arXiv:2602.02122v1 [physics.atom-ph] 2 Feb 2026

中性硫中具有天体物理学重要性的跃迁数据的理论研究

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

[1]太阳活动与空间天气国家重点实验室，中国科学院国家天文台[2]理论天体物理学，物理与天文学系，乌普萨拉大学，Box 516，SE-751 20 乌普萨拉，瑞典[3]材料科学与应用数学系，马尔默大学，SE-205 06 马尔默，瑞典

收稿日期：2025年9月2日 / 接受日期：2026年1月26日

摘要

准确而全面的原子数据对于恒星光谱建模至关重要。用于丰度分析的特定谱线振子强度的不确定度会直接转化为所导出元素丰度的不确定度；不完整或有偏的原子数据集会在非局域热力学平衡（non-LTE）建模中造成显著误差。因此，对原子数据进行理论计算对于补充有限的实验结果至关重要。在本工作中，我们采用多组态狄拉克–哈特里–福克方法（多组态狄拉克-哈特里-福克）和相对论组态相互作用方法（相对论组态相互作用），给出了中性硫（中性硫）107个能级之间1,730条电偶极（E1）跃迁的大量原子数据，包括振子强度、跃迁率和寿命。这些能级属于组态$3p^3np$（n = 3 – 7）、$3p^3nf$（n = 4,5）、$3s3p^5$, $3p^3ns$（n = 4 – 7）和$3p^3nd$（n = 3 – 6）。计算所得跃迁率的准确度通过将巴布什金规范与库仑规范之间跃迁率差异的比较与抵消因子（CF）分析相结合加以评估。约16%的从头计算结果达到A–B准确度分类，对应于10%以内的不确定度，该分类由美国国家标准与技术研究院的原子光谱数据库（NIST 原子光谱数据库）定义。研究发现，应用精细调节技术可显著提高库仑规范下结果的准确度，从而改善巴布什金规范与库仑规范之间的一致性；约24%的精细调节后的跃迁数据被归入精度等级A–B。

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

1。引言

S光谱学是天体物理学中的有力工具，能够提供重要的
in有关恒星物理条件和化学丰度的见解
o恒星的（Tennyson 2019年）。硫是宇宙中丰度最高的
d元素之一，具有丰富的光谱特征——
tu在多个波段观测到的结果
w 利用空间和地面观测设施（例如Durrance 等人 983；Skillman 和
]Kennicutt 1993；Carpenter 等人 1994）。这些
li线是探测恒星大气的有力诊断指标—
s层、星际介质和星系（例如Judge 1988年；
Feaga 等人 2002；Anderson 等人 2013年）。尤其是，作为一种 α
e元素，硫常用于研究银河系—
ti碳的化学演化（例如，Nissen 等人 2007年；Skúladóttir 等人 015；
2Duffau 等人 2017年；Costa Silva 等人 2020；da Silva 等人 023）。
2

鉴于硫的重要性，可靠地推断恒星及其他天体中的硫丰度颇有意义。然而，要准确分析观测到的硫光谱，就需要准确且完整的原子数据集。少量诊断谱线的跃迁数据误差会直接影响推断出的硫丰度；而不完整或存在系统偏差的原子数据集则可能影响非局部热动平衡（non-LTE）模型中的统计平衡（例如，Kamp 等人 2001年；Daflon 等人 2003年；Takeda 等人 2005年；Korotin 和 Kiselev 2024年）。因此，人们投入了大量精力，对中性硫的跃迁数据开展理论计算和实验室测量。

在实验方面，Savage 和 Lawrence（1966年）、Bridges 和 Wiese（1967年）以及 Müller（1968年）报告了早期对多重线跃迁间振子强度和跃迁概率的测量结果。Doering（1990）采用电子能量损失光谱学方法，测量了 $3p^4\ ^3P - 3p^3(^4S)4s\ ^3S^o$ (1814 Å)、$3p^4\ ^3P - 3p^3(^2D)4s\ ^3D^o$ (1479 Å) 和 $3p^4\ ^3P - 3p^3(^4S)3d\ ^3D^o$(1429 Å) 多重线的相对振子强度。Delalic 等人（1990）采用高频偏转技术，测定了可见光范围内八组不同多重线的辐射寿命。Beideck 等人（1994）利用在托莱多重离子加速器上进行的束箔光谱技术，根据测得的平均寿命和分支比，推导出 $3p^3(^4S)4s\ ^3S^o$、$3p^3(^2P)4s\ ^3P^o$ 和 $3p^4\ ^3P$ 多重线中八个跃迁的振子强度。Federman 和 Cardelli（1995）基于 Doering（1990）和 Beideck 等人（1994）报告的振子强度，分析了使用戈达德高分辨率光谱仪获取的朝向 ζ-Oph 的星际光谱，并通过增长曲线获得了一组自洽的、涵盖约十几条中性硫谱线的振子强度。近来，Zerne 等人（1997）采用时间分辨真空紫外激光光谱学，测定了 10450 Å 处 $3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1 - 3p^3(^4S)4p\ ^3P_{0,1,2}$三重线的振子强度；Berzinsh 等人（1997）则报告了十二个态的寿命。Biémont 等人（1998）将这些寿命数据与其基于相对论哈特里–福克（HFR）计算得出的理论分支比相结合，推导出一组自洽的真空紫外谱线振子强度。

除实验测量外，也有不少关于中性硫跃迁数据的理论计算。Ganas（1982）采用解析形式的原子独立粒子模型势，计算了硫等电子序列的光学振子强度。Kurucz 和 Peytremann（1975）使用经缩放的托马斯–费米–狄拉克径向波函数，并通过对观测能级进行最小二乘拟合得到本征矢量，半经验地计算了振子强度。Ho 和 Henry（1985）、Fleming 和 Hibbert（1999）、Tayal（1998）以及 Chen 和 Msezane（1997）基于组态相互作用（CI）方法（Hibbert 1975），使用 CIV3 程序进行了计算。Fawcett（1986）使用 HFR 程序包，计算了中性硫中允许的 n=3 –3 和 3–4 跃迁的振子强度。Fischer（1987）对中性硫中若干 $3p^3(^2D)nd\ ^3P^o$ 项进行了多组态哈特里–福克（MCHF）计算。此后，Froese Fischer 等人（2006）通过布赖特–泡利哈密顿量纳入相对论效应，报告了直到 $3p^3(^4S)3d\ ^3D^o$ 的能级间允许的电偶极（E1）跃迁及部分禁戒跃迁。Zatsarinny & Bartschat（2006）（下文简称 ZB2006）使用 B样条盒式多通道方法，报告了某些能级的 $3p^3nl$ 组态精细结构能量（最高至 n=12 ），以及这些能级之间相应的 E1 振子强度。在这项计算中，他们采用相当大的 B 样条基组纳入 CI 效应，并通过布赖特–泡利哈密顿量纳入相对论效应。Deb & Hibbert（2006）和 Deb 与 Hibbert（2008）（下文简称 DH2008）采用精细调节技术，使用 CIV3 程序给出了 120 个能级之间 2173 个 E1 跃迁的振子强度和辐射跃迁率。然而，正如 ZB2006 所指出的，不同计算所得的振子强度和跃迁概率有时差异很大。不同计算之间的巨大差异表明，理论原子数据存在很大的不确定度，可能会对天体物理光谱分析造成显著影响。这可能是由于许多计算中纳入的组态相互作用不足。DH2008 最近的研究在其 CI 计算中纳入了 300,000 个组态态函数（CSF），据我们所知，这是迄今为止针对中性硫规模最大的计算。然而，直到现在还没有开展过规模更大的计算，例如纳入数百万个 CSF 的计算。

本研究旨在展示我们采用全相对论多组态狄拉克–哈特里–福克方法（MCDHF）和相对论组态相互作用（RCI）方法进行的大量计算结果。本文提供两组计算结果。其中一组直接由 MCDHF 和 RCI 计算得出，称为从头计算结果。另一组则对 RCI 计算中的本征值进行了微调，称为微调结果。我们将微调数据与从头计算结果进行比较，以研究微调对辐射数据和寿命的影响。新的原子数据集有助于通过与其他数据集比较来评估各类原子数据的精度。

本文共分为四节，其中包括引言。第2节介绍理论方法和计算方案。第3 节呈现能级、跃迁数据和寿命的结果与讨论。第4 节为结论。

2. 方法

2.1. 多组态狄拉克–哈特里–福克方法

计算采用基于狄拉克–库仑哈密顿量的多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用方法，这些方法已在通用相对论原子结构程序包 GRASP2018[1]中实现。本节简要概述这些方法，并请读者参阅 Grant (2007年）、Froese Fischer 等人(2016）、Froese Fischer 等人 (2019年）以及 Jönsson 等人 (2023b），了解多组态狄拉克-哈特里-福克方法的详细信息；有关该程序包的逐步操作指南，请参阅 Jönsson 等人 (2023a年）。

在多组态狄拉克-哈特里-福克方法中，原子态波函数（原子态函数，$\Psi(\gamma^{(j)}\,PJM$）展开为组态态函数（组态态函数，$\Phi(\gamma_i PJM$）的线性组合：

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

组态态函数是*jj*耦合的多电子函数，由单电子狄拉克轨道的乘积构成。单电子轨道的径向部分以及组态态函数的展开系数通过求解狄拉克–哈特里–福克径向方程和组态相互作用本征值问题，在相对论自洽场过程中求得。构造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 等，1997年，2001年）。确定单电子轨道的径向分量后，在后续的相对论组态相互作用计算中，将布赖特相互作用和量子电动力学效应（自能和真空极化）等高阶相互作用加入狄拉克–库仑哈密顿量。保持径向分量不变，通过求解组态相互作用本征值问题，得到目标态的组态态函数展开系数。

