《天文学与天体物理学》稿件编号：主文
2023年4月6日
©ESO 2023

# Ex氧丰度分析所需的原子数据 ★

W. Li[1], P. Jönsson[2], A. M. Amarsi[3],M. 碳 Li[4],和 J. Grumer[3]

[1]中国科学院国家天文台，北京 100012，中国 电子邮箱：wxli@nao.cas.cn[2]马尔默大学材料科学与应用数学系，SE-205 06 马尔默，瑞典[3]乌普萨拉大学物理与天文学系理论天体物理学组，Box 516，SE-751 20 乌普萨拉，瑞典[4]惠州学院电子信息与电气工程学院，中国惠州 516007

收稿日期：2022年12月8日／接受日期：2023年4月3日。

arXiv:2304.02310v1 [astro-ph.SR] 5 Apr 2023

**摘要**

作为宇宙中仅次于氢和氦的丰度最高元素，氧在行星、恒星和星系天体物理学中发挥着关键作用。氧丰度对恒星结构和演化影响尤为显著；而作为太阳对流区底部不透明度的主要贡献者，氧也是太阳建模问题讨论的核心。然而，丰度分析需要完整且可靠的原子数据集。我们采用多组态狄拉克–哈特里–福克方法和相对论组态相互作用方法，提供了详尽的中性氧原子数据。文中给出了辐射电偶极跃迁的寿命和跃迁概率，并将其与以往计算结果及现有测量值进行了比较。我们通过比较 Babushkin 规范和库仑规范下的跃迁速率，以及分析相消因子，评估了计算所得跃迁速率的准确度。本研究计算的 989 个跃迁中，有 205 个被归入精度等级 AA–B，即不确定度低于 10%；这一分类遵循美国国家标准与技术研究院原子光谱数据库所定义的标准。我们讨论了新的 $\log(gf)$ 值对太阳氧丰度的影响，并最终建议采用 $\log \epsilon_{\rm O} = 8.70 \pm 0.04$。

**K关键词**。 原子数据 — 原子过程 — 方法：数值方法 — 太阳：丰度 — 恒星：丰度 s

## 1。引言

O氧是宇宙中含量最丰富的金属元素。它是追踪星系演化的关键指标（例如，Romano2022），也是
w系外行星形成与表征的重要指标（例如，Kolecki & Wang 2022）。在恒星内部，氧是
m不透明度的重要来源；例如，在太阳中，氧是对流区底部附近的主要不透明度来源（例如，Mondet
e等，2015）。因此，太阳氧丰度对于解决太阳建模问题至关重要。太阳建模问题描述的是
s通过日震反演推断的太阳内部结构理论预测与观测结果之间存在显著差异
t与标准太阳模型相比（例如，Vinyolesetal.2017；Christensen-Dalsgaard 2021）。

可以通过分析恒星光谱来确定恒星大气中的氧丰度。对于AFGK型恒星，
t最常用的氧丰度诊断之一是高激发态 O中性碳 777 nm 三重线组（例如 Nissen 等，2014；
B Buder 等，2021）。有时也会使用其他允许跃迁原子谱线：最常见的是 O中性碳 615.8 nm（Korotin 等，014；Delgado Mena 等，2021）；太阳的分
2析还会用到 O中性碳 844.7 nm 和 926.9 nm 多重态（Asplund et al. 2004，2021；Caffau
eet al. 2008）。这些谱线通常还会结合低激发态禁戒谱线使用，通常为 [O I] 630.0 nm（Bertran de Lis 等，015；Franchini 等，2021）；太阳的分析还会使
2用 [O I] 557.7 nm 和 636.3 nm 谱线（Allende Prieto 等，2001；Meléndez
& Asplund 2008年），不过至少在太阳光谱中，这些谱线存在显著混合。也可以通过以下方式推断氧丰度
f来自分子诊断指标，尤其是紫外线和红外线中的 OH 谱线（Israelian 等，1998；Boesgaard 等，1999；Meléndez &
Barbuy 2002），不过这类谱线通常对恒星对流的影响更为敏感（例如 Asplund 和 García
Pérez 2001；Amarsi 等，2021）。

丰度测定的准确性在很大程度上取决于辐射跃迁概率的可靠性。此外，若要放宽局部热力学平衡（LTE）假设——对于 O I 777 nm 三重线及其他高激发态允许氧原子谱线而言，这是必要的（例如，Steffen 等，2015；Amarsi 等，2016）——则需要一组大量且可靠的跃迁概率，才能准确确定统计平衡。

原子氧的大多数跃迁概率来自理论计算。美国国家标准与技术研究院原子光谱数据库（NIST-ASD；参见Kramida等人（2022））中列出的 Oi 的跃迁概率和振子强度由Wiese等人(1996)根据Hibbert等人(1991)、Butler与Zeippen(1991)以及Biemont与Zeippen(1992)的理论计算汇编而成。Hibbert等人(1991)计算了多种跃迁的振子强度，其中包括 a

★ 完整的能级表（表 A.1）和跃迁数据表（表 A.2）仅以电子格式提供，可通过匿名 FTP 访问 CDS，地址为 cdsarc.cds.unistra.fr (130.79.128.5)，或访问 https://cdsarc.cds.unistra.fr/cgi-bin/qcat?J/A+A/.

大量连接中性氧$n \leq 4$三重态和五重态的允许跃迁，采用CIV3代码。 Butler与Zeippen(1991)在国际不透明度计划框架下，计算了 OI中允许跃迁的振子强度。Biemont与Zeippen(1992)使用原子结构计算程序SUPERSTRUCTURE，计算了$2p$-$3s$和$3s$-$3p$ 中具有天体物理学意义的自旋允许或自旋禁戒跃迁。

OI另有若干其他计算结果。完整的已发表论文列表可从 NIST 原子跃迁概率文献数据库（Kramida 2023）中检索。Tachiev & Froese Fischer (2002)采用多组态 Hartree–Fock 方法（多组态 Hartree–Fock 方法）进行了计算，在后续的组态相互作用计算中纳入了 Breit–Pauli 效应，并确定了类氧序列（原子序数为 Z = 8-20）的所有精细结构能级（最高至 $2p^3 3d$ ）。 Zheng & Wang (2002)采用最弱束缚电子势模型理论计算了 OI的原子数据，包括辐射寿命、跃迁概率和振子强度。Tayal (2009)采用基于 B 样条盒的 R 矩阵方法，并使用 Breit–Pauli 形式，计算了 $n$= 2–4 能级之间允许跃迁的振子强度，以及中性氧中 $n$ = 2 能级到最高至 $n$ = 11 的较高激发能级的跃迁振子强度。

本文中，我们采用多组态狄拉克-哈特里-福克（MCDHF）和相对论组态相互作用（RCI）方法，对 OI的最低 81 个态的原子数据进行了扩展计算。这些计算是一个更大型项目的一部分，该项目聚焦于天体物理学上重要的 C、N、O 中性元素；此前已报道了 C I (Li et al. 2021) 和 NI (Li et al. 2023) 的大量研究结果。我们计算了电偶极（E1）跃迁数据（波长、跃迁概率、谱线强度和加权振子强度），以及这些态相应的寿命。随后，我们考察计算所得 log(gf) 的差异可能如何影响太阳氧丰度，进而影响太阳建模问题。

## 2. 理论方法

### 2.1. 多组态狄拉克–哈特里–福克方法

计算采用 GRASP2018 软件包[1] (FroeseFischer et al. 2019; Jönsson et al. 2023)，该软件包基于 MCDHF 和 RCI 方法。MCDHF 方法的详细介绍见 Grant (2007)、Froese Fischer et al. (2016)、FroeseFischer et al. (2019) 以及 Jönssonetal.(2023)。此处仅作简要介绍。

在 MCDHF 方法中，原子态 Ψ 的波函数 $\gamma^{(j)} PJM$、$j$ = 1、2、. . .、$N$ 具有角动量量子数$JM$ 和宇称 $P$，展开为 $N_{\rm CSFs}$ 组态态函数（CSFs）

$$\Psi(\gamma^{(j)} PJM) = \sum_{i}^{N_{\rm CSFs}} c_i^{(j)} \Phi(\gamma_i PJM). \tag{1}$$

CSFs 是由单电子狄拉克轨道乘积构成的 $jj$-耦合多电子函数。至于符号，$J$ 和 $M$ 是角量子数，$P$ 是宇称，而 $\gamma_i$ 指定 CSF 的占据子壳层及其完整的角耦合树信息，例如轨道占据、耦合方案以及其他唯一描述 CSFs 所需的量子数。

单电子轨道的径向大分量和小分量以及 CSFs 的展开系数 $\{c^{(j)}{}_i\}$ 通过相对论自洽场程序获得，即求解狄拉克-哈特里-福克径向方程以及由对目标态的统计加权能量泛函应用变分原理（并添加保持单电子轨道正交归一性的项）所得到的组态相互作用本征值问题。构建能量泛函所需的角积分基于耦合张量形式的二次量子化方法（Gaigalas et al.1997、2001），并计入相对论运动学效应。一旦确定了单电子轨道的径向分量，便将高阶相互作用（如横向光子相互作用和量子电动力学效应（真空极化和自能））加入狄拉克-库仑哈密顿量。在径向分量保持固定的情况下，通过求解组态相互作用本征值问题获得目标态 CSFs 的展开系数 $\{c^{(j)}{}_i\}$。

两个态 $\gamma' P' J'$ 和 $\gamma PJ$之间的跃迁数据，例如跃迁概率和加权振子强度，可用跃迁算符 $\mathbf{T}^{(1)}$的约化矩阵元表示：

$$\langle \Psi(\gamma PJ) \| \mathbf{T}^{(1)} \| \Psi(\gamma' P' J') \rangle = \sum_{j,k} c_j c'_k \langle \Phi(\gamma_j PJ) \| \mathbf{T}^{(1)} \| \Phi(\gamma'_k P' J') \rangle, \tag{2}$$

