通过大规模多组态狄拉克-哈特里-福克计算建立的铍原子数据基准

S.J. Wu,[1] S. W. Tian,[1] R. Si,[1] K. Wang,[2] P. Jönsson,[3] G. Gaigalas,[4] M. Godefroid,[5] A. M. Amarsi,[6] 和 C. Y. Chen[1]1)上海EBIT实验室，核物理与离子束应用重点实验室，近代物理研究所，复旦大学核科学与技术系，中国上海 2004332)安徽师范大学物理系、安徽省光电材料科学与技术重点实验室、教育部功能分子固体重点实验室，中国安徽芜湖 2410003)材料科学与应用数学系，马尔默大学，SE-20506，瑞典马尔默4)理论物理与天文学研究所，维尔纽斯大学，Saul˙etekio Avenue 3，LT-10222，立陶宛维尔纽斯5)光谱学、量子化学与大气遥感，CP160/09，布鲁塞尔自由大学，比利时布鲁塞尔 B-10506)理论天体物理学，乌普萨拉大学物理与天文学系，Box 516，SE-751 20，瑞典乌普萨拉

arXiv:2603.11098v1 [physics.atom-ph] 11 Mar 2026

（*电子邮箱：chychen@fudan.edu.cn）

（*电子邮箱：rsi@fudan.edu.cn）

（日期：2026年3月13日）

本文采用多组态狄拉克-哈特里-福克（MCDHF）和相对论组态相互作用（RCI）方法，计算了铍中组态 $1s^2 2snl$ ($n \leq 7$) + $1s^2 2p^2$ 的最低99个能级的激发能、辐射跃迁数据、寿命、Land´e g 因子、超精细相互作用常数和同位素位移参数。与现有实验激发能相比，平均差值及其标准差为7.08 ± 1.14 cm^{-1} (0.011% ± 0.003 %)，表明理论与观测的一致性极佳。我们基于两种相互独立的方法估算跃迁速率的不确定度。目前的MCDHF/RCI振子强度与显式相关高斯（ECG）方法所得结果均在2%以内一致，唯有四个跃迁受到强烈抵消效应的影响。对于寿命、超精细分裂和同位素位移，目前的MCDHF/RCI结果与少数现有实验值吻合良好，这支持了我们对许多缺乏实验测量的态所作预测的可靠性。这些全面的结果可用于天体物理等离子体中的谱线识别和诊断。

关键词：多组态 组态 Dirac-Hartree-Fock；铍原子；跃迁概率；寿命；超精细分裂；同位素位移。

I. 引言

原子光谱数据对许多天体物理研究至关重要，其中电子数较少的较轻元素受到广泛关注[1,2]。通过分析天体物理观测记录的原子光谱，可以推断元素丰度、电子温度、电子密度等性质，以及重要的激发机制和光致过程[3,4]。铍长期以来一直是天体物理观测关注的对象[5–7]，其光谱也已得到广泛研究。美国国家标准与技术研究院（NIST）的文献数据库收录了已发表的 Be I 能级（超过100篇论文）和跃迁概率（超过200篇论文）研究的完整列表[8]。晚型星中的铍丰度是多种天体物理情境下的重要诊断指标[9,10]，可用于研究演化混合、星系化学演化、行星吞噬以及球状星团的形成[11–15]。

为了满足对天体物理观测进行精确分析的要求，始终需要高分辨率的原子光谱，这些光谱需通过实验室测量和理论计算获得。遗憾的是，迄今提供的相关数据往往不够完整，或精度不足以用于分析。多年来，人们一直在这些领域开展大量研究。

有关铍光谱的实验测量可追溯至19世纪末。波长测量范围为89至31780 Å，数据取自空心阴极放电和弧光放电的发射光谱、束箔光谱以及远紫外光吸收光谱。关于1997年之前的研究，Kramida和Martin的汇编中提供了详细信息[16],，其中Johansson和Holmström的工作[17–19]给出了许多精确结果。NIST原子光谱数据库（ASD）[8] 收录的大多数能级都来自这三项研究。除这些研究外，Cook等人[20]最近利用超低膨胀光学腔进行无多普勒光谱学，报告了Be I中2s2p $^1P_1$态的光谱学结果。其重心的绝对频率测定为42 565.4501(13) cm^{-1}，精度比此前的实验测量高130倍——

此前的实验测量。两年后，Cook等人[21] 利用具有共振中间态的双光子光谱学，测量了中性 ^{9}Be中2s3d $^1D_2$ 态的绝对频率，其精度比此前的实验测量高180倍。Ahrendsen等人22最近测量了中性 ^{9}Be中2s3s $^1S_0$ 态的绝对能量，测量精度比此前的实验结果提高了20倍。所有这些高精度实验测量在一定程度上丰富了中性铍的参考数据。

关于 Be I 低激发态理论计算的研究已有大量成果，NIST原子光谱数据库[8]相关的文献数据库中收录的丰富资料便是明证。以下综述并不力求面面俱到，而是着重讨论若干与本文背景及进展最为相关的关键研究。Froese Fischer 和 Tachiev[23,24]采用多构型 Hartree-Fock（MCHF）方法计算了铍等电子序列的 $n \leq 3$ 个能级的激发能、寿命和跃迁概率，并通过 Breit-Pauli哈密顿量纳入相对论效应。Sims等人[25–27] 通过 Hylleraas-组态相互作用（Hy-CI）方法，计算了铍原子 2 1S基态以及 3 1S、4 1S、5 1S、6 1S、7 1S 激发态的非相对论能量。Dong等人 [28] 通过全相对论多组态狄拉克-哈特里-福克（MCDHF）方法，计算了 Be I 若干低激发态的激发能、跃迁概率和极化率。近年来，Stanke等人.[29–37] 和 Nasiri等人.[38]采用变分优化的高斯函数，这些函数显式依赖于电子间距离，即所谓的显式相关高斯函数（ECG），高精度地计算了 Be I 低激发态的跃迁能。他们的研究主要涉及 Be I 的 ^{1}S、 ^{1}P°、 ^{1}D 和 ^{3}P° 谱项。他们的结果与实验值之间的偏差通常小于 0.1 cm^{-1}，令人十分满意。然而，在并行计算机系统上使用数百个核心连续计算数月甚至一年，通常才能完成一两个谱项的计算。因此，他们计算涉及的能级数通常不多。迄今为止，他们仅给出了铍原子基态与 19 个最低束缚激发单重态 S 和 P° 态之间的跃迁速率[38]。

作为我们开展精确原子数据研究系列工作的一部分[39–46]，我们使用 GRASPG 软件包[47], 进行了大规模多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用计算。该软件包是 GRASP 代码的进一步优化和改进版本[48,49]。相关改进详见 Li 等人[50,51] 和 Si 等人[47]的研究。本研究首次将改进后的程序应用于中性铍原子。通过展示该方法的准确性和可靠性，我们旨在建立一个稳健的框架，用于研究其他具有天体物理学相关性的中性和低电荷原子的原子参数。未来的工作将把这一方法扩展至一系列原子，从硼开始，并全面、系统地探索它们的原子结构和性质。这些研究成果将通过系列论文发表，为实验室和天体物理等离子体的高精度研究作出贡献。

本工作的计算为 Be I 中 $1s^2 2snl$（$n \leq 7$）+ $1s^2 2p^2$ 组态的最低 99 个能级提供了高精度数据，包括激发能、波长、跃迁速率（电偶极（E1）和四极（E2）、磁偶极（M1）和四极（M2））、寿命、Land´e g 因子、超精细相互作用常数和同位素位移。本工作是我们先前计算的延续[41], ；先前的工作报道了从 B II 到 Ne VII 的类铍离子中 $n \leq 6$ 个能级的完整、高精度数据集，涵盖激发能、寿命和跃迁速率。为评估本次多组态狄拉克-哈特里-福克（MCDHF）和相对论组态相互作用（RCI）数据的准确性，我们采用了两种不确定度估算方法，并将结果与中性铍已有的实验值和理论值进行了广泛比较。

II. 理论与计算

A. 原子态函数

在多组态狄拉克-哈特里-福克方法中，原子态函数（ASFs）表示为组态态函数（CSFs）的线性展开。组态态函数由单电子狄拉克轨道的反对称化耦合乘积构成。Froese Fischer 等人[52] 对此方法作了详细介绍。因此，这里仅介绍计算程序。

在我们的多组态狄拉克-哈特里-福克计算中，针对组态 $1s^2 2snl$ ($n \leq 7$) + $1s^2 2p^2$ 的最低 99 个能级。偶宇称和奇宇称的原始多参考组态（MR）集合包括以下组态

偶宇称：$2s^2$, $2p^2$, 2s3s、2s3d、2p3p、2s4s、2s4d、2p4p、2p4 f 、2s5s、2s5d、2s5g、2p5p、2p5 f 、2s6s、2s6d、2s6g、2p6p、2p6 f 、2p6h、2s7s、2s7d、2s7g、2s7i、2p7p、2p7 f 、2p7h、2s8s、2p8p；

奇宇称：2s2p、2s3p、2p3s、2p3d、2s4p、2s4f、2p4s、2p4d、2s5p、2s5f、2p5s、2p5d、2p5g、2s6p、2s6f、2s6h、2p6p、2p6f、2p6g、2s7p、2s7f、2s7h、2p7s、2p7d、2p7g、2p7i、2s8p、2p8s。

这些多参考组随后称为 MR_0。对这些多参考组同时进行偶宇称和奇宇称的初始多组态狄拉克-哈特里-福克计算，以确定一组从 1s 到 8p 的共用轨道。其中，专门引入 8s 和 8p 两个轨道，以考虑 LS 项依赖性，并与 1s、2s、2p……7i 谱轨道共同优化[53,54]。采用活性空间（AS）方法[55,56] 生成组态态函数展开：允许从最初占据的价亚壳层向额外的激发轨道进行单激发和双激发。所有展开中的组态态函数均保持 1s 亚壳层闭合。首先考虑的轨道活性集如下：

活性空间$_1$ = {8s、8p、8d、8f、8g、8h、8i、8k}。

通过以下序列引入额外的活性空间：

$$\mathrm{AS}_2 = \mathrm{AS}_1 + \{9s, 9p, 9d, 9f, 9g, 9h, 9i, 9k, 9l\},$$

活性空间$_3$ = 活性空间$_2$ + {10s、10p、10d、10 f、10g、10h、10i、10k、10l、10m}，活性空间$_4$ = 活性空间$_3$ + {11s、11p、11d、11 f、11g、11h、11i、11k、11l、11m}，活性空间$_5$ = 活性空间$_4$ + {12s、12p、12d、12 f、12g、12h、12i、12k、12l}，活性空间$_6$ = 活性空间$_5$ + {13s、13p、13d、13 f、13g、13h、13i、13k、13l}，活性空间$_7$ = 活性空间$_6$ + {14s、14p、14d、14 f、14g、14h、14i}，活性空间$_8$ = 活性空间$_7$ + {15s、15p、15d、15 f、15g、15h、15i}，活性空间$_9$ = 活性空间$_8$ + {16s、16p、16d、16 f、16g}，活性空间$_{10}$ = 活性空间$_9$ + {17s、17p、17d、17 f}，活性空间$_{11}$ = 活性空间$_{10}$ + {18s、18p、18d}，活性空间$_{12}$ = 活性空间$_{11}$ + {19s、19p、19d}，活性空间$_{13}$ = 活性空间$_{12}$ + {20s、20p}，活性空间$_{14}$ = 活性空间$_{13}$ + {21s、21p}，活性空间$_{15}$ = 活性空间$_{14}$ + {22s、22p}。

最终的活性空间被限制为 AS_{15}，这是因为 GRASPG 程序包中的轨道数目不允许超过 214。这是 GRASPG 中所用打包标记法所能支持的最大轨道数，其中标记是由若干分别编码的部分构成的 4 字节整数[50]。活性空间按照一系列扩展被系统地增大，以便监测计算性质的收敛性。在这种所谓的逐层（LBL）方法中，每一步只优化新出现的那一层轨道，而先前的轨道则保持固定。

轨道优化完成后，在随后的相对论组态相互作用计算中纳入量子电动力学（QED）修正和布赖特相互作用。在这一阶段，允许来自 1s 亚壳层的单激发和双激发，以计入获得精确结果所需的核价（CV）和核核（CC）电子相关效应。与此同时，需要考虑更大的多参考组态，以便捕捉三激发和四激发的更多贡献。此处，附加的多参考组态按如下方式定义：

多参考组$_1$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 8$), 多
参考组$_2$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 9$), 多参
考组$_3$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 10$), 多参
考组$_4$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 11$), 多参
考组$_5$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 12$), 多参
考组$_6$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 13$), 多参
考组$_7$: $1s^2nln'l'$ ($2 \le n \le n' \le 14$).

对于以上所有多参考组，轨道角动量遵循标准条件 $0 \le l \le n-1$, $0 \le l' \le n'-1$。此外，当主量子数 n 或 n′ 满足 $n \ge 9$ 或 $n' \ge 9$时，相应的轨道角动量限制为 l、l′ ∈ {s、p、d、f }。

最终的多参考组态（MR）选为 MR_7。通过允许这些组态中的所有电子发生单激发和双激发，跃迁至 AS_{15} 轨道活性集，可以引入更多来自三重和四重激发的贡献。最终偶宇称和奇宇称相对论组态相互作用空间中的组态态函数（CSFs）数量分别为 129 247 141 和 118 235 059，并分布于不同的 J对称性中。如此大规模的展开在计算机内存和计算时间方面都极具挑战性，原始 GRASP 程序包无法处理。借助组态态函数生成器（CSFG）[51] 以及近期作为 GRASPG 程序包[47], 的一部分开发的新凝聚方法，我们可以有效地减少 CSFs 的数量。简而言之，我们基于狄拉克-库仑哈密顿量进行规模较小的相对论组态相互作用计算，累加 CSFG 的权重平方，直至达到指定比例；详情见 Li 等人[51]第 5.3 节。这里，我们从 MR_7 和 AS_9 展开开始。我们通过保留所有标记并生成贡献达到累积权重 0.9999999 的 CSFG，进行凝聚，从而得到精简的 CSFG 列表。随后，利用 CSFG 的特性，我们可以通过将每种对称性对应的最高轨道重新定义为 AS_{15}，对展开进行先验凝聚。所得的凝聚 CSFG 列表用于基于狄拉克-库仑-布雷特哈密顿量的相对论组态相互作用计算，并对布赖特相互作用加以限制。最终凝聚后的 CSFG 列表中，两种宇称对应的组态态函数数量分别为 6 714 901 和 6 620 286。仅保留了原始 CSFs 的约 5%。测试计算表明，展开规模的大幅缩减仅会使激发能发生可忽略的变化（$\le 1\ cm^{-1}$）。鉴于这一优势，我们可以将整个计算时间缩短至一个月；整个计算包括多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用计算，以及评估跃迁速率、寿命、超精细结构和同位素位移所需的时间。计算使用配备两颗 AMD EPYC 7542 中央处理器（CPU）的并行计算系统上的 64 个核心完成。

在相对论计算中，始终使用 j j 耦合对波函数展开所依据的组态态函数进行标记。为与实验人员或 NIST 原子光谱数据库等数据库所采用的标记体系保持一致，需将 j j 耦合的组态态函数转换为 LSJ耦合方案[57]。同时，使用 LS百分比组成中占主导的谱项标记量子态[58,59]。

B. 跃迁速率

获得一组原子态函数后，两个原子态 ψ_α(PJM) 和 Ψ_β(P′J′M′) 之间多极跃迁的跃迁速率可表示为约化跃迁矩阵元的函数：

$$\langle \psi_\alpha(PJ) \| \mathbf{O}^{\lambda,(k)} \| \psi_\beta(P'J') \rangle, \tag{1}$$

其中，$O^{\lambda,(k)}$ 是多极阶数为 k 的库仑规范或 Babushkin 规范下的电磁算符（λ = 1 表示电多极，λ = 0 表示磁多极）。如有需要，可先变换原子态函数，使轨道集成为双正交，然后再应用拉卡代数[60]，将跃迁矩阵元表示为单电子矩阵元之和[61,62]。

C. Landˊe因子

塞曼效应由原子的磁矩与外磁场之间的相互作用引起。朗ˊ德 g 因子决定了外磁场中磁子能级的分裂。在考虑非相对论

条件下，纯 LS 耦合中的朗德 g 因子可写为

$$g_J(LS) = 1 + (g_s - 1)\frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (2)$$

其中，$g_s = 2.002\,319$ 是电子的旋磁比。对于低原子序数原子和低能态，若可忽略相对论效应，或自旋轨道耦合较弱，则非相对论公式所得结果有效。

在完全相对论理论中，朗德 g 因子为

$$g_J = \frac{2}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \times \langle \psi_\alpha(PJ) \| \sum_{j=1}^{N} \left[-\mathrm{i}\frac{\sqrt{2}}{2\alpha} r_j (\boldsymbol{\alpha}_j \mathbf{C}^{(1)}(j))^{(1)} + \frac{g_s - 2}{2} \beta_j \boldsymbol{\Sigma}_j \right] \| \psi_\alpha(PJ) \rangle, \quad (3)$$

其中，i 是虚数单位，α是精细结构常数，$\boldsymbol{\alpha}_j$ 是狄拉克矩阵，$\mathbf{C}^{(k)}$ 是球张量算符，$\boldsymbol{\Sigma}_j$ 是相对论自旋矩阵[63,64]。由于维格纳-埃卡特定理有不同的表述形式，本文公式（包括 IID 节中的公式）在不同论文中可能看起来有所不同，Jönsson 等人[65]对此作了详细说明。