由相对论组态相互作用计算确定原子态函数后，可以通过对下能级和上能级所有组态态函数之间的约化矩阵元求和，以跃迁算符的约化矩阵元表示两个能态 $\gamma'P'J'$和 γPJ之间的辐射 E1 跃迁数据（例如跃迁速率 A和加权振子强度 $\log(gf)$）：

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

跃迁算符可用巴布什金规范和库仑规范表示；在非相对论极限下，它们分别对应长度形式和速度形式。在纳入通过对完整轨道组进行所有可能激发而得到的组态态函数的极限下，我们可以获得狄拉克方程的精确波函数；此时巴布什金规范和库仑规范下的跃迁矩（Grant 1974）数值相同。然而，实际使用近似多电子波函数时，两种规范下的跃迁数据通常有所差异。两种规范所得数值之间的相对差异 $\mathrm{d}T = |A_B - A_C|/\max(A_B, A_C)$，可作为波函数准确度的一项指标（Froese Fischer 2009年；Ekman et al.2014）。需要注意的是，应像 Papoulia et al. (2019年) 和 Li 等人 (2023a年,b) 那样，以统计方式使用 d3.2.1。我们将在第

在多组态狄拉克-哈特里-福克相对论计算中，原子态函数以*jj*耦合的组态态函数表示。为了识别计算态，并遵循天文学家和实验学家所采用的标记惯例，我们将原子态函数从*jj*耦合变换到*LSJ*耦合组态态函数基组。在 GRASP2018 程序包中，从*jj*耦合到*LSJ* 耦合的变换由 `jj2lsj` 程序完成，该程序由 Gaigalas 等人开发 (2003年、2004年、2017年)。

[1] GRASP 完全开源，可在 GitHub 仓库中获取：https://github.com/compas/grasp由CompAS合作组维护。

表1：中性硫计算方案汇总。

宇称	多参考多组态Dirac–Hartree–Fock	多参考相对论组态相互作用	AS	N_{CSFs}
even	$3s^23p^3np$ (n = 3 – 8), $3s^23p^3nf$（n = 4, 5），$3p^6$	$3p^6$, $3s^23p^3np$（n = 3 – 8），$3s^23p^3nf$（n = 4, 6），$3s3p^3np7d$（n = 3 – 7）、$3sp^3nf7d$（n = 4、5）、$3s^23pnp7d^2$ (n = 3, 4)	{12s, 12p, 11d, 10f, 9g, 8h}	11 049 420
odd	$3s^23p^3ns$（n = 4 – 7），$3s^23p^3nd$（n = 3 – 7）$3s3p^5$, $3p^54s$	$3s3p^5$, $3s^23p^3ns$（n = 4 – 8），$3p^54s$、$3s^23p^3nd$（n = 3 – 7）、$3s3p^3ns7d$（n = 4 – 7）、$3sp^3nd7d$（n = 3 – 7）、$3p^57d$、$3s^23p4s7d^2$, $3s3p^4np$（n = 4 – 8）	{12s, 12p, 11d, 10f, 9g, 8h}	8 146 099

注。 多参考多组态Dirac–Hartree–Fock和多参考相对论组态相互作用分别表示用于多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用计算的多参考组。主动空间是轨道的活性集。N_{CSFs} 是最终相对论组态相互作用计算中生成的组态态函数数目。

2.2. 计算方案

我们针对属于 {$3p^3np$ (n = 3 – 7), $3p^3nf$ (n = 4,5)} 偶宇称组态的能态，以及属于 {$3s3p^5$,$3p^3ns$ (n = 4 – 7), $3p^3nd$ (n = 3 – 6)} 奇宇称组态的能态。为考虑相对于目标组态的波函数中更高阶组态相互作用贡献，我们在多组态狄拉克-哈特里-福克（多参考多组态 Dirac–Hartree–Fock）和相对论组态相互作用（多参考相对论组态相互作用）计算中均采用了扩展多参考组态。这些扩展多参考组态集合依据初步计算的结果，通过 `rcsfmr`程序在 `GRASP2018` 中确定。表 N_{CSFs}列出了最终采用的多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用计算所用的多参考组态集合、轨道集合，以及偶宇称和奇宇称下组态态函数总数（1）。

我们的计算采用扩展最优能级方案（Dyall等（1989）），针对偶宇称和奇宇称态的加权平均进行。我们采用多参考单-双（MR-SD）方法获得组态态函数展开，该方法允许从MR组态向活性集（AS；Olsen等（1988）；Sturesson等（2007）；Froese Fischer等（2016））中的轨道进行单、双（SD）替换。活性集中的轨道分为光谱轨道和关联轨道：前者用于构建MR中的组态，后者则用于修正初步获得的波函数。$1s^22s^22p^6$ 始终作为非活性闭壳层芯保留。在多组态狄拉克-哈特里-福克计算中，3s轨道保持非活性；组态态函数展开则通过对MR-MCDHF组态中所有其他价轨道进行SD替换生成。目标态的最终波函数通过后续的相对论组态相互作用计算确定；该计算包含的组态态函数展开，是通过允许MR-MCDHF组态的n ≥ 3 亚壳层进行SD替换，以及MR-RCI中附加组态的n ≥ 3亚壳层向表1所列活性轨道组进行单替换而形成的。RCI计算中也考虑了Breit相互作用。最终偶态和奇态展开分别包含11,049,420和8,146,099个组态态函数，分布于不同的ff J 对称性（偶宇称为0–5，奇宇称为0–4）。

2.3. 微调

在原子结构计算中，根据实验能量对哈密顿矩阵的对角元素进行微调或调整，是一种强有力的半经验技术，可以显著减小理论能级与实验观测能级之间的偏差。该技术已应用于基于组态相互作用方法的 `CIV3`(Hibbert 1975年) 程序，以及基于多组态 Hartree–Fock 方法的 `ATSP2K` (Froese Fischer 等人 2007年) 程序中，该方法已成功应用于多个原子系统的计算，以获得精确的能级和跃迁参数（例如 Lundberg 等人 2001年；Corrégé 与 Hibbert 2004年；Froese Fischer 与 Tachiev 2004年）。上述两种方法都基于 LSJ 耦合的组态态函数，不同 LS 项之间的非对角矩阵元较小。然而，由于非对角矩阵元较大，直接对 jj 耦合计算进行微调颇具挑战。为解决这一问题，Li 等人（2023年）提出了一种方法，将哈密顿量从 jj 耦合转换为 LSJ 耦合形式，在该形式下进行微调，然后再转换回 jj 耦合形式。这一过程通过两个新程序 jj2lsj_2022 和 rfinetune 成功应用于 GRASP2018。他们还以 C III 和 B I 为例，证明微调显著提高了跃迁率和寿命的精度，与从头计算结果相比有明显改善。从头计算结果的 LS 组态分析表明，除 $3p^3(^4S)7p\ ^3P$ 和 $3s3p^5\ ^3P$ 态中少数例外外，中性硫的大多数能态都可以用相对纯粹的 LSJ 耦合很好地描述。因此，我们采用了与 Li 等人（2023年）相同的方法。

在本研究中，我们基于美国国家标准与技术研究院原子光谱数据库（NIST ASD）的实验能量（Kramida 等（2024）），采用多参考组态相互作用集，对偶态和奇态应用了微调过程。需要指出的是，在我们准备论文期间，NIST ASD 根据Civiš 等（2024年）的结果更新了能级。经过仔细比较，我们发现能级修正可以忽略不计，大多数相对差异约为 10^{-7}。最大修正出现在 $3p^3$（^4S）$7p\ ^5P_3$, ，相对差异为 10^{-4}。如此微小的差异不会对我们的微调结果产生显著影响。因此，我们保留了本研究中的微调结果。

3. 结果与讨论

3.1. 能级

硫中性硫 107 个最低能态（56 个偶宇称态和 51 个奇宇称态）的能级，包括从头计算和微调计算的结果，列于表A.1，并附有 Civiš 等人（2024年）最近更新的 NIST 原子光谱数据库中的实验能量。表格第一列标为“编号”，其中的数字按照 NIST 原子光谱数据库所列能级的顺序排列。图1展示了计算数据与 NIST 原子光谱数据库数值之间的能量差，这些差值以激发能为横轴绘制，

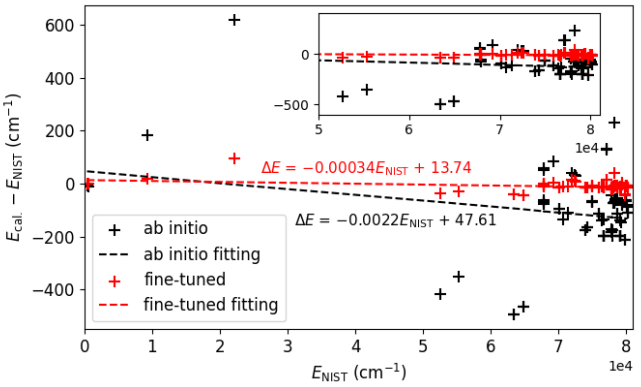


图 1：NIST 原子光谱数据库提供的激发能对应的能量差。黑色虚线和红色虚线分别是对从头计算（黑色加号）和微调（红色加号）所得数据进行的线性拟合。右上角的插图放大显示了$E_{\rm NIST} > 5 \times 10^4$ cm^{-1}。