其中 $cj$ 和 $c'_k$ 分别是低能态和高能态 CSF 的展开系数。求和遍及两个 CSF 展开中包含的所有基态（1）。

### 2.2. dT 和 CF

在相对论理论中，E1 跃迁算符有两种常见表示：Babushkin 规范和库仑规范；在非相对论极限下，它们分别等价于长度形式和速度形式。与后两者一样，假设波函数是狄拉克方程的精确解，则 Babushkin 和库仑跃迁矩的数值相同（Grant1974）。

[1] GRASP 完全开源，可在 GitHub 仓库 https://github.com/compas/grasp 获取，该仓库由 CompAS 合作团队维护。

**表 1.** O I 计算方案摘要。

| 宇称 | 多组态狄拉克-哈特里-福克中的多参考 | RCI 中的多参考 | AS | $N_{\mathrm{CSFs}}$ |
|---|---|---|---|---|
| even | $2s^22p^3np$ $(n = 2-6)$, $2s^22p^3nf$ $(n = 4, 5)$ | $2s^22p^3np$ $(n = 2-8)$, $2s^22p^3nf$ $(n = 4, 5)$, $2s2p^4ns$ $(n = 3-7)$, $2s2p^4nd$ $(n = 3-6)$ | {12*s*, 12*p*, 11*d*, 11*f*, 9*g*, 7*h*} | 12 641 532 |
| odd | $2s^22p^3ns$ $(n = 3-6)$, $2s^22p^3nd$ $(n = 3-5)$ | $2s^22p^3ns$ $(n = 3-7)$, $2s^22p^3nd$ $(n = 3-5)$ | {12*s*, 12*p*, 11*d*, 11*f*, 9*g*, 7*h*} | 7 683 274 |

**注释**。MR 和 AS 分别表示计算中使用的多参考轨道组和活性轨道组。$N_{\mathrm{CSFs}}$ 表示最终 RCI 计算中生成的 CSF 数量。

对于近似可实际获得的解，跃迁矩会有所不同，量 d$T$ 定义为

$$\mathrm{d}T = \frac{|A_{\mathrm{B}} - A_{\mathrm{C}}|}{\max(A_{\mathrm{B}}, A_{\mathrm{C}})}, \tag{3}$$

其中 $A_{\mathrm{B}}$ 和 $A_{\mathrm{C}}$ 分别是 Babushkin 形式和 Coulomb 形式下的跃迁速率（Froese Fischer 2009；Ekman 等，2014），可用于从统计意义上评估一组跃迁的计算速率的不确定性。

也可以通过研究相消因子（CF）来评估计算所得跃迁数据的准确性，其定义为（Cowan 1981）

$$\mathrm{CF} = \left[\frac{|\sum_j \sum_k c_j \langle \Phi(\gamma_j PJ) \| \mathbf{T}^{(1)} \| \Phi(\gamma'_k P'J') \rangle c'_k|}{\sum_k \sum_j |c_j \langle \Phi(\gamma_j PJ) \| \mathbf{T}^{(1)} \| \Phi(\gamma'_k P'J') \rangle c'_k|}\right]^2, \tag{4}$$

其中符号与公式（1）和（2）中的相同。CF 值较小，例如小于 0.1 或 0.05（Cowan1981），表明计算所得跃迁参数（如跃迁速率或线强度）会受到强烈相消效应的影响。这是由于相位相反但振幅几乎相等的基组态之间发生组态相互作用，导致线强度相对较小。CF 较小的跃迁通常具有较大的不确定性；因此，CF 可作为 d$T$ 值的补充，用于估算不确定性。在本工作中，我们扩展了 Grasp2018 软件包（Froese Fischer 等，2019；Jönsson 等，2023），使其能够计算 CF。

### *2.3.* 计算方案

计算采用扩展最优能级（EOL）方案（Dyall 等，1989），针对偶态（最高至 $2s^22p^35f$）和奇态（最高至 $2s^22p^35d$）的加权平均进行。CSF 展开采用多参考单激发-双激发（MR-SD）方法获得，该方法允许从 MR 构型向活性轨道组（AS）中的轨道进行单激发和双激发（SD）（Olsen 等，1988；Sturesson 等，2007；Froese Fischer 等，2016）。）。除表示物理态的目标构型外，MR 中还纳入了若干对总波函数有显著贡献的构型。相对于目标构型，从这种扩展 MR 进行 SD 激发，可将更高阶的组态相互作用贡献纳入波函数。偶宇称和奇宇称对应的两组 MR 列于表 1，表中还给出了 AS，以及最终偶态和奇态展开中按不同 J 对称性分布的 CSF 数量。

与用于碳 I-IV (Li et al. 2021) 和中性氮I (Li et al. 2023) 的计算方案类似，按照 Papoulia et al. (2019) 提出的 CSF 生成策略，MCDHF 计算基于 CSF 展开，并对从内层亚壳层进行的替代施加限制，以便更好地描述高里德伯态波函数的外部部分，从而提高跃迁数据的精度。在初始计算中，我们通过允许从 $1s^2$ 最多进行一次替代，研究了核价（CV）关联对结果的贡献，并发现 CV 贡献可以忽略。因此，在 MCDHF 和 RCI 计算中，$1s^2$ 核均保持冻结。后续 MCDHF 计算所用的 CSF 展开通过允许目标组态的 $2p$ 轨道向活性轨道组进行 SD 替代而得到。在这一阶段，1s 和 $2s$ 轨道保持闭合。目标态的最终波函数通过 RCI 计算确定，其中包含的 CSF 展开通过允许 MR 组态中所有满足 $n = 2$ 的亚壳层进行 SD 替代而构成。

## 3. 结果与讨论

### *3.1.* 能级和寿命

表 A.1 列出了中性氧最低的 81 个态（45 个偶宇称态和 36 个奇宇称态）的能量。在计算中，本征态的标记由式（1）展开中系数最大的 CSF 决定。为便于比较，表中还列出了 NIST-ASD（Kramida等人（2022））中的观测能量，以及差值 $\Delta E = E_{\mathrm{NIST}} - E_{\mathrm{MCDHF}}$。在大多数情况下，理论结果与实验结果之间的相对差异小于 0.2%；但基态组态 $2s^22p^4$, 所属能级除外，其平均相对差异约为 1.16%。图 1 展示了 NIST-ASD 数值与本文计算数据之间的能量差异 $\Delta E$ 随激发能 $E_{\mathrm{RCI}}$ 的变化。从线性拟合可以看出，计算所得的激发能存在 0.25% 的系统误差。我们发现

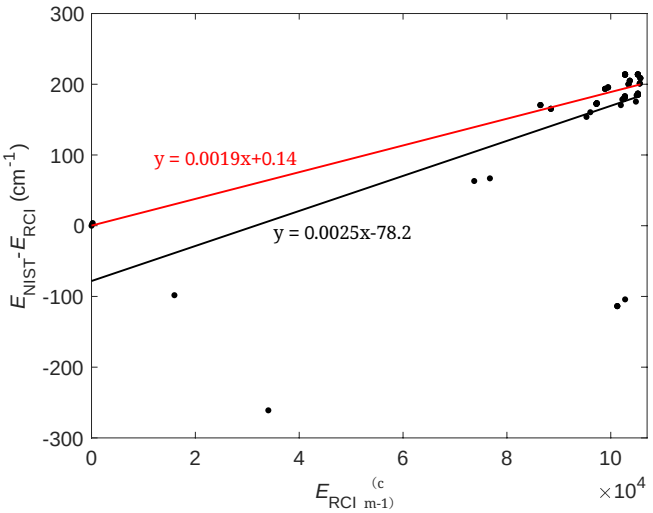


**图 1.** 能量差异及本文计算得到的激发能。黑色实线为图中所示散点数据的线性拟合。红色实线为排除 $2s^22p^4\ ^1D_2$, $^1S_0$, $2s^22p^33s\ ^5S_2$, $^3S_1$, $^3D^{1,2,3}$, 和 $^1D_2$ 态后的线性拟合。

对于大多数能级，计算结果比 NIST-ASD 数值低约 170–190 cm$^{-1}$，但属于 2s$^2$2p$^4$ 和 2s$^2$2p$^3$3s 的少数几个态除外。排除这些能级，即 2s$^2$2p$^4$ $^1$D$_2$, $^1$S$_0$, 2s$^2$2p$^3$3s $^5$S$_2$, $^3$S$_1$, $^3$D$^{1,2,3}$, 和 $^1$D$_2$, 后，系统误差降至 0.19%。表 A.1 的最后两列还列出了根据 Babushkin 规范和库仑规范下计算的 E1 跃迁率得到的寿命。除少数态外，Babushkin 规范与库仑规范之间的相对差异均远低于 5%；这些例外态向较低态的衰变主要由自旋禁戒跃迁主导。

表 2 将本文 MCDHF/RCI 计算得到的寿命与其他理论计算和实验测量的现有结果进行了比较。对于所有选定的跃迁，Babushkin 规范和库仑规范下计算的寿命相差不超过 6.0%。此外，亚稳态 2p$^3$3s $^5$S$_2^o$ 的原子性质因其在天体物理诊断中的潜在应用而颇受关注。Zhang 等（2020）使用 MCDHF 方法系统研究了 2p$^3$3s $^5$S$_2^o$ 态的寿命，并推荐 Babushkin 规范下的 202±30 μs 和库仑规范下的 235±35 μs 作为最终值。我们计算得到的 209/213 μs（分别对应 B/C 规范）与其结果吻合良好。Tachiev & Froese Fischer（2002）的 MCHF 计算得到的寿命大得多，这可能是由于忽略了电子相关效应和相对论效应。然而，各种计算得到的理论寿命仍高于 Wells & Zipf（1974）、Johnson（1972）、Nowak 等（1978）和 Mason（1990）使用飞行时间技术报告的实验值。还值得注意的是，Tayal（2009）基于基于 B 样条盒的 R 矩阵方法得到的 3s $^3$D$^o$、4s $^3$S$^o$、4d $^5$D$^o$和 4d $^3$D$^o$ 态的理论寿命，与另外三种理论方法的结果存在显著差异。这三种方法包括：Tachiev & Froese Fischer（2002）使用在 ATSP 代码中实现的 MCHF 方法（Froese Fischer 2000；Froese Fischer 等，2007），以及 Hibbert 等（1991）和 Biemont & Zeippen（1992）分别使用 CIV3（Hibbert 1975）和 SUPERSTRUCTURE 代码（Eissner，W. 1991）进行的组态相互作用（CI）计算。

例如，Brooks 等人（1977）采用电子束相移法，Kröll 等人（1985）采用时间分辨激光光谱法，以及 Smith 等人（1971）和 Pinnington 等人（1974）采用束箔技术，均报道了多项 O I 寿命测量结果。Brooks 等人（1977）的测量结果与我们计算的 3s $^3$S$^o$、$^3$D$^o$ 和 5d $^3$D$^o$ 态寿命在实验误差范围内一致，但对 4s、5s $^3$S o 和 4d $^3$D$^o$ 态的测量结果则存在较大差异。我们得到的 3s $^3$S$^o$、$^3$D$^o$ 和 $^1$D$^o$ 态寿命，与 Smith 等人（1971）采用束箔法发表的实验结果吻合良好；而 Pinnington 等人（1974）采用相同实验技术测得的数值略大。Kröll 等人（1985）和 Bromander 等人（1978）分别采用时间分辨光谱法和高频偏转技术，测量了 O I 中 ns、np 和 nd 态的寿命。Kröll 等人（1985）的结果在实验误差范围内与我们的理论寿命一致；而与理论预测值相比，Bromander 等人（1978）的结果则有的过大，有的过小。对于 3s $^3$S$^o$ 态，除 Savage 和 Lawrence（1966）测得的寿命明显偏大外，我们的结果与所有实验数据均吻合良好。

### *3.2.* 跃迁速率和振子强度

表 A.2 列出了所有计算所得 E1 跃迁的跃迁数据，包括波长、谱线强度 (S)、加权振子强度 (log($gf$))、跃迁概率 ($A$)、规范一致性、d$T$、相消因子 CF，以及估算的准确度等级A.2。需要注意的是，所报告的波长已作调整，以与 NIST-ASD 中的能级能量相匹配。log($gf$) 和 $A$ 的数据以巴布斯金规范和库仑规范两种形式报告，并根据实验波长进行了调整。

**表 2.** 巴布申斯基（硼）和库仑（碳）规范下寿命的比较（B/C），以及与其他理论（Other Theo.）和实验（Exp.）结果的比较。

| 态 | Unit | 寿命 目前 | 其他理论。 | Exp. |
|---|---|---|---|---|
| $2p^3 3s\ {}^5S^o$ | $\mu$s | 209/213 | 528[a], 202/235[d], 200[e] | 170±25[f], 185±10[g], 180±5[h], 185±30[i] |
| $2p^3 3s\ {}^3S^o$ | ns | 1.70/1.69 | 1.76[a],1.61[b], 1.73[c], 1.63[e] | 2.4±0.3[j], 1.7±0.3[k], 1.7±0.2[l], 1.82±0.05[r], 1.79±0.17[p]，1.70±0.15[m]，1.70±0.14[n]，1.8±0.27[o] |
| $2p^3 3s\ {}^3D^o$ | ns | 4.21/4.15 | 4.19[b], 4.46[c] | 3.94±0.22[p], 5.0±0.4[q], 4.5±0.675[o] |
| $2p^3 3s\ {}^1D^o$ | ns | 1.86/1.85 | | 1.77±0.14[p], 2.01±0.12[q] |
| $2p^3 4s\ {}^3S^o$ | ns | 5.74/5.67 | 5.33[a], 5.24[b], 5.04[c] | 4.0±0.6[o] |
| $2p^3 5s\ {}^3S^o$ | ns | 13.55/13.35 | | 17±3[s], 6.0±0.9[o] |
| $2p^3 6s\ {}^3S^o$ | ns | 26.82/25.22 | | 24±3[s] |
| $2p^3 3p\ {}^3P$ | ns | 32.12/32.73 | 32.70[a], 29.68[b] | 36±4[s], 39.1±1.4[t], 40±3[u] |
| $2p^3 4p\ {}^3P$ | ns | 182.3/181.8 | 175.4[b] | 153±10[u], 161±19[v] |
| $2p^3 4p\ {}^5P$ | ns | 200.2/212.0 | 189.7[b] | 193±10[u], 194±19[v] |
| $2p^3 4d\ {}^5D^o$ | ns | 72.15/73.21 | 72.20[b], 96.64[c] | 96±4[u], 95±9[v] |
| $2p^3 4d\ {}^3D^o$ | ns | 15.31/15.41 | 16.85[b], 12.91[c] | 23±3[s], 20±3[o], 80±10[u] |
| $2p^3 5d\ {}^3D^o$ | ns | 31.13/32.12 | | 36±4[s], 30±4.5[o] |

注：aTachiev & Froese Fischer（2002）；bHibbert 等（1991）；cTayal（2009）；dZhang 等（2020）；eBiemont & Zeippen（1992）；f Wells & Zipf（1974）；gJohnson（1972）；hNowak 等（1978）；iMason（1990）；jSavage & Lawrence（1966）；kGaillard & Hesser（1968）；lDruetta & Poulizac（1970）；mMartinson 等（1971）；nLin 等（1972）；oBrooks 等（1977）；pSmith 等（1971）；qPinnington 等（1974）；rLawrence（1970）；s Kröll 等（1985）；tBischel 等（1981，1982）；uBromander 等（1978）；vDay 等（1981）。请注意，Brooks 等（1977）结果的实验不确定度按其上限给出，即 15%。

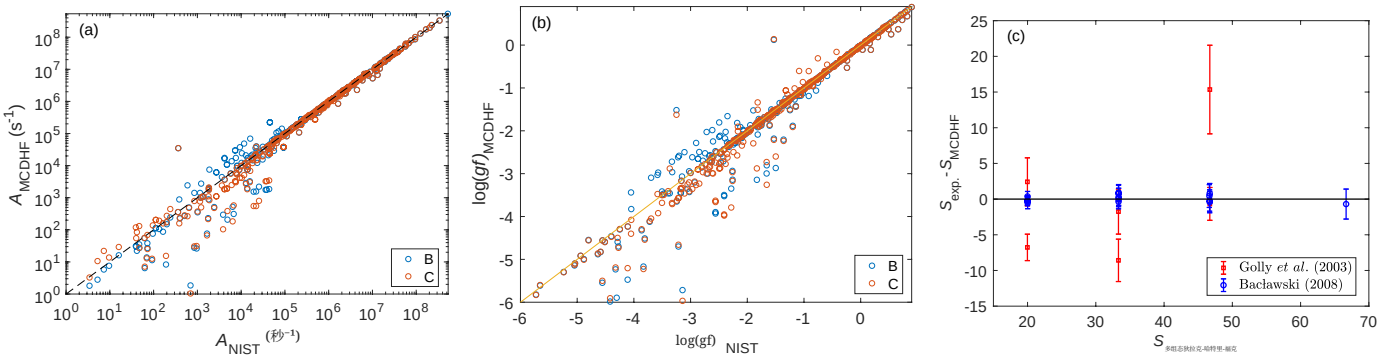


**图 2.** 将本研究的跃迁数据与其他研究的数值进行比较。(a) 面板：理论跃迁概率$A$在 Babushkin（硼）规范和 Coulomb（碳）规范下与 NIST-ASD 中公布的结果进行比较（Kramida等人（2022））。(b) 面板：Babushkin形式下 log($gf$) 数值与 CIV3（Hibbert 等人，1991年）、MCHF（Tachiev & Froese Fischer，2002年）和 B 样条 R 矩阵（Tayal，2009年）计算结果的比较。(c) 面板：理论谱线强度$S$ 多组态狄拉克-哈特里-福克与 Golly 等人发表的相应实验结果（Golly 等人 (2003年)（红色方块）以及Bacławski (2008年)（蓝色圆点）进行比较。请注意，Bacławski (2008年) 提供的是相对谱线强度，即每个多重线组内的谱线强度均归一化，使其总和为 100；本研究计算结果及Golly 等人 (2003年) 的相应结果也采用相同处理方法。比较时使用 Babushkin 规范下的谱线强度。

### 3.2.1. 与以往理论结果的比较

将计算得到的跃迁结果与其他理论研究进行比较。图 2 左图中，本 工作在 Babushkin 规范和库仑规范下的 A 值与 NIST-ASD（Kramida等人（2022））提供的数据进行比较，这些数据汇编自 Hibbert 等人（1991）、Biemont 和 Zeippen （1992）以及 Butler 和 Zeippen （1991）的研究。前两项计算分别使用 CIV3 和 SUPERSTRUCTURE 代码完成。后一项研究则是在国际不透明度计划的框架下开展的。

如图所示，本研究计算的$A$值与 NIST-ASD 相应结果总体上吻合良好，尤其是对于$A_B \geq 10^5$ s$^{-1}$的跃迁。以 Babushkin 规范下的结果为例，所选 380 个跃迁中有 70% 与 NIST-ASD 数据吻合，差异小于 20%。在具有$A_B \geq 10^5$ 的 236 个跃迁中，有 204 个与 NIST-ASD 数据吻合，相对差异小于 10%。值得注意的是，对于具有 $10^3 \leq A \leq 10^5$ s$^{-1}$ 的跃迁，库仑规范下的跃迁数据比 Babushkin 规范下的数据与 NIST-ASD 结果更加一致。仔细检查这些跃迁后，我们发现其中大多数涉及高里德伯态。例如，其中 74% 是从$n = 5$，6 个态跃迁至较低能级的跃迁。对于这一类

**表 3.** Babushkin (B) 和 Coulomb (C) 两种规范中 $gf$ 值的比较，B/C，以及现有实验 (Exp.) 结果。

| | | | $gf$ | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 上部 | 较低的 | $\lambda_{vac}$(nm) | 本工作 | 实验.[a] | 其他实验 |
| $2p^3 3s\ ^3S^o_1$ | $2p^4\ ^3P_0$ | 130.603 | 0.0499/0.0501 | | 0.05±0.01[b]，0.05±0.005[c]，0.047±0.0014[d]，0.047±0.0047[e]，0.048±0.0048[f]，0.050±0.0050[g]，0.05±0.0115[h]，0.052±0.0052[i]，0.045±0.009[j]，0.053±0.00318[k] |
| $2p^3 3s\ ^1D^o_2$ | $2p^4\ ^1D_2$ | 115.215 | 0.535/0.538 | 0.49±0.039 | 0.526±0.083[b], 0.526±0.055[d], 0.56±0.04[e], 0.50±0.05[f]，0.51±0.026[g]，0.50±0.03[l] |
| $2p^3 4s\ ^3S^o_1$ | $2p^4\ ^3P_0$ | 104.169 | 0.00827/0.00841 | 0.0089±0.0015 | |
| $2p^3 4s\ ^3S^o_1$ | $2p^4\ ^3P_1$ | 104.094 | 0.0249/0.0252 | 0.029±0.0049 | |
| $2p^3 4s\ ^3S^o_1$ | $2p^4\ ^3P_2$ | 103.923 | 0.0417/0.0423 | 0.048±0.0072 | |
| $2p^3 3d\ ^3D^o_{1,2}$ | $2p^4\ ^3P_1$ | 102.743 | 0.0627/0.0624 | 0.069±0.010 | |
| $2p^3 3d\ ^3D^o_1$ | $2p^4\ ^3P_0$ | 102.816 | 0.0209/0.0208 | 0.024±0.0031 | |
| $2p^3 3s\ ^3D^o_1$ | $2p^4\ ^3P_0$ | 99.080 | 0.0570/0.0577 | 0.052±0.0047 | |
| $2p^3 3s\ ^3D^o_1$ | $2p^4\ ^3P_1$ | 99.013 | 0.0442/0.0448 | 0.042±0.0042 | |
| $2p^3 3s\ ^3D^o_2$ | $2p^4\ ^3P_1$ | 99.020 | 0.128/0.130 | 0.11±0.0121 | |
| $2p^3 3s\ ^3D^o_2$ | $2p^4\ ^3P_2$ | 98.865 | 0.0457/0.0463 | 0.051±0.0071 | |
| $2p^3 3s\ ^3D^o_3$ | $2p^4\ ^3P_2$ | 98.877 | 0.243/0.246 | 0.22±0.044 | |

注释。aGoldbach & Nollez（1994）；bGaillard & Hesser（1968）；cDruetta & Poulizac（1970）；dLawrence（1970）；eSmith 等（1971）；f Martinson 等（1971）；gLin 等（1972）；hOtt（1971）；iKikuchi（1971）；jClyne & Piper（1976）；kJenkins（1985）；lPinnington 等（1974）。本研究计算所得结果已根据实验波长进行了调整。

跃迁，我们建议采用库仑规范下计算的辐射数据，而非更常用的 Babushkin 规范。根据 Papoulia 等人(2019)，这是因为基于通过纳入较深亚层的替换而得到的 CSF 展开进行 MCDHF 计算时，所得的关联轨道相较于外层里德伯轨道更为收缩。因此，较为扩展的里德伯态波函数的外部区域无法得到准确描述。由此可以认为，对于涉及高激发里德伯态的跃迁，侧重于波函数内部区域的库仑规范应比 Babushkin 规范给出更可靠的跃迁数据。然而，对于涉及低激发态的跃迁，除一些具有A $< 10^2$ $s^{-1}$且两种规范之间差异显著的弱跃迁外，我们计算得到的两种规范下的跃迁速率彼此非常一致；对于这些两种规范结果差异较大的跃迁，通常优先采用 Babushkin 形式，因为它对波函数的外部区域更为敏感，而该区域决定原子跃迁（Grant 1974；Hibbert 1974）。

此外，图 2 中间面板将 Babushkin规范下计算得到的 log(g f ) 值与 Tayal（2009）、Tachiev & Froese Fischer（2002）和 Hibbert 等（1991）的不同计算结果进行了比较；这些结果分别采用 B 样条 R 矩阵、CI 和多组态 Hartree–Fock 方法计算。从图中可以看出，对于 log(g f ) $> -1.5$ 的跃迁，本研究结果与另外三组理论值高度一致。然而，对于较弱的 log(g f ) $<-1.5$ 跃迁，不同方法之间的一致性较差，结果分散范围更大。总体而言，本研究的 log(g f ) 值与 Tachiev & Froese Fischer（2002）和 Hibbert 等（1991）的结果比与 Tayal（2009）的结果更加一致。

### 3.2.2. 与现有实验结果的比较

表 3 将计算得到的 g f 值与一些现有的实验测量结果进行了比较。Goldbach 和 Nollez（1994）使用壁稳定电弧测量了 95–120 nm 光谱范围内属于 5 个多重态的 12 条 O I 谱线的 log(g f) 值。测得的绝对 g f 值的不确定度介于 ±10 和 ±20% 之间。我们在两种规范下计算得到的 g f 结果与 Goldbach 和 Nollez（1994）的测量值高度吻合，但 115.215 nm 和 99.080 nm 谱线除外；对于这两条谱线，我们预测的数值略大（高出 2%）。对于 115.215 nm 谱线，还采用了各种技术获得了其他 g f 值测定结果，例如束箔技术（Smith 等，1971；Martinson 等，1971；Lin 等，1972；Pinnington 等，1974）、相移技术（Gaillard 和 Hesser，1968）以及脉冲电子束技术（Lawrence，1970）。从表 3 可以看出，不同方法得到的结果非常一致，我们的计算值也与这些结果很好地吻合。对于 130.6 nm 谱线，也进行了多次 g f 值测量。同样，不同测量所得结果彼此完全一致，并且与我们在 Babushkin 规范和库仑规范下计算得到的结果也完全一致。此外，Bridges 和 Wiese（1998）测量了 $2p^3 3s\ ^3S^o - 4p\ ^3P$ 和 $3s\ ^5S^o - 2p^3 4p\ ^5P$ 组的跃迁概率，分别得到 $7.62 \times 10^5$ $s^{-1}$ 和 $3.64 \times 10^5$ $s^{-1}$ 的数值。对于 $2p^3 3s\ ^3S^o - 2p^3 4p\ ^3P$ 组，我们的计算结果在实验误差范围内与实验值一致；而对于 $2p^3 3s\ ^5S^o - 2p^3 4p\ ^5P$ 组，在考虑实验不确定度后，我们预测的跃迁概率略大，约高出 5%。

此外，还有针对可见光和红外线谱线的谱线强度测量（Golly 等人 2003年；Bacławski 2008年）。在图2 (c)中，将Babushkin规范下计算得到的$S$ 值与Golly 等人 (2003年)和

**表4.** 根据跃迁速率大小，对 O I 中计算得到的跃迁速率的 d$T$ （%）分布及 CF 进行统计。分析基于按实验波长调整后的数据。

| 组别 | $A$ ($s^{-1}$) | No. | ⟨d$T$⟩ (%) | d$T$ < 20% (& 碳F > 0.05) (%) | d$T$ < 10%（和 CF > 0.05） (%) | d$T$ < 5% (& 碳F > 0.05) (%) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| g1 | $10^0$–$10^2$ | 226 | 28.32 | 58.8 (0.4) | 38.1 (0.4) | 23.5 (0.0) |
| g2 | $10^2$–$10^4$ | 147 | 17.03 | 74.8 (24.5) | 72.1 (23.1) | 57.1 (12.2) |
| g3 | $10^4$–$10^6$ | 221 | 17.99 | 75.6 (65.2) | 63.3 (54.3) | 52.5 (45.7) |
| g4 | $10^6$– | 166 | 2.29 | 100.0 (95.8) | 98.8 (94.6) | 86.7 (82.5) |

**表 5.** 精度等级（准确度）的 d$T$ 或 d$\tilde{T}$ 限值与 CF 的关联。

| Acc. | Unc. (%) | d$T$ 或 d $\tilde{T}$ (%) | CF | $N$ | $N_{acc.}$ g1 | g2 | g3 | g4 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| A | ≤ 3 | ≤ 3 | ≥ 0.1 | 80 | 0 | 0 | 0 | 80 |
| B | ≤ 10 | > 3 & ≤ 10<br>≤ 3 | ≥ 0.1<br>< 0.1 | 125 | 0 | 0 | 41 | 84 |
| C | ≤ 25 | > 10& ≤ 25<br>>3& ≤ 10 | ≥ 0.1<br>< 0.1 | 317 | 70 | 111 | 134 | 2 |
| D | ≤ 50 | > 25& ≤ 50<br>或 >10& ≤ 25 | ≥ 0.1<br>< 0.1 | 269 | 110 | 20 | 19 | 0 |
| E | > 50 | > 50<br>> 25& ≤ 50 | < 0.1 | 198 | 46 | 16 | 27 | 0 |

**注释。** $N$ 是根据 d$T$ 指标得出的、属于特定精度等级的计算跃迁总数。$N$是表4中定义的每个跃迁组内属于特定精度等级的跃迁数。请注意，此统计分析使用 Babushkin 规范下的 CF。A、B、C、D和E类分别包括 NIST-ASD 定义的 {A, A、AA}、{B、B}、{C、C}、{D、D} 和 E 类。相应的不确定度（不确定度）限值见第二列。

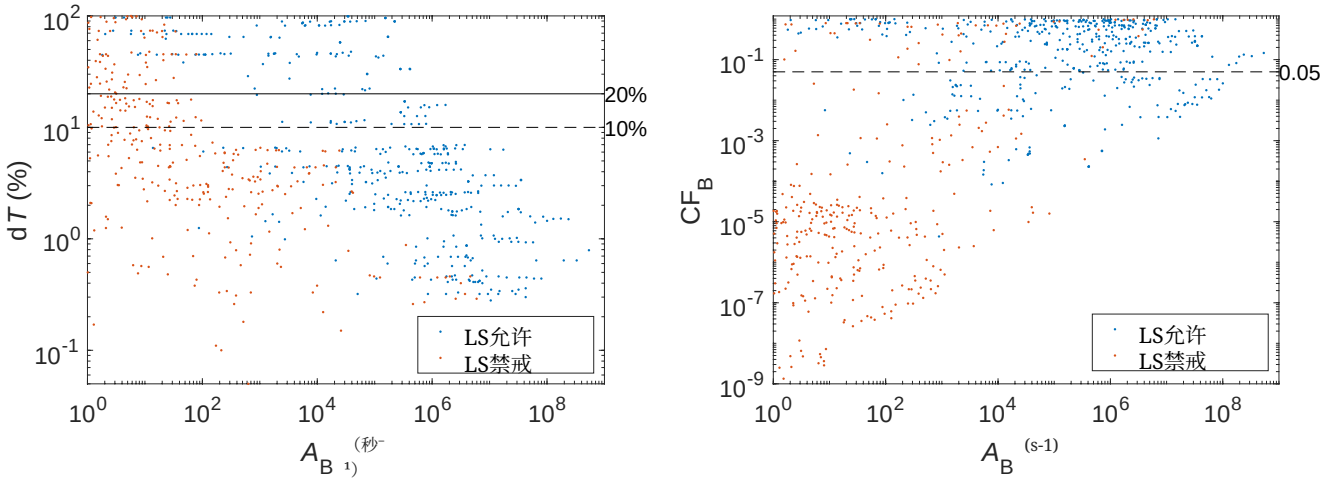


**图 3.** O I 的 E1跃迁中，d$T$和 CF 值随跃迁速率 $A$ 变化的散点图。左图：Babushkin形式下，E1跃迁的 d$T$值随跃迁速率 $A_B$ 变化的散点图，其中 $A_B > 10^0\,s^{-1}$。右图：与左图相同，但显示相消因子 CF。蓝色和红色分别表示允许的*LS*跃迁和禁戒的*LS*跃迁。

Bacławski (2008年)给出的谱线强度之差与计算谱线强度的关系图。请注意，Bacławski (2008年)提供了多重态内的相对谱线强度（归一化至100）；因此，图2 (c)中用于比较的所有数值都已转换为相对值。可以看出，我们计算的所有谱线强度均与Bacławski(2008年)的结果在报告的实验不确定度范围内一致。然而，与Golly 等人(2003年)的结果相比，在 $2p^3 3p\ ^5P - 2p^3 3d\ ^5D^o$ 跃迁阵列中观察到较大差异；对于该阵列，我们的计算结果与Bacławski (2008年)的结果完全一致。

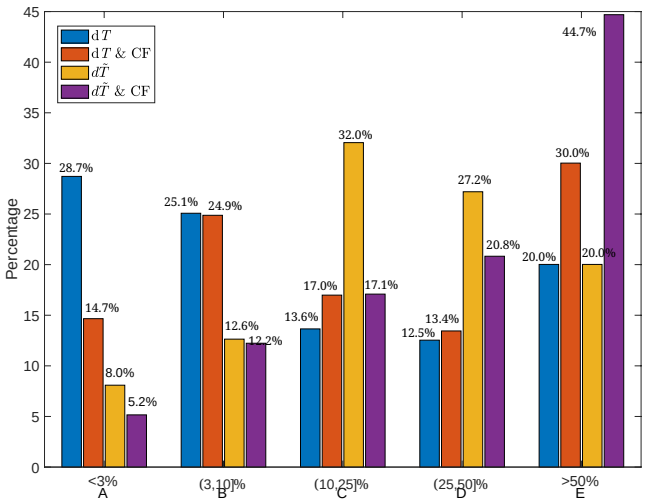


**图 4.** 不同不确定性类别下 O I 中所有跃迁的百分比分布：A（不确定性 ≤ 3%）、B（3% ＜ 不确定性 ≤ 10%）、C（10% ＜不确定性 ≤ 25%）、D（25% ＜不确定性 ≤ 50%）和 E（不确定性 ＞ 50%）；不确定性估计分别基于仅使用 d*T* 值（蓝色）、d*T*&CF 值（红色）、d ˜*T*（橙色）以及 d ˜*T*&CF 值（紫色）。

### 3.2.3. 使用 d*T* 和 CF 进行不确定性估计

目前有多种方法用于估算计算所得跃迁速率的不确定度（Kramida 2014；FroeseFischer 2009；Ekman 等，2014；El-Sayed2021；Gaigalas 等，2020）。然而，估算计算所得跃迁速率的不确定度并非易事，不同方法可能仅适用于特定系统和电离阶段。如第2.2节所述（见公式（3）和（4）），本研究尝试利用dT和 CF 值评估不确定度。

图3 展示了 d*T* （左图）和 CF（右图，采用 Babushkin规范）相对于$A < 10^0$ s$^{-1}$ （采用 Babushkin 规范）的散点图。由于跃迁速率为 *A* 的弱跃迁对于不透明度计算或光谱丰度分析等天体物理研究通常不太重要，因此图中忽略了这些跃迁。图中用不同颜色表示*LS* 允许跃迁和 LS 禁戒跃迁ff。总体而言，如图3所示，跃迁速率*A* 较大或属于 LS允许跃迁的较强跃迁，其 *d*T值总是较小，*CF* 值则较大，这表明这些跃迁的不确定度较小。然而，较弱的跃迁大多是 *LS*禁戒的互组合跃迁，它们的 CF 值较小，且受到抵消效应的显著影响。所有图3中所示 E1跃迁的平均 dT（*CF*）为 17.4%（0.27）。

为了更好地展示计算所得跃迁速率的 dT 和 CF 参数，以及它们相对于跃迁速率 A 大小的分布，我们根据 A 值的大小将跃迁分为四组（g1 - g4），如表4所示。前三组包含 A 不超过 $10^6$ s$^{-1}$ 的弱跃迁，最后一组则包含 A $\geq 10^6$ s$^{-1}$ 的强跃迁。每组均给出了 ⟨dT⟩ 的平均值。第四组跃迁的 ⟨dT⟩ 仅为 2.29%，这表明对于 A $\geq 10^6$ s$^{-1}$ 的强跃迁，计算精度非常高。此外，还对每组跃迁中 CF > 0.05 和/或不同 dT 值（即 dT ＜20%、dT ＜10% 和 dT ＜5%）所占的比例进行了统计分析，结果列于表4的最后三列。

根据 dT 和 CF 的值，我们采用四种方法估算了每个跃迁的精度等级。第一种方法采用式（3）中定义的 dT 值作为每个跃迁速率的不确定度。第二种方法中，各精度等级对应的 dT 和 CF 定义见表 5。此外，第三种方法根据 A 值的大小将跃迁分为六组，即 A ＜$10^{-2}$ s$^{-1}$, $10^{-2} \leq$ A ＜$10^1$ s$^{-1}$, $10^1 \leq$ A ＜$10^3$ s$^{-1}$, $10^3 \leq$ A ＜$5\times10^5$ s$^{-1}$, $5\times10^5 \leq$ ＜3 $5\times10^6$ $^{-1}$ $\geq 3\ 5\times10^6$ ˜ = A . s，以及 A .，并计算每组的平均 dT$_{av}$。随后，我们定义 d T max(dT , dT$_{av}$)˜，以取代 dT，作为各个跃迁速率的不确定度。最后，第四种方法采用表 5 中给出的 dT 和 CF 定义作为不确定度指标。我们对属于特定精度等级的跃迁数量进行了统计分析。四种方法得到的百分比见图 4。

通过比较 d*T* 和 d*T*&CF 方法可以看出，根据 CF 的数值，某些 A 级跃迁的精度有所降低。例如，A 级˜ ˜跃迁的百分比从 28.7% 降至 14.7%。与其他两个指标相比，d*T* 和 d*T*&CF 预测，高精度类别中不确定性低于 10% 的跃迁比例较低，分别为 8.0% 和 5.2%。从图 4可以看出，仅使用 d*T* 值估算精度可能会低估不确定性。正如Ekman 等人(2014) 所得出的结论，d*T* 是跃迁速率不确定性的可靠指标，尤其适用于 *LS*允许跃迁；而对于 *LS* 禁阻跃迁，若对大量样本取平均，d*T* 可用作 ˜ ˜不确定性指标。因此，d*T* 和 d*T*&CF 指标或许能对计算得到的跃迁速率给出更“稳妥”的不确定性估计，尽管它们可能会高估不确定性，尤其是对于强 *LS*允许跃迁。

˜由 d*T* 程序预测的准确度等级列于表 A.2。对准确度等级的分布进行了统计分析，结果见表 5。总体而言，本工作计算的 989 条跃迁中有 80（205）条的不确定度为 ＜3%（＜10%），并被归入准确度等级 A（B）。在属于 A 准确度等级的 80 条跃迁中，