D. 超精细结构

N 电子原子的电子张量算符，以原子单位表示，可写为[63,64]

$$\mathbf{T}^{(1)} = \sum_{j=1}^{N} -\mathrm{i}\sqrt{2}\alpha r_j^{-2} (\boldsymbol{\alpha}_j \mathbf{C}^{(1)}(j))^{(1)}, \quad (4)$$

$$\mathbf{T}^{(2)} = \sum_{j=1}^{N} -r_j^{-3} \mathbf{C}^{(2)}(j). \quad (5)$$

超精细相互作用将电子角动量 J 和核角动量 I 耦合为总角动量 F ＝I ＋J。超精细相互作用常数以原子单位定义为

$$A_J = \frac{\mu_I}{I} \frac{1}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \left\langle \psi_\alpha(PJ) \middle\| \mathbf{T}^{(1)} \middle\| \psi_\alpha(PJ) \right\rangle, \quad (6)$$

$$B_J = 2Q \sqrt{\frac{J(2J-1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \left\langle \psi_\alpha(PJ) \middle\| \mathbf{T}^{(2)} \middle\| \psi_\alpha(PJ) \right\rangle. \quad (7)$$

在这些表达式中，μ_I 是原子核的磁偶极矩，Q 是原子核的电四极矩。

E. 同位素位移

考虑到原子核有限质量以及电荷空间分布的影响，不同的同位素同一元素的将具有不同的能级。由此产生的同位素位移由质量位移（MS）和场位移（FS）贡献组成。

质量位移由核反冲运动引起，可分为正常质量位移（NMS）和特定质量位移（SMS）。能级同位素位移的公式可写为[66,67]

$$\delta\nu_{\mathrm{MS}} = \left(\frac{M' - M}{MM'} \right) (K_{\mathrm{NMS}} + K_{\mathrm{SMS}}), \quad (8)$$

其中，M 和 M′ 分别是不同同位素的核质量。K_{NMS} 和 K_{SMS} 表示质量位移参数。

场位移是由同一元素的不同同位素具有不同的核电荷分布所引起的，这会导致电势出现微小差异。对能级同位素位移的这一贡献可近似表示为

$$\delta\nu_{\mathrm{FS}} \approx \left(F^{(0)\mathrm{ved}} + F^{(1)\mathrm{ved}} \delta \langle r^2 \rangle \right) \delta \langle r^2 \rangle, \quad (9)$$

其中，$F^{(0)\mathrm{ved}}$ 和 $F^{(1)\mathrm{ved}}$ 是相关的能级电子因子，上标“ved”表示原子核内部“变化的电子密度”。 $\delta\langle r^2\rangle$ 是两种同位素的核半径平方均值之差。有关能级电子因子的详细信息，参见 Ekman 等人[67]。计算出能级同位素位移后，通过对一组跃迁中上、下能级的能级同位素位移作差，即可得到理论跃迁同位素位移。

III. 数据评估

A. 能级

图 1 以铍原子的四个能级（$1s^2 2s2p\ \ ^3P_0^\circ$、$1s^2 2s2p\ \ ^1P_1^\circ$、$1s^2 2s3s\ \ ^1S_0$, $1s^2 2p^2\ \ ^1D_2$）为例，展示逐步扩展轨道活性集对激发能的影响。收敛性测试所用的多参考组态为 MR_0。 ΔE 表示使用相邻两个活性集得到的激发能之差，即 AS_n 与 AS_{n-1}。从图 1 可以清楚看出，随着轨道集的扩展，本计算结果已充分收敛。通过逐步扩展轨道集，相邻活性集之间的差值逐渐减小。起初，当活性集从 AS_1 扩展到 AS_2, 时，激发能的变化非常显著。尤其是对于 $2s2p\ \ ^1P_1^\circ$ 和 $2s3s\ \ ^1S_0$, ，差值分别为 $-1773\ \mathrm{cm}^{-1}$ 和 $1913\ \mathrm{cm}^{-1}$。即使将活性集扩展至 AS_{12}, , AS_{12} 与 AS_{13} 之间的激发能差，对于 $1s^2 2s2p\ \ ^3P_0^\circ$为 $4.3\ \mathrm{cm}^{-1}$ ，对于 $1s^2 2s2p\ \ ^1P_1^\circ$ 为 $6.4\ \mathrm{cm}^{-1}$ ，对于 $1s^2 2p^2\ ^1D_2$为 $7.0\ \mathrm{cm}^{-1}$ 。只有当活性集扩展至 AS_{15}, 时，激发能差才降至 $1\ \mathrm{cm}^{-1}$以下。因此，为达到光谱学精度，必须将活性集扩展到如此大的规模。

在本次相对论组态相互作用计算中，我们构建了足够大的组态态函数展开，并全面考虑了各种关联效应。鉴于 Be I 只有四个电子，价层-价层、芯层-价层和芯芯电子关联效应

均已纳入考虑。它们对激发能的平均贡献分别为 169 cm^{-1}、94 cm^{-1} 和 159 cm^{-1}。此外，我们还考虑了由 $n \leq 11$、$l \leq 5$ 的轨道构成的组态态函数之间的布赖特贡献，以及主要的量子电动力学修正；它们对激发能的平均贡献分别仅为 2.4 cm^{-1} 和 1.8 cm^{-1}。

此外，值得注意的是，在扩展最终相对论组态相互作用计算的多参考空间时，能量也可能发生显著变化。图 2 展示了扩展多参考组态对 $1s^22s2p\ ^3P_0^\circ$、$1s^22s2p\ ^1P_1^\circ$、$1s^22s3s\ ^1S_0$,$1s^22p^2\ ^1D_2$（单位为 cm^{-1}）激发能的影响。轨道的活性空间设为 AS_{15}，此处 ΔE 表示采用 MR_n 和 MR_{n-1} 获得的激发能之差。对图 2 的考察清楚表明，通过多参考组态中的附加组态引入的三重和四重激发会极大地影响激发能。将多参考组态从 MR_0 扩展至 MR_1通常会降低激发能。对于能级 $1s^22p^2\ ^1D_2$，$1s^22s2p\ ^1P_1^\circ$ 和 $1s^22s2p\ ^3P_0^\circ$，MR_1 使能量分别降低约 441 cm^{-1}、296 cm^{-1}和 62 cm^{-1}。对于 MR_2, , 新引入的多参考组态可能使激发能升高或降低。对于能级 $1s^22p^2\ ^1D_2$, $1s^22s2p\ ^1P_1^\circ$和 $1s^22s2p\ ^3P_0^\circ$，MR_2 产生了与 MR_1, 相似的影响；而对于能级 $1s^22s3s\ ^1S_0$, , 激发能增加了约 107 cm^{-1}。随后，继续扩大多参考空间不会对激发能产生进一步的显著影响，因为这些影响几乎都低于 1 cm^{-1}。然而，正如 III B 节将要展示的，额外的三重和四重激发对于跃迁速率非常重要，尤其有助于改善不同规范之间的一致性。

在表 I 中，给出了本次相对论组态相互作用计算所得的 Be I 中组态 $1s^22snl$ （$n \leq 7$） + $1s^22p^2$ 的 99 个最低能级的激发能（E_{MCDHF}）。表中还列出了来自 NIST原子光谱数据库[8] 的实验值。采用组态、总角动量数 J 和能量排序作为良好量子数，以匹配各能级。由表 I 可见，NIST原子光谱数据库为 Be I 提供了 75 个 $n \leq 7$ 能级。本次多组态狄拉克-哈特里-福克计算结果与这些观测值符合得非常好，差异均在 10 cm^{-1}以内，结果令人十分满意。与 NIST 数值相比，总平均差异及其标准差为 $7.08 \pm 1.14\ cm^{-1}$ （0.011% ± 0.003%）。值得注意的是，标准差非常小，这意味着如果将 Be I 的基态能量下移 7.08 cm^{-1}进行修正，则本次计算的激发能与实验值之间的均方根差为 1.2 cm^{-1}。为了量化平移后的绝对能量差异，也可以使用 Ek-man 等人[68] 所述的平均能级偏差（MLD）。

$$MLD = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|E_{obs}(i) - E_{calc}(i) + ES|, \qquad (10)$$

其中 NIST 数值被用作 E_{obs}。能量位移（ES）通过最小化总和来确定，并反映基态能级在理论上的束缚能平衡中受到偏 favor 或不 favor 的程度

所获得的 MLD（ES）值为 0.75（6.91）cm^{-1}，对应本工作。

正如我们在第 II A 节所讨论的，凝聚法可能会使计算得到的激发能改变至多 1 cm^{-1}。因此，从头算得到的激发能（E_{MCDHF}）均取整为以 cm^{-1} 为单位的整数。此外，后续计算所用的激发能还根据实验结果进行了修正。对于没有实验值可供参考的能级（涉及谱项 ^1G、^3G、$^1H^\circ$、$^3H^\circ$、^1I、^3I），我们利用本研究中谱项 $^1P^\circ$、$^3P^\circ$、^1D、^3D、$^1F^\circ$、$^3F^\circ$ 的 MCDHF 结果与 NIST 值之间的差值来外推近似值，即将原始 MCDHF 值增加 7.08 cm^{-1}。这些修正后的值保留小数点后两位，标记为 $E^{adjusted}$，也列于表 I 中。

对于铍原子，Froese Fischer和Tachiev[24] 使用 MCHF+BP方法计算了$n \leq 3$ 能级的激发能。他们的结果与实验值之间的平均偏差约为100 cm^{-1}。Dong等人[28], 也采用了MCDHF和RCI方法，其结果与NIST值之间的差异可达4%，而我们的结果精确了两个数量级。近年来，Be I最准确的结果是Stanke等人.[29–37] 和Nasiri等人.[38]利用全电子ECG函数获得的。他们的计算涉及$n \leq 7$ 能级的 ^1S、$^1P^\circ$、^1D和 $^3P^\circ$ 谱项。在他们的计算中使用了全电子显式相关高斯函数和有限核质量变分方法，并在各态能量中加入了主要的相对论修正和量子电动力学修正。因此，他们的结果与实验值之间的偏差通常小于 0.1 cm^{-1}，这令人十分满意。要达到这样的基准精度，该方法需要在并行计算机系统上使用数百个核心连续计算约一年。对于目前的MCDHF/RCI计算，计算时间和计算负荷可以大幅降低。目前的能量数据总体上已经足够准确，并且比现有理论数据更加完整，可用于天体物理研究。

B. 跃迁速率

表 II 展示了 Be I 中组态 $1s^22snl$ ($n \leq 7$) + $1s^22p^2$ 的最低 99 个能级之间 $BF \geq 10^{-5}$ 的电偶极跃迁、M1、E2 和 M2 跃迁的计算波长、跃迁速率、加权振子强度、谱线强度及分支比（BF）。对于电偶极跃迁和 E2 跃迁，同时给出了巴布什金（长度）形式和库仑（速度）形式的结果。由于本工作中 $BF \geq 10^{-5}$ 的 E2 跃迁仅有 15 个，因此后续的不确定度估计主要针对电偶极跃迁。

两种规范之间的一致性确实常被用作准确度的良好指标[69,70]。线强度 S_l 与 S_v （分别采用长度规范和速度形式）之间的差异δS 定义为 [69,70]S δS_l S_v /min(S, S)。

需要指出的是，正如第 III A 节所述，在扩展最终相对论组态相互作用计算的多参考空间时，差异δS 也会受到影响。图3展示了多参考组态对四个强跃迁中 δS的影响，即 $1s^22s4p\ ^1P_1^\circ \rightarrow 1s^22s^2\ ^1S_0$,$1s^22s5p\ ^1P_1^\circ \rightarrow 1s^22s4s\ ^1S_0$，$1s^22s6p\ ^1P_1^\circ \rightarrow 1s^22s5s\ ^1S_0$,$1s^22s7p\ ^1P_1^\circ \rightarrow 1s^22s6s\ ^1S_0$。显然，随着多参考组态的扩展，这些跃迁的δS值均已收敛。对于跃迁 $1s^22s7p\ ^1P_1^\circ \rightarrow 1s^22s6s\ ^1S_0$，请注意，当多参考组态从 MR_5 扩展至 MR_6时， δS 从 39% 降至 2.6%。这种变化源于关联轨道平均半径的不规则性；这些轨道通常相对较小，并且强烈依赖于用于获得波函数[54]的优化策略。关联轨道通常相当收缩，必须首先使能量上占主导地位的效应达到饱和，才能获得局域于空间其他区域的轨道。然而，对于本研究所采用的波函数，13s 轨道的平均半径远大于 12s 或 11s 轨道。因此，当 13s 被纳入多参考组态时，δS 会发生显著变化。两种规范下的线强度都会改变，但这与 Papoulia 等人的分析[54]，一致，其中长度规范下的线强度 S_I变化最大。

采用 Kramida[71,72,73]，针对电偶极跃迁和 E2跃迁提出的不确定度估计方法，我们按照 NIST原子光谱数据库[8] 的术语，给出谱线强度 S 的估计不确定度，并将其列于表 II 的倒数第二列（标记为 Acc_1）中（AA $\leq$ 1 %、$A^+ \leq$ 2 %、A $\leq$ 3 %、$B^+\leq$ 7 %、B $\leq$ 10 %、$C^+ \leq$ 18%、C $\leq$ 25 %、$D^+ \leq$ 40 %、D $\leq$ 50 % 和 E $>$ 50 %）。按照 Kramida[73]，所述的方法，对于来自 $n \leq 4$的跃迁，谱线强度用作判别量；而对于来自 $n = 5$、6、7 的跃迁，则使用分支比。S 的相对不确定度最终取以下三个值中的最大值：

1. $\exp(\exp|u(Q)|)$-1 的值，其中 u(Q) 是基于判别量 Q 的拟合函数。函数 u(Q) 首先根据 Q 对数据进行分组。在每个分组中，计算 Q 的平均值，并将其与该 Q 范围内计算得到的 $\ln(S_L/S_V)$ 的均方根值配对。随后对这些数据对进行曲线拟合。对于 $n \leq 4$ 跃迁，拟合函数 u(Q) 可写为：$u(Q) = 0.00564Q^2 - 0.24023Q - 5.94218$，其中 $Q \equiv \ln(< S_L >)$；对于 $n = 5$跃迁：$u(Q) = 0.00695Q^2 - 0.27196Q - 7.48159$；对于 $n = 6$跃迁：$u(Q) = 0.00801Q^2 - 0.11431Q - 5.10159$；对于 $n = 7$跃迁：$u(Q) = 0.0096Q^2 - 0.00932Q - 3.41755$。在最后三种情况下（$n \geq 5$），Q 对应于 $\ln(< BF >)$。在所有情况下，u(Q) 都对应于 $\ln(\sqrt{< (\ln(S_L/S_V))^2 >})$。

2. $\exp(|\ln(S_L/S_V)|)$-1 的实际值。

3. 多组态狄拉克-哈特里-福克方法固有的最小误差。我们确定了几个不确定性来源。首先，使用多参考组态[7] 以及活性空间[14] 和活性空间[15], 进行计算所得的平均数值收敛误差为 0.48%。其次，对于该原子系统，高阶相对论效应和量子电动力学贡献预计远低于 0.1%。第三，考虑了因缩减组态状态函数展开而产生的计算近似。其对能级的影响（在 1 cm^{-1}内）对应于跃迁概率 0.01% 的不确定性。综合考虑后，我们得出结论：最小内禀误差估计为 0.5%。

该过程应用于 Be I 的 E1跃迁和 E2跃迁。在表 II 中，Be I 的 E1 S值约有 36% 被评估为不确定度为 $\leq$ 1 %（AA），12% 的不确定度为 $\leq$ 2 %（A+），4% 的不确定度为 $\leq$ 3 %（A），37% 的不确定度为 $\leq$ 7 %（B+），6 % 的不确定度为 $\leq$10%（B），而仅有 5% 的不确定度为 $>$ 10 %（C+、C、D+、D 和 E）。对于表 II 中唯一的 M2 跃迁 $2s2p\ ^3P_2^\circ \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$，由于缺少长度规范与速度规范之间的比较，其精度通过比较计算中两个连续层的结果来估计。基于多参考组态[7], ，我们采用活性空间[14] 和活性空间[15]的结果进行比较。所得线强差小于 0.01%，从而使该跃迁获得 AA评级。图4 给出了分支分数为 $\geq 10^{-5}$ 的 E1跃迁中差δS 随跃迁速率变化的分布，并且显然强跃迁具有更小的 δS。

还通过定量和定性评估方法评估波函数和跃迁参数的准确性，该方法研究谱线强度 S 与规范参数 G[74,75]之间的关系。Rynkun 等人[76] 和 Kitovien˙e 等人 [77]详细描述了不确定度估计方法。谱线强度 S 对 G 的依赖关系呈抛物线形，E1跃迁对应的抛物线最小值可表示如下

$$G_{S=0} = \frac{\sqrt{2}}{1 - \mathrm{sgn}(\frac{M_l}{M_v})\sqrt{\frac{S_l}{S_v}}}, \tag{11}$$

其中，$\mathrm{sgn}\frac{M_l}{M_v}$ 表示约化跃迁矩阵元的符号。在这种方法中，我们需要关注约化矩阵元 M_l （Babushkin 形式）和约化矩阵元 M_v （库仑形式）的符号。如果这两种形式下的约化矩阵元符号不同，则 $G_{S=0}$ 参数的范围为 $0 < G_{S=0} < \sqrt{2}$。正如 Rynkun 等人[76], 所提到的，属于此范围的跃迁不予评估，而是直接归入精度等级 E。如果两种形式下约化矩阵元的符号相同，则可以使用 $G_{S=0}$ 来估算精度等级。Gaigalas 等人[78]给出了约化矩阵元符号相同时，不同精度等级对应的 $G_{S=0}$ 界限。图 5 展示了 99 个能级中 BF $\geq 10^{-5}$ 的 E1跃迁的线强度 S 随 $G_{S=0}$ 参数变化的分布。大多数跃迁属于 AA 精度等级。估算得到的线强度 S 不确定度列于表 II 的最后一列（标记为 Acc_2）。约 89% 的不确定度为 $\leq$ 1%（AA），4% 的不确定度为$\leq$ 3%（A），仅 7% 的不确定度为 $\geq$ 3%。显然，定量和定性评估方法给出的不确定度较小、较为乐观，而 Kramida 提出的方法给出的不确定度往往较大、较不乐观，这是因为该方法对不同范围内判别量 Q 的不确定度取了平均值

。为求稳妥，我们建议读者采用表 II 中 Acc_1 列较为保守的估计值，尽管我们认为，对于大多数跃迁而言，Acc_2 可能已经足够。这一问题仍需进一步研究。

为说明本工作所计算跃迁数据的准确性，表 III 将本工作得到的束缚激发单重态 S 和 P° 态结果与已有的理论振子强度进行了比较。可以看出，对于所有这些强跃迁，Babushkin 形式与库仑形式下的振子强度偏差均小于 1%。同样令人欣慰的是，我们的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用振子强度与显式相关高斯结果[38]高度一致。相对差异确实在 2% 以内，令人非常满意，但以下 4 个跃迁除外（2s4p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$,：4%；2s 5p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s4s\ ^1S_0$, 4：2%；2s6p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s\ 5s\ ^1S_0$,：4%；2s 7p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s6s\ ^1S_0$：9%）。我们还研究了所有跃迁的抵消因子（CF），它们揭示了跃迁参数[79], 计算中存在较大的抵消；相关数值也列于表 II。对于这四个跃迁，其 CF 均低于 0.01，表明所计算的跃迁参数受到强烈抵消效应的影响，而这通常意味着不确定度较大。需要指出的是，对于这四个 $CF < 0.01$ 的跃迁，在三种情况下，本工作结果与显式相关高斯结果之间的相对差异超过了 Acc_1 给出的准确度；在全部四种情况下，差异均超过了 Acc_2 给出的准确度。这表明，本工作中 $CF < 0.01$ 的跃迁所给出的不确定度可能被低估，使用时应谨慎。除显式相关高斯结果外，Chen [80] 还采用带半经验芯势的 B 样条 CI（BCICP）方法，计算了铍束缚态的振子强度。与本工作的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用数值相比，他们的结果与显式相关高斯结果相差更大，部分差异超过 10%，即 2s4p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$, 2、s5p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s\ 4s\ ^1S_0$,、2s 6p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s\ 5s\ ^1S_0$, 2、s7p $^1P_1^\circ \rightarrow 2s6s\ ^1S_0$,；最后一个跃迁的差异最大，达到 46%。

NIST[81]评估并汇编了2010年以前 Be I 的实验值和理论跃迁数据。主要跃迁结果来自 Tachiev 和 Froese Fischer [23], 以及 Il Nam [82]开展的两项精细的多组态 Hartree–Fock 计算。约70%的跃迁速率属于 B 级精度，其余分布在 A、C 和 D 级。将 NIST 的264个跃迁速率与我们的计算结果进行比较后发现，许多跃迁的差异超过 5%。值得注意的是，在 NIST 汇编中原本被评为 D 级的跃迁，偏差通常超过10%，有些甚至相差数个数量级。此前的两项多组态 Hartree–Fock 计算所采用的活性空间和多参考组态展开都相对有限。相比之下，本工作采用的计算流程更为完善。正如第 IIIB 节开头所述，通过多参考组态展开引入的三重和四重激发对跃迁速率有显著影响。唯一存在明显差异的 M2 跃迁，在我们的计算中也表现出优异的收敛性。因此，我们有充分理由相信，本工作获得的跃迁结果具有更高的可靠性和准确性。除这264个个经 NIST 评定的跃迁外，我们还对近500个额外跃迁进行了可靠性评估。鉴于某些情况下观察到的显著偏差以及新评估的跃迁，我们认为，本工作的结果大大丰富了 Be I 的参考数据，可为相关研究提供有用的参考。

C. 寿命

本文 MCDHF/RCI 计算得到的巴布什金（长度）规范下的辐射寿命τ^l_{MCDHF}列于表 I，对应 Be I 中组态 $1s^22snl$（$n \le 7$）+ $1s^22p^2$ 的 99 个最低能级；这些寿命通过计入所有可能的电偶极跃迁、E2、M1 和 M2 衰变通道的辐射跃迁速率计算得到。此处未给出库仑（速度）规范下的辐射寿命，因为长度规范与速度规范所得寿命符合得非常好。除 2s2p $^3P_1^\circ$ 能级外，其余所有寿命的符合程度均在 1% 以内。作为替代，我们给出长度规范下计算寿命的相对不确定度。它可利用误差传播的标准公式[73]方便地确定：

$$\frac{u(\tau_k)}{\tau_k} = \tau_k \sqrt{\sum_i u(A_{ki})^2}, \tag{12}$$

式中 A_{ki} 表示从上能级 k 到下能级 i 的跃迁，求和遍及所有到较低能级的跃迁。此处所用的 $u(A_{ki})$ 值取自 Acc_1。可以看出，对于 $n \le 6$ 的能级，寿命的相对不确定度均在 1% 以内，而对于 $n = 7$ 能级，不确定度则略大一些。

对于此处考察的所有能级，禁戒跃迁的贡献都小到可以忽略，唯有两个能级（2s 2p $^3P_1^\circ$ 和$2p^2\ ^1D_2$）例外。它们也是仅有的两个 $n \le 6$ 能级，其寿命不确定度超过 1%。对于$2p^2\ ^1D_2$, ，其寿命的主要贡献来自$2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 2s\ 2p\ ^1P_1^\circ$ 电偶极跃迁，但$2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ 电四极跃迁也发挥着不可忽视的作用。2s 2p $^3P_1^\circ$ 的寿命主要由2s 2p $^3P_1^\circ \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ 跃迁决定，该跃迁属于组态间跃迁。在图6中，我们考察了该跃迁的多参考组态（MR）与在两种规范下计算的跃迁速率一致性之间的关系。图中清楚地显示，随着多参考组态（MR）的扩展，巴布什金规范下的跃迁速率已良好收敛，而库仑规范下的跃迁速率则发生了显著变化。在库仑规范下计算的MR_2 和 MR_7 跃迁速率相差一个数量级。该跃迁对电子关联十分敏感，规范间的一致性可能只是偶然的。因此，已良好收敛的长度规范结果似乎更为可靠，应予采用。此外，鉴于关于负能连续态对长度规范与速度规范下寿命的贡献的讨论[83]，本工作给出的2s 2p $^3P_1^\circ$ 寿命仍需进一步研究。

表IV列出了与以往实验寿命和理论寿命的比较，其中涵盖了 13 个能级，

文献中已知其测量寿命的能级[84–97]。测量不确定度包括可能残留的系统误差，以及不同次记录产生的统计误差。当本工作的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用结果落在实验误差范围内时，实验寿命以粗体标出。对于 2s2p ^{1}P°、2s3s ^{3}S、2p^2 ^{3}P、2s 3d ^{3}D、2s 3d ^{1}D、2s4s ^{3}S、2s4d ^{3}D、2s5s ^{3}S、2s 5d ^{3}D 和 2s 6s ^{3}S，本工作的结果与许多测量值和计算值吻合良好。尤其是 Wang 等人[97] 最近通过时间分辨激光诱导荧光技术测得的五个新值，我们的所有结果均落在实验误差范围内，只有 2s 6s ^{3}S 略有偏差。对于 2s5d ^{1}D 和 2s 6d ^{1}D，理论值与观测值之间的差异较大。不过，这两个能级的相关实验测量年代较久且数量有限。尽管与实验测量存在偏差，本工作的这两个能级的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用结果与 Moccia 和 Spizzo[94] 以及 Chang[95]的理论值一致。

D. 兰德 g因子

表 V 展示了 Be I 中最低的 99 个能级的兰德 g 因子及其 LS 耦合值。由于多组态狄拉克-哈特里-福克方法给出的兰德 g 因子是单一数值，且不包含固有的不确定度估计，我们评估了其数值收敛性，以判断相关不确定度。具体而言，我们比较了基于 MR_7的活性空间$_{14}$ 和活性空间$_{15}$ 所得的结果。观察到的变化可用于估计计算设置中固有的数值不确定度，平均不确定度为 0.01%。必须将其与该方法的整体准确度区分开来。总不确定度主要由多组态狄拉克-哈特里-福克方法固有的系统偏差决定。因此，收敛性测试主要验证特定计算的稳定性，而非其相对于基准的绝对准确度；这一测试也适用于后续对超精细结构和同位素位移的不确定度评估。

显然，大多数能级的结果与纯 LS 耦合值一致，这意味着谱项之间的混合较弱，或者发生在 g_J 值几乎相同的谱项之间。以能级 8 为例，该能级标记为 ^{1}D$_2$, ，其组成为 52% 2p^2 ^{1}D$_2$, 27% 2s3d ^{1}D$_2$ 和 6% 2s8d ^{1}D$_2$。这三个态的纯 LS 耦合值均为 1.0000。因此，混合态的最终值与纯 LS 耦合值相同。只有当混合态的 g_J 值差异很大时，强混合才会显著影响朗德 g 因子。Schiffmann 等人 98、Li 等人 [99]和 Wu 等人[100],的研究表明，偏离 LS 耦合的情况在较重的离子中更为显著，因为这些离子的相对论效应更强。

E. 超精细结构

表 V 给出了 ^{9}Be 最低 99 个能级的超精细相互作用常数。本研究计算采用以下原子核参数：核自旋 I = 1. 5、核磁偶极矩 μ_I = -1.177432(3)[101]和核电四极矩 Q = 0. 05350(14) 巴恩[102]。通过比较基于多参考组态 MR_7的活性空间 AS_{14} 和 AS_{15} 所得结果，还估算了超精细相互作用常数的平均数值不确定度。对于 A_J，平均不确定度为 0.23%。绝对值低于 5 兆赫的结果不确定度较大。对于 B_J，平均不确定度为 1.5%；绝对值低于 0.002 兆赫的结果不确定度更大。

考虑到 1s^2 2s2p ^{3}P$_1^\circ$，2 态是可能出现超精细效应的最低激发态，过去几十年来，人们通过实验和理论方法对其进行了广泛研究[103–110]。表 VI 给出了通过多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用方法获得的 Be I 这些态的超精细相互作用常数，以便与其他计算和实验数据进行比较。如表 VI 所示，本研究的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用结果与实验值吻合良好，差异均小于 0.1%，与其他理论值的情况相近。我们用于计算超精细结构的 rh f s 代码未包含量子电动力学修正，这是造成差异的重要因素。同时，计算得到的 B 的准确度受相应 Q 值准确度的限制。此处我们采用了 Puchalski 等人推荐的新值.[102]。此外，一些研究者提到了高阶量子电动力学效应[111], 、Bohr–Weisskopf效应[112] 以及其他对超精细结构参数的贡献，这些因素都可能解释我们的结果与实验值之间的剩余差异。

F. 同位素位移

表 V 列出了 Be I 最低的 99 个能级的质量位移参数和场位移参数。通过公式 (8) 和 (9)，可以计算铍的任意同位素的能级质量位移和场位移。理论跃迁同位素位移可以根据相应的能级同位素位移之差估算。核质量分别为： ^{11}Be 为 11.02166108(26) u，^{10}Be 为 10.01353469(9) u， ^{9}Be 为 9.01218306(8) u[113]。下面以 ^{10}Be − ^{9}Be 同位素对的 2s 3d ^{1}D$_2$ − 2s^2 ^{1}S$_0$ 跃迁为例。将公式 (8) 与 2s 3d ^{1}D$_2$ 的质量位移参数 K_{NMS} = 51 842 GHz u 和 K_{SMS} =1 478.3 GHz u，以及 2s^2 ^{1}S$_0$, 的质量位移参数 K_{NMS} = 52 902 GHz u 和 K_{SMS} = 1 684.3 GHz u 结合，可推导出该跃迁的正常质量位移 $\delta\nu_{NMS}$ = 11.757 GHz 和特定质量位移$\delta\nu_{SMS}$ = 2.286 GHz。与质量位移相比，场位移对于轻原子通常较小。利用 Angeli 和 Marinova 提供的 $\delta\langle r^2\rangle$ 值[114]，估算得到该跃迁的场位移为 $\delta\nu_{FS} = -0.006$GHz。场位移相当小，因此在我们的同位素位移计算中可以忽略。为了评估所计算同位素位移参数的不确定性，

我们比较了基于 MR_7的 AS_{14} 和 AS_{15} 的结果。正常质量位移参数和场位移参数的平均数值不确定度为 0.01%，而特定质量位移参数的不确定度略高，为 0.1%，这是由于其对电子相关效应更加敏感。

Puchalski等人.[115] 通过显式相关高斯方法计算了^{11}Be − ^{9}Be同位素对在2s3s $^1S_0$ − 2s^2 $^1S_0$ 和2s 2p $^1P_1^\circ$ − 2s^2 $^1S_0$ 跃迁中的同位素质量位移。这两个跃迁的计算结果分别为18.90625(4) GHz和16.01529(3) GHz，与我们的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用值18.882 GHz和16.007 GHz相比分别为……两者符合良好，偏差小于0.2%。此外，Wen等人[116] 使用高分辨率多光子共振电离质谱法，测量了 ^{10}Be − ^{9}Be同位素对在若干从2s^2 $^1S_0$ 到2s ns $^1S_0$ 或2s nd $^1D_2$ 的跃迁中的一些同位素质量位移。所有这些跃迁的同位素位移实验不确定度均为40 MHz。图7中绘出了本研究多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算得到的同位素位移，并与实验值及其他理论值[117]进行了比较。如图所示，我们的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用值与实验值符合良好。我们计算得到的所有同位素位移均落在实验误差范围内。对于大多数态，Wen等人[116] 使用多构型Hartree-Fock方法计算的跃迁同位素位移与其测量值符合良好。然而，他们的研究中，2s^2 $^1S_0$ − 2s3d $^1D_2$（0.1 GHz）和2s^2 $^1S_0$ − 2s 4d $^1D_2$（0.21 GHz）的理论值与观测值偏差超出了实验误差范围。对于2s^2 $^1S_0$ − 2s 3d $^1D_2$，Chung和Zhu的计算值与Wen等人提供的测量值符合良好。不过，Chung和Zhu的计算仅针对$n \leq 3$ 能级。

IV. 总结

本文报告了中性铍最低的 99 个能级的激发能、跃迁速率、寿命、朗德 g 因子、超精细相互作用常数和同位素位移。详细讨论了轨道活性空间和多参考组态对激发能及跃迁速率的影响。为达到光谱学精度，扩展活性空间和多参考组态展开尤为重要，需进行仔细研究。结果表明，通过扩展多参考组态展开引入的三重和四重激发，对于改善用于评估跃迁数据的不同规范之间的一致性至关重要。通过两种不确定度估算方法，以及与现有实验结果和其他理论结果的比较，证实了本文多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算结果具有很高的精度。

对于能级，与NIST值的总平均差值及其标准差为$7.08 \pm 1.14\ \mathrm{cm}^{-1}$（$0.011\% \pm 0.003\%$），结果非常令人满意。对于跃迁速率，采用两种不确定度估算方法来估计当前多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用线强度的精度。还与采用ECG方法获得的高精度振子强度进行了比较。多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用振子强度与ECG方法结果之间的相对差异，对大多数数据而言在2%以内。此外，还将辐射寿命与以往的实验值和理论值进行了比较，观察到良好的一致性，尤其是与一些近期测量结果。采用当前多组态狄拉克–哈特里–福克/相对论组态相互作用方法得到的超精细相互作用常数与实验值之间的差异小于0.1%。我们计算的同位素位移落在实验误差范围内。

本研究显著增加了铍原子的高精度数据量。这些全面的数据，尤其是跃迁速率、寿命、超精细相互作用常数和同位素位移，扩充并提高了 Be I 原子数据的精度，可可靠地应用于各类天体物理和实验室等离子体中的谱线识别与诊断。本研究是迄今采用多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用方法开展的最全面、大规模计算，也可作为其他计算的基准。

致谢

我们感谢中国国家重点研发计划（项目编号：2022YFA1602303、2022YFA1602500）和中国国家自然科学基金委员会（项目编号：12074081、12104095、12393824）的资助。P. J. 感谢瑞典研究理事会（VR 2023-05367）的资助。A. M. A. 感谢瑞典研究理事会（VR 2020-03940）的资助，以及瑞典皇家科学院通过克拉福德基金会提供的资助（CR 2024-0015）。

本文为已被《物理与化学参考数据》发表的文章的录用稿。最终认证版本将在网上发布，网址为：https://doi.org/10.1063/5.0285265。

数据可用性

支持本研究结论的数据可在本文及其补充材料中获取。

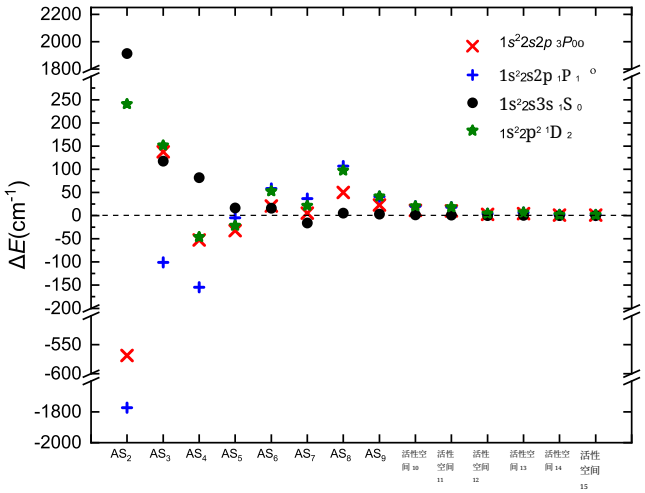


图 1. $1s^2 2s2p\ {}^3P_0^\circ$、$1s^2 2s2p\ {}^1P_1^\circ$、$1s^2 2s3s\ {}^1S_0$, $1s^2 2p^2\ {}^1D_2$ 能级的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用激发能与 AS 的关系（差值，单位为 cm^{-1}）。MR 设为 MR_0。

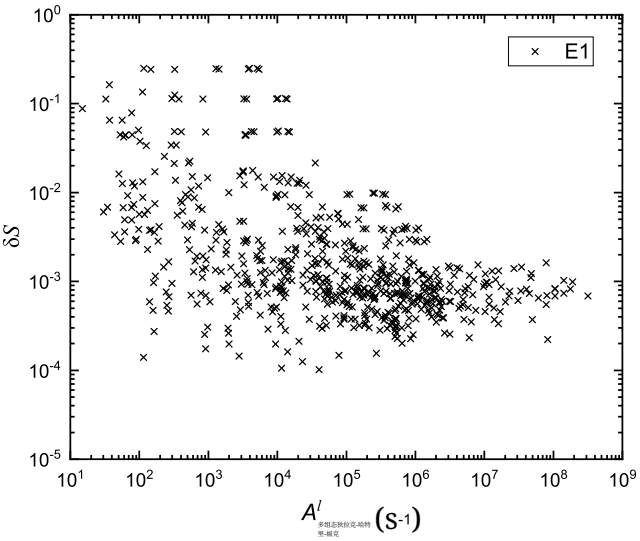


图4. 最低99 个n ≤ 7 能级之间、分支分数 ≥ 10^{-5} 的E1跃迁的 δS差值。

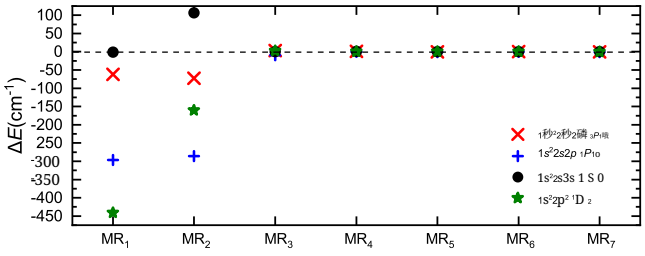


图 2. 多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算的 $1s^2 2s2p\ {}^3P_0^\circ$、$1s^2 2s2p\ {}^1P_1^\circ$、$1s^2 2s3s\ {}^1S_0$, $1s^2 2p^2\ {}^1D_2$ 能级激发能之差（单位：cm^{-1}）随多参考组态的变化。活性空间设为 AS_{15}。

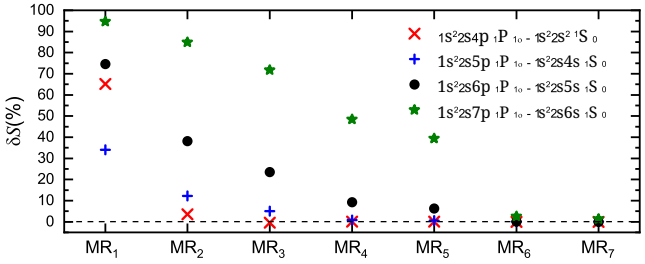


图3. 扩展多参考组态对跃迁中 δS的影响（单位：cm^{-1}）：$1s^2 2s4p\ {}^1P_1^\circ - 1s^2 2s^2\ {}^1S_0$, $1s^2 2s5p\ {}^1P_1^\circ - 1s^2 2s4s\ {}^1S_0$, $1s^2 2s6p\ {}^1P_1^\circ - 1s^2 2s5s\ {}^1S_0$, $1s^2 2s7p\ {}^1P_1^\circ - 1s^2 2s6s\ {}^1S_0$。活性空间设为$AS_{15}$。

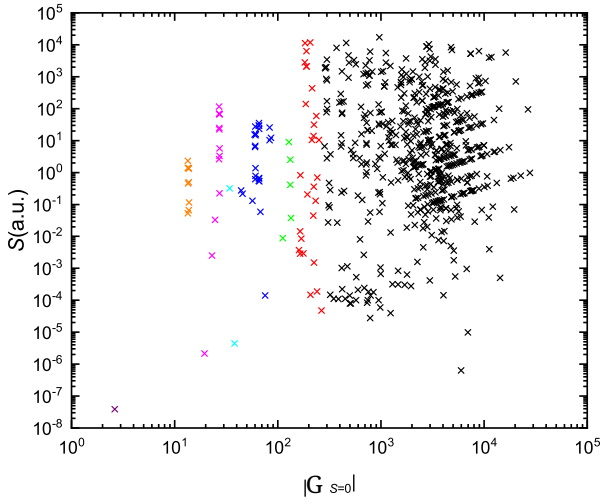


图5. 99 个能级之间分支分数 ≥ 10^{-5} 的E1跃迁的谱线强度S随 $G_{S=0}$ 参数的分布。不同颜色依据Rynkun 等人[76]所述方法标记所估算跃迁的精度等级。黑色表示AA 精度等级，红色表示A+，绿色表示A，蓝色表示B+，青色表示B，品红色表示C+，橙色表示C，紫色表示E。

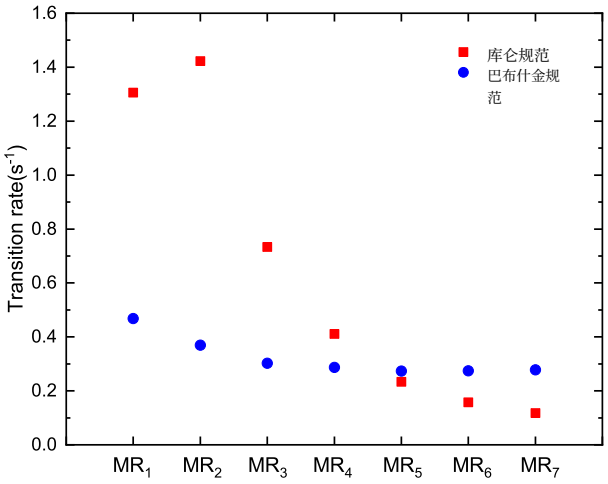


图6. 两种规范下，$2s2p\ ^3P_1^\circ \rightarrow 2s^2\ ^1S_0$ 能级的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用跃迁速率随多参考组态（MR）的变化。活性空间设为 AS_{15}。

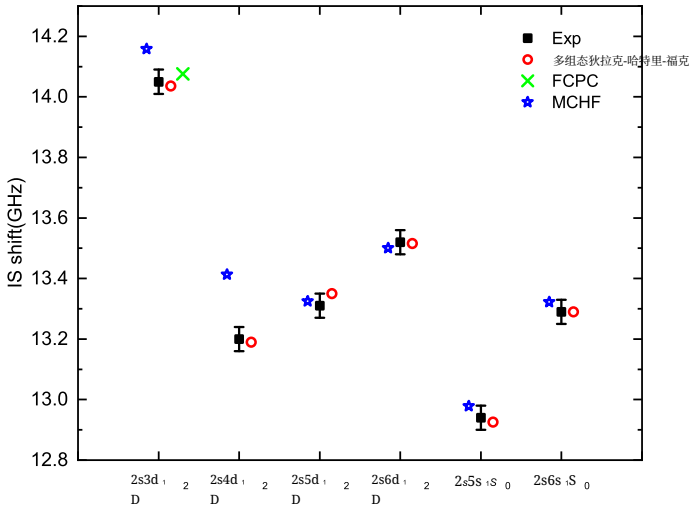


图7. 本文的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用计算结果与实验测量、MCHF方法[116], FCPC方法[117]所得结果的 $^{10}Be - ^9Be$跃迁同位素位移比较。在每种情况下，初始态均为$2s^2\ ^1S_0$ 基态。

表 I：Be I 中 n ≤ 7 组态的最低 99 个能级的激发能（单位：cm^{-1}）和辐射寿命（单位：s）。E_{MCDHF}：本研究的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用激发能；$E^{Adjusted}$：根据实验值和理论值修正后的激发能；E_{NIST}：NIST 数据库汇编值[8]；ΔE_{MCDHF}：E_{MCDHF}与 E_{NIST}之间的能量差（单位：cm^{-1}）；τ^{l}_{MCDHF}：本研究以长度形式计算的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用寿命；$u(\tau^{l})/\tau^{l}$：本研究以长度形式计算的多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用寿命的相对不确定度（%）；LS 组态：LS 本征矢量组成。

Key	能级	JπE$_{MCDHF}$	E^{Adjusted}	E$_{NIST}$	ΔE$_{MCDHF}$	τ^{l} 多组态狄拉克-哈特里-福克	u(τ^{l})/τ^{l}	LS 组态
1	$2s^2\ {}^1S_0$	0+ 0	...	...	...	...	...	0.87 + 0.09 $2p^2\ {}^1S$
2	$2s2p\ {}^3P^\circ_0$	0− 21 973	21 978.31	21 978.31	-4.86	...	...	0.93
3	$2s2p\ {}^3P^\circ_1$	1− 21974	21 978.92	21 978.925	-5.42	3.593×10^{0}	136	0.93
4	$2s2p\ {}^3P^\circ_2$	2− 21976	21 981.26	21 981.26	-5.18	3.592×10^{3}	0.01	0.93
5	$2s2p\ {}^1P^\circ_1$	1− 42564	42 565.45	42 565.4502	-1.19	1.805×10^{-9}	0.48	0.73 + 0.12 $2s3p\ {}^1P^\circ$
6	$2s3s\ {}^3S_1$	1+ 52072	52 080.94	52 080.943	-8.76	6.712×10^{-9}	0.32	0.96
7	$2s3s\ {}^1S_0$	0+ 54668	54 677.35	54 677.349	-8.87	2.885×10^{-8}	0.48	0.95
8	$2p^2\ {}^1D_2$	2+ 56875	56 882.55	56 882.5474	-7.12	1.636×10^{-4}	2.53	0.52 + 0.27 $2s3d\ {}^1D$
9	$2s3p\ {}^3P^\circ_0$	0− 58900	58 907.47	58 907.472	-7.56	8.572×10^{-8}	0.48	0.97
10	$2s3p\ {}^3P^\circ_1$	1− 58900	58 907.47	58 907.472	-7.11	8.572×10^{-8}	0.48	0.97
11	$2s3p\ {}^3P^\circ_2$	2− 58900	58 907.84	58 907.839	-7.42	8.571×10^{-8}	0.48	0.97
12	$2p^2\ {}^3P_0$	0+ 59687	59 693.60	59 693.60	-6.86	2.363×10^{-9}	0.48	0.88 + 0.05 $2p3p\ {}^3P$
13	$2p^2\ {}^3P_1$	1+ 59687	59 694.99	59 694.99	-7.51	2.363×10^{-9}	0.28	0.88 + 0.05 $2p3p\ {}^3P$
14	$2p^2\ {}^3P_2$	2+ 59690	59 696.98	59 696.98	-7.31	2.362×10^{-9}	0.38	0.88 + 0.05 $2p3p\ {}^3P$
15	$2s3p\ {}^1P^\circ_1$	1− 60181	60 187.44	60 187.4434	-6.11	7.002×10^{-8}	0.32	0.84 + 0.08 $2s2p\ {}^1P^\circ$
16	$2s3d\ {}^3D_1$	1+ 62046	62 053.74	62 053.7385	-7.93	5.229×10^{-9}	0.33	0.97
17	$2s3d\ {}^3D_2$	2+ 62046	62 053.74	62 053.742	-7.80	5.229×10^{-9}	0.38	0.97
18	$2s3d\ {}^3D_3$	3+ 62046	62 053.74	62 053.742	-7.64	5.229×10^{-9}	0.48	0.97
19	$2s3d\ {}^1D_2$	2+ 64422	64 428.40	64 428.4032	-6.22	1.200×10^{-8}	0.45	0.69 + 0.15 $2p^2\ {}^1D$
20	$2s4s\ {}^3S_1$	1+ 64497	64 506.48	64 506.483	-9.04	1.804×10^{-8}	0.25	0.97
21	$2s4s\ {}^1S_0$	0+ 65236	65 245.44	65 245.437	-9.24	4.816×10^{-8}	0.34	0.98
22	$2s4p\ {}^3P^\circ_0$	0− 66804	66 811.89	66 811.89	-7.78	2.438×10^{-7}	0.33	0.99
23	$2s4p\ {}^3P^\circ_1$	1− 66804	66 811.89	66 811.89	-7.61	2.438×10^{-7}	0.29	0.99
24	$2s4p\ {}^3P^\circ_2$	2− 66805	66 811.89	66 811.89	-7.29	2.438×10^{-7}	0.30	0.99
25	$2s4p\ {}^1P^\circ_1$	1− 67027	67 034.80	67 034.80	-7.40	2.745×10^{-7}	0.26	0.95
26	$2s4d\ {}^3D_1$	1+ 67934	67 941.63	67 941.63	-7.14	1.171×10^{-8}	0.32	0.98
27	$2s4d\ {}^3D_2$	2+ 67935	67 941.65	67 941.65	-7.10	1.171×10^{-8}	0.36	0.98
28	$2s4d\ {}^3D_3$	3+ 67935	67 941.68	67 941.68	-6.99	1.171×10^{-8}	0.46	0.98
29	$2s4f\ {}^3F^\circ_4$	4− 68234	68 241.04	68 241.04	-6.86	6.288×10^{-8}	0.48	0.99
30	$2s4f\ {}^3F^\circ_2$	2− 68234	68 241.04	68 241.041	-6.85	6.288×10^{-8}	0.41	0.99
31	$2s4f\ {}^3F^\circ_3$	3− 68234	68 241.04	68 241.044	-6.77	6.287×10^{-8}	0.42	0.96 + 0.03 $2s4\,f\ {}^1F^\circ$
32	$2s4f\ {}^1F^\circ_3$	3− 68234	68 241.30	68 241.30	-6.89	6.252×10^{-8}	0.33	0.96 + 0.03 $2s4\,f\ {}^3F^\circ$
33	$2s4d\ {}^1D_2$	2+ 68775	68 780.96	68 780.96	-6.42	2.004×10^{-8}	0.46	0.86 + 0.04 $2p^2\ {}^1D$
34	$2s5s\ {}^3S_1$	1+ 69001	69 010.18	69 010.18	-8.89	3.822×10^{-8}	0.23	0.97
35	$2s5s\ {}^1S_0$	0+ 69313	69 322.30	69 322.30	-9.15	8.112×10^{-8}	0.28	0.99
36	$2s5p\ {}^3P^\circ_0$	0− 70058	70 065.40	70 065.40	-7.44	4.414×10^{-7}	0.27	0.99
37	$2s5p\ {}^3P^\circ_1$	1− 70058	70 065.40	70 065.40	-7.33	4.414×10^{-7}	0.23	0.99
38	$2s5p\ {}^3P^\circ_2$	2− 70058	70 065.40	70 065.40	-6.93	4.414×10^{-7}	0.24	0.99
39	$2s5p\ {}^1P^\circ_1$	1− 70113	70 120.59	70 120.59	-7.72	2.744×10^{-7}	0.21	0.98
40	$2s5d\ {}^3D_3$	3+ 70597	70 603.73	70 603.73	-6.86	2.242×10^{-8}	0.44	0.98
41	$2s5d\ {}^3D_2$	2+ 70597	70 603.76	70 603.76	-6.87	2.242×10^{-8}	0.35	0.98
42	$2s5d\ {}^3D_1$	1+ 70597	70 603.76	70 603.76	-6.73	2.242×10^{-8}	0.31	0.98
43	$2s5f\ {}^3F^\circ_4$	4− 70743	70 749.70	70 749.7	-6.65	1.193×10^{-7}	0.36	0.99
44	$2s5f\ {}^3F^\circ_2$	2− 70743	70 749.74	70 749.741	-6.69	1.193×10^{-7}	0.31	0.99
45	$2s5f\ {}^3F^\circ_3$	3− 70743	70 749.74	70 749.744	-6.61	1.193×10^{-7}	0.32	0.98
46	$2s5f\ {}^1F^\circ_3$	3− 70743	70 750.02	70 750.02	-6.74	1.178×10^{-7}	0.33	0.98
47	$2s5g\ {}^3G_3$	3+ 70784	70 790.47	...	...	2.272×10^{-7}	0.44	1.00
48	$2s5g\ {}^3G_4$	4+ 70784	70 790.48	...	...	2.272×10^{-7}	0.36	0.55 + 0.44 $2s5g\ {}^1G$
49	$2s5g\ {}^3G_5$	5+ 70784	70 790.49	...	...	2.272×10^{-7}	0.48	1.00

续见下页

表 I – 接上一页

Key	能级	$J\pi$	E_{MCDHF}	$E^{Adjusted}$	E_{NIST}	ΔE_{MCDHF}	τ^{l} [单组态跃迁寿命/秒]	$u(\tau^{l})/\tau^{l}$	LS 组态
50	2s5g $^{1}G_{4}$	4+	70784	70 790.57	...	...	2.272×10^{-7}	0.37	0.55 + 0.44 2s5g ^{3}G
51	2s5d $^{1}D_{2}$	2+	70996	71 002.41	71 002.406	-6.43	3.541×10^{-8}	0.46	0.90 + 0.03 2s6d ^{1}D
52	2s6s $^{3}S_{1}$	1+	71152	71 160.51	71 160.514	-8.87	7.003×10^{-8}	0.33	0.97
53	2s6s $^{1}S_{0}$	0+	71312	71 321.25	71 321.25	-9.13	1.281×10^{-7}	0.38	0.99
54	2s6p $^{3}P^{\circ}_{0}$	0−	71723	71 730.64	71 730.64	-7.58	7.090×10^{-7}	0.36	1.00
55	2s6p $^{3}P^{\circ}_{1}$	1−	71723	71 730.66	71 730.66	-7.52	7.088×10^{-7}	0.31	1.00
56	2s6p $^{3}P^{\circ}_{2}$	2−	71724	71 730.66	71 730.66	-7.06	7.089×10^{-7}	0.32	1.00
57	2s6p $^{1}P^{\circ}_{1}$	1−	71738	71 746.17	71 746.17	-8.15	3.417×10^{-7}	0.33	0.99
58	2s6d $^{3}D_{1}$	1+	72023	72 029.49	72 029.49	-6.69	3.837×10^{-8}	0.42	0.98
59	2s6d $^{3}D_{2}$	2+	72023	72 029.50	72 029.50	-6.68	3.838×10^{-8}	0.46	0.98
60	2s6d $^{3}D_{3}$	3+	72023	72 029.51	72 029.51	-6.58	3.838×10^{-8}	0.56	0.98
61	2s6f $^{3}F^{\circ}_{2}$	2−	72105	72 111.57	72 111.57	-6.61	2.024×10^{-7}	0.39	0.99
62	2s6f $^{3}F^{\circ}_{3}$	3−	72105	72 111.57	72 111.57	-6.60	2.023×10^{-7}	0.40	0.97 + 0.02 2s6 f $^{1}F^{\circ}$
63	2s6f $^{3}F^{\circ}_{4}$	4−	72105	72 111.60	72 111.6	-6.55	2.024×10^{-7}	0.44	0.99
64	2s6f $^{1}F^{\circ}_{3}$	3−	72105	72 111.75	72 111.75	-6.59	1.990×10^{-7}	0.45	0.97 + 0.02 2s6 f $^{3}F^{\circ}$
65	2s6g $^{3}G_{3}$	3+	72130	72 136.27	...	...	3.876×10^{-7}	0.44	1.00
66	2s6g $^{3}G_{4}$	4+	72130	72 136.28	...	...	3.876×10^{-7}	0.37	0.56 + 0.44 2s6g ^{1}G
67	2s6g $^{3}G_{5}$	5+	72130	72 136.29	...	...	3.876×10^{-7}	0.47	1.00
68	2s6g $^{1}G_{4}$	4+	72130	72 136.37	...	...	3.876×10^{-7}	0.38	0.56 + 0.44 2s6g ^{3}G
69	2s6h $^{3}H^{\circ}_{4}$	4−	72135	72 142.06	...	...	6.025×10^{-7}	0.58	1.00
70	2s6h $^{3}H^{\circ}_{5}$	5−	72135	72 142.07	...	...	6.025×10^{-7}	0.60	0.54 + 0.46 2s6h $^{1}H^{\circ}$
71	2s6h $^{3}H^{\circ}_{6}$	6−	72136	72 142.08	...	...	6.025×10^{-7}	0.61	1.00
72	2s6h $^{1}H^{\circ}_{5}$	5−	72136	72 142.16	...	...	6.025×10^{-7}	0.60	0.54 + 0.46 2s6h $^{3}H^{\circ}$
73	2s6d $^{1}D_{2}$	2+	72245	72 251.22	72 251.22	-6.36	5.841×10^{-8}	0.58	0.92 + 0.03 2s7d ^{1}D
74	2s7s $^{3}S_{1}$	1+	72346	72 354.70	72 354.7	-8.25	1.164×10^{-7}	1.54	0.97
75	2s7s $^{1}S_{0}$	0+	72440	72 448.38	72 448.38	-8.81	1.896×10^{-7}	1.81	0.99
76	2s7p $^{3}P^{\circ}_{0}$	0−	72690	72 697.33	72 697.33	-7.12	1.073×10^{-6}	1.56	1.00
77	2s7p $^{3}P^{\circ}_{2}$	2−	72690	72 697.34	72 697.34	-7.07	1.073×10^{-6}	1.36	1.00
78	2s7p $^{3}P^{\circ}_{1}$	1−	72691	72 697.34	72 697.34	-6.60	1.068×10^{-6}	1.26	0.99
79	2s7p $^{1}P^{\circ}_{1}$	1−	72694	72 701.80	72 701.8	-8.17	4.593×10^{-7}	1.54	0.99
80	2s7d $^{3}D_{3}$	3+	72874	72 880.92	72 880.92	-6.52	6.066×10^{-8}	2.97	0.98
81	2s7d $^{3}D_{2}$	2+	72874	72 881.01	72 881.01	-6.61	6.064×10^{-8}	2.36	0.98
82	2s7d $^{3}D_{1}$	1+	72875	72 881.03	72 881.03	-6.53	6.064×10^{-8}	2.09	0.98
83	2s7f $^{3}F^{\circ}_{4}$	4−	72925	72 931.60	72 931.6	-6.44	3.177×10^{-7}	2.04	0.99
84	2s7f $^{3}F^{\circ}_{3}$	3−	72925	72 931.62	72 931.62	-6.45	3.174×10^{-7}	1.77	0.96 + 0.04 2s7 f $^{1}F^{\circ}$
85	2s7f $^{3}F^{\circ}_{2}$	2−	72925	72 931.61	72 931.61	-6.36	3.177×10^{-7}	1.75	0.96
86	2s7f $^{1}F^{\circ}_{3}$	3−	72925	72 931.77	72 931.77	-6.44	3.112×10^{-7}	2.26	0.96 + 0.04 2s7 f $^{3}F^{\circ}$
87	2s7g $^{3}G_{3}$	3+	72941	72 947.68	...	...	6.138×10^{-7}	1.87	1.00
88	2s7g $^{3}G_{4}$	4+	72941	72 947.69	...	...	6.138×10^{-7}	1.51	0.56 + 0.44 2s7g ^{1}G
89	2s7g $^{3}G_{5}$	5+	72941	72 947.70	...	...	6.138×10^{-7}	2.02	1.00
90	2s7g $^{1}G_{4}$	4+	72941	72 947.78	...	...	6.138×10^{-7}	1.55	0.56 + 0.44 2s7g ^{3}G
91	2s7h $^{3}H^{\circ}_{4}$	4−	72945	72 951.50	...	...	9.530×10^{-7}	2.27	1.00
92	2s7h $^{3}H^{\circ}_{5}$	5−	72945	72 951.51	...	...	9.529×10^{-7}	2.33	0.54 + 0.45 2s7h $^{1}H^{\circ}$
93	2s7h $^{3}H^{\circ}_{6}$	6−	72945	72 951.52	...	...	9.530×10^{-7}	2.38	1.00
94	2s7h $^{1}H^{\circ}_{5}$	5−	72945	72 951.60	...	...	9.530×10^{-7}	2.34	0.54 + 0.45 2s7h $^{3}H^{\circ}$
95	2s7i $^{3}I_{5}$	5+	72946	72 952.62	...	...	1.346×10^{-6}	3.23	1.00
96	2s7i $^{3}I_{6}$	6+	72946	72 952.63	...	...	1.346×10^{-6}	3.28	0.54 + 0.46 2s7i ^{1}I
97	2s7i $^{3}I_{7}$	7+	72946	72 952.64	...	...	1.346×10^{-6}	3.33	1.00
98	2s7i $^{1}I_{6}$	6+	72946	72 952.72	...	...	1.346×10^{-6}	3.29	0.54 + 0.46 2s7i ^{3}I
99	2s7d $^{1}D_{2}$	2+	73011	73 017.55	73 017.55	-6.47	9.001×10^{-8}	3.12	0.93

表 II：表 I 所列最低的 99 个能级之间的跃迁波长 λ （真空波长，单位为 Å）、跃迁速率 A（单位为 s^{-1}）、加权振子强度 g f（无量纲）、谱线强度 S（单位为原子单位）以及两种估算的不确定度 Acc。 λ 为跃迁波长（单位为 Å）。Type 为多极类型，BF 为从上能级出发的分支比。A^l、gf_l 和 S^l 分别为本研究的 MCDHF/RCI 计算所得长度（l）形式的跃迁速率、加权振子强度和谱线强度。A^v、gf_v 和 S^v 分别为本研究的 MCDHF/RCI 计算所得速度（v）形式的跃迁速率、加权振子强度和谱线强度。CF 为抵消因子。倒数第二列（Acc_1）表示采用 Kramida [73]提出的不确定度估计方法得到的 S 值估算精度。最后一列（Acc_2）表示采用定量与定性评估方法[76,77]得到的 S 值估算精度。仅列出 BF $\geq 10^{-5}$ 的跃迁。（本表完整内容以机器可读形式提供。）

i	j	λ	Type	BF	A^l	gf_l	S^l	A^v	gf_v	S^v	CF	Acc_1	Acc_2
1	3	4 549.81	E1	1.000×10^{0}	2.783×10^{-1}	2.591×10^{-9}	3.881×10^{-8}	1.176×10^{-1}	1.095×10^{-9}	1.640×10^{-8}	2.52×10^{-10}	E	E
1	4	4 549.33	M2	1.000×10^{0}	2.784×10^{-4}	4.319×10^{-12}	1.819×10^{2}	...	...	...	...	AA	AA
1	5	2 349.32	E1	1.000×10^{0}	5.539×10^{8}	1.375×10^{0}	1.063×10^{1}	5.535×10^{8}	1.374×10^{0}	1.063×10^{1}	4.06×10^{-1}	AA	AA
1	8	1 758.01	E2	2.655×10^{-1}	1.624×10^{3}	3.761×10^{-6}	1.217×10^{2}	1.623×10^{3}	3.759×10^{-6}	1.216×10^{2}	6.62×10^{-1}	AA	AA
1	15	1 661.48	电偶极跃迁	4.906×10^{-1}	7.007×10^{6}	8.699×10^{-3}	4.758×10^{-2}	6.999×10^{6}	8.689×10^{-3}	4.753×10^{-2}	1.19×10^{-2}	AA	AA
1	25	1 491.76	电偶极跃迁	7.112×10^{-2}	2.591×10^{5}	2.594×10^{-4}	1.274×10^{-3}	2.592×10^{5}	2.594×10^{-4}	1.274×10^{-3}	1.28×10^{-3}	AA	AA
1	39	1 426.12	电偶极跃迁	2.542×10^{-1}	9.266×10^{5}	8.476×10^{-4}	3.979×10^{-3}	9.262×10^{5}	8.472×10^{-4}	3.978×10^{-3}	1.14×10^{-2}	AA	AA
1	55	1 394.10	电偶极跃迁	1.121×10^{-4}	1.582×10^{2}	1.383×10^{-7}	6.346×10^{-7}	1.583×10^{2}	1.383×10^{-7}	6.349×10^{-7}	7.30×10^{-6}	B+	AA
1	57	1 393.80	电偶极跃迁	3.059×10^{-1}	8.952×10^{5}	7.822×10^{-4}	3.589×10^{-3}	8.948×10^{5}	7.818×10^{-4}	3.587×10^{-3}	2.33×10^{-2}	AA	AA
1	78	1 375.57	电偶极跃迁	2.729×10^{-3}	2.556×10^{3}	2.175×10^{-6}	9.850×10^{-6}	2.557×10^{3}	2.176×10^{-6}	9.854×10^{-6}	1.64×10^{-4}	B+	AA
1	79	1 375.48	电偶极跃迁	3.236×10^{-1}	7.045×10^{5}	5.995×10^{-4}	2.715×10^{-3}	7.046×10^{5}	5.995×10^{-4}	2.715×10^{-3}	2.71×10^{-2}	B+	AA
2	6	3 321.97	电偶极跃迁	1.111×10^{-1}	1.656×10^{7}	8.218×10^{-2}	8.987×10^{-1}	1.656×10^{7}	8.217×10^{-2}	8.987×10^{-1}	3.22×10^{-1}	AA	AA
2	13	2 651.35	电偶极跃迁	3.334×10^{-1}	1.411×10^{8}	4.461×10^{-1}	3.894×10^{0}	1.410×10^{8}	4.457×10^{-1}	3.890×10^{0}	4.20×10^{-1}	AA	AA
2	16	2 495.29	电偶极跃迁	5.498×10^{-1}	1.051×10^{8}	2.944×10^{-1}	2.419×10^{0}	1.051×10^{8}	2.942×10^{-1}	2.417×10^{0}	7.20×10^{-1}	AA	AA
2	20	2 351.38	电偶极跃迁	8.405×10^{-2}	4.659×10^{6}	1.158×10^{-2}	8.968×10^{-2}	4.659×10^{6}	1.159×10^{-2}	8.968×10^{-2}	1.24×10^{-1}	AA	AA
2	26	2 175.65	电偶极跃迁	5.250×10^{-1}	4.483×10^{7}	9.543×10^{-2}	6.835×10^{-1}	4.479×10^{7}	9.536×10^{-2}	6.830×10^{-1}	4.17×10^{-1}	AA	AA
2	34	2126.22	电偶极跃迁	7.687×10^{-2}	2.011×10^{6}	4.089×10^{-3}	2.862×10^{-2}	2.012×10^{6}	4.090×10^{-3}	2.863×10^{-2}	8.24×10^{-2}	AA	AA
2	42	2 056.54	电偶极跃迁	5.081×10^{-1}	2.267×10^{7}	4.311×10^{-2}	2.919×10^{-1}	2.265×10^{7}	4.308×10^{-2}	2.917×10^{-1}	3.00×10^{-1}	AA	AA
2	52	2 033.26	电偶极跃迁	7.376×10^{-2}	1.053×10^{6}	1.958×10^{-3}	1.311×10^{-2}	1.054×10^{6}	1.959×10^{-3}	1.311×10^{-2}	6.27×10^{-2}	AA	AA
2	58	1 997.96	电偶极跃迁	4.978×10^{-1}	1.297×10^{7}	2.329×10^{-2}	1.532×10^{-1}	1.296×10^{7}	2.327×10^{-2}	1.530×10^{-1}	2.31×10^{-1}	AA	AA
2	74	1 985.06	电偶极跃迁	7.212×10^{-2}	6.194×10^{5}	1.098×10^{-3}	7.174×10^{-3}	6.198×10^{5}	1.098×10^{-3}	7.179×10^{-3}	4.97×10^{-2}	B+	AA
2	82	1 964.53	电偶极跃迁	4.913×10^{-1}	8.102×10^{6}	1.406×10^{-2}	9.096×10^{-2}	8.090×10^{6}	1.404×10^{-2}	9.082×10^{-2}	1.71×10^{-1}	B+	AA
3	6	3322.04	电偶极跃迁	3.334×10^{-1}	4.967×10^{7}	2.465×10^{-1}	2.696×10^{0}	4.965×10^{7}	2.464×10^{-1}	2.695×10^{0}	3.35×10^{-1}	AA	AA
3	8	2 865.03	电偶极跃迁	6.010×10^{-3}	3.675×10^{1}	2.261×10^{-7}	2.133×10^{-6}	4.276×10^{1}	2.631×10^{-7}	2.481×10^{-6}	2.93×10^{-8}	C+	C+
3	12	2 651.49	E1	1.000×10^{0}	4.232×10^{8}	4.461×10^{-1}	3.894×10^{0}	4.232×10^{8}	4.461×10^{-1}	3.894×10^{0}	3.71×10^{-1}	AA	AA
3	13	2 651.39	电偶极跃迁	2.500×10^{-1}	1.058×10^{8}	3.346×10^{-1}	2.920×10^{0}	1.058×10^{8}	3.344×10^{-1}	2.918×10^{0}	3.42×10^{-1}	AA	AA
3	14	2 651.25	电偶极跃迁	2.501×10^{-1}	1.058×10^{8}	5.577×10^{-1}	4.868×10^{0}	1.058×10^{8}	5.573×10^{-1}	4.864×10^{0}	1.77×10^{-1}	AA	AA
3	16	2 495.33	电偶极跃迁	4.123×10^{-1}	7.886×10^{7}	2.208×10^{-1}	1.814×10^{0}	7.880×10^{7}	2.207×10^{-1}	1.813×10^{0}	6.21×10^{-1}	AA	AA
3	17	2 495.33	电偶极跃迁	7.422×10^{-1}	1.419×10^{8}	6.625×10^{-1}	5.442×10^{0}	1.418×10^{8}	6.620×10^{-1}	5.438×10^{0}	5.82×10^{-1}	AA	AA
3	20	2 351.42	电偶极跃迁	2.522×10^{-1}	1.398×10^{7}	3.476×10^{-2}	2.691×10^{-1}	1.397×10^{7}	3.475×10^{-2}	2.690×10^{-1}	1.29×10^{-1}	AA	AA
3	24	2 230.50	E2	1.074×10^{-5}	4.406×10^{1}	1.643×10^{-7}	1.086×10^{1}	4.405×10^{1}	1.643×10^{-7}	1.086×10^{1}	2.37×10^{-1}	AA	AA
3	26	2 175.68	电偶极跃迁	3.938×10^{-1}	3.362×10^{7}	7.157×10^{-2}	5.127×10^{-1}	3.360×10^{7}	7.153×10^{-2}	5.123×10^{-1}	3.63×10^{-1}	AA	AA
3	27	2 175.68	电偶极跃迁	7.088×10^{-1}	6.051×10^{7}	2.147×10^{-1}	1.538×10^{0}	6.047×10^{7}	2.146×10^{-1}	1.537×10^{0}	3.36×10^{-1}	AA	AA
3	34	2 126.25	电偶极跃迁	2.306×10^{-1}	6.034×10^{6}	1.227×10^{-2}	8.588×10^{-2}	6.032×10^{6}	1.227×10^{-2}	8.586×10^{-2}	8.55×10^{-2}	AA	AA
3	41	2056.56	电偶极跃迁	6.859×10^{-1}	3.060×10^{7}	9.700×10^{-2}	6.567×10^{-1}	3.057×10^{7}	9.693×10^{-2}	6.563×10^{-1}	2.41×10^{-1}	AA	AA
3	42	2 056.56	电偶极跃迁	3.811×10^{-1}	1.700×10^{7}	3.233×10^{-2}	2.189×10^{-1}	1.699×10^{7}	3.231×10^{-2}	2.188×10^{-1}	2.63×10^{-1}	AA	AA
3	52	2 033.28	电偶极跃迁	2.213×10^{-1}	3.160×10^{6}	5.875×10^{-3}	3.933×10^{-2}	3.159×10^{6}	5.874×10^{-3}	3.932×10^{-2}	6.49×10^{-2}	AA	AA
3	58	1 997.98	电偶极跃迁	3.734×10^{-1}	9.729×10^{6}	1.747×10^{-2}	1.149×10^{-1}	9.721×10^{6}	1.745×10^{-2}	1.148×10^{-1}	2.04×10^{-1}	AA	AA
3	59	1 997.98	电偶极跃迁	6.721×10^{-1}	1.751×10^{7}	5.240×10^{-2}	3.447×10^{-1}	1.750×10^{7}	5.236×10^{-2}	3.444×10^{-1}	1.85×10^{-1}	AA	AA
3	74	1 985.08	电偶极跃迁	2.164×10^{-1}	1.858×10^{6}	3.294×10^{-3}	2.153×10^{-2}	1.859×10^{6}	3.294×10^{-3}	2.153×10^{-2}	5.13×10^{-2}	B+	AA
3	81	1 964.56	电偶极跃迁	6.632×10^{-1}	1.094×10^{7}	3.164×10^{-2}	2.046×10^{-1}	1.092×10^{7}	3.160×10^{-2}	2.044×10^{-1}	1.37×10^{-1}	B+	AA
3	82	1 964.56	电偶极跃迁	3.684×10^{-1}	6.076×10^{6}	1.055×10^{-2}	6.821×10^{-2}	6.068×10^{6}	1.053×10^{-2}	6.813×10^{-2}	1.52×10^{-1}	B+	AA
4	6	3322.29	电偶极跃迁	5.555×10^{-1}	8.277×10^{7}	4.109×10^{-1}	4.494×10^{0}	8.275×10^{7}	4.108×10^{-1}	4.493×10^{0}	3.75×10^{-1}	AA	AA

续见下页

表 II – 接上一页

i	j	λ	Type	BF	A^l	^{gfl}	S^l	A^v	^{gfv}	S^v	CF	Acc_1	Acc_2
4	8	2 865.22	电偶极跃迁 1.262×10^{-2}		7.719×10^{1}	4.750×10^{-7}	4.480×10^{-6}	8.324×10^{1}	5.123×10^{-7}	4.832×10^{-6}	1.02×10^{-7}	B	B
4	9	2708.10	E2	1.932×10^{-5}	2.254×10^{2}	2.479×10^{-7}	2.932×10^{1}	2.254×10^{2}	2.478×10^{-7}	2.931×10^{1}	7.22×10^{-1}	AA	AA
4	10	2 708.10	E2	1.449×10^{-5}	1.691×10^{2}	5.577×10^{-7}	6.597×10^{1}	1.690×10^{2}	5.575×10^{-7}	6.595×10^{1}	7.24×10^{-1}	AA	AA
4	13	2 651.55	电偶极跃迁 4.166×10^{-1}		1.763×10^{8}	5.576×10^{-1}	4.867×10^{0}	1.762×10^{8}	5.571×10^{-1}	4.863×10^{0}	3.44×10^{-1}	AA	AA
4	14	2 651.41	电偶极跃迁 7.499×10^{-1}		3.174×10^{8}	1.673×10^{0}	1.460×10^{1}	3.171×10^{8}	1.671×10^{0}	1.459×10^{1}	4.18×10^{-1}	AA	AA
4	16	2 495.48	电偶极跃迁 2.749×10^{-2}		5.257×10^{6}	1.472×10^{-2}	1.210×10^{-1}	5.254×10^{6}	1.471×10^{-2}	1.209×10^{-1}	4.48×10^{-1}	AA	AA
4	17	2 495.48	电偶极跃迁 2.474×10^{-1}		4.732×10^{7}	2.209×10^{-1}	1.815×10^{0}	4.729×10^{7}	2.207×10^{-1}	1.813×10^{0}	6.54×10^{-1}	AA	AA
4	18	2 495.48	电偶极跃迁 9.896×10^{-1}		1.892×10^{8}	1.237×10^{0}	1.016×10^{1}	1.891×10^{8}	1.236×10^{0}	1.015×10^{1}	7.23×10^{-1}	AA	AA
4	20	2 351.55	电偶极跃迁 4.204×10^{-1}		2.330×10^{7}	5.795×10^{-2}	4.486×10^{-1}	2.330×10^{7}	5.794×10^{-2}	4.486×10^{-1}	1.43×10^{-1}	AA	AA
4	22	2230.62	E2	2.387×10^{-5}	9.791×10^{1}	7.304×10^{-8}	4.828×10^{0}	9.788×10^{1}	7.301×10^{-8}	4.826×10^{0}	2.43×10^{-1}	AA	AA
4	23	2 230.62	E2	1.790×10^{-5}	7.343×10^{1}	1.643×10^{-7}	1.086×10^{1}	7.341×10^{1}	1.643×10^{-7}	1.086×10^{1}	2.43×10^{-1}	AA	AA
4	26	2175.79	电偶极跃迁 2.625×10^{-2}		2.241×10^{6}	4.772×10^{-3}	3.418×10^{-2}	2.240×10^{6}	4.769×10^{-3}	3.416×10^{-2}	2.69×10^{-1}	AA	AA
4	27	2 175.79	电偶极跃迁 2.363×10^{-1}		2.017×10^{7}	7.158×10^{-2}	5.127×10^{-1}	2.016×10^{7}	7.153×10^{-2}	5.124×10^{-1}	3.81×10^{-1}	AA	AA
4	28	2 175.79	电偶极跃迁 9.451×10^{-1}		8.068×10^{7}	4.008×10^{-1}	2.871×10^{0}	8.063×10^{7}	4.006×10^{-1}	2.869×10^{0}	4.19×10^{-1}	AA	AA
4	34	2 126.35	电偶极跃迁 3.845×10^{-1}		1.006×10^{7}	2.045×10^{-2}	1.432×10^{-1}	1.006×10^{7}	2.045×10^{-2}	1.432×10^{-1}	9.47×10^{-2}	AA	AA
4	36	2 079.69	E2	2.216×10^{-5}	5.020×10^{1}	3.255×10^{-8}	1.744×10^{0}	5.016×10^{1}	3.253×10^{-8}	1.743×10^{0}	1.34×10^{-1}	AA	AA
4	37	2 079.69	E2	1.662×10^{-5}	3.765×10^{1}	7.323×10^{-8}	3.923×10^{0}	3.762×10^{1}	7.318×10^{-8}	3.920×10^{0}	1.34×10^{-1}	AA	AA
4	40	2 056.66	电偶极跃迁 9.145×10^{-1}		4.079×10^{7}	1.811×10^{-1}	1.226×10^{0}	4.076×10^{7}	1.810×10^{-1}	1.225×10^{0}	3.02×10^{-1}	AA	AA
4	41	2 056.66	电偶极跃迁 2.286×10^{-1}		1.020×10^{7}	3.234×10^{-2}	2.189×10^{-1}	1.019×10^{7}	3.231×10^{-2}	2.188×10^{-1}	2.75×10^{-1}	AA	AA
4	42	2 056.66	电偶极跃迁 2.540×10^{-2}		1.133×10^{6}	2.156×10^{-3}	1.460×10^{-2}	1.132×10^{6}	2.154×10^{-3}	1.459×10^{-2}	1.98×10^{-1}	AA	AA
4	43	2 050.51	E2	1.001×10^{-5}	8.391×10^{1}	4.760×10^{-7}	2.444×10^{1}	8.390×10^{1}	4.760×10^{-7}	2.444×10^{1}	2.38×10^{-1}	AA	AA
4	52	2033.38	电偶极跃迁 3.689×10^{-1}		5.267×10^{6}	9.795×10^{-3}	6.557×10^{-2}	5.267×10^{6}	9.794×10^{-3}	6.557×10^{-2}	7.15×10^{-2}	AA	AA
4	54	2010年.08	E2	2.049×10^{-5}	2.890×10^{1}	1.750×10^{-8}	8.467×10^{-1}	2.882×10^{1}	1.746×10^{-8}	8.444×10^{-1}	8.56×10^{-2}	AA	AA
4	55	2 010.07	E2	1.536×10^{-5}	2.167×10^{1}	3.938×10^{-8}	1.905×10^{0}	2.161×10^{1}	3.927×10^{-8}	1.900×10^{0}	8.55×10^{-2}	AA	AA
4	58	1 998.07	电偶极跃迁 2.489×10^{-2}		6.486×10^{5}	1.165×10^{-3}	7.660×10^{-3}	6.481×10^{5}	1.164×10^{-3}	7.654×10^{-3}	1.56×10^{-1}	A+	AA
4	59	1 998.07	电偶极跃迁 2.240×10^{-1}		5.837×10^{6}	1.747×10^{-2}	1.149×10^{-1}	5.832×10^{6}	1.745×10^{-2}	1.148×10^{-1}	2.12×10^{-1}	AA	AA
4	60	1 998.07	电偶极跃迁 8.961×10^{-1}		2.335×10^{7}	9.782×10^{-2}	6.434×10^{-1}	2.333×10^{7}	9.774×10^{-2}	6.429×10^{-1}	2.32×10^{-1}	AA	AA
4	63	1 994.80	E2	1.186×10^{-5}	5.858×10^{1}	3.145×10^{-7}	1.487×10^{1}	5.860×10^{1}	3.146×10^{-7}	1.487×10^{1}	1.74×10^{-1}	AA	AA
4	74	1 985.17	电偶极跃迁 3.607×10^{-1}		3.098×10^{6}	5.491×10^{-3}	3.589×10^{-2}	3.099×10^{6}	5.492×10^{-3}	3.589×10^{-2}	5.61×10^{-2}	B+	AA
4	76	1 971.76	E2	1.944×10^{-5}	1.812×10^{1}	1.056×10^{-8}	4.821×10^{-1}	1.791×10^{1}	1.044×10^{-8}	4.767×10^{-1}	5.96×10^{-2}	A+	A+
4	78	1 971.76	E2	1.446×10^{-5}	1.354×10^{1}	2.368×10^{-8}	1.081×10^{0}	1.339×10^{1}	2.341×10^{-8}	1.069×10^{0}	5.95×10^{-2}	A+	A+
4	80	1 964.65	电偶极跃迁 8.842×10^{-1}		1.458×10^{7}	5.905×10^{-2}	3.819×10^{-1}	1.456×10^{7}	5.899×10^{-2}	3.815×10^{-1}	1.72×10^{-1}	B+	AA
4	81	1 964.65	电偶极跃迁 2.210×10^{-1}		3.645×10^{6}	1.055×10^{-2}	6.821×10^{-2}	3.641×10^{6}	1.053×10^{-2}	6.813×10^{-2}	1.57×10^{-1}	B+	AA
4	82	1 964.65	电偶极跃迁 2.456×10^{-2}		4.049×10^{5}	7.030×10^{-4}	4.547×10^{-3}	4.045×10^{5}	7.023×10^{-4}	4.542×10^{-3}	1.18×10^{-1}	B+	AA
4	83	1 962.70	E2	1.292×10^{-5}	4.067×10^{1}	2.114×10^{-7}	9.519×10^{0}	4.080×10^{1}	2.121×10^{-7}	9.549×10^{0}	1.28×10^{-1}	AA	AA
5	7	8 256.34	电偶极跃迁 $1.000\times10^{+0}$		3.466×10^{7}	3.542×10^{-1}	9.628×10^{0}	3.461×10^{7}	3.537×10^{-1}	9.614×10^{0}	1.06×10^{-1}	AA	AA
5	8	6 984.66	电偶极跃迁 7.158×10^{-1}		4.377×10^{3}	1.601×10^{-4}	3.680×10^{-3}	4.300×10^{3}	1.572×10^{-4}	3.616×10^{-3}	5.67×10^{-6}	A+	A+
5	19	4 573.95	电偶极跃迁 9.407×10^{-1}		7.842×10^{7}	1.230×10^{0}	1.852×10^{1}	7.831×10^{7}	1.228×10^{0}	1.849×10^{1}	1.02×10^{-1}	AA	AA
5	21	4 409.17	电偶极跃迁 4.866×10^{-1}		1.010×10^{7}	2.945×10^{-2}	4.275×10^{-1}	1.010×10^{7}	2.943×10^{-2}	4.271×10^{-1}	3.99×10^{-2}	AA	AA
5	33	3 814.54	电偶极跃迁 9.594×10^{-1}		4.786×10^{7}	5.221×10^{-1}	6.556×10^{0}	4.780×10^{7}	5.214×10^{-1}	6.548×10^{0}	1.05×10^{-1}	AA	AA
5	35	3 737.36	电偶极跃迁 4.209×10^{-1}		5.188×10^{6}	1.086×10^{-2}	1.337×10^{-1}	5.185×10^{6}	1.086×10^{-2}	1.336×10^{-1}	3.62×10^{-2}	AA	AA
5	51	3 516.55	电偶极跃迁 9.484×10^{-1}		2.679×10^{7}	2.483×10^{-1}	2.875×10^{0}	2.675×10^{7}	2.480×10^{-1}	2.871×10^{0}	8.98×10^{-2}	AA	AA
5	53	3477.56	电偶极跃迁 4.159×10^{-1}		3.248×10^{6}	5.889×10^{-3}	6.742×10^{-2}	3.246×10^{6}	5.886×10^{-3}	6.738×10^{-2}	3.76×10^{-2}	AA	AA
5	73	3 368.62	电偶极跃迁 9.392×10^{-1}		1.608×10^{7}	1.368×10^{-1}	1.517×10^{0}	1.606×10^{7}	1.366×10^{-1}	1.515×10^{0}	7.37×10^{-2}	AA	AA
5	75	3 346.39	电偶极跃迁 4.298×10^{-1}		2.267×10^{6}	3.807×10^{-3}	4.194×10^{-2}	2.267×10^{6}	3.805×10^{-3}	4.192×10^{-2}	4.06×10^{-2}	B+	AA
5	99	3 283.85	电偶极跃迁 9.327×10^{-1}		1.036×10^{7}	8.376×10^{-2}	9.055×10^{-1}	1.035×10^{7}	8.366×10^{-2}	9.044×10^{-1}	5.32×10^{-2}	B+	AA

表 III. 铍原子的当前计算结果与现有理论振子强度的比较。

下态	上态	f1多组态狄拉克-哈特里-福克	fv多组态狄拉克-哈特里-福克	f_{ECG}[a]	f_{BCICP}[b]	f_{MCHF}[c]
$2s^2\ ^1S_0$	$2s2p\ ^1P_1^\circ$	1.375×10^{0}	1.374×10^{0}	1.374×10^{0}	1.375×10^{0}	1.380×10^{0}
$2s^2\ ^1S_0$	$2s3p\ ^1P_1^\circ$	8.699×10^{-3}	8.689×10^{-3}	8.582×10^{-3}	9.01×10^{-3}	8.985×10^{-3}
$2s^2\ ^1S_0$	$2s4p\ ^1P_1^\circ$	2.594×10^{-4}	2.594×10^{-4}	2.707×10^{-4}	2.30×10^{-4}	
$2s^2\ ^1S_0$	$2s5p\ ^1P_1^\circ$	8.476×10^{-4}	8.472×10^{-4}	8.600×10^{-4}	8.10×10^{-4}	
$2s^2\ ^1S_0$	$2s6p\ ^1P_1^\circ$	7.822×10^{-4}	7.818×10^{-4}	7.911×10^{-4}	7.50×10^{-4}	
$2s^2\ ^1S_0$	$2s7p\ ^1P_1^\circ$	5.995×10^{-4}	5.995×10^{-4}	6.108×10^{-4}	5.90×10^{-4}	
$2s2p\ ^1P_1^\circ$	$2s3s\ ^1S_0$	1.181×10^{-1}	1.179×10^{-1}	1.179×10^{-1}	1.18×10^{-1}	1.147×10^{-1}
$2s2p\ ^1P_1^\circ$	$2s4s\ ^1S_0$	9.816×10^{-3}	9.808×10^{-3}	9.827×10^{-3}	9.82×10^{-3}	
$2s2p\ ^1P_1^\circ$	$2s5s\ ^1S_0$	3.621×10^{-3}	3.619×10^{-3}	3.632×10^{-3}	3.62×10^{-3}	
$2s2p\ ^1P_1^\circ$	$2s6s\ ^1S_0$	1.963×10^{-3}	1.962×10^{-3}	1.973×10^{-3}	1.96×10^{-3}	
$2s2p\ ^1P_1^\circ$	$2s7s\ ^1S_0$	1.269×10^{-3}	1.268×10^{-3}	1.278×10^{-3}	1.23×10^{-3}	
$2s3s\ ^1S_0$	$2s3p\ ^1P_1^\circ$	9.564×10^{-1}	9.560×10^{-1}	9.561×10^{-1}	9.58×10^{-1}	9.465×10^{-1}
$2s3s\ ^1S_0$	$2s4p\ ^1P_1^\circ$	1.029×10^{-2}	1.029×10^{-2}	1.039×10^{-2}	9.82×10^{-3}	
$2s3s\ ^1S_0$	$2s5p\ ^1P_1^\circ$	1.475×10^{-2}	1.474×10^{-2}	1.481×10^{-2}	1.45×10^{-2}	
$2s3s\ ^1S_0$	$2s6p\ ^1P_1^\circ$	1.088×10^{-2}	1.087×10^{-2}	1.091×10^{-2}	1.07×10^{-2}	
$2s3s\ ^1S_0$	$2s7p\ ^1P_1^\circ$	7.528×10^{-3}	7.524×10^{-3}	7.615×10^{-3}	7.51×10^{-3}	
$2s3p\ ^1P_1^\circ$	$2s4s\ ^1S_0$	2.082×10^{-1}	2.080×10^{-1}	2.078×10^{-1}	2.09×10^{-1}	
$2s3p\ ^1P_1^\circ$	$2s5s\ ^1S_0$	2.434×10^{-2}	2.432×10^{-2}	2.433×10^{-2}	2.43×10^{-2}	
$2s3p\ ^1P_1^\circ$	$2s6s\ ^1S_0$	8.584×10^{-3}	8.576×10^{-3}	8.581×10^{-3}	8.57×10^{-3}	
$2s3p\ ^1P_1^\circ$	$2s7s\ ^1S_0$	4.232×10^{-3}	4.228×10^{-3}	4.231×10^{-3}	4.23×10^{-3}	
$2s4s\ ^1S_0$	$2s4p\ ^1P_1^\circ$	1.430×10^{0}	1.430×10^{0}	1.430×10^{0}	1.43×10^{0}	
$2s4s\ ^1S_0$	$2s5p\ ^1P_1^\circ$	1.790×10^{-3}	1.790×10^{-3}	1.832×10^{-3}	1.59×10^{-3}	
$2s4s\ ^1S_0$	$2s6p\ ^1P_1^\circ$	5.133×10^{-3}	5.132×10^{-3}	5.176×10^{-3}	4.95×10^{-3}	
$2s4s\ ^1S_0$	$2s7p\ ^1P_1^\circ$	4.146×10^{-3}	4.149×10^{-3}	4.212×10^{-3}	4.08×10^{-3}	
$2s4p\ ^1P_1^\circ$	$2s5s\ ^1S_0$	2.937×10^{-1}	2.935×10^{-1}	2.932×10^{-1}	2.95×10^{-1}	
$2s4p\ ^1P_1^\circ$	$2s6s\ ^1S_0$	3.599×10^{-2}	3.596×10^{-2}	3.596×10^{-2}	3.60×10^{-2}	
$2s4p\ ^1P_1^\circ$	$2s7s\ ^1S_0$	1.269×10^{-2}	1.267×10^{-2}	1.267×10^{-2}	1.27×10^{-2}	
$2s5s\ ^1S_0$	$2s5p\ ^1P_1^\circ$	1.814×10^{0}	1.813×10^{0}	1.814×10^{0}	1.82×10^{0}	
$2s5s\ ^1S_0$	$2s6p\ ^1P_1^\circ$	5.982×10^{-4}	5.987×10^{-4}	6.253×10^{-4}	4.78×10^{-4}	
$2s5s\ ^1S_0$	$2s7p\ ^1P_1^\circ$	3.296×10^{-3}	3.300×10^{-3}	3.367×10^{-3}	3.16×10^{-3}	
$2s5p\ ^1P_1^\circ$	$2s6s\ ^1S_0$	3.843×10^{-1}	3.840×10^{-1}	3.837×10^{-1}	3.86×10^{-1}	
$2s5p\ ^1P_1^\circ$	$2s7s\ ^1S_0$	4.792×10^{-2}	4.790×10^{-2}	4.788×10^{-2}	4.79×10^{-2}	
$2s6s\ ^1S_0$	$2s6p\ ^1P_1^\circ$	2.183×10^{0}	2.178×10^{0}	2.181×10^{0}	2.19×10^{0}	
$2s6s\ ^1S_0$	$2s7p\ ^1P_1^\circ$	1.884×10^{-4}	1.860×10^{-4}	2.080×10^{-4}	1.12×10^{-4}	
$2s6p\ ^1P_1^\circ$	$2s7s\ ^1S_0$	4.774×10^{-1}	4.781×10^{-1}	4.771×10^{-1}	4.79×10^{-1}	
$2s7s\ ^1S_0$	$2s7p\ ^1P_1^\circ$	2.543×10^{0}	2.530×10^{0}	2.545×10^{0}	2.56×10^{0}	

a f_{ECG}：来自ECG方法的数值[38]b f_{BCICP}：来自BCICP 方法的数值[80]c f_{MCHF}：来自MCHF方法的数值[24]

表IV. Be I 能级的计算寿命及与先前结果的比较。当本工作采用多组态狄拉克-哈特里-福克/相对论组态相互作用得到的数值落在实验误差范围内时，实验寿命以粗体标出。

上能级		寿命（纳秒）			
组态	Term	本工作		上一篇	
		$\tau^{l}_{\text{多组态狄拉克-哈特里-福克}}$	$\tau^{v}_{\text{多组态狄拉克-哈特里-福克}}$	实验*	计算†
$2s2p$	$^1P^\circ$	1.81	1.81	2.05(6)[a],2.3(1)[c],2.5(2)[d],1.80(15)[f],1.77(5)[i],1.85(4)[j]	1.79[l],1.73[m],1.79[n],1.7[k]
$2s3s$	^3S	6.71	6.71	5.95(16)[a],7.3(2)[c],6.2(2)[d],6.4(2)[h]	6.70[l],6.65[m],6.61[n],6.7[k]
$2p^2$	^3P	2.36	2.36	2.42(6)[a],2.3(2)[c],2.4(1)[d]	2.31[l],2.37[n],2.2[k]
$2s3d$	^3D	5.23	5.23	5.00(14)[a],4.9(2)[c],5.4(2)[d],5.2(2)[h]	5.18[l],5.26[m],5.14[n],5.6[k]
$2s3d$	^1D	12.00	12.01	12.0(3)[a],10.0(2)[c],12.3(4)[d],10.4(10)[e]	12.3[l],12.2[m],12.5[n],10.6[k]
$2s4s$	^3S	18.04	18.05	18.2(7)[k]	17.9[m],19.8[k]
$2s4d$	^3D	11.71	11.72	11.2(6)[b],11.5(5)[c],10.8(4)[d],11.7(6)[k]	11.7[l],11.73[m],14.6[k]
$2s4d$	^1D	20.04	20.07	18.8(5)[a],13.6(2)[c],19.3(5)[d],14.0(15)[e],14.5(10)[g]	19.9[l],20.1[m],15.4[k]
$2s5s$	^3S	38.22	38.23	11.7(6)[a],10.5(5)[c],38.6(6)[k]	38.4[l],38.4[m],42.6[k]
$2s5d$	^3D	22.42	22.43	23.3(10)[k]	22.5[m],30.1[k]
$2s5d$	^1D	35.41	35.45	19(2)[e]	35.1[l],35.5[m],24.4[k]
$2s6s$	^3S	70.03	70.05	73.4(27)[k]	69.6[m],79.4[k]
$2s6d$	^1D	58.41	58.49	38(4)[e]	57.3[l],58.4[m],36.8[k]

*实验寿命数据来源：a Bergström 等人 84；b Bromander、Buchta 和 Lundin 85；c Andersen、Jessen 和 Sørensen 86；d Bromander 87；e Andersen、Roberts 和 Sørensen 88；f Hontzeas 等人 89；g Poulsen、Andersen 和 Skouboe 90；h Kerkhoff、Schmidt 和 Zimmermann 91；i Irving 等人 92；j Schnabel 和 Kock 93；k Wang 等人 [97]。†计算寿命数据来源：l Moccia 和 Spizzo 94；m Chang 95；n Froese Fischer、Gaigalas 和 Godefroid 96；k Wang 等人 [97]。

表 V：最低 99 个能级（列于表 I）中的朗德 g 因子 g_J 和 LS 耦合值 g_J(LS)、超精细相互作用常数 A_J 和 B_J（均以 MHz 为单位）、质量位移参数 K_{NMS} 和 K_{SMS}（单位为 GHz u）、场位移参数 $F^{(0)ved}$（单位为 GHz/fm^2）和 $F^{(1)ved}$（单位为 GHz/fm^4）。

Key	能级	$J\pi$	g_J	g_J(LS)	A_J	B_J	K_{NMS}	K_{SMS}	$F^{(0)ved}$	$F^{(1)ved}$
1	$2s^2\ ^1S_0$	0+	...	...	...	...	52 902	1 684.3	0.70052	-1.4382×10^{-5}
2	$2s2p\ ^3P^\circ_0$	0−	...	...	...	...	52 540	965.23	0.69066	-1.4179×10^{-5}
3	$2s2p\ ^3P^\circ_1$	1−	1.5000	1.5000	-139.27	-0.7260	52 541	965.27	0.69066	-1.4179×10^{-5}
4	$2s2p\ ^3P^\circ_2$	2−	1.5000	1.5000	-124.47	1.4521	52 541	965.10	0.69066	-1.4179×10^{-5}
5	$2s2p\ ^1P^\circ_1$	1−	1.0000	1.0000	-13.836	0.8452	52 202	1 592.7	0.69119	-1.4190×10^{-5}
6	$2s3s\ ^3S_1$	1+	2.0000	2.0000	-332.25	0.0000	52 046	1 694.9	0.69616	-1.4292×10^{-5}
7	$2s3s\ ^1S_0$	0+	...	...	...	...	52 003	1 649.4	0.69574	-1.4284×10^{-5}
8	$2p^2\ ^1D_2$	2+	1.0000	1.0000	-13.938	1.7418	51 967	540.79	0.68434	-1.4049×10^{-5}
9	$2s3p\ ^3P^\circ_0$	0−	...	0.0000	...	...	51 933	1 576.5	0.69464	-1.4261×10^{-5}
10	$2s3p\ ^3P^\circ_1$	1−	1.5000	1.5000	-154.22	-0.1048	51 933	1 576.8	0.69464	-1.4261×10^{-5}
11	$2s3p\ ^3P^\circ_2$	2−	1.5000	1.5000	-152.07	0.2098	51 933	1 576.7	0.69464	-1.4261×10^{-5}
12	$2p^2\ ^3P_0$	0+	...	...	...	...	51 920	545.61	0.67749	-1.3909×10^{-5}
13	$2p^2\ ^3P_1$	1+	1.5000	1.5000	18.101	0.7337	51 920	545.29	0.67749	-1.3909×10^{-5}
14	$2p^2\ ^3P_2$	2+	1.5000	1.5000	3.3859	-1.4680	51 920	545.01	0.67749	-1.3909×10^{-5}
15	$2s3p\ ^1P^\circ_1$	1−	1.0000	1.0000	-6.7039	0.4272	51 912	1 468.9	0.69315	-1.4230×10^{-5}
16	$2s3d\ ^3D_1$	1+	0.5000	0.5000	150.60	0.0159	51 881	1 664.6	0.69484	-1.4265×10^{-5}
17	$2s3d\ ^3D_2$	2+	1.1667	1.1667	-50.946	0.0226	51 881	1 664.6	0.69484	-1.4265×10^{-5}
18	$2s3d\ ^3D_3$	3+	1.3333	1.3333	-101.22	0.0456	51 881	1 664.6	0.69484	-1.4265×10^{-5}
19	$2s3d\ ^1D_2$	2+	1.0000	1.0000	-3.9842	0.5005	51 842	1 478.3	0.69230	-1.4213×10^{-5}
20	$2s4s\ ^3S_1$	1+	2.0000	2.0000	-318.76	0.0000	51 841	1 673.2	0.69557	-1.4280×10^{-5}
21	$2s4s\ ^1S_0$	0+	...	...	...	...	51 830	1 657.1	0.69541	-1.4277×10^{-5}
22	$2s4p\ ^3P^\circ_0$	0−	...	...	...	...	51 803	1 628.0	0.69505	-1.4269×10^{-5}
23	$2s4p\ ^3P^\circ_1$	1−	1.5000	1.5000	-155.26	-0.0385	51 803	1 628.2	0.69505	-1.4269×10^{-5}
24	$2s4p\ ^3P^\circ_2$	2−	1.5000	1.5000	-154.71	0.0772	51 803	1 628.1	0.69505	-1.4269×10^{-5}
25	$2s4p\ ^1P^\circ_1$	1−	1.0000	1.0000	-3.0264	0.1808	51 799	1 578.2	0.69439	-1.4256×10^{-5}
26	$2s4d\ ^3D_1$	1+	0.5000	0.5000	154.01	0.0063	51 784	1 664.8	0.69512	-1.4271×10^{-5}
27	$2s4d\ ^3D_2$	2+	1.1667	1.1667	-51.661	0.0091	51 784	1 664.8	0.69511	-1.4271×10^{-5}
28	$2s4d\ ^3D_3$	3+	1.3333	1.3333	-103.01	0.0183	51 784	1 664.8	0.69511	-1.4271×10^{-5}
29	$2s4f\ ^3F^\circ_4$	4−	1.2500	1.2500	-77.734	0.0070	51 779	1 651.5	0.69521	-1.4273×10^{-5}
30	$2s4f\ ^3F^\circ_2$	2−	0.6667	0.6667	103.52	0.0048	51 779	1 651.4	0.69521	-1.4273×10^{-5}
31	$2s4f\ ^3F^\circ_3$	3−	1.0808	1.0833	-55.896	0.0053	51 779	1 651.5	0.69521	-1.4273×10^{-5}
32	$2s4f\ ^1F^\circ_3$	3−	1.0025	1.0000	29.903	0.0069	51 779	1 651.9	0.69521	-1.4273×10^{-5}
33	$2s4d\ ^1D_2$	2+	1.0000	1.0000	-1.1536	0.1466	51 770	1 626.5	0.69441	-1.4256×10^{-5}
34	$2s5s\ ^3S_1$	1+	2.0000	2.0000	-315.10	0.0000	51 767	1 665.4	0.69541	-1.4277×10^{-5}
35	$2s5s\ ^1S_0$	0+	...	...	...	...	51 763	1 658.1	0.69533	-1.4275×10^{-5}
36	$2s5p\ ^3P^\circ_0$	0−	...	...	...	...	51 749	1 643.4	0.69516	-1.4272×10^{-5}
37	$2s5p\ ^3P^\circ_1$	1−	1.5000	1.5000	-154.34	-0.0185	51 749	1 643.6	0.69517	-1.4272×10^{-5}
38	$2s5p\ ^3P^\circ_2$	2−	1.5000	1.5000	-155.43	0.0371	51 749	1 643.6	0.69517	-1.4272×10^{-5}
39	$2s5p\ ^1P^\circ_1$	1−	1.0000	1.0000	-2.8538	0.0910	51 749	1 619.0	0.69483	-1.4265×10^{-5}
40	$2s5d\ ^3D_3$	3+	1.3333	1.3333	-103.54	0.0091	51 740	1 661.9	0.69520	-1.4272×10^{-5}
41	$2s5d\ ^3D_2$	2+	1.1667	1.1667	-51.887	0.0045	51 740	1 661.9	0.69520	-1.4272×10^{-5}
42	$2s5d\ ^3D_1$	1+	0.5000	0.5000	155.05	0.0032	51 740	1 661.9	0.69520	-1.4272×10^{-5}
43	$2s5f\ ^3F^\circ_4$	4−	1.2500	1.2500	-77.843	0.0042	51 738	1 653.8	0.69524	-1.4273×10^{-5}
44	$2s5f\ ^3F^\circ_2$	2−	0.6667	0.6667	103.72	0.0029	51 738	1 653.8	0.69524	-1.4273×10^{-5}
45	$2s5f\ ^3F^\circ_3$	3−	1.0818	1.0833	-49.328	0.0032	51 738	1 653.8	0.69524	-1.4273×10^{-5}
46	$2s5f\ ^1F^\circ_3$	3−	1.0015	1.0000	23.332	0.0041	51 738	1 654.3	0.69524	-1.4273×10^{-5}
47	$2s5g\ ^3G_3$	3+	0.7500	0.7500	77.959	0.0009	51 737	1 656.7	0.69527	-1.4274×10^{-5}
48	$2s5g\ ^3G_4$	4+	1.0278	1.0500	-77.979	0.0011	51 737	1 656.7	0.69527	-1.4274×10^{-5}
49	$2s5g\ ^3G_5$	5+	1.2000	1.2000	-62.382	0.0012	51 737	1 656.7	0.69527	-1.4274×10^{-5}
50	$2s5g\ ^1G_4$	4+	1.0222	1.0000	62.369	0.0011	51 737	1 656.7	0.69527	-1.4274×10^{-5}
51	$2s5d\ ^1D_2$	2+	1.0000	1.0000	-0.4563	0.0626	51 734	1 648.7	0.69490	-1.4266×10^{-5}
52	$2s6s\ ^3S_1$	1+	2.0000	2.0000	-313.71	0.0000	51 732	1 662.2	0.69535	-1.4276×10^{-5}
53	$2s6s\ ^1S_0$	0+	...	...	...	...	51 730	1 658.1	0.69530	-1.4275×10^{-5}

续见下页

表 V – 续前页

Key	能级	$J\pi$	g_J	g_J(LS)	A_J	B_J	$K_{\rm NMS}$	$K_{\rm SMS}$	$F^{(0)}$ved	$F^{(1)}$ved
54	2s6p $^3P^\circ_0$	0−	...	...	...	...	51 722	1 649.8	0.69521	-1.4273×10^{-5}
55	2s6p $^3P^\circ_1$	1−	1.4999	1.5000	-149.82	-0.0102	51 722	1 650.0	0.69521	-1.4273×10^{-5}
56	2s6p $^3P^\circ_2$	2−	1.5000	1.5000	-155.73	0.0206	51 722	1 649.9	0.69521	-1.4273×10^{-5}
57	2s6p $^1P^\circ_1$	1−	1.0001	1.0000	-6.8844	0.0519	51 722	1 636.2	0.69502	-1.4269×10^{-5}
58	2s6d $^3D_1$	1+	0.5000	0.5000	155.47	0.0018	51 717	1 660.2	0.69523	-1.4273×10^{-5}
59	2s6d $^3D_2$	2+	1.1667	1.1667	-52.005	0.0026	51 717	1 660.2	0.69523	-1.4273×10^{-5}
60	2s6d $^3D_3$	3+	1.3333	1.3333	-103.75	0.0053	51 717	1 660.2	0.69523	-1.4273×10^{-5}
61	2s6 f $^3F^\circ_2$	2−	0.6667	0.6667	103.83	0.0018	51 716	1 655.1	0.69525	-1.4274×10^{-5}
62	2s6 f $^3F^\circ_3$	3−	1.0816	1.0833	-51.330	0.0020	51 716	1 655.2	0.69525	-1.4274×10^{-5}
63	2s6 f $^3F^\circ_4$	4−	1.2500	1.2500	-77.905	0.0027	51 716	1 655.2	0.69525	-1.4274×10^{-5}
64	2s6 f $^1F^\circ_3$	3−	1.0018	1.0000	25.332	0.0026	51 716	1 655.5	0.69525	-1.4274×10^{-5}
65	2s6g $^3G_3$	3+	0.7500	0.7500	77.978	0.0006	51 715	1 657.0	0.69527	-1.4274×10^{-5}
66	2s6g $^3G_4$	4+	1.0279	1.0500	-77.989	0.0007	51 715	1 657.0	0.69527	-1.4274×10^{-5}
67	2s6g $^3G_5$	5+	1.2000	1.2000	-62.391	0.0007	51 715	1 657.0	0.69527	-1.4274×10^{-5}
68	2s6g $^1G_4$	4+	1.0221	1.0000	62.382	0.0007	51 715	1 657.0	0.69527	-1.4274×10^{-5}
69	2s6h $^3H^\circ_4$	4−	0.8000	0.8000	62.400	0.0003	51 715	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
70	2s6h $^3H^\circ_5$	5−	1.0181	1.0333	-62.405	0.0003	51 715	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
71	2s6h $^3H^\circ_6$	6−	1.1667	1.1667	-52.001	0.0003	51 715	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
72	2s6h $^1H^\circ_5$	5−	1.0152	1.0000	51.999	0.0003	51 715	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
73	2s6d $^1D_2$	2+	1.0000	1.0000	-0.1767	0.0329	51 713	1 654.2	0.69508	-1.4270×10^{-5}
74	2s7s $^3S_1$	1+	2.0000	2.0000	-313.08	0.0000	51 712	1 660.6	0.69533	-1.4275×10^{-5}
75	2s7s $^1S_0$	0+	...	...	...	...	51 711	1 658.0	0.69529	-1.4274×10^{-5}
76	2s7p $^3P^\circ_0$	0−	...	...	...	...	51 705	1 652.9	0.69523	-1.4273×10^{-5}
77	2s7p $^3P^\circ_2$	2−	1.5000	1.5000	-155.87	0.0126	51 706	1 653.0	0.69524	-1.4273×10^{-5}
78	2s7p $^3P^\circ_1$	1−	1.4982	1.5000	-128.84	-0.0061	51 706	1 653.0	0.69524	-1.4273×10^{-5}
79	2s7p $^1P^\circ_1$	1−	1.0018	1.0000	-27.611	0.0321	51 706	1 644.7	0.69512	-1.4271×10^{-5}
80	2s7d $^3D_3$	3+	1.3333	1.3333	-103.85	0.0033	51 703	1 659.3	0.69525	-1.4273×10^{-5}
81	2s7d $^3D_2$	2+	1.1667	1.1667	-52.048	0.0016	51 703	1 659.3	0.69525	-1.4273×10^{-5}
82	2s7d $^3D_1$	1+	0.5000	0.5000	155.68	0.0012	51 703	1 659.2	0.69525	-1.4273×10^{-5}
83	2s7 f $^3F^\circ_4$	4−	1.2500	1.2500	-77.941	0.0018	51 702	1 656.0	0.69526	-1.4274×10^{-5}
84	2s7 f $^3F^\circ_3$	3−	1.0802	1.0833	-59.309	0.0013	51 702	1 656.0	0.69526	-1.4274×10^{-5}
85	2s7 f $^3F^\circ_2$	2−	0.6667	0.6667	103.89	0.0012	51 702	1 655.9	0.69526	-1.4274×10^{-5}
86	2s7 f $^1F^\circ_3$	3−	1.0031	1.0000	33.309	0.0017	51 702	1 656.2	0.69526	-1.4274×10^{-5}
87	2s7g $^3G_3$	3+	0.7500	0.7500	77.989	0.0004	51 701	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
88	2s7g $^3G_4$	4+	1.0279	1.0500	-77.996	0.0004	51 701	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
89	2s7g $^3G_5$	5+	1.2000	1.2000	-62.397	0.0005	51 701	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
90	2s7g $^1G_4$	4+	1.0221	1.0000	62.391	0.0004	51 701	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
91	2s7h $^3H^\circ_4$	4−	0.8000	0.8000	62.403	0.0002	51 702	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
92	2s7h $^3H^\circ_5$	5−	1.0181	1.0333	-62.406	0.0002	51 702	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
93	2s7h $^3H^\circ_6$	6−	1.1667	1.1667	-52.002	0.0002	51 701	1 657.3	0.69527	-1.4274×10^{-5}
94	2s7h $^1H^\circ_5$	5−	1.0152	1.0000	52.001	0.0002	51 702	1 657.2	0.69527	-1.4274×10^{-5}
95	2s7i $^3I_5$	5+	0.8333	0.8333	52.004	0.0001	51 702	1 657.3	0.69527	-1.4274×10^{-5}
96	2s7i $^3I_6$	6+	1.0128	1.0238	-52.003	0.0001	51 702	1 657.4	0.69527	-1.4274×10^{-5}
97	2s7i $^3I_7$	7+	1.1429	1.1429	-44.572	0.0001	51 701	1 657.3	0.69527	-1.4274×10^{-5}
98	2s7i $^1I_6$	6+	1.0110	1.0000	44.573	0.0001	51 702	1 657.3	0.69527	-1.4274×10^{-5}
99	2s7d $^1D_2$	2+	1.0000	1.0000	-0.0632	0.0196	51 701	1 656.0	0.69516	-1.4272×10^{-5}

表 VI. ^{9}Be 同位素 $1s^2\,2s2p\ {}^3P^{\circ}_{1,2}$ 态的超精细相互作用常数（单位：兆赫）比较。

方法	A_2	A_1	B_2	B_1
线性组合多体微扰理论[a]	-124.47	-139.10		
HF +SDCI[b]	-124.76	-139.77		
有限元多组态 Hartree-Fock[c]	-124.50	-139.27		
多构型Hartree-Fock[d]	-124.50	-139.35		
相对论相对变分+组态相互作用[e]	-124.349	-139.012	1.44103	-0.72052
全组态点电荷模型[f]	-124.51	-139.36		
本工作	-124.47	-139.27	1.4521	-0.7260
实验值[g]	-124.5368(17)	-139.373(12)	1.429(8)	-0.753(44)

a 来自Ray、Lee和Das的链式簇多体微扰理论 [104] b 来自Beck和Nicolaides的Hartree-Fock与CI，允许向Slater型关联轨道进行全部单激发和双激发 [106] c 来自Sundholm和Olsen的有限元多构型Hartree-Fock [107] d 来自Jönsson和Froese Fischer的多构型Hartree-Fock [108] e 来自Wang等人的Rayleigh-Ritz变分法结合多组态CI [109] f 来自Chen的FCPC方法 [110] g 来自Blachman和Lurio的实验超精细相互作用常数 [103]

[1]T. R. Kallman和P. Palmeri，“X射线天体物理学的原子数据”，《现代物理评论》79, 79–133（2007）。[2]G. Del Zanna和H. E. Mason，“太阳紫外线与X射线光谱诊断”，《太阳物理学综述》15（2018年），10.1007/s41116-018-0015-3。[3]E. Träbert、P. Beiersdorfer、N. S. Brickhouse和L. Golub，“太阳动力学观测卫星上大气成像组件仪器 λ193 通道的高分辨率实验室光谱”，《天体物理学杂志增刊》215, 6（2014）。[4]E. Träbert、P. Beiersdorfer、N. S. Brickhouse和L. Golub，“太阳动力学观测卫星上AIA仪器 λ131 通道的高分辨率实验室光谱”，《天体物理学杂志增刊》211, 14（2014）。[5]E. Träbert，“天体物理学相关离子中的E1禁戒跃迁速率”，Physica Scripta 89, 114003（2014）。[6]G. Buldgen、P. Eggenberger、A. Noels、R. Scuflaire、A. M. Amarsi、N. Grevesse和S. Salmon，“更高的金属丰度并不能解决太阳问题”，《天文学与天体物理学》669, L9（2023）。[7]A. M. Boesgaard，“来自锂、铍和硼的耐人寻味的揭示”，《天体物理学杂志》943, 40（2023）。[8]A. Kramida、Yu. Ralchenko、J. Reader以及NIST ASD团队，NIST原子光谱数据库（5.12版），[在线]。可获取：https://physics.nist.gov/asd [2025, 5月 22]。美国国家标准与技术研究院，盖瑟斯堡，马里兰州。（2024年）。[9]P. Molaro、G. Cescutti和X. Fu，“盖亚-恩克拉多斯星系中的锂和铍”，《皇家天文学会月报》496, 2902–2909（2020年）。[10]A. M. Boesgaard、C. P. Deliyannis、M. G. Lum和A. Chontos，“一太阳质量恒星中的锂和铍”，《天体物理学杂志》941, 21 2022( )。[11]R. Smiljanic、L. Pasquini、C. Charbonnel和N. Lagarde，“沿疏散星团 IC 4651演化序列的铍丰度——流体动力学恒星模型的新检验”，《天文学与天体物理学》510, A50（2010年）。[12]M. Tucci Maia、J. Meléndez、M. Castro、M. Asplund、I. Ramírez、T. R. Monroe、J. D. do Nascimento Jr.和D. Yong，“由Be丰度推断的太阳孪生星中的浅层额外混合”，《天文学与天体物理学》576, L10（2015）。[13]S. Desidera、V. D’Orazi和M. Lugaro，“太阳型恒星中的铍极度亏损是否与白矮星伴星的存在有关？”《天文学与天体物理学》587, A46（2016）。[14]N. Prantzos，“银河系中Li、Be和B同位素的产生与演化”，《天文学与天体物理学》542, A67（2012）。[15]R. E. Giribaldi和R. Smiljanic，“利用CUBES光谱仪测定球状星团转折点恒星的铍丰度”，《实验天文学》55, 117–132（2022）。[16]A. Kramida和W. C. Martin，“中性铍（Be I）光谱的能级与波长汇编”，《物理与化学参考数据》26, 1185–1194（1997年）。[17]L. Johansson，“中性铍原子的光谱”，《物理学档案》23, 119（1962）。[18]L. Johansson，“对Be I位移项系的补充”，Physica Scripta 10, 236–240（1974）。[19]J. E. Holmström和L. Johansson，“对中性铍和单电离铍光谱的补充，铍I和铍II”，《物理学档案》40, 133（1969年）。[20]E. C. Cook、A. D. Vira、C. Patterson、E. Livernois和W. D. Williams，“在中性铍-9最低单重态中检验量子电动力学”，《物理评论快报》121（2018年），10.1103/physrevlett.121.053001。[21]E. C. Cook、A. D. Vira和W. D. Williams，“中性 ^{9}铍2s3d $^{1}D_2$ 能级的共振双光子光谱”，《物理评论A》101（2020年），10.1103/physreva.101.042503。[22]K. J. Ahrendsen、T. Karani和W. D. Williams，“中性 ^{9}铍2s3s $^{1}S_0$ 态绝对能量的精密测量”，《物理评论A》110（2024年），10.1103/PhysRevA.110.032818。[23]G. Tachiev和C. Froese Fischer，“布赖特-泡利能级、寿命和跃迁数据：类铍光谱”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》32, 5805–5823（1999年）。[24]C. Froese Fischer和G. Tachiev，“类铍至类氖等电子序列的布赖特-泡利能级、寿命和跃迁概率”，《原子数据与核数据表》87, 1–184 (2004). [25]J. S. Sims 和 S. A. Hagstrom，“中性铍 ^{1}S基态的 Hylleraas组态相互作用研究”，《物理评论A》83 (2011), 10.1103/physreva.83.032518. [26]J. S. Sims 和 S. A. Hagstrom，“铍等电子序列 ^{1}S基态的 Hylleraas组态相互作用非相对论能量”，《化学物理学杂志》140 (2014), 10.1063/1.4881639.[27]J. S. Sims，“铍原子3 1S、4 1S、5 1S、6 1S和7 1S激发态的 Hylleraas组态相互作用（Hy-CI）非相对论能量”，《美国国家标准与技术研究院研究杂志》125 (2020), 10.6028/jres.125.006. [28]H. Dong、J. Jiang、Z. Wu、C. Dong 和 G. Gaigalas，“使用多组态狄拉克-哈特里-福克方法计算铍的原子极化率*”，《中国物理B》30, 043103 (2021)。[29]M. Stanke、D. Ke̡dziera、S. Bubin 和 L. Adamowicz，“ ^{9}Be的最低激发能”，《物理评论快报》99 (2007), 10.1103/physrevlett.99.043001.[30]M. Stanke、D. Ke̡dziera、S. Bubin 和 L. Adamowicz，“计入核运动和相对论修正计算的 ^{9}Be电离势”，《物理评论A》75 (2007), 10.1103/physreva.75.052510. [31]M. Stanke、J. Komasa、S. Bubin 和 L. Adamowicz，“采用有限核质量方法并计入相对论和量子电动力学修正计算的Be原子最低五个 ^{1}S态”，《物理评论A》80 (2009), 10.1103/physreva.80.022514. [32]M. Stanke、A. Bralin、S. Bubin 和 L. Adamowicz，“采用有限核质量方法和全电子显式相关高斯函数计算原子P态的主导相对论修正”，《物理评论A》97 (2018), 10.1103/physreva.97.012513. [33]M. Stanke 和 L. Adamowicz，“使用全电子显式相关高斯函数计算原子D态主导相对论修正的有限核质量计算”，《物理评论A》100 (2019), 10.1103/physreva.100.042503. [34]M. Stanke、S. Bubin 和 L. Adamowicz，“使用全电子显式相关高斯函数计算的铍最低十个 ^{1}P里德伯态”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》52, 155002 (2019)。[35]M. Stanke、E. Palikot、K. L. Sharkey 和 L. Adamowicz，“铍 ^{1}D里德伯谱的基准计算”，《化学物理快报》779, 138823 (2021). [36]M. Stanke、A. Ke̡dziorski 和 L. Adamowicz，“使用全电子显式相关高斯函数计算的铍 ^{3}P态精细结构”，《物理评论A》105 (2022), 10.1103/physreva.105.012813. [37]A. Ke̡dziorski、M. Stanke 和 L. Adamowicz，“采用有限核质量方法和全电子显式相关高斯函数进行的原子精细结构计算”，《化学物理快报》751, 137476 (2020). [38]S. Nasiri、L. Adamowicz 和 S. Bubin，“铍原子能谱和振子强度的基准计算”，《物理与化学参考数据》50 (2021), 10.1063/5.0065282. [39]K. Wang、P. Jönsson、G. Gaigalas、L. Radži¯ut˙e、P. Rynkun、G. Del Zanna 和 C. Y. Chen，“从Cr X到Zn XVI的类磷离子的能级、寿命和跃迁速率：大规模相对论多组态计算”，《天体物理学杂志增刊》235, 27 (2018)。[40]K. Wang、C. X. Song、P. Jönsson、G. D. Zanna、S. Schiffmann、M. Gode- froid、G. Gaigalas、X. H. Zhao、R. Si、C. Y. Chen 和 J. Yan，“用于天体物理学的大规模多组态狄拉克-哈特里-福克计算原子数据基准：从Cr IX到Cu XIV的类硫离子”，《天体物理学杂志增刊》239, 30 (2018)。[41]K. Wang、Z. B. Chen、C. Y. Zhang、R. Si、P. Jönsson、H. Hartman、M. F. Gu、C. Y. Chen 和 J. Yan，“天体物理学原子数据基准：B II至Ne VII之间的类铍离子”，《天体物理学杂志增刊》234, 40 (2018)。[42]K. Wang、C. X. Song、P. Jönsson、J. Ekman、M. Godefroid、C. Y. Zhang、R. Si、X. H. Zhao、C. Y. Chen 和 J. Yan，“用于类硼S XII的跃迁数据的大规模多组态狄拉克-哈特里-福克和相对论组态相互作用计算”，《天体物理学杂志》864, 127 (2018)。

[43]K. Wang、P. Jönsson、G. Del Zanna、M. Godefroid、Z. B. Chen、C. Y. Chen 和 J. Yan，“用于天体物理学的大规模多组态狄拉克-哈特里-福克计算：从Cr VIII到Zn XIV的类氯离子”，《天体物理学杂志增刊》246, 1 (2019)。[44]C. X. Song、K. Wang、G. Del Zanna、P. Jönsson、R. Si、M. Godefroid、G. Gaigalas、L. Radži¯ut˙e、P. Rynkun、X. H. Zhao、J. Yan 和 C. Y. Chen，“用于天体物理学的大规模多组态狄拉克-哈特里-福克计算：从Mn XI到Ni XIV的类磷离子n = 4 能级”，《天体物理学杂志增刊》247, 70 (2020)。[45]X. H. Zhang、G. Del Zanna、K. Wang、P. Rynkun、P. Jönsson、M. Godefroid、G. Gaigalas、L. Radži¯ut˙e、L. H. Ma、R. Si、J. Xiao、Z. B. Chen、J. Yan、Y. Wu 和 C. Y. