和 BB14_144。在 PyNeb 1.1.17 中，atom_BBQ10_34、atom_BB14_34 和 coll_Z96_34 未被纳入，因为它们分别被 atom_BBQ10、atom_BB14_144 和 coll_Z96_144 取代；而 coll_BB14 和 coll_BBQ10 已弃用。

比较 [Fe III] 中源自同一上能级的跃迁所对应的观测谱线强度比与相应的 A 值比，可将后者的整体精度约束在 20–30% 左右。使用新数据集进行的光谱拟合所得温度和密度分别相差不超过 6% 和 20%，验证了这些数据集的实用性。使用这些原子数据集计算的辐射寿命彼此相差不超过 0.1 dex。修订碰撞数据文件后，发现 Z96_34 数据集并不完整，且其在 $\log \Upsilon < -1$ 条件下的有效碰撞强度精度较差。对于 [Fe III]，，我们选定 atom_BB14_144 和 coll_BB14_144 数据集作为 PyNeb 1.1.17 中的默认数据集。

对于 Fe II，我们已实现原子文件 VVKFHF99_52、DH11_52、B15_52、TZ18_52、SRKFB19_52、TZ18_173、SRKFB19_173，以及碰撞文件 VVKFHF99_52、B15_52、TZ18_52、SRKFB19_52、TZ18_173和 SRKFB19_173。经过广泛测试和反复推敲，我们发现原子_SRKFB19_52和原子_SRKFB19_173 数据集中的A值存在错误，而原子_VVKFHF99_52和碰撞_VVKFHF99_52 缺少数据；因此，这些文件未纳入 PyNeb 1.1.17。除这一缺陷外，根据其余原子文件得出的、源自共同上能级的跃迁理论A值比率彼此相差不超过 20–25%，且大多数落在实验误差棒范围内。光谱拟合得出的温度和密度变化分别约为 20% 和 4 倍，这似乎表明密度并非良好的拟合参数，而荧光连续谱泵浦可能是一个未计入的能级布居因素。然而，关键能级 $3d^7\ a\ {}^4F_{9/2}$的理论表征较差——其A值不准确，且临界密度极低、对辐射数据集和碰撞数据集都很敏感——因此我们无法给出更确切的结论。将禁戒跃迁和允许跃迁的辐射数据与实验进行广泛比较后发现，要达到实测精度（优于 10%）存在计算困难；因此，从统计意义上说，整体理论A值精度达到 20–30% 是合理的

可信的。最后，所考察的碰撞数据集在$T_e = 10^4$K 下得出的临界密度各不相同，这种情况难以分析。

在 PyNeb 1.1.17 中，原子文件 VVKFHF99_52、TZ18_52 以及碰撞文件 VVKFHF99_52、SRKFB19_52、SRKFB19_173 已被原子_VVKFHF99、原子_TZ18_173、碰撞_VVKFHF99 和碰撞_SRKFB19 取代。此外，原子_B15、碰撞_B15、原子_VVKFHF99 和碰撞_VVKFHF99 已弃用。我们选用原子_TZ18_173 和碰撞_TZ18_173 作为默认数据集。

表 A1 汇总了 PyNeb 1.1.16 和 1.1.17 中所有 Fe 三 和 Fe II 的数据文件状态。

本研究得出的最后一项建议，是关于与光谱建模代码相关的原子数据库维护。后者在天体物理分析中的潜力，很大程度上取决于其辐射速率和碰撞速率数据表的完整性（准确性和完备性）；如本文所示，这些数据需要经过详细评估和更新。对于 [Fe III] 和 [Fe II], 等复杂离子光谱，这可能是一项耗时的工作。

作者贡献： C.M.（Claudio Mendoza）构思并统筹了整篇论文。J.E.M.-D. 和 J.G.-R. 提供了观测数据，并就数据的有效性和来源进行了深入讨论。M.A.B. 提供数据、执行计算，并主导了关于 [Fe II] 荧光连续谱泵浦的讨论。C.M.（Christophe Morisset）开展数据研究、执行辅助计算，并为 PyNeb 软件包提供软件支持。研究、方法、分析和验证：C.M.（Claudio Mendoza）、J.E.M.-D.、J.G.-R.、M.A.B.、C.M.（Christophe Morisset）。论文撰写及初稿准备：C.M.（Claudio Mendoza）、J.E.M.-D.。审阅与编辑：C.M.（Claudio Mendoza）、J.E.M.-D.、C.M.（Christophe Morisset）、J.G.-R.、M.A.B.。可视化：C.M.（Claudio Mendoza）、J.E.M.-D.。所有作者均已阅读并同意发表的手稿版本。