**表6.** 作为氧丰度诊断所使用的允许 O I 谱线。

| 上部 | 较低 | $\lambda_{air}$(nm) | log *gf* | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | 当前 | | NIST[a] | 量子缺陷理论[b] | 多方法[c] | 多方法[d] |
| | | | B | C | | | | |
| $2p^3 4d\ ^5D^o_2$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 615.815 | -1.849 | -1.851 | -1.841 | | | |
| $2p^3 4d\ ^5D^o_3$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 615.817 | -1.004 | -1.006 | -0.995 | | | |
| $2p^3 4d\ ^5D^o_4$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 615.819 | -0.418 | -0.420 | -0.409 | | | |
| $2p^3 3p\ ^5P_3$ | $2p^3 3s\ ^5S^o_2$ | 777.194 | 0.350 | 0.335 | 0.369 | 0.317 | 0.350 | 0.350±0.021 |
| $2p^3 3p\ ^5P_2$ | $2p^3 3s\ ^5S^o_2$ | 777.417 | 0.204 | 0.189 | 0.223 | 0.170 | 0.204 | 0.196±0.022 |
| $2p^3 3p\ ^5P_1$ | $2p^3 3s\ ^5S^o_2$ | 777.539 | -0.018 | -0.033 | 0.002 | -0.051 | -0.019 | -0.0296±0.021 |
| $2p^3 3p\ ^3P_0$ | $2p^3 3s\ ^3S^o_1$ | 844.625 | -0.466 | -0.474 | -0.463 | -0.493 | | |
| $2p^3 3p\ ^3P_2$ | $2p^3 3s\ ^3S^o_1$ | 844.636 | 0.233 | 0.225 | 0.236 | 0.206 | | |
| $2p^3 3p\ ^3P_1$ | $2p^3 3s\ ^3S^o_1$ | 844.676 | 0.011 | 0.003 | 0.014 | -0.015 | | |
| $2p^3 3d\ ^5D^o_2$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 926.583 | -0.739 | -0.737 | -0.718 | -0.750 | | |
| $2p^3 3d\ ^5D^o_3$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 926.594 | 0.106 | 0.108 | 0.125 | 0.096 | | |
| $2p^3 3d\ ^5D^o_4$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 926.601 | 0.693 | 0.694 | 0.712 | 0.681 | | |
| $2p^3 4s\ ^5S^o_2$ | $2p^3 3p\ ^5P_3$ | 1130.238 | 0.056 | 0.040 | 0.078 | 0.033 | | |
| $2p^3 4s\ ^3S^o_1$ | $2p^3 3p\ ^3P_1$ | 1316.389 | -0.258 | -0.263 | -0.254 | -0.280 | | |
| $2p^3 4s\ ^3S^o_1$ | $2p^3 3p\ ^3P_2$ | 1316.485 | -0.036 | -0.041 | -0.032 | -0.058 | | |
| $2p^3 4s\ ^3S^o_1$ | $2p^3 3p\ ^3P_0$ | 1316.511 | -0.735 | -0.740 | -0.731 | -0.757 | | |

注。(a)Kramida 等（2022）；(b)Civiš 等（2018）；(c)Magg 等（2022）；(d)Bautista 等（2022）。所示为上下组态、实验波长（空气中，单位 nm）以及由各种计算得到的振子强度。请注意，Magg 等（2022）在倒数第二列给出的 777 三重线的 log(g f) 值基于同时使用 GRASP 和 AUTOSTRUCTURE 代码计算的结果。Bautista 等（2022）在最后一列报告的值是通过对多种方法（MCDHF、R-矩阵、赝相对论 Hartree-Fock 方法 +芯极化效应和 CI）的结果取平均得到的。本计算的 log(g f) 结果已使用实验波长进行了调整。

这些跃迁都相当强，具有 $A \geq 10^6\ s^{-1}$ (g4)。g4 中的所有跃迁的不确定度均低于 25%；而对于 g1 组，大多数跃迁被评为 C、D 或 E 精度等级。

## 4. 太阳氧丰度

太阳氧丰度仍存在激烈争议。过去几十年间，它经历了大幅下调：从 Anders & Grevesse（1989）中的 $\log \epsilon_O \equiv \log N_O/N_H + 12 = 8.93$，降至 Asplund 等人（2005）中的 8.66。近期估值可分为“低”值（$\log \epsilon_O = 8.67$–$8.71$；Amarsi 等人，2018、2021；Asplund 等人，2021）和“中间”值（8.73–8.77；Caffau 等人，2015；Steffen 等人，2015；Bergemann 等人，2021；Magg 等人，2022）；有时也有研究提出“高”值，范围为 8.80–8.90（Socas-Navarro，2015；Cubas Armas 等人，2020）。

近期研究之间的差异之一是Amarsi et al.（2018）和Asplund et al.（2021）（低氧丰度）与Bergemann et al.（2021）和Magg et al.（2022）（中等氧丰度）所采用的Oi谱线跃迁概率。前者中，O I615.8 nm、777 nm、844.7 nm和926.9 nm特征的跃迁概率取自NIST-ASD，并基于Hibbert et al.（1991）的原子数据。另一方面，后两项研究仅基于Oi 777 nm三重线，采用了Civiš et al.（2018）利用量子缺陷理论（QDT）计算的结果，以及Bautista et al.（2022）基于多种方法结果平均值的计算。

表6 给出了不同太阳氧丰度分析（Asplund et al. 2004；Caffau et al. 2008年；Asplund et al. 2021）所采用的允许谱线。表中列出了这些谱线来自各种计算的log(gf)值。值得注意的是，在所有情况下，NIST-ASD（基于Hibbert et al. 1991）的log($gf$)值都系统地大于其他理论结果。与我们在Babushkin规范下的结果相比，它们偏小0.01至0.02 dex。此外，Civiš et al.（2018）的QDT值系统地小于其他计算结果；与我们结果的差异在0.01至0.03 dex之间。在这两种情况下，差异在Oi 777 nm三重线处最大。

图 5 展示了表 6 中关于差异相对于太阳氧丰度的结果，具体通过

$$\Delta \log \epsilon = -\Delta \log (gf) = -\left(\log (gf)_{\rm new} - \log (gf)_{\rm orig}\right), \quad (5)$$

在这种情况下，$\log (gf)_{\rm orig}$ 对应于通过 NIST-ASD 获取的 *Hibbert* 等 (1991的数据中 log($gf$) 值。可以看到，数值整体系统性偏高：Babushkin规范下平均高出 0.011 dex，库仑规范下平均高出 0.017 dex。尤其是对于 OI 777 纳米三重线，Asplund 等 (2021) 在所选原子谱线中赋予其最大权重，并采用了 $\log \epsilon_O = 8.69$（基于 Amarsi 等(2018) 的分析）；据此推得的丰度升至 $\log \epsilon_O = 8.71$。这一数值仍与这些作者根据禁戒谱线（8.70）和分子谱线（8.70）得到的结果吻合良好（另见Amarsi 等（2021））， 且处于所报 0.04 的不确定度范围内。

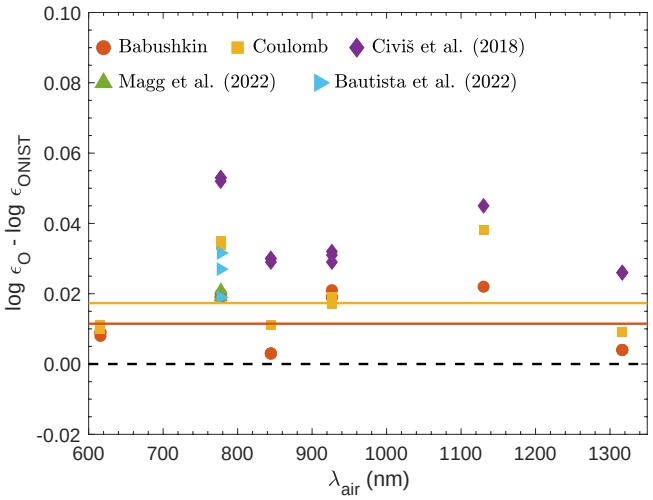


**图 5.** 采用表 6 中给出的不同理论跃迁数据推得的太阳氧丰度与 NIST-ASD 数值之间的差异。红色圆圈：本研究的 Babushkin规范。橙色方块：本研究的库仑规范。紫色菱形：Civiš 等人 (2018)。绿色上三角：Magg 等人 (2022)。蓝色右三角：Bautista 等人 (2022)。红色和蓝色实心水平线分别表示 Babushkin 规范和库仑规范的平均结果。请注意，所有*LS* 特征的权重均相同。

Amarsi 等（2018）对 O I 777 纳米三重线的结果比 Bergemann 等（2021）（8.75±0.03）和 Magg 等（2022）（8.77±0.04）基于同一谱线得到的结果低 0.06 – 0.08 dex。如图 5 所示，与 Amarsi 等（2018）采用的数据相比，Magg 等（2022）和 Bautista 等（2022）的多方法结果中 log (gf ) 的差异约为 0.02 – 0.03 dex。这些差异虽具显著性，却不是造成 0.06 – 0.08 dex 差异的主要原因。关于这些差异成因的进一步讨论，见 Amarsi 等（2021）第 4.4 节。

我们总体建议的太阳氧丰度为 8.70 ± 0.04，综合考虑允许的 O I、禁戒的 [OI], 和分子 OH 谱线，并采用与 Asplund 等人 (2021) 给出的相同（系统）不确定度。该数值属于上述定义的“低”值范围，几乎无助于缓解太阳建模问题。这个长期存在的问题或许部分可以通过改进理论建模来解决（Bailey 等人，2015；Buldgen 等人，2017，2019；Zhang 等人，2019；Yang，2019，2022）。

## 5. 结论

扩展原子数据，包括 采用多组态狄拉克-哈特里-福克方法和 RCI 方法计算并提供的 O I 4 跃迁能级、寿命及跃迁数据。这些数据对于可靠地开展太阳和恒星光谱分析不可或缺。

我使用多组态狄拉克-哈特里-福克和 RCI 方法

我们将计算得到的跃迁数据与其他理论结果和实验结果进行了广泛比较。对于大多数跃迁，计算得到的跃迁数据与 NIST-ASD 中相应结果符合得相当好，尤其是对于 $A \geq 10^5\,\mathrm{s}^{-1}$ 或 $\log(gf) > -1.5$ 的跃迁。NIST-ASD 中可查到的 380 个选定跃迁中，有 266 个与后者的差异在 20% 以内。与此同时，对于较弱的跃迁（$A < 10^5$ 或 $\log(gf) < -1.5$），不同理论方法之间的差异分布范围要大得多。具体而言，对于 $10^3 \leq A \leq 10^5\mathrm{s}^{-1}$ 或 $-3.5 \leq \log(gf) \leq -2$ 的跃迁，库仑规范下的跃迁数据比 Babushkin规范下的数据与其他理论值更为吻合；其中大多数跃迁涉及高里德伯态，因此我们建议采用本研究中库仑规范下的辐射数据。我们还将计算得到的寿命和振子强度 $\log(gf)$ 与现有实验测量结果进行了比较。总体而言，我们计算得到的数值（任一规范下）与测量值符合良好。

此外，我们采用四种方法估算计算所得跃迁概率的不确定性，依据是 Babushkin 规范和库仑规范下计算所得跃迁速率的相对差异，以量值 d$T$ 和 CF 表示。根据由 max(d$T$, d$T_{av}$) 预测的准确度等级，989 个计算所得跃迁中有 205 个的不确定性低于 10%，并被评为 A 或 B 级。所有属于 AA 级的计算所得跃迁都相当强，其$A \geq 10^6\ \mathrm{s}^{-1}$。所有具有 $A \geq 10^6\ \mathrm{s}^{-1}$ 的跃迁，其不确定性均低于 25%；而对于具有 $A < 10^2\ \mathrm{s}^{-1}$ 的弱跃迁，大多数被评为 D 级或 E 级。

最后，我们通过将修正量 $\Delta\log\ \epsilon = -\Delta\log(\mathrm{gf})$ 应用于文献中的丰度，分析了新原子数据对氧丰度分析的影响。总体而言，Civiš 等（2018）低估了典型 O I 谱线的跃迁概率，而 Hibbert 等（1991）则高估了这些跃迁概率。对于 O I 777 纳米三重线，相较于我们采用 Babushkin规范得到的结果，两者的差异分别为 −0.03 dex 和 +0.02 dex。将我们的跃迁概率与 Amarsi 等（2018）对 O I 777 纳米三重线的分析相结合，得到太阳的 $\log\epsilon_o = 8.71$。这与低激发禁戒线以及分子谱线的结果高度一致。总体而言，我们主张采用 $\log\epsilon_o = 8.70 \pm 0.04$。

## 6. 致谢

AMA 衷心感谢瑞典研究理事会（VR 2020-03940）的资助。MCL 感谢广东省基础与应用基础研究基金会（2022A1515110043）的支持。我们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。

## 参考文献

Allende Prieto, C., Lambert, D. L., & Asplund, M. 2001, ApJ, 556, L63 Amarsi, A. M., Asplund, M., Collet, R., & Leenaarts, J. 2016, MNRAS, 455, 3735 Amarsi, A. M., Barklem, P. S., Asplund, M., Collet, R., & Zatsarinny, O. 2018, A&A, 616, A89 Amarsi, A. M., Grevesse, N., Asplund, M., & Collet, R. 2021, A&A, 656, A113 Anders, E. & Grevesse, N. 1989, Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 197 Asplund, M., Amarsi, A. M., & Grevesse, N. 2021, A&A, 653, A141 Asplund, M. & García Pérez, A. E. 2001, A&A, 372, 601 Asplund, M., Grevesse, N., & Sauval, A. J. 2005, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 336, 宇宙丰度作为 S 的记录

恒星

演化与核合成，编者：I. Barnes、Thomas G. & F. N. Bash，25 Asplund, M., Grevesse, N., Sauval, A. J., Allende Prieto, C., & Kiselman, D. 2004, A&A, 417, 751 Bacławski, A. 2008, J. Quant. Spectr. Rad. Transf., 109, 1986 Bailey, J. E., Nagayama, T., Loisel, G. P., et al. 2015, Nature, 517, 56 Bautista, M. A., Bergemann, M., Gallego, H. C., et al. 2022, A&A, 665, A18 Bergemann, M., Hoppe, R., Semenova, E., et al. 2021, MNRAS, 508, 2236 Bertran de Lis, S., Delgado Mena, E., Adibekyan, V. Z., Santos, N. C., & Sousa, S. G. 2015, A&A, 576, A89 Biemont, E. & Zeippen, C. J. 1992, A&A, 265, 850 Bischel, W. K., Perry, B. E., & Crosley, D. R. 1981, Chemical Physics Letters, 82, 85 Bischel, W. K., Perry, B. E., & Crosley, D. R. 1982, Appl. Opt., 21, 1419 Boesgaard, A. M., King, J. R., Deliyannis, C. P., & Vogt, S. S. 1999, AJ, 117, 492 Bridges, J. M. & Wiese, W. L. 1998, 《物理评论A辑》, 57, 4960 Bromander, J., Duric, N., Erman, P., & Larsson, M. 1978, Phys. Scr, 17, 119 Brooks, N. H., Rohrlich, D., & Smith, W. H. 1977, ApJ, 214, 328 Buder, S., Sharma, S., Kos, J., et al. 2021, MNRAS, 506, 150 Buldgen, G., Salmon, S. J. A. J., Noels, A., et al. 2019, A&A, 621, A33 Buldgen, G., Salmon, S. J. A. J., Noels, A., et al. 2017, A&A, 607, A58 Butler, K. & Zeippen, C. J. 1991, J. Phys. IV France, 01, C1 Caffau, E., Ludwig, H. G., Steffen, M., et al. 2008, A&A, 488, 1031 Caffau, E., Ludwig, H. G., Steffen, M., et al. 2015, A&A, 579, A88 Christensen-Dalsgaard, J. 2021, Living Reviews in Solar Physics, 18, 2 Civiš, S., Kubelík, P., Ferus, M., et al. 2018, The Astrophysical Journal Supplement Series, 239, 11 Clyne, M. A. A. & Piper, L. G. 1976, J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2, 72, 2178 Cowan, R. D. 1981, 原子结构与光谱理论（加利福尼亚州伯克利：加利福尼亚大学出版社） Cubas Armas, M., Asensio Ramos, A., & Socas-Navarro, H. 2020, A&A, 643, A142 Day, R. L., Anderson, R. J., & Salamo, G. J. 1981, J. Opt. Soc. Am., 71, 851 Delgado Mena, E., Adibekyan, V., Santos, N. C., et al. 2021, A&A, 655, A99 Druetta, M. & Poulizac, M. C. 1970, Physics Letters A, 33, 115 Dyall, K., Grant, I., Johnson, C., Parpia, F., & Plummer, E. 1989, Comput. Phys. Commun., 55, 425 Eissner, W. 1991, J. Phys. IV France, 01, C1 Ekman, J., Godefroid, M., & Hartman, H. 2014, Atoms, 2, 215 El-Sayed, F. 2021, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 276, 107930 Franchini, M., Morossi, C., Di Marcantonio, P., et al. 2021, AJ, 161, 9 Froese Fischer, C. 2000, Computer Physics Communications, 128, 635 Froese Fischer, C. 2009, Physica Scripta Volume T, 134, 014019 Froese Fischer, C., Gaigalas, G., Jönsson, P., & Biero´n, J. 2019, Comput. Phys. Commun., 237, 184 Froese Fischer, C., Godefroid, M., Brage, T., Jönsson, P., & Gaigalas, G. 2016, Journalof PhysicsB: Atomic, Molecular and OpticalPhysics, 49, 182004 Froese Fischer, C., Tachiev, G., Gaigalas, G., & Godefroid, M. R. 2007, Computer Physics Communications, 176, 559 Gaigalas, G., Fritzsche, S., & Grant, I. P. 2001, Computer Physics Communications, 139, 263 Gaigalas, G., Rudzikas, Z., & Froese Fischer, C. 1997, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics, 30, 3747 Gaigalas, G., Rynkun, P., Radži¯ut˙e, L., et al. 2020, The AstrophysicalJournal Supplement Series, 248, 13 Gaillard, M. & Hesser, J. E. 1968, ApJ, 152, 695 Goldbach, C. & Nollez, G. 1994, A&A, 284, 307 Golly, A., Jazgara, A., & Wujec, T. 2003, Phys. Scr, 67, 485 Grant, I. P. 1974, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics, 7, 1458 Grant, I. P. 2007, 原子与分子的相对论量子理论（纽约：施普林格） Hibbert, A. 1974, Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics, 7, 1417 Hibbert, A. 1975, Computer Physics Communications, 9, 141 Hibbert, A., Biemont, E., Godefroid, M., & Vaeck, N. 1991, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 24, 3943 Israelian, G., García López, R. J., & Rebolo, R. 1998, ApJ, 507, 805 Jenkins, D. B. 1985, J. Quant. Spectr. Rad. Transf., 34, 55 Johnson, C. E. 1972, 《物理评论A辑》, 5, 2688 Jönsson, P., Gaigalas, G., Froese Fischer, C., et al. 2023, Atoms, 已接收 Jönsson, P., Godefroid, M., Gaigalas, G., et al. 2023, Atoms, 11 Kikuchi, T. T. 1971, Appl. Opt., 10, 1288 Kolecki, J. R. & Wang, J. 2022, AJ, 164, 87 Korotin, S. A., Andrievsky, S. M., Luck, R. E., et al. 2014, MNRAS, 444, 3301 Kramida, A. 2014, Atoms, 2, 86 Kramida, A. 2023, NIST 原子跃迁概率文献数据库（版本 9.0），在线访问：https://doi.org/10.18434/T46C7N。Kramida, A., Yu. Ralchenko, Reader, J., & and NIST ASD Team. 2022, NIST 原子光谱数据库（版本 5.10），[在线]。Ava

可用：

https://physics.nist.gov/asd [2022, 2008年10月 27]。美国国家标准与技术研究院，盖瑟斯堡，马里兰州。Kröll, S., Lundberg, H., Persson, A., & Svanberg, S. 1985, 《物理评论快报》, 55, 284
Lawrence, G. M. 1970, 《物理评论A辑》，2，397

Li, M. C., Li, W., Jönsson, P., Amarsi, A. M., & Grumer, J. 2023, ApJS, 265, 26 Li, W., Amarsi, A. M., Papoulia, A., Ekman, J., & Jönsson, P. 2021, MNRAS, 502, 3780 Lin, C. C., Irwin, D. J. G., Kernahan, J. A., Livingston, A. E., & Pinnington, E. H. 1972,《加拿大物理学杂志》, 50, 2496 Magg, E., Bergemann, M., Serenelli, A., et al. 2022, A&A, 661, A140 Martinson, I., Berry, H. G., Bickel, W. S., & Oona, H. 1971,《美国光学学会杂志（1917–1983）》, 61, 519 Mason, J. W. 1990,《哈雷彗星：研究、结果与诠释》第2卷：尘埃、彗核与演化 Meléndez, J. & Asplund, M. 2008年, A&A, 490, 817 Meléndez, J. & Barbuy, B. 2002, ApJ, 575, 474 Mondet, G., Blancard, C., Cossé, P., & Faussurier, G. 2015, ApJS, 220, 2 Nissen, P. E., Chen, Y. Q., Carigi, L., Schuster, W. J., & Zhao, G. 2014, A&A, 568, A25 Nowak, G., Borst, W. L., & Fricke, J. 1978,《物理评论A辑》, 17, 1921 Olsen, J., Roos, B. O., Jo/rgensen, P., & Jensen, H. J. A. 1988,《化学物理学杂志》, 89, 2185 Ott, W. R. 1971,《物理评论A辑》, 4, 245 Papoulia, A., Ekman, J., Gaigalas, G., et al. 2019, Atoms, 7 Pinnington, E. H., Irwin, D. J. G., Livingston, A. E., & Kernahan, J. A. 1974,《加拿大物理学杂志》, 52, 1961 Romano, D. 2022, arXiv电子预印本, arXiv:2210.04350 Savage, B. D. & Lawrence, G. M. 1966, ApJ, 146, 940 Smith, W. H., Bromander, J., Curtis, L. J., Berry, H. G., & Buchta, R. 1971, ApJ, 165, 217 Socas-Navarro, H. 2015, A&A, 577, A25 Steffen, M., Prakapavi˘cius, D., Caffau, E., et al. 2015, A&A, 583, A57 Sturesson, L., Jönsson, P., & Froese Fischer, C. 2007,《计算机物理通信》, 177, 539 Tachiev, G. I. & Froese Fischer, C. 2002, A&A, 385, 716 Tayal, S. S. 2009,《物理学文摘》, 79, 015303 Vinyoles, N., Serenelli, A. M., Villante, F. L., et al. 2017, ApJ, 835, 202 Wells, W. C. & Zipf, E. C. 1974,《物理评论A辑》, 9, 568 Wiese, W. L., Fuhr, J. R., & Deters, T. M. 1996,《物理与化学参考数据杂志》专著第7卷。纽约州梅尔维尔：AIP出版社 Yang, W.-M. 2019, ApJ, 873, 18 Yang, W.-M. 2022, ApJ, 939, 61 Zhang, Q.-S., Li, Y., & Christensen-Dalsgaard, J. 2019, ApJ, 881, 103 Zhang, X.-Y., Shen, X.-Z., Yuan, P., & Hu, F. 2020,《物理评论A辑》, 102, 042824 Zheng, N.-W. & Wang, T. 2002, ApJS, 143, 231

**表 A.1.** O I 的能级（单位：$cm^{-1}$）和寿命（单位：s；分别采用 Babushkin（$\tau_B$）规范和 Coulomb（$\tau_C$）规范给出）。

| No. | 态 | $E$ 多组态狄拉克-哈特里-福克 | $E_{\rm NIST}$ | $\Delta E$ | $\tau_B$ | $\tau_C$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 0.00 | 0.000 | 0 | | |
| 2 | $2s^22p^4\ ^3P_1$ | 155.73 | 158.265 | 2.54 | | |
| 3 | $2s^22p^4\ ^3P_0$ | 223.26 | 226.977 | 3.72 | | |
| 4 | $2s^22p^4\ ^1D_2$ | 15966.11 | 15867.862 | -98.25 | | |
| 5 | $2s^22p^4\ ^1S_0$ | 34053.62 | 33792.583 | -261.04 | | |
| 6 | $2s^22p^33s\ ^5S^o_2$ | 73705.01 | 73768.200 | 63.19 | 2.0918E-04 | 2.1296E-04 |
| 7 | $2s^22p^33s\ ^3S^o_1$ | 76728.03 | 76794.978 | 66.95 | 1.7020E-09 | 1.6911E-09 |
| 8 | $2s^22p^33p\ ^5P_1$ | 86455.25 | 86625.757 | 170.51 | 2.9107E-08 | 3.0123E-08 |
| 9 | $2s^22p^33p\ ^5P_2$ | 86457.22 | 86627.778 | 170.56 | 2.9094E-08 | 3.0109E-08 |
| 10 | $2s^22p^33p\ ^5P_3$ | 86460.80 | 86631.454 | 170.65 | 2.9070E-08 | 3.0085E-08 |
| – | – | – | – | – | – | – |

注。 能级以基态为基准，并与 NIST-ASD 数据（Kramida等人（2022））进行比较。差异 $\Delta E$ 与 $E_{\rm MCDHF}$ 和 $E_{\rm NIST}$ 的数值列于第五列。完整表格可在线查阅。

**表 A.2.** O I 的电偶极跃迁数据。

| 上层 | 下层 | $\lambda$ (nm) | $S$ (a.u.，对应 $a_0^2e^2$ 的原子单位) | | 对数 $gf$ | | 一个 ($s^{-1}$) | | d$T$ | CF | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | B | C | B | C | B | C | | B | C | Acc. |
| $2s^22p^35d\ ^3D^o_1$ | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 94.8686 | 1.01E-03 | 9.82E-04 | -3.489 | -3.502 | 8.01E+05 | 7.77E+05 | 0.030 | 1.90E-03 | 3.71E-02 | B |
| $2s^22p^35d\ ^3D^o_2$ | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 94.8686 | 1.52E-02 | 1.47E-02 | -2.313 | -2.327 | 7.20E+06 | 6.98E+06 | 0.030 | 3.84E-03 | 1.40E-01 | B |
| $2s^22p^35d\ ^3D^o_3$ | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 94.8686 | 8.48E-02 | 8.23E-02 | -1.566 | -1.579 | 2.87E+07 | 2.79E+07 | 0.030 | 8.04E-03 | 3.74E-01 | A |
| $2s^22p^35d\ ^5D^o_3$ | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 94.8898 | 1.37E-06 | 1.38E-06 | -6.356 | -6.354 | 4.66E+02 | 4.68E+02 | 0.006 | 1.32E-07 | 6.21E-06 | C |
| $2s^22p^35d\ ^5D^o_2$ | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 94.8898 | 1.68E-08 | 1.85E-08 | -8.269 | -8.226 | 7.97E+00 | 8.79E+00 | 0.094 | 3.63E-09 | 1.63E-07 | D |
| $2s^22p^35d\ ^5D^o_1$ | $2s^22p^4\ ^3P_2$ | 94.8898 | 3.31E-08 | 3.16E-08 | -7.975 | -7.994 | 2.61E+01 | 2.50E+01 | 0.044 | 2.64E-08 | 8.23E-07 | C |
| $2s^22p^35d\ ^3D^o_1$ | $2s^22p^4\ ^3P_1$ | 95.0112 | 1.51E-02 | 1.47E-02 | -2.315 | -2.328 | 1.19E+07 | 1.16E+07 | 0.030 | 6.02E-03 | 2.46E-01 | B |
| $2s^22p^35d\ ^3D^o_2$ | $2s^22p^4\ ^3P_1$ | 95.0112 | 4.54E-02 | 4.40E-02 | -1.838 | -1.851 | 2.14E+07 | 2.08E+07 | 0.030 | 7.97E-03 | 3.78E-01 | B |
| $2s^22p^35d\ ^5D^o_2$ | $2s^22p^4\ ^3P_1$ | 95.0325 | 8.17E-07 | 8.20E-07 | -6.583 | -6.581 | 3.86E+02 | 3.87E+02 | 0.003 | 1.68E-07 | 7.74E-06 | C |
| $2s^22p^35d\ ^5D^o_1$ | $2s^22p^4\ ^3P_1$ | 95.0325 | 8.94E-09 | 9.69E-09 | -8.544 | -8.509 | 7.03E+00 | 7.63E+00 | 0.078 | 4.54E-09 | 2.03E-07 | D |
| – | – | – | – | – | – | – | – | – | – | – | – | |

**注释**。上态和下态、真空波长、 $\lambda$、线强度、$S$、加权振子强度 log $gf$、跃迁概率、$A$，以及两个规范下 A 值的相对差异 $A$、$dT$和相消因子 CF 均列于表中。请注意，波长和跃迁参数已按 NIST-ASD 的 Ritz 波长值进行了调整（Kramida等人（2022））。准确度等级 Acc. 的界限定义如下：A ≤ 3%，B ≤ 10%，C ≤ 25%，D ≤ 50%，E > 50%。表中仅展示前十行；完整表格可在线查阅。

## 附录 A：氧 I 的能级和跃迁数据。