能量$_{\rm NIST}$。微调后，计算能量与实验能量的吻合度系统性提高；计算激发能的系统误差从 0.22% 降至 0.03%，均方根偏差则从 188.5 cm^{-1} 降至 20.3 cm^{-1}。特别是，对于 3p^4 ^{1}S$_0$, 3p^3(^{4}S)4s ^{5}S$^o_2$,^{3}S$^o_1$ 和 3p^3(^{4}S)4p ^{5}P$_{1,2,3}$,^{3}P$_{0,1,2}$, 的能级，从头计算所得能量与实验能量相差较大（超过 300 cm^{-1}）；相比之下，微调后的能量与实验值的差异均在 50 cm^{-1} 以内，只有 3p^4 ^{1}S$_0$, 例外，相差 96 cm^{-1}。此外，微调还有助于校正能级位置，这里的位置是指按激发能排列的能级次序。例如，在从头计算中，3p^3(^{2}P)4s ^{1}P$^o_1$ 态的能量高于 3p^3(^{2}D)4p ^{3}F 态，与实验数据相比位置有误。微调使其能量回到正确位置，同时 3p^3(^{2}D)3d ^{1}P$^o_1$ 微扰态与 3p^3(^{2}P)4s ^{1}P$^o_1$态的混合略有减弱。

进一步迭代微调有望获得更接近实验能量的结果。考虑到微调过程以及重新计算波函数和跃迁性质所需的总时间成本，同时鉴于目前已有结果的精度已达到一个仅靠增大组态态函数基组规模便难以实现的水平，尤其是本研究的计算涉及一千多万个组态态函数，因此我们认为，当前结果足以用于研究微调对跃迁数据的影响。

3.2. 跃迁数据

表 A.1所列 107 个能级之间 1,730 个电偶极跃迁的从头计算和微调计算所得跃迁参数见表 A.2；完整表格可在 CDS 获取。请注意，本文所有表格中列出的波长均根据 NIST 原子光谱数据库中的实验能级得出，这些能级最初来自 Civiš 等人(2024 年)；从头计算和微调计算结果的跃迁数据，包括加权振子强度、log(gf) 和跃迁速率 A，均已根据实验波长进行调整。

3.2.1. 准确度评估

我们按照 Li 等人（2023b）采用的方法评估了所计算跃迁数据的精度。该方法根据 A 值的大小对跃迁进行分组。对于中性硫，我们选取了六组：A $< 10^{-2}$ s^{-1}, $10^{-2} \le$ A $< 10^0$ s^{-1}, $10^0 \le$ A $< 10^3$ s^{-1}, $10^3 \le$ A $< 3.5\times10^5$ s^{-1}, $3.5\times10^5 \le$ A $< 10^7$ s^{-1}, 以及 A $\ge 10^7$。接下来，我们计算了每组的平均 dT$_{\rm av}$ 。如第 2.1 节所述，规范差参数仅应作为具有相似性质的一组跃迁的统计不确定度估计。因此，我们将 dT 定义为 max(dT , dT$_{\rm av}$), 以此替代 dT，作为单个跃迁的规范差指标。随后，我们将抵消因子（CF）纳入分析。它是计算跃迁矩阵元时抵消效应的数值度量（例如 Cowan 1981；Zhang 等人 2013；Gaigalas 等人 2020）。较小的 CF（通常低于约 0.1 或 0.05，见 Cowan（1981））表明抵消效应较强，因此计算得到的跃迁参数具有较大的不确定度。

每个计算跃迁速率的最终精度等级系˜通过对 dT 与 CF 参数的综合分析估计得出。基于上述步骤，我们遵循 NIST 原子光谱数据库中准确度分类的定义惯例，将准确度划分为五个等级。A、B、C、D 和 E 等级分别对应于 NIST˜原子光谱数据库所定义的 {A、A+和 AA}、{B+和 B}、{C+ 和 C}、{D+ 和 D} 以及 E 等级。各精度等级的 dT 与 CF 定义如下：

˜– A (≤ 3%): dT ≤ 3 & CF ≥ 0.1˜– B (≤ 10%): 3 < dT ≤ 10 & CF ≥ 0.1 或˜dT ≤ 3& CF < 0.1˜– C (≤ 25%): 10 <dT ≤ 25 & CF ≥ 0.1 或˜3 < dT ≤ 10 & CF < 0.1˜– D (≤ 50%): 25 < dT ≤ 50 & CF ≥ 0.1 或˜10 <dT ≤ 25 & CF < 0.1˜– E (> 50%): dT > 50 或25 < d ˜T ≤ 50 & CF < 0.1

我们在表A.2中为每条跃迁给出了估计精度等级；这些等级是根据上述程序对从头计算结果和微调结果分别确定的。我们希望这些信息能为数据使用者提供数据质量方面的参考。以巴布什金规范为例，各精度等级所占百分比如下：

– 从头计算：A：2.1%；B：13.8%；C：30.0%；D：28.6%；E：25.5 %– 微调：A：9.1%；B：15.1%；C：26.1%；D：26.8%；E：22.9%

较低精度数据占比较高的原因在于，在1,730条跃迁数据中，约50%为*LS*禁戒互组合跃迁（IC），其中包括涉及3s3p^5 能级的双电子单光子（TEOP）跃迁。这些跃迁受电子关联效应支配，难以精确计算。在高精度等级A和B中，超过80%的跃迁为*LS*允许跃迁，而在低精度等级D和E中，超过70%为*LS*禁戒IC跃迁。

统计结果表明，微调计算所得A类和B类高精度结果的比例高于从头计算。造成这一差异的主要原因是，微调减小了Babushkin规范与库仑规范之间跃迁数据的总体差异。

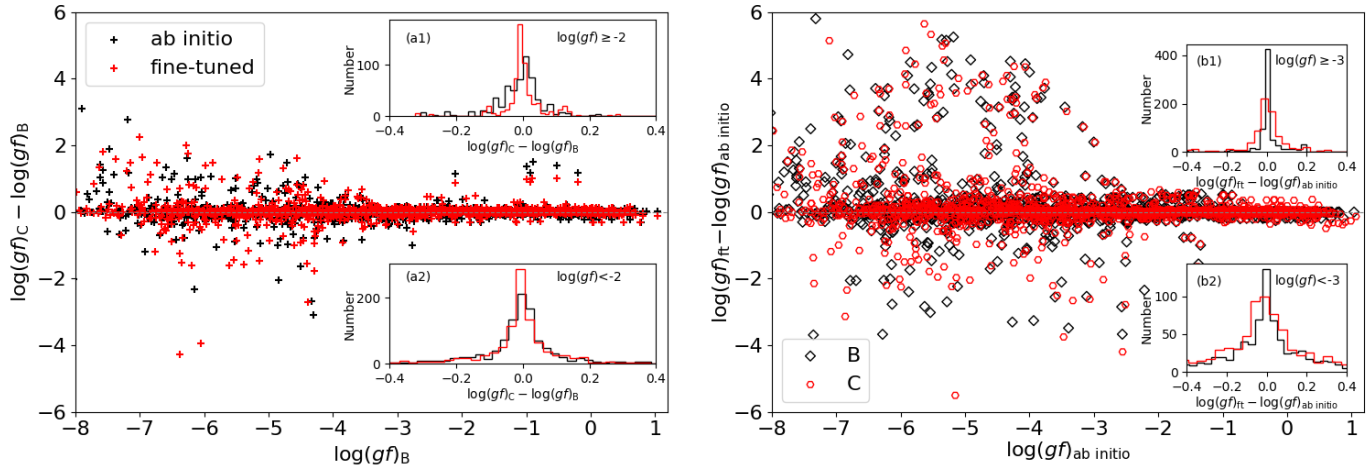


图2：左：分别比较从头计算（黑色加号）和微调（红色加号）结果中 Babushkin 规范与库仑规范的 log(gf)。插图 (a1) 和 (a2) 分别显示 log(gf) 差值的直方图，对应 log(gf) ≥ −2 和 log(gf)< −2 的跃迁。右：分别比较 Babushkin 规范（黑色菱形）和库仑规范（红色六边形）下从头计算与微调计算所得的 log(gf)。插图 (b1) 和 (b2) 分别显示 log(gf) 差值的直方图，对应 log(gf) ≥ −3 和 log(gf) < −3 的跃迁。

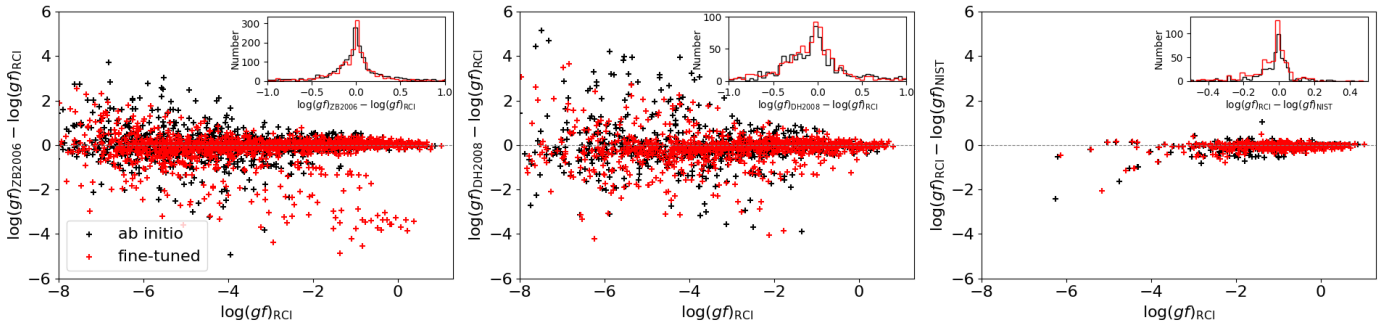


图3：将本研究的 log(g f) 与以往研究的结果进行比较。左：ZB2006（Zatsarinny & Bartschat 2006）。中：DH2008（Deb & Hibbert 2008）。右：NIST 原子光谱数据库（Kramida 等（2024））。NIST 原子光谱数据库中的数据汇编自多个来源，包括 Müller（1968年）；Beideck 等人（1994年）；Biémont 等人（1996，1998）；Zerne等人（1997）；Froese Fischer 等人（2006年）以及 Zatsarinny & Bartschat（2006）。比较中采用了当前从头计算（黑色加号）和微调相对论组态相互作用计算（红色加号）得到的 Babushkin 结果。插图显示了 log(g f) 差值对应的跃迁数分布直方图。请注意，图2和图3中所有图的 y 轴范围一致。

3.2.2. 巴布什金规范与库仑规范的比较

图2的左图给出了Babushkin规范与库仑规范之间log(gf)值的差异。直方图（插图(a1)和(a2)）分别显示了log(gf) ≥ −2和log(gf) < −2的跃迁的规范差异分布。从头计算数据与微调数据均显示两种规范之间具有良好一致性，在总共1,730条跃迁中，有73%的差异小于0.1 dex。对于log(gf)大于 −2.0的跃迁，从头计算结果与微调结果均有约86%在两种规范之间的差异处于0.1 dex以内。在同一子集中，从图2左图的直方图(a1)可以看出，两种规范之间差异大于0.05 dex的跃迁数量，从头计算结果（33%）高于微调结果（23%）。这表明微调可以在一定程度上提高Babushkin规范与库仑规范之间的一致性，这也解释了微调结果中高精度数据的比例高于从头计算结果的原因，如第3.2.1节所示。

通常，较强的跃迁在巴布什金规范与库仑规范之间表现出更好的一致性。然而，我们在 Figure −1 至 0 的 log(gf)$_B$ 范围内观察到六个异常值，见图 2。这些跃迁发生在高里德伯态 $3p^3(^4S)7p\ ^3P_{0,1,2}$ 与 $3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_{1}$之间，2、3。尽管这些跃迁在巴布什金规范与库仑规范下的结果存在较大差异（1–1.5 dex），但巴布什金规范下的从头计算数据与微调数据高度吻合，偏差小于 0.01 dex，而库仑规范下的结果相差 0.2–0.5 dex。尽管根据第 3.2.1 节所述方法，这六个跃迁均被归为 E精度等级，但我们认为，对于这些跃迁，巴布什金规范下的数据可能更可靠。

3.2.3. 从头计算结果与微调结果的比较

图2 右侧面板比较了微调结果与从头计算结果的 log(gf) 值。直方图（插图 (b1) 和 (b2)）展示了 log(g f) ≥ −3 和 log(gf) < −3对应跃迁差值的分布。需要注意的是，所有数据（包括波长和跃迁数据）

均经过调整以匹配实验能级，因此图中所示差异完全归因于微调导致的混合系数变化。通过比较可以看出，微调对 $\log(gf)$ 值有显著影响：约 42% 的巴布什金数据（以及 45% 的库仑规范数据）变化超过 0.1 dex。其次，从直方图 (b1) 可见，微调对库仑规范结果的影响比对巴布什金规范数据更为显著。例如，在 $\log(gf)$ 大于 −3.0 的跃迁中，42% 的库仑数据变化超过 0.05 dex，而巴布什金数据中这一比例为 26%。第三，微调对弱跃迁的影响比对强跃迁更为显著。直方图显示，$\log(gf)$ < −3 的跃迁中，44% 在巴布什金规范下的变化超过 0.2 dex；相比之下，$\log(gf)$ ≥ −3 的跃迁中这一比例为 9%。

尽管关于恰当规范之选择的争论仍在持续（例如Starace 1971年；Hibbert 1974年；Cowan 1981年；Papoulia等人2019年；Gaigalas等人2024年），巴布什金规范通常被认为能给出更可靠的跃迁结果，因为它能更好地描述支配原子跃迁的波函数外围部分（Hibbert 1974年）。此外，在多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论构型相互作用计算中未计入负能态的贡献，这些贡献对巴布什金规范结果的影响可忽略不计，但会显著影响库仑规范结果，对弱IC跃迁尤为明显；这进一步表明，巴布什金规范结果似乎更为可靠（Chen等人2001年）。这解释了图2 所呈现的结果以及第3.2.1 节和第3.2.2节中的结论，即微调能够更好地改善库仑规范中精度较低的结果，从而增强巴布什金规范与库仑规范之间的一致性，并进而提高总体精度。此外，库仑规范中的跃迁矩阵元依赖于跃迁能量，因而对微调更为敏感。基于这些原因，可以预期微调对库仑规范的影响大于对巴布什金规范的影响。

3.2.4. 与先前理论和实验结果的比较

在图3中，我们从头计算和微调得到的 $\log(gf)$ 结果与 ZB2006（1719 个跃迁）、DH2008（1001 个跃迁）和 NIST 原子光谱数据库[2]（528 个跃迁）的数据进行了比较。ZB2006 基于 B样条盒式多通道方法，而 DH2008 则基于经过微调的组态相互作用方法。每个面板中的直方图显示了我们的结果与其他结果之间差异的统计分布。总体而言，我们的结果与 ZB2006 的吻合度高于与 DH2008 的吻合度。例如，对于 $\log(gf)$ 大于 −3.0 的跃迁，从头计算（微调）数据中有 68.4%（66.9%）与 ZB2006 的差异在 ±0.1 dex 以内，而与 DH2008 的差异在此范围内的仅占 44.6%。

然而，在图3左侧面板的右下角观察到一些出乎意料的大偏差，这表明对于某些跃迁，微调会导致结果与 ZB2006 数据相差 >1.0 dex。这些跃迁大多是以下能级之间的 IC跃迁：$3p^3(^2D)4p\ ^1P$、$3p^3(^4S)nd$（n = 3,4、5、6）$^3D^o$, $^5D^o$ 和

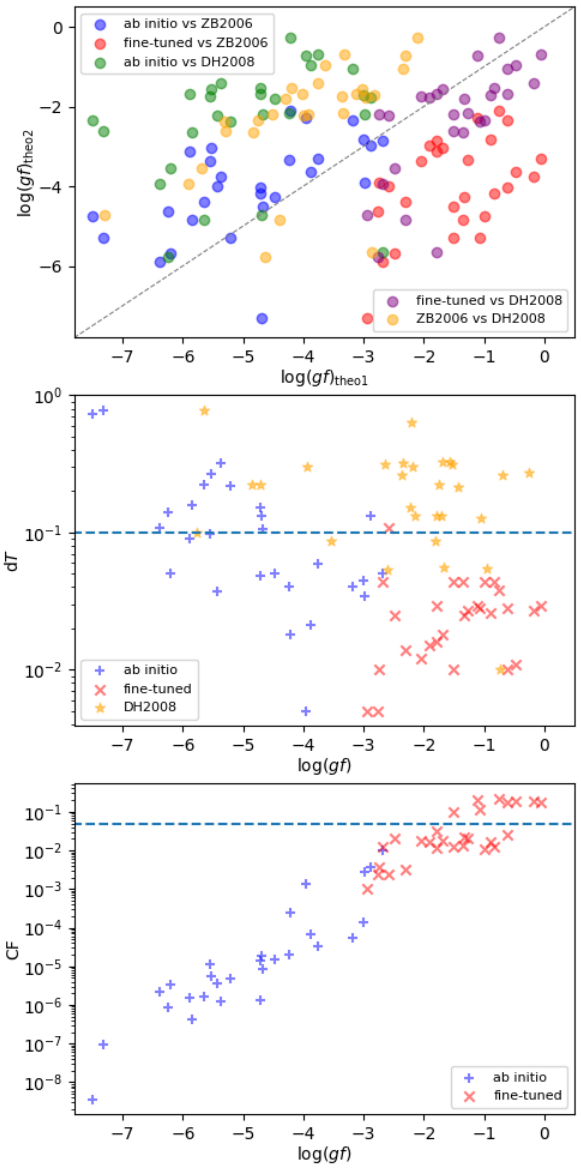


图4：上图：比较 $\log(gf)_{\rm RCI} > -3.0$ 和 $\Delta\log(gf) > 1.0$ dex 的跃迁理论值，对应图3左图和中图。中图：dT 值的散点图。下图：CF 值的散点图。中图和下图中的虚线分别表示 dT = 0.1 和 CF = 0.05。ZB2006：Zatsarinny & Bartschat (2006年)；DH2008：Deb & Hibbert (2008)。

$3p^3(^4S)nf$ (n = 3, 4、5) ^3F, ^5F。IC跃迁由态混合直接引起，其理论跃迁率对波函数的质量非常敏感；其跃迁数据的准确计算比 *LS*-允许跃迁更具挑战性。在图 4的上图中，我们比较了 ZB2006 和 DH2008 均有数据的反常跃迁结果。如图所示，在所有计算结果中，我们的微调数据最大，而从头计算数据最小。另一个有趣的现象是，尽管各项结果之间存在显著差异，我们的微调数据与 DH2008 的微调结果更为吻合，而从头计算结果则更接近 ZB2006。进一步仔细考察与这些“反常”跃迁相关的能级后，我们没有发现

[2] 请注意，NIST 原子光谱数据库中部分中性硫跃迁的 $\log(gf)$ 值存在异常（Alexander Kramida，私人通信），而线强度 S 和振子强度 f 的值是正确的。本文采用的 NIST 原子光谱数据库中的 $\log(gf)$ 值均由 f 值计算得出。

表 2：硫的实验与理论加权振子强度 log(gf) 比较

上能级	下能级	$\lambda_{vac.}$ (Å)	从头计算 B	从头计算 C	微调 B	微调 C	ZB2006[a]	DH2008[b] B	DH2008[b] C	实验
$3p^3(^2P)4s\ ^3P^o_2$	$3p^4(^3P)\ ^3P_2$	1295.653	−0.389	−0.397	−0.391	−0.398	−0.385	−0.412	−0.434	−0.362±0.030[c]
$3p^3(^2P)4s\ ^3P^o_1$	$3p^4(^3P)\ ^3P_2$	1296.174	−0.874	−0.882	−0.878	−0.886	−0.870	−0.888	−0.907	−0.959±0.039[c]
$3p^3(^2P)4s\ ^3P^o_2$	$3p^4(^3P)\ ^3P_1$	1302.336	−0.801	−0.809	−0.801	−0.808	−0.805	−0.827	−0.845	−0.815±0.043[c]
$3p^3(^2P)4s\ ^3P^o_1$	$3p^4(^3P)\ ^3P_1$	1302.862	−1.078	−1.087	−1.078	−1.086	−1.074	−1.084	−1.103	−0.932±0.067[c]
$3p^3(^2P)4s\ ^3P^o_1$	$3p^4(^3P)\ ^3P_0$	1305.883	−0.910	−0.919	−0.910	−0.917	−0.914	−0.921	−0.939	−0.824±0.038[c]
$3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1$	$3p^4(^3P)\ ^3P_2$	1807.312	−0.367	−0.374	−0.370	−0.379	−0.371	−0.369	−0.394	−0.319±0.032[c]
$3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1$	$3p^4(^3P)\ ^3P_1$	1820.342	−0.597	−0.605	−0.600	−0.610	−0.601	−0.599	−0.624	−0.593±0.056[c]
$3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1$	$3p^4(^3P)\ ^3P_0$	1826.245	−1.077	−1.084	−1.080	−1.089	−1.080	−1.078	−1.103	−1.252±0.085[c]
丰度诊断中性硫谱线										
$3p^3(^4$硫$)5p\ ^5P_3$	$3p^3(^4S)4s\ ^5S^o_2$	4695.422	−1.667	−1.690	−1.675	−1.686	−1.716	−1.599	−1.607	
$3p^3(^4$硫$)5p\ ^5P_2$	$3p^3(^4S)4s\ ^5S^o_2$	4696.753	−1.825	−1.849	−1.833	−1.845	−1.873	−1.753	−1.757	
$3p^3\ (^4S)\ 5d\ ^5D^o_2$	$3p^3(^4$硫$)4p\ ^5P_3$	6758.611	−1.858	−1.896	−1.857	−1.869	−1.784			
$3p^3(^4$硫$)5d\ ^5D^o_3$	$3p^3(^4$硫$)4p\ ^5P_3$	6758.886	−1.014	−1.051	−1.012	−1.024	−0.940			
$3p^3(^4S)5d\ ^5D^o_4$	$3p^3(^4S)4p\ ^5P_3$	6759.043	−0.428	−0.465	−0.427	−0.438	−0.353			
$3p^3(^4S)4d\ ^5D^o_0$	$3p^3(^4S)4p\ ^5P_1$	8672.585	−0.911	−0.962	−0.918	−0.932	−0.908	−0.826	−0.873	
$3p^3(^4S)4d\ ^5D^o_4$	$3p^3(^4$硫$)4p\ ^5P_3$	8697.023	+0.047	−0.004	+0.040	+0.027	+0.052	+0.186	+0.182	
$3p^3(^4$硫$)4p\ ^3P_2$	$3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1$	10458.308	0.259	+0.273	+0.259	+0.262	+0.256	+0.270	+0.274	+0.250±0.009[d]
$3p^3(^4$硫$)4p\ ^3P_0$	$3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1$	10459.618	−0.440	−0.426	−0.440	−0.436	−0.444	−0.429	−0.426	−0.447±0.011[d]
$3p^3(^4$硫$)4p\ ^3P_1$	$3p^3(^4S)4s\ ^3S^o_1$	10462.267	+0.037	+0.051	+0.037	+0.041	+0.035	+0.048	+0.052	+0.030±0.010[d]

注释。 B：巴布什金规范。C：库仑规范。表中采用真空波长。 (a) Zatsarinny & Bartschat (2006)。 (b) Deb & Hibbert (2008)。 (c) Beideck 等人采用束箔技术 Beideck 等人 (1994)。 (d) Zerne 等人采用激光光谱学 Zerne 等人 (1997)。

微调过程会倾向于“过度修正”能级间隔不准确之处。在图 3的中图和下图中，我们展示了 dT 和 CF 参数的分布。显然，与从头计算结果和 DH2008 的结果相比，微调结果在巴布申规范与库仑规范之间的一致性更好。微调结果的 CF 值大于从头计算数据。根据第 ˜节中基于 dT &CF 方法进行的准确度评估 3.2.1，图 4 中所有微调计算的跃迁精度等级均优于 C（即 A、B 或 C），而所有从头计算结果的精度等级均差于 C（即 C、D 或 E）。因此，根据 dT 和 CF 评估，微调结果被认为更准确。我们期待未来有精确的实验测量来验证这些结果。

本文给出的 1730 个跃迁中，有 528 个跃迁的数据可在 NIST 原子光谱数据库中查到；这些数据由Kaufman& Martin (1993年) 和 Podobedova 等人 (2009年) 汇编。这些数据主要包括较强的跃迁（$S \geq 0.01$），来自 ZB2006；其余跃迁则取自其他理论计算（Biémont 等人 1996、1998年；Froese Fischer 等人 2006年；Zatsarinny & Bartschat 2006）和实验测量值（Müller 1968年；Beideck 等人 1994年；Zerne 等人 1997年）。NIST 原子光谱数据库对这些结果进行了严格汇编，并评估了相关不确定度。将我们的结果与这些汇编数据进行比较，有助于评估计算结果的可靠性。图3右图展示了我们的计算结果与 NIST 原子光谱数据库数据的比较。可以看出，我们的从头计算和微调数据均与 NIST 原子光谱数据库推荐的 log(gf) 值吻合良好，约 74% 的结果落在 ±0.1 dex 以内，54% 的结果落在 ±0.05 dex 以内。

具体而言，表中列出了具有可用实验测量值的跃迁结果，以及用作太阳丰度诊断的十个跃迁结果2。理论结果

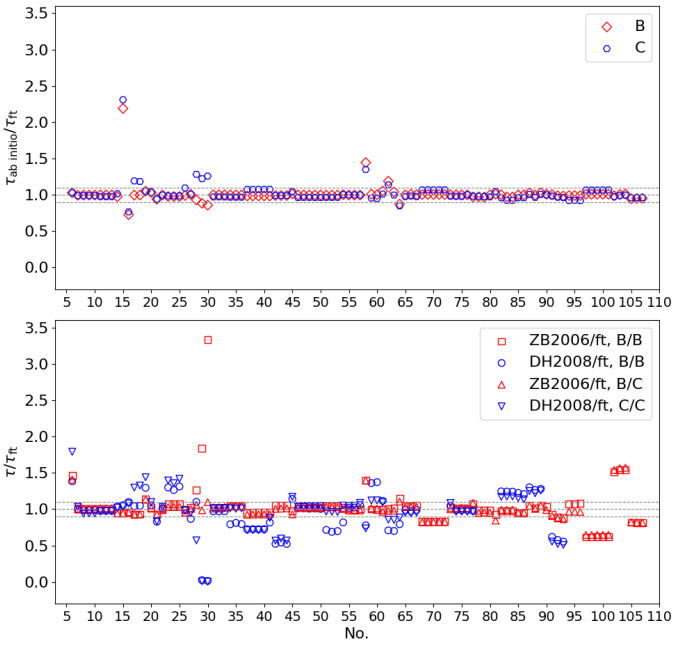


图5：上图：比较巴布什金规范（B）和库仑规范（C）下的微调寿命（ft）。下图：将微调寿命与其他理论结果进行比较。ZB2006：Zatsarinny&Bartschat (2006年)；DH2008 Deb& Hibbert (2008)。ZB2006/ft，B/B：ZB2006的巴布什金规范结果除以微调寿命的巴布什金规范结果。三条灰色虚线分别表示 τ/τ_{ft} = 00.9、1.0 和 1.1。

结果包括从头算和微调相对论组态相互作用计算、ZB2006的B样条计算以及DH2008的CI计算。实验室测量结果来自Beideck 等人（1994年）和

Zerne 等人（1997年）列于最后一栏。Beideck 等人（1994年）采用束箔光谱技术，根据测得的平均寿命和分支比推导出振子强度。然而，对于1296.17 Å、1203.86 Å、1305.88 Å、1807.31 Å和1826.24 Å等谱线，所有理论结果均超出Beideck 等人（1994年）的实验不确定度范围，而不同的理论计算彼此吻合良好，差异在 ±0.03 dex以内。我们还考察了Müller （1968年）报告的测量结果，其中给出了1814 Å和1299 Å多重线各条谱线的振子强度。如Beideck 等人（1994年）所示，两项实验结果之间的差异尤其显著，log(f)的最小差值为0.1 dex。这表明测量结果仍可能存在相当大的不确定度。