资助： J.E.M.-D. 感谢德国研究联合会（DFG）以 Emmy Noether 研究组的形式提供资助（Grant 编号 KR4598/2-1，首席研究员 Kathryn Kreckel）。Ch.M. 感谢 UNAM/DGAPA/PAPIIT Grant IN101220 的支持。J.G.-R. 感谢 Severo Ochoa 卓越计划 CEX2019-000920-S 提供的高级研究奖学金；感谢加那利群岛政府下属加那利群岛研究、创新与信息社会局（ACIISI）和欧洲区域发展基金（ERDF）通过编号为 ProID2021010074 的 Grant 提供的经费支持；并感谢编号为 P/308614 的 Grant 提供的支持，该资助由西班牙科学、创新与大学部（MCIU）从国家总预算拨付的资金，以及由 MCIU 从加那利群岛自治区总预算拨付的资金提供。

数据可用性声明： 本次修订中修订和汇编的数据文件已在 PyNeb 1.1.17 中公开提供。

致谢： 我们感谢 Cather- ine Ramsbottom（英国贝尔法斯特女王大学）就 Fe II 的辐射和碰撞数据进行的大量私人通信与数据交换。我们衷心感谢 Gra ̇zyna Stasi ́nska（法国巴黎天文台）开展数据交换并进行有益讨论。

利益冲突： 作者声明不存在利益冲突。

缩写

本文使用了以下缩写：

CDS 斯特拉斯堡天文数据中心 NIST 美国国家标准与技术研究院

附录 A

表 A1。 PyNeb 库中 1.1.16 和 1.1.17 版本的 Fe III 和 Fe II 原子数据文件状态。“X”表示文件存在；“*”表示文件存在且为默认文件；“D”表示文件已弃用（但仍可通过命令 pn.atomicData.includeDeprecatedPath() 访问）。

铁三 文件名	v1.1.16	v1.1.17	铁II 文件名	v1.1.16	v1.1.17
fe_iii_atom_BB14_144.dat		*	fe_ii_atom_TZ18_173.dat		*
铁_三_原子_BBQ10.dat	X	X	铁 II 原子 B15.dat	*	D
fe_iii_atom_DH09_34.dat		X	fe_ii_atom_B15_52.dat		X
fe_iii_atom_NP96.dat	X	X	fe_ii_atom_DH11_52.dat		X
铁_三_原子_Q96_34.dat		X	铁 Fe II 原子 SRKFB19.dat	X	D
铁_三_原子_Q96_J00.dat	*	X	铁 Fe II 原子 VVKFHF99.dat	X	D
fe_iii_coll_BB14_144.dat		*	fe_ii_coll_TZ18_173.dat		*
fe_iii_coll_BB14.dat	X	D	fe_ii_coll_B15.dat	*	D
fe_三_碰撞_BBQ10.dat	X	D	fe ii coll B15 52.dat		X
铁_三_碰撞_BBQ10_34.dat		X	铁 ii 碰撞 B15 old.dat	X	D
铁_三_碰撞_Q96.dat	X	X	铁 ii 碰撞 SRKFB19.dat	X	X
fe_iii_coll_Z96.dat	*	X	fe_ii_coll_VVKFHF99.dat	X	D
fe_iii_coll_Z96_144.dat		X			

注释

[1] http://research.iac.es/proyecto/PyNeb/[2] http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/testop/TheIP.html

[3] https://open.adas.ac.uk/

参考文献

1. Luridiana, V.; Morisset, C.; Shaw, R.A. PyNeb：用于发射线分析的新软件。载于《国际天文学联合会研讨会》；剑桥大学出版社：剑桥，英国，2012年；第283卷，第422–423页。https://doi.org/10.1017/S1743921312011738。2. Luridiana, V.; Morisset, C.; Shaw, R.A. PyNeb：用于分析发射线的新工具。I. 代码说明与结果验证。《天文学与天体物理学》2015年，573，A42。https://doi.org/10.1051/0004-6361/201323152。3. Peimbert, M.; Peimbert, A.; Delgado-Inglada, G. 星云光谱学：H II区与行星状星云指南。《太平洋天文学会出版物》2017年，129，082001。https://doi.org/10.1088/1538-3873/aa72c3。4. Morisset, C.; Luridiana, V.; García-Rojas, J.; Gómez-Llanos, V.; Bautista, M.; Mendoza., Claudio. 使用 PyNeb 进行原子数据评估。《Atoms》2020年，8，66。https://doi.org/10.3390/atoms8040066。5. Juan de Dios, L.; Rodríguez, M. 行星状星云的原子数据与密度结构。《皇家天文学会月报》2021年，507，5331–5339。https://doi.org/10.1093/mnras/stab2488。6. Perinotto, M.; Bencini, C.G.; Pasquali, A.; Manchado, A.; Rodriguez Espinosa, J.M.; Stanga, R. 四个行星状星云中的铁丰度。《天文学与天体物理学》1999年，347，967–974。7. Delgado Inglada, G.; Rodríguez, M.; Mampaso, A.; Viironen, K. 银河系行星状星云中的铁丰度。《天体物理学杂志》2009年，694，1335–1348，https://doi.org/10.1088/0004-637X/694/2/1335。8. Delgado-Inglada, G.; Mesa-Delgado, A.; García-Rojas, J.; Rodríguez, M.; Esteban, C. 电离星云中的 Fe/Ni 比：尘埃耗损模式的线索。《皇家天文学会月报》2016年，456，3855–3865，https://doi.org/10.1093/mnras/stv2961。9. Mesa-Delgado, A.; Esteban, C.; García-Rojas, J.; Luridiana, V.; Bautista, M.; Rodríguez, M.; López-Martín, L.; Peimbert, M. HH 202 中电离气体的性质——II. 使用紫外—可见光高分辨率阶梯光栅光谱仪进行阶梯光栅分光光度测量的结果。《皇家天文学会月报》2009年，395，855–876，https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2009.14554.x。10. Méndez-Delgado, J.E.; Esteban, C.; García-Rojas, J.; Henney, W.J.; Mesa-Delgado, A.; Arellano-Córdova, K.Z. 通过深度高光谱分辨率光谱观测猎户星云中的光致电离 Herbig-Haro 天体——I. HH 529 II 和 III。《皇家天文学会月报》2021年，502，1703–1739，https://doi.org/10.1093/mnras/stab068。11. Méndez-Delgado, J.E.; Henney, W.J.; Esteban, C.; García-Rojas, J.; Mesa-Delgado, A.; Arellano-Córdova, K.Z. 通过深度高光谱分辨率光谱观测猎户星云中的光致电离 Herbig-Haro 天体。II. HH 204。《天体物理学杂志》2021年，918，27。https://doi.org/10.3847/1538-4357/ac0cf5。

12. D’Odorico, S.; Cristiani, S.; Dekker, H.; Hill, V.; Kaufer, A.; Kim, T.; Primas, F. UVES（ESO VLT 的阶梯光栅光谱仪）的性能，以及恒星和类星体首批观测的亮点。载于《8 至 10 米级望远镜的发现与研究展望》；Bergeron, J., 编；光学与光子仪器工程师学会（SPIE）：贝灵厄姆，华盛顿州，美国，2000年；第4005卷，第121–130页。https://doi.org/10.1117/12.390133。13. Garstang, R.H. Fe II 禁戒线的跃迁概率。《皇家天文学会月报》1962年，124，321。https://doi.org/10.1093/ mnras/124.4.321。14. Kurucz, R.L.; Peytremann, E. 半经验 gf 值表。第1部分：波长：5.2682 NM 至 272.3380 nm；第2部分：波长：272.3395 NM 至 599.3892 nm；第3部分：波长：599.4004 NM 至 9997.2746 NM；SAO 特别报告；史密松天体物理台：剑桥，马萨诸塞州，美国，1975年。15. Nussbaumer, H.; Storey, P.J. Fe II 原子数据。《天文学与天体物理学》1980年，89，308–313。16. Nussbaumer, H.; Pettini, M.; Storey, P.J. Fe II 六重态跃迁。《天文学与天体物理学》1981年，102，351–358。17. Hummer, D.G.; Berrington, K.A.; Eissner, W.; Pradhan, A.K.; Saraph, H.E.; Tully, J.A. IRON 项目原子数据。I. 目标与方法。《天文学与天体物理学》1993年，279，298–309。18. Eissner, W.; Jones, M.; Nussbaumer, H. 原子结构与辐射数据计算技术，包括相对论修正。《计算物理学通讯》1974年，8，270–306。https://doi.org/10.1016/0010-4655(74)90019-8。19. Hibbert, A. CIV3——用于计算组态相互作用波函数和电偶极振子强度的通用程序。《计算物理学通讯》1975年，9，141–172。https://doi.org/10.1016/0010-4655(75)90103-4。20. Cowan, R.D. 原子结构与光谱理论；加利福尼亚大学：伯克利，加利福尼亚州，美国，1981年。21. Nahar, S.N. IRON 项目原子数据。VII. Fe II 的辐射偶极跃迁概率。《天文学与天体物理学》1995年，293，967–977。22. Nahar, S.N.; Pradhan, A.K. IRON 项目原子数据。XVII. Fe III 中偶极允许跃迁和禁戒跃迁的辐射跃迁概率。《天文学与天体物理学增刊》1996年，119，509–522。23. Quinet, P.; Le Dourneuf, M.; Zeippen, C.J. IRON 项目原子数据。XIX. Fe II 禁戒线的辐射跃迁概率。《天文学与天体物理学增刊》1996年，120，361–371。24. Zhang, H.L.; Pradhan, A.K. IRON 项目原子数据。VI. Fe II 的碰撞强度和速率系数。《天文学与天体物理学》1995年，293，953–966。25. Zhang, H. IRON 项目原子数据。XVIII. Fe III 电子碰撞激发的碰撞强度和速率系数。《天文学与天体物理学增刊》1996年，119，523–528。26. Bautista, M.A.; Pradhan, A.K. IRON 项目原子数据。XIII. Ni II 和 Fe II 禁戒跃迁的电子激发速率与发射率比。《天文学与天体物理学增刊》1996年，115，551–559。27. Bautista, M.A.; Ballance, C.P.; Quinet, P. Fe III 的原子数据与光谱模型。《天体物理学杂志》2010年，718，L189–L193。https: //doi.org/10.1088/2041-8205/718/2/L189。28. Badnell, N.R.; Ballance, C.P. Fe^{2+} 的电子碰撞激发：中间耦合框架变换、Breit-Pauli 和 Dirac R 矩阵计算的比较。《天体物理学杂志》2014年，785，99。https://doi.org/10.1088/0004-637X/785/2/99。29. Bautista, M.A.; Fivet, V.; Ballance, C.; Quinet, P.; Ferland, G.; Mendoza, C.; Kallman, T.R. Fe II 的原子数据与光谱模型。《天体物理学杂志》2015年，808，174。https://doi.org/10.1088/0004-637X/808/2/174。30. Tayal, S.S.; Zatsarinny, O. Fe II 禁戒跃迁和允许跃迁的电子碰撞激发。《物理评论 A》2018年，98，012706。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.012706。31. Smyth, R.T.; Ramsbottom, C.A.; Keenan, F.P.; Ferland, G.J.; Ballance, C.P. 迈向 Fe II 低能级跃迁收敛的电子碰撞激发计算。《皇家天文学会月报》2019年，483，654–663。https://doi.org/10.1093/mnras/sty3198。32. Berrington, K.A.; Eissner, W.B.; Norrington, P.H. R MATRX1：贝尔法斯特原子 R 矩阵程序。《计算物理学通讯》1995年，92，290–420。https://doi.org/10.1016/0010-4655(95)00123-8。33. Zatsarinny, O. BSR：B 样条原子 R 矩阵程序。《计算物理学通讯》2006年，174，273–356。https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005 . 10.006。34. Ait-Tahar, S.; Grant, I.P.; Norrington, P.H. Dirac R 矩阵方法下 Fe XXII 的电子散射。《物理评论 A》1996年，54，3984–3989。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.54.3984。35. Griffin, D.C.; Badnell, N.R.; Pindzola, M.S. 中间耦合下的 R 矩阵电子碰撞激发截面：一种 MQDT 变换方法。《物理学杂志 B：原子与分子物理》1998年，31，3713–3727。https://doi.org/10.1088/0953-4075/31/16/022。36. Wan, Y.; Favreau, C.; Loch, S.D.; McLaughlin, B.M.; Qi, Y.; Stancil, P.C. 低温下 Fe II 的电子碰撞精细结构激发。《皇家天文学会月报》2019年，485，2252–2258。https://doi.org/10.1093/mnras/stz550。37. Deb, N.C.; Hibbert, A. 属于 Fe III 三个最低组态的能级之间跃迁的振子强度。《物理学会议系列杂志》2008年，130，012006。https://doi.org/10.1088/1742-6596/130/1/012006。38. Deb, N.C.; Hibbert, A. Fe III 的 $3d^6$ 能级之间的电四极和磁偶极跃迁。《物理学杂志 B：原子与分子物理》2009年，42，065003。https://doi.org/10.1088/0953-4075/42/6/065003。

39. Deb, N.C.; Hibbert, A. Fe III 的 3d 6、3d 54s 和 3d ^{5}4p 能级间 E1 跃迁的加权 f 值、A值和谱线强度。《原子数据与核数据表》. 2009年, 95, 184–303. https://doi.org/10.1016/j.adt.2008.12.001. 40. Deb, N.C.; Hibbert, A. 能级混合对准确的 [Fe II] 跃迁率的重要性。《天文学与天体物理学》. 2010年, 524, A54. https: //doi.org/10.1051/0004-6361/201015426. 41. Deb, N.C.; Hibbert, A. 观测到的红外 [Fe II] 谱线的强度比计算。《天体物理学杂志》. 2010年, 711, L104–L107. https://doi.org/10.1088/2041-8205/711/2/L104. 42. Deb, N.C.; Hibbert, A. Fe II 禁戒线的辐射跃迁率。《天文学与天体物理学》. 2011年, 536, A74. https: //doi.org/10.1051/0004-6361/201118059. 43. Deb, N.C.; Hibbert, A. Fe II 天体物理学重要跃迁的 log gf 值。《天文学与天体物理学》. 2014年, 561, A32. https: //doi.org/10.1051/0004-6361/201322751. 44. Quinet, P. Fe III 禁戒线的跃迁概率。《天文学与天体物理学增刊》. 1996 年 , 116, 573–578. 45. Fivet, V.; Quinet, P.; Bautista, M.A. 双电离铁峰元素中具有天体物理学兴趣的禁戒 M1 和 E2 跃迁的辐射速率。《天文学与天体物理学》 2016年, 585, A121. https://doi.org/10.1051/0004-6361/201526983. 46. Schnabel, R.; Schultz-Johanning, M.; Kock, M. Fe II 寿命和跃迁概率。《天文学与天体物理学》. 2004年, 414, 1169–1176. https://doi.org/10.1051/0004-6361:20031685. 47. Meléndez, J.; Barbuy, B. Fe II 谱线准确且精密的 gf 值。《天文学与天体物理学》. 2009年, 497, 611–617. https: //doi.org/10.1051/0004-6361/200811508. 48. Den Hartog, E.A.; Lawler, J.E.; Sneden, C.; Cowan, J.J.; Brukhovesky, A. Fe II 紫外和蓝色谱线的原子跃迁概率，以及太阳和贫金属恒星 HD 84937 光球中的丰度测定。《天体物理学杂志增刊》, 2019年, 243, 33. https://doi.org/10.3847/1538-4365/ab322e. 49. Rostohar, D.; Derkatch, A.; Hartman, H.; Johansson, S.; Lundberg, H.; Mannervik, S.; Norlin, L.O.; Royen, P.; Schmitt, A. Fe^+亚稳态的寿命测量。《物理评论快报》. 2001年, 86, 1466–1469. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.1466. 50. Hartman, H.; Derkatch, A.; Donnelly, M.P.; Gull, T.; Hibbert, A.; Johansson, S.; Lundberg, H.; Mannervik, S.; Norlin, L.O.; Rostohar, D.; 等. FERRUM 项目： [Fe II] 的实验跃迁概率及其天体物理学应用。《天文学与天体物理学》. 2003年, 397, 1143–1149. https://doi.org/10.1051/0004-6361:20021557. 51. Gurell, J.; Hartman, H.; Blackwell-Whitehead, R.; Nilsson, H.; Bäckström, E.; Norlin, L.O.; Royen, P.; Mannervik, S. FERRUM 项目： [Fe II] 禁戒线的跃迁概率及实验亚稳态寿命。《天文学与天体物理学》. 2009年, 508, 525–529. https://doi.org/10.1051/0004-6361/200913233. 52. Johansson, S.; Zethson, T.; Hartman, H.; Ekberg, J.O.; Ishibashi, K.; Davidson, K.; Gull, T. 在船底座η星的 HST 光谱中识别出的新 Fe III 禁戒和荧光谱线。《天文学与天体物理学》. 2000年, 361, 977–981. 53. Badnell, N.R. AUTOSTRUCTURE 的 Breit-Pauli 畸变波实现。《计算物理学通讯》. 2011年, 182, 1528–1535. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2011.03.023. 54. Parpia, F.A.; Fischer, C.F.; Grant, I.P. GRASP92：用于大规模相对论原子结构计算的软件包。《计算物理学通讯》. 1996年, 94, 249–271. https://doi.org/10.1016/0010-4655(95)00136-0. 55. Kramida, A.; Yu. Ralchenko.; Reader, J.; NIST ASD 团队. NIST 原子光谱数据库，5.9版；美国国家标准与技术研究院：盖瑟斯堡, MD，美国，2021年. 56. Hibbert, A.; Glass, R.; Froese Fischer, C. 用于计算 Breit-Pauli 哈密顿量角积分的通用程序。《计算物理学通讯》. 1991 年 , 64, 455–472. https://doi.org/10.1016/0010-4655(91)90138-B. 57. Mendoza, C.; Bautista, M.A.; Deprince, J.; García, J.A.; Gatuzz, E.; Gorczyca, T.W.; Kallman, T.R.; Palmeri, P.; Quinet, P.; Witthoeft, M.C. XSTAR 原子数据库。《Atoms》 2021年, 9, 12. https://doi.org/10.3390/atoms9010012. 58. Storey, P.J.; Sochi, T. 根据 C II 双电子复合谱线确定星云的电子温度和自由电子能量分布。《皇家天文学会月报》. 2013年, 430, 599–610. https://doi.org/10.1093/mnras/sts660. 59. Sochi, T. 《天文光谱的原子与分子方面》。博士论文，伦敦大学学院，英国，2012年. 60. Peimbert, A. 由甚大望远镜阶梯光栅分光光度测量推导出的剑鱼座30星云化学组成。《天体物理学杂志》. 2003年, 584, 735–750. https://doi.org/10.1086/345793. 61. García-Rojas, J.; Esteban, C.; Peimbert, A.; Peimbert, M.; Rodríguez, M.; Ruiz, M.T. 对 S 311 的深度阶梯光栅分光光度测量：位于太阳圆之外的银河系 H II 区。《皇家天文学会月报》. 2005年, 362, 301–312. https://doi.org/10.1111/j.1365-2966. 2005.09302.x. 62. García-Rojas, J.; Esteban, C.; Peimbert, M.; Costado, M.T.; Rodríguez, M.; Peimbert, A.; Ruiz, M.T. 银河系 H II 区 M16、M20 和 NGC 3603 中的微弱发射线。《皇家天文学会月报》. 2006年, 368, 253–279. https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2006.10105.x. 63. García-Rojas, J.; Esteban, C.; Peimbert, A.; Rodríguez, M.; Peimbert, M.; Ruiz, M.T. 银河系 H II 区 M8 和 M17 的化学组成：基于甚大望远镜深度阶梯光栅分光光度测量的修订。《墨西哥天文学与天体物理学评论》. 2007年, 43, 3–31. 64. López-Sánchez, Á.R.; Esteban, C.; García-Rojas, J.; Peimbert, M.; Rodríguez, M. 重新审视 NGC 5253 的局部化学污染：深度阶梯光栅分光光度测量结果。《天体物理学杂志》. 2007年, 656, 168–185. https://doi.org/10.1086/510112.

65. Esteban, C.; Bresolin, F.; Peimbert, M.; García-Rojas, J.; Peimbert, A.; Mesa-Delgado, A. 河外 H II 区的凯克高分辨率阶梯光栅光谱仪观测：基于复合线测定的碳和氧丰度。《天体物理学杂志》. 2009年, 700, 654–678. https://doi.org/10.1088/0004-637X/700/ 1/654. 66. Esteban, C.; García-Rojas, J.; Carigi, L.; Peimbert, M.; Bresolin, F.; López-Sánchez, A.R.; Mesa-Delgado, A. 低金属丰度恒星形成星系中基于复合线测定的碳和氧丰度：对化学演化的启示。《皇家天文学会月报》. 2014年, 443, 624–647. https://doi.org/10.1093/mnras/stu1177. 67. Esteban, C.; Fang, X.; García-Rojas, J.; Toribio San Cipriano, L. 朝向银河系反中心方向的氧径向丰度梯度。《皇家天文学会月报》. 2017年, 471, 987–1004. https://doi.org/10.1093/mnras/stx1624. 68. Esteban, C.; Bresolin, F.; García-Rojas, J.; Toribio San Cipriano, L. M101 和 M31 中碳、氮和氧的丰度梯度。《皇家天文学会月报》. 2020年, 491, 2137–2155. https://doi.org/10.1093/mnras/stz3134. 69. Esteban, C.; García-Rojas, J. 重新审视银河系氮和氧的径向丰度梯度。《皇家天文学会月报》. 2018年, 478, 2315–2336. https://doi.org/10.1093/mnras/sty1168. 70. Domínguez-Guzmán, G.; Rodríguez, M.; García-Rojas, J.; Esteban, C.; Toribio San Cipriano, L. 麦哲伦云 H II 区化学丰度的均一性。《皇家天文学会月报》. 2022, 517, 4497–4514. https://doi.org/10.1093/ mnras/stac2974. 71. Verner, E.M.; Verner, D.A.; Korista, K.T.; Ferguson, J.W.; Hamann, F.; Ferland, G.J. Fe II 发射光谱的数值模拟。《天体物理学杂志增刊》. 1999, 120, 101–112. https://doi.org/10.1086/313171. 72. Rodríguez, M. H II 区中的 [Fe II] 荧光。《天文学与天体物理学》. 1999年, 348, 222–226. 73. Verner, E.M.; Verner, D.A.; Baldwin, J.A.; Ferland, G.J.; Martin, P.G. 猎户星云中 [Fe II] 的连续谱泵浦。《天体物理学杂志》. 2000年, 543, 831–839. https://doi.org/10.1086/317159. 74. Hartman, H. 天体物理等离子体中的荧光。载于《原子与分子物理学新趋势》；Springer：德国柏林/海德堡，2013年；第189页。https://doi.org/10.1007/978-3-642-38167-6_11. 75. Sarkar, A.; Ferland, G.J.; Chatzikos, M.; Guzmán, F.; van Hoof, P.A.M.; Smyth, R.T.; Ramsbottom, C.A.; Keenan, F.P.; Ballance, C.P. 使用新原子数据集改进活动星系核的 Fe II 发射线模型。《天体物理学杂志》. 2021年, 907, 12. https://doi.org/10.3847/15 38-4357/abcaa6.

免责声明/出版商说明：所有出版物中所载的声明、观点和数据仅代表个别作者和贡献者的意见，并不代表 MDPI 和/或编辑的意见。MDPI 和/或编辑不对因内容中提及的任何观点、方法、说明或产品而给人员或财产造成的任何伤害承担责任。