用于太阳丰度分析的 Scott 等人 （2015年）所采用的十条可见光与近红外谱线的比较结果列于表2下半部分。对于10450 Å 三重线，基于激光光谱学的不同理论结果和 Zerne 等人 的实验室测量值（1997年）在 0.02 dex 以内符合得非常好，尽管 DH2008 的结果略微超出了测量不确定度。对于全部十条跃迁，DH2008 的结果通常大于 ZB2006 和本文计算结果，而我们的从头计算结果和微调结果总体上与 ZB2006 符合良好。然而，对于两条 4690 Å 谱线和 6750 Å 三重线，我们的结果与 ZB2006 的结果之间存在较大差异，最大差异达到 0.07 dex。这些谱线曾被用作太阳硫丰度的诊断指标（例如 Caffau 等人，2007年；Scott 等人，2015）。然而，由于这一显著差异，在 Amarsi 等人 （2025）最近的分析中，6750 Å 谱线被赋予了零权重，并且理论计算仍需进一步改进。未来亟需对这些诊断谱线的振子强度进行精确的实验室测量，这不仅有助于更好地约束理论计算，也有助于天体物理应用。天体物理一致性检验也可能有助于评估理论数据的可靠性和质量（例如 Laverick 等人，2019年；Korotin 和 Kiselev 2024），尤其是在缺乏实验室测量值的情况下。

3.3. 寿命

将计算得到的寿命与精确测量值进行比较，也有助于评估计算所得跃迁数据的整体准确性。图 5 分别比较了我们在巴布什金规范和库仑规范下微调后及从头计算得到的寿命（上图），以及这些寿命与 ZB2006 和 DH2008 结果的比较（下图）。除表 A.1中编号为 #19、#20、#28、#29、#30 和 #58 的能级外，从头计算和微调后的寿命彼此吻合良好。这些能级与 ZB2006 和 DH2008 的结果也存在显著差异。对于编号为 #19、#20 和 #58 的能级，从头计算与微调后寿命之间的较大差异，是由微调导致组态态函数（CSFs）的混合系数变化所致。例如，在从头计算中，$3p^3(^4S)6p\ ^5P_1$ 能级的百分比纯度为 92 %，接近纯 *LSJ*耦合。相比之下，微调使其百分比纯度降至 84%，并使其与 $3p^3(^2D)4p\ ^1P_1$ 的混合比例增至 7%，从而缩短了 $3p^3(^4S)6p\ ^5P_1$的寿命。三重态 $3s3p^5\ ^3P^o_{2,\ 1,\ 0}$ （编号为 #28、#29 和 #30 的能级）的寿命部分取决于 TEOP跃迁 $3s3p\ ^5\ ^3P^o$ - $3s^23p^34p\ ^3P$，^5P 和 IC跃迁 $3s3p^5\ ^3P^o$ - $3s^23p^4\ ^1D$，^1S；这些跃迁由电子关联驱动，准确计算极具挑战性。研究发现，这些三重态与 $3p^3(^2D)nd\ ^3P^o(n\ =3-7)$强烈混合。对于这些能级，巴布什金规范下的寿命更稳定，而微调会使库仑规范下的寿命发生更大变化。这与第 3.2.3 节讨论的结果一致，即微调对库仑规范下跃迁数据的影响更大。

总体而言，图 5 下图中的比较显示，我们的结果与 ZB2006 的结果比与 DH2008 的结果更为吻合。在有三组寿命数据（ZB2006、DH2008 和我们的计算结果）可供比较的 78 个能级中，有 69 个能级的结果与 ZB2006 的结果相差在 $0.9 \le \tau/\tau_{ft} \le 1.1$ 范围内，而 DH2008 的结果中只有 35 个能级符合这一标准。我们还注意到，我们计算的里德伯态 $3p^3(^4S)6d\ ^5D^o$（编号 #97–#101 的能级）五重态以及 $3p^3(^4S)7p\ ^3P$（编号 #102–#104 的能级）三重线的寿命，与 ZB2006 的结果也存在显著差异。这些能级也存在强烈的能级混合，尤其是 $3p^3(^4S)7p\ ^3P$ 三重线，其百分比纯度仅约为 50%。对于 $3p^3(^4S)6d5D^o_4$，我们的结果——从头计算得到 266.27/269.21 ns，微调计算得到 264.35/251.99 ns——与 Delalic 等人（1990）使用高频偏转技术获得的260 ± 20 ns 实验值非常吻合（见表3）。相比之下，ZB2006 的结果为 165/163 ns，显著低于实验值。

表3将我们计算的寿命与其他理论计算结果和实验测量结果进行了比较。其他计算结果包括 ZB2006 的 B样条计算、Biémont 等人（1998年）的 HFR计算、DH2008 的 CI计算，以及 Froese Fischer 等人（2006年）的 MCHF计算。与其他结果相比，除 $3p3(^2P)4s\ ^3P^o_0$,1,2、$3p^3(^2D)4p\ ^3P_2$, 和 $3p^3(^4S)6d\ ^5D^o_4$外，HFR 结果普遍小得多。本研究的理论结果以及 ZB2006 和 DH2008 的结果，与 Berzinsh 等人（1997年）采用激光光谱学获得的实验测量值，以及 Beideck 等人（1994年）采用束箔技术获得的实验测量值非常吻合；除 $3p^3(^4S)4d\ ^3D_{1,2,3}$态外，这些结果也与 Federman 和 Cardelli（1995年）的天文观测值吻合良好。对于该态，DH2008 得出的寿命约为 Berzinsh 等人（1997年）测量结果的一半。对于长寿命态，即 $3p^3(^4S)4s\ ^5S^o_2$、$3p^3(^4S)np\ ^5P_3(n\ =5,6,7)$ 和 $3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_2$，理论与实验测量结果之间存在显著差异，不同计算结果和实验结果之间也存在显著差异。对于这些由弱跃迁主导的能级，理论计算和实验测量都颇具挑战。此外，长寿命态的寿命测量往往具有较大的不确定度，因此需要进一步进行精确测量。

4. 结论

硅的能级、跃迁数据和寿命采用基于多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用方法的从头计算与微调两种途径进行了计算。我们发现，微调能提供更准确的混合系数，从而正确地定位能级。它还能更好地改善库仑规范下的结果，而库仑规范在从头计算中通常精度较低。由微调引起的波函数修正提高了巴布什金规范与库仑规范之间跃迁数据的一致性，从而提高了跃迁数据的精度。

表3：硅的实验和理论辐射寿命对比（单位：纳秒）。

No.	态	理论 从头计算 B/C	微调 B/C	B样条[a] B/C	HFR[b]	CI[c] B/C	MCHF[d]	实验 实验室测量值	天文观测值[f]
7	$3p^3(^4硫)4s\ ^3S_1$	1.93/1.96	1.94/1.99	1.93/1.98	1.5	1.94/2.05	2.04	1.875(0.094)[g]	1.875(0.188)
27	$3p^3(^4硫)5s\ ^3S_1$	6.88/7.01	6.83/6.95	6.87/6.97	4.2	5.92/6.63		7.1(0.5)[e]	6.9(1.4)
54	$3p^3(^4硫)6s\ ^3S_1$	16.80/17.20	16.77/17.14	17.0/17.2	9.7	13.72/18.00		17.7(1.1)[e]	16.9(3.4)
90	$3p^3(^4硫)7s\ ^3S_1$	34.16/35.38	33.90/35.38	34.5/34.9	18.8			35.6(4.0)[e]	31.0(8.4)
6	$3p^3(^4硫)4s\ ^5S_2$	13893/14439	13510/14043	17615/19771		18691/25138	39037	9200(1000)[i]	
								27000(5000)[j]	
22	$3p^3(^2D)4s\ ^1D_2$	2.23/2.27	2.23/2.27	2.23/2.24	1.7	2.26/2.34	2.30		
55	$3p^3(^2P)4s\ ^3P_0$	2.25/2.29	2.25/2.29	2.22/2.25	3.0	2.29/2.39			
56	$3p^3(^2P)4s\ ^3P_1$	2.24/2.28	2.24/2.28	2.21/2.24	2.9	2.30/2.40		2.034(0.102)[g]	2.1(0.2)
57	$3p^3(^2P)4s\ ^3P_2$	2.22/2.26	2.22/2.26	2.20/2.22	2.8	2.35/2.46		2.146(0.129)[g]	2.1(0.2)
12	$3p^3(^4硫)4p\ ^3P_0$	45.12/43.72	45.15/44.80	46.3/45.4	36.1	44.05/43.67	49.5	46.1(1.0)[e]	
11	$3p^3(^4硫)4p\ ^3P_1$	45.14/43.74	45.17/44.82	46.3/45.4	36.1	44.04/43.66	49.4	46.1(1.0)[e]	
13	$3p^3(^4硫)4p\ ^3P_2$	45.10/43.69	45.12/44.78	46.3/45.4	36.0	44.03/43.65	49.3	46.1(1.0)[e]	
91	$3p^3(^2D)4p\ ^3P_2$	58.49/58.48	58.25/59.46	53.6/53.8	63.0	36.07/32.96		53.5(4)[i]	
34	$3p^3(^4硫)5p\ ^3P_2$	179.06/173.11	179.14/178.85	184/186	131.9	141.98/181.15		188(13)[e]	
								185(15)[i]	
33	$3p^3(^4硫)5p\ ^5P_3$	156.05/149.48	155.78/153.94	158/159	130.1	151.49/156.49		615(50)[i]	
60	$3p^3(^4S)6p\ ^5P_3$	352.19/329.68	351.23/346.94	352/350	289.9	481.87/389.08		265(20)[i]	
96	$3p^3(^4硫)7p\ ^5P_3$	596.11/621.01	601.79/673.21	631/624	549.8			415(25)[i]	
23	$3p^3(^4S)3d\ ^3D_1$	3.44/3.61	3.52/3.67	3.69/3.77	1.9	4.58/5.11	2.62		
24	$3p^3(^4S)3d\ ^3D_2$	3.44/3.60	3.52/3.66	3.68/3.77	1.9	4.45/4.97	2.61		3.0(0.6)
25	$3p^3(^4S)3d\ ^3D_3$	3.42/3.58	3.50/3.64	3.67/3.75	1.9	4.59/5.16	2.59		
42	$3p^3(^4硫)4d\ ^3D_1$	11.87/12.36	11.97/12.48	12.1/12.6	6.0	6.27/7.09		12.6(1.3)[e]	
43	$3p^3(^4硫)4d\ ^3D_2$	11.85/12.34	11.96/12.46	12.1/12.6	6.0	6.49/7.43		12.5(0.7)[e]	9.6(1.9)
44	$3p^3(^4硫)4d\ ^3D_3$	11.73/12.21	11.84/12.34	12.0/12.5	5.9	6.18/7.02		12.9(1.1)[e]	
80	$3p^3(^4S)5d\ ^3D_1$	37.18/38.84	38.38/39.73	36.0/37.8	10.1			41(3)[e]	
78	$3p^3(^4S)5d\ ^3D_2$	37.68/39.34	38.76/40.09	36.3/38.1	10.0				37(7.5)
79	$3p^3(^4S)5d\ ^3D_3$	37.75/39.39	38.80/40.18	36.6/38.4	9.9			40(4)[e]	
97	$3p^3(^4S)6d\ ^5D_4$	266.27/269.21	264.35/251.99	165/163	593.1			260(20)[i]	
107	$3p^3(^4S)6d\ ^3D_1$	134.65/135.55	141.41/141.03	108/115	16.0				
106	$3p^3(^4S)6d\ ^3D_2$	138.30/139.29	145.68/145.13	112/118	15.9			75(7)[b]	199(90)
105	$3p^3(^4S)6d\ ^3D_3$	142.01/143.06	150.12/149.33	116/123	15.8				

注：B/C：巴布什金规范和库仑规范。最后两列括号中的数值为实验误差。(a) Zatsarinny 与 Bartschat（2006）采用的 B 样条方法。(b) Biémont 等人（1998）的相对论哈特里–福克计算。(c) Deb 与 Hibbert（2008）的组态相互作用计算。(d) Froese Fischer 等人（2006）的多组态哈特里–福克计算。(e) Berzinsh 等人（1997）和 Zerne 等人（1997）的激光光谱学。(f) 寿命数据摘自 Zatsarinny 与 Bartschat（2006），原始数据来自 Federman 和 Cardelli（1995）；Federman 和 Cardelli（1996）。(g) Beideck 等人（1994）采用的束箔技术。(i) Delalic 等人（1990）采用的高频偏转技术。(j) Mason（1994）采用的电子碰撞解离法。

我们与各种理论和实验结果进行了广泛比较。计算数据的精度水平采用规范差异参数与CF相结合的方式进行评估。对于需要完整原子数据集的应用，我们建议使用巴布什金规范下的微调数据；对于特定跃迁，建议与不同来源进行交叉验证以确保可靠性。值得注意的是，对于某些跃迁，不同理论计算之间存在显著差异，尤其是太阳丰度诊断谱线。缺乏精确的实验测量使评估不同计算的精度变得复杂。进一步的实验工作对于验证和约束理论预测至关重要。

本研究提供的原子数据可用于天体物理学应用，尤其是非 LTE 恒星光谱分析（例如 Korotin 和 Kiselev 2024 ）。特别是，这些新数据对太阳硫丰度的影响已在近期由 Amarsi 等人（2025）进行了详细讨论。

数据可用性

表 A.1 和表 A.2 的完整版本仅以电子形式提供于 CDS，可通过匿名 FTP 访问 cdsarc.u- strasbg.fr (130.79.128.5)，或通过 HTTP：//cdsweb.u-strasbg.fr/cgi-bin/qcat?J/A+A/。

致谢。 WL感谢中国国家重点研发计划项目（编号：2022YFF0503800）、中国国家自然科学基金（NSFC，项目编号：12373058）以及太阳活动与空间天气国家重点实验室专项研究基金的支持。AMA感谢瑞典研究理事会（VR 2020-03940）、通过瑞典皇家科学院资助的克拉福德基金会（CR 2024-0015），以及欧盟地平线欧洲计划研究与创新项目（资助协议编号：101079231，EXOHOST）的支持。PJ感谢瑞典研究理事会（VR 2023-05367）的支持。AMA和WL还感谢2024年中国科学院（CAS）院长国际学者项目（PIFI）的支持。WL感谢李彦廷在rfinetune代码方面提供的宝贵讨论。我们也感谢匿名审稿人提出的有益意见，这些意见帮助改进了原稿。

参考文献

Amarsi, A. M., Li, W., Grevesse, N., & Jurewicz, A. J. G. 2025, 天文学与天体物理学, 703, A35

Anderson, D. E., Bergin, E. A., Maret,S., & Wakelam,V. 2013,《天体物理学杂志》, 779, 141 Beideck, D. J., Schectman, R. M., Federman, S. R., & Ellis, D. G. 1994, 《天体物理学杂志》, 428, 393 Berzinsh, U., Caiyan, L., Zerne, R., Svanberg, S., & Biémont, E. 1997, 《物理评论A》, 55, 1836 Biémont, E., Garnir, H. P., Federman, S. R., Li, Z. S., & Svanberg, S. 1998, 《天体物理学杂志》, 502, 1010 Biémont, E., Storey, P. J., & Zeippen, C. J. 1996, 天文学与天体物理学, 309, 991 Bridges, J. M. & Wiese, W. L. 1967, 《物理评论》, 159, 31 Caffau, E., Faraggiana, R., Bonifacio, P., Ludwig, H.-G., & Steffen, M. 2007, 天文学与天体物理学, 470, 699 Carpenter, K. G., Robinson, R. D., Wahlgren, G. M., Linsky, J. L., & Brown, A. 1994, 《天体物理学杂志》, 428, 329 Chen, M. H., Cheng, K. T., & Johnson, W. R. 2001, 《物理评论A》, 64, 042507 Chen, Z. & Msezane, A. Z. 1997, 《物理学杂志B：原子与分子物理学》, 30, 3873 Civiš, S., Kramida, A., Zanozina, E. M., et al. 2024, 《天体物理学杂志增刊》, 274, 32 Corrégé, G. & Hibbert, A. 2004, 《原子数据与核数据表》, 86, 19 Costa Silva, A. R., Delgado Mena, E., & Tsantaki, M. 2020, 天文学与天体物理学, 634, A136 Cowan, R. D. 1981, 《原子结构与光谱理论》, 第1版, 第3卷 (加利福尼亚大学出版社) da Silva, R., D'Orazi, V., Palla, M., et al. 2023, 天文学与天体物理学, 678, A195 Daflon, S., Cunha, K., Smith, V. V., & Butler, K. 2003, 天文学与天体物理学, 399, 525 Deb, N. C. & Hibbert, A. 2006, 《物理学杂志B：原子与分子物理学》, 39, 4301 Deb, N. C. & Hibbert, A. 2008, 《原子数据与核数据表》, 94, 561 Delalic, Z., Erman, P., & Kallne, E. 1990, 《物理学文摘》, 42, 540 Doering, J. P. 1990, 《地球物理研究杂志》, 95, 21313 Duffau, S., Caffau, E., Sbordone, L., et al. 2017, 天文学与天体物理学, 604, A128 Durrance, S. T., Feldman, P. D., & Weaver, H. A. 1983, 《天体物理学杂志》, 267, L125 Dyall, K., Grant, I., Johnson, C., Parpia, F., & Plummer, E. 1989, 《计算物理通讯》, 55, 425 Ekman, J., Godefroid, M., & Hartman, H. 2014, 《原子》, 2, 215 Fawcett, B. C. 1986, 《原子数据与核数据表》 , 35, 185 Feaga, L. M., McGrath, M. A., & Feldman, P. D. 2002, 《天体物理学杂志》, 570, 439 Federman, S. R. & Cardelli, J. A. 1995, 《天体物理学杂志》, 452, 269 Federman, S. R. & Cardelli, J. A. 1996, 《物理学学报》, 1996, 158 Fischer, C. F. 1987, 《物理学杂志B：原子与分子物理学》, 20, 4365 Fleming, J. & Hibbert, A. 1999, 《物理学文摘T辑》, 83, 44 Froese Fischer, C. 2009, 《物理学文摘T辑》, 134, 014019 Froese Fischer, C., Gaigalas, G., Jönsson, P., & Biero´n, J. 2019, 《计算物理通讯》, 237, 184 Froese Fischer, C., Godefroid, M., Brage, T., Jönsson, P., & Gaigalas, G. 2016, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理学》, 49, 182004 Froese Fischer, C. & Tachiev, G. 2004, 《原子数据与核数据表》, 87, 1 Froese Fischer, C., Tachiev, G., Gaigalas, G., & Godefroid, M. R. 2007, 《计算物理通讯》, 176, 559 Froese Fischer, C., Tachiev, G., & Irimia, A. 2006, 《原子数据与核数据表》, 92, 607 Gaigalas, G., Fritzsche, S., & Grant, I. P. 2001, 《计算物理通讯》, 139, 263 Gaigalas, G., Froese Fischer, C., Rynkun, P., & Jönsson, P. 2017, 《原子》, 5, 6 Gaigalas, G., Rudzikas, Z., & Froese Fischer, C. 1997, 《物理学杂志B：原子与分子物理学》, 30, 3747 Gaigalas, G., Rynkun, P., Domoto, N., et al. 2024, 《皇家天文学会月刊》, 530, 5220 Gaigalas, G., Rynkun, P., Radži¯ut˙e, L., et al. 2020, 《天体物理学杂志增刊》, 248, 13 Gaigalas, G., Žalandauskas, T., & Rudzikas, Z. 2003, 《原子数据与核数据表》, 84, 99 Gaigalas, G., Zalandauskas, T., & Fritzsche, S. 2004, 《计算物理通讯》, 157, 239 Ganas, P. S. 1982, 《物理快报A》, 87, 394 Grant, I. P. 1974, 《物理学杂志B：原子与分子物理学》, 7, 1458 Grant, I. P. 2007, 《原子与分子的相对论量子理论》 (施普林格，纽约) Hibbert, A. 1974, 《物理学杂志B：原子与分子物理学》, 7, 1417 Hibbert, A. 1975, 《计算物理通讯》, 9, 141 Ho, Y. K. & Henry, R. J. W. 1985, 《天体物理学杂志》, 290, 424 Judge, P. G. 1988, 《皇家天文学会月刊》, 231, 419 Jönsson, P., Gaigalas, G., Fischer, C. F., et al. 2023a年, 《原子》, 11 Jönsson, P., Godefroid, M., Gaigalas, G., et al. 2023b, 《原子》, 11 Kamp, I., Iliev, I. K., Paunzen, E., et al. 2001, 天文学与天体物理学, 375, 899 Kaufman, V. & Martin, W. C. 1993, 《物理与化学参考数据杂志》, 22, 279 Korotin, S. A. & Kiselev, K. O. 2024, 《天文学报告》, 68, 1159 Kramida, A., Yu. Ralchenko, Reader, J., & and NIST ASD 团队。2024年, NIST 原子光谱数据库（版本 5.12）， [在线]。网址: https://physics.nist.gov/asd [2025, 8月 21]。美国国家标准与技术研究院，马里兰州盖瑟斯堡。Kurucz, R. L. & Peytremann, E. 1975年，SAO 特别报告。Laverick, M., Lobel, A., Royer, P., 等，2019年，天文学与天体物理学，624, A60。Li, M. C., Li, W., Jönsson, P., Amarsi, A. M., & Grumer, J. 2023a年，《天体物理学杂志增刊》，265，26。Li, W., Jönsson, P., Amarsi, A. M., Li, M. C., & Grumer, J. 2023b，天文学与天体物理学，674，A54。Li, Y., Gaigalas, G., Li, W., Chen, C., & Jönsson, P. 2023年，《原子》，11。Lundberg, H., Li, Z. S., & Jönsson, P. 2001年，《物理评论A》，63，032505。Mason, N. J. 1994年，《物理学学报》，49，578。Müller, D. 1968年，《自然研究杂志A辑》，23，1707。Nissen, P. E., Akerman, C., Asplund, M., 等，2007年，天文学与天体物理学，469，319。Olsen, J., Roos, B. O., Jo/rgensen, P., & Jensen, H. J. A. 1988年，《化学物理学杂志》，89，2185。Papoulia, A., Ekman, J., Gaigalas, G., 等，2019年，《原子》，7。Papoulia, A., Ekman, J., & Jönsson, P. 2019年，天文学与天体物理学，621，A16。Podobedova, L. I., Kelleher, D. E., & Wiese, W. L. 2009年，《物理与化学参考数据杂志》，38，171。Savage, B. D. & La wrence, G. M. 1966年，《天体物理学杂志》，146，940。Scott, P., Grevesse, N., Asplund, M., 等，2015年，天文学与天体物理学，573，A25。Skillman, E. D. & Kennicutt, Jr., R. C. 1993年，《天体物理学杂志》，411，655。Skúladóttir, Á., Andrievsky, S. M., Tolstoy, E., 等，2015年，天文学与天体物理学，580，A129。Starace, A. F. 1971年，《物理评论A》，3，1242。Sturesson, L., Jönsson, P., & Froese Fischer,C. 2007年，计算机物理通讯，177, 539。Takeda, Y., Hashimoto, O., Taguchi, H., 等，2005年，《日本天文学会刊》，57，751。Tayal, S. S. 1998年，《天体物理学杂志》，497，493。Tennyson, J. 2019年，《天文光谱学》。天文光谱学的原子与分子物理学导论（世界科学出版社）。Zatsarinny, O. & Bartschat, K. 2006年，《物理学杂志B：原子与分子物理学》，39，2861。Zerne, R., Caiyan, L., Berzinsh, U., & Svanberg, S. 1997年,《物理学学报》，56，459。Zhang, W., Palmeri, P., Quinet, P., & Biémont, É. 2013年，天文学与天体物理学，551，A136。

附录 A：能级和跃迁数据。

表 A.1：从头计算和精细–调谐计算得到的能级和寿命。

No.	组态	态	E（cm^{-1}）			从头计算		精细–调谐	
			从头计算	微调–	NIST 原子光谱数据库	τ_B (s)	τ_C (秒)	τ_B (秒)	τ_C (秒)
1	$3p^4$	$^3P_2$	0.00	0.00	0.0000				
2	$3p^4$	$^3P_1$	388.63	395.37	396.0565				
3	$3p^4$	$^3P_0$	563.86	572.33	573.5957				
4	$3p^4$	$^1D_2$	9423.71	9258.76	9238.6090				
5	$3p^4$	$^1S_0$	22798.74	22276.12	22179.9542				
6	$3p^3(^4$硫$)4s$	$^5S^o_2$	52206.08	52586.28	52623.6050	1.389E−05	1.444E−05	1.351E−05	1.404E−05
7	$3p^3(^4S)4s$	$^3S^o_1$	54980.58	55302.32	55330.7750	1.931E−09	1.964E−09	1.944E−09	1.985E−09
8	$3p^3(^4S)4p$	$^5P_1$	62952.47	63405.52	63446.0380	3.605E−08	3.567E−08	3.616E−08	3.606E−08
9	$3p^3(^4S)4p$	$^5P_2$	62963.20	63416.88	63457.1166	3.595E−08	3.558E−08	3.606E−08	3.596E−08
10	$3p^3(^4S)4p$	$^5P_3$	62980.48	63434.97	63475.0270	3.577E−08	3.540E−08	3.588E−08	3.579E−08
–	–	–	–	–	–	–	–	–	–

注释。 能级以基态为参照，并与 NIST 原子光谱数据库（Kramida 等（2024））中源自 Civiš 等人 (2024年) 的数据进行比较。寿命分别以 Babushkin（τ_B）和 Coulomb（τ_C）规范给出。NIST 原子光谱数据库中没有第 94 和 95 号的激发能。考虑到这些能态的简并度接近，我们在微调过程中使用第 96 号能量值（$3p^3(^4S)7p\ ^5P_3$）作为第 94 和 95 号的能量。完整表格可在 CDS 获取。

表 A.2：计算得到的跃迁数据。

上能级	下能级	λ (Å)	从头计算						微调					
			log(gf)		A ($^{-1}$)		Acc		log(gf)		A (s^{-1})		Acc.	
			B	C	B	C	B	C	B	C	B	C	B	C
$3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_1$	$3p^4\ ^3P_2$	1247.11	−4.01	−3.98	1.39E+05	1.50E+05	C	C	−4.04	−4.01	1.29E+05	1.39E+05	C	C
$3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_2$	$3p^4\ ^3P_2$	1247.14	−2.86	−2.83	1.17E+06	1.26E+06	C	C	−2.90	−2.87	1.08E+06	1.17E+06	C	C
$3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_3$	$3p^4\ ^3P_2$	1247.16	−2.15	−2.12	4.32E+06	4.67E+06	C	C	−2.19	−2.16	3.93E+06	4.27E+06	C	C
$3p^3(^4$硫$)6d\ ^5D^o_3$	$3p^4\ ^3P_2$	1250.12	−6.43	−7.27	2.28E+02	3.25E+01	E	E	−5.82	−6.13	9.14E+02	4.54E+02	E	E
$3p^3(^4S)6d\ ^5D^o_2$	$3p^4\ ^3P_2$	1250.12	−6.13	−6.43	6.37E+02	3.20E+02	E	E	−6.14	−6.45	6.20E+02	3.04E+02	E	E
$3p^3(^4S)6d\ ^5D^o_1$	$3p^4\ ^3P_2$	1250.12	−6.50	−6.71	4.50E+02	2.79E+02	E	E	−6.56	−6.79	3.89E+02	2.28E+02	E	E
$3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_1$	$3p^4\ ^3P_1$	1253.30	−2.85	−2.82	1.99E+06	2.14E+06	C	C	−2.89	−2.86	1.84E+06	1.97E+06	C	C
$3p^3(^4S)6d\ ^3D^o_2$	$3p^4\ ^3P_1$	1253.33	−2.40	−2.37	3.35E+06	3.60E+06	C	C	−2.44	−2.41	3.07E+06	3.30E+06	C	C
$3p^3(^4S)6d\ ^5D^o_2$	$3p^4\ ^3P_1$	1256.34	−8.91	−7.70	1.04E+00	1.67E+01	E	E	−8.56	−7.86	2.31E+00	1.16E+01	E	E
$3p^3(^4S)6d\ ^5D^o_1$	$3p^4\ ^3P_1$	1256.34	−6.48	−6.76	4.68E+02	2.44E+02	E	E	−6.66	−7.03	3.04E+02	1.31E+02	E	E
–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–

注释。仅显示前十行。波长为真空波长，根据 NIST 原子光谱数据库中的能级计算得出，数据来源于Civiš 等人(2024年)。需要指出的是，与第 94 和 95 号跃迁相关的波长（$3p^3(^4S)7p\ ^5P_{1,2}$)是使用第 96 号能级值（$3p^3(^4S)7p\ ^5P_3$）计算得出的。完整表格可在 CDS 获取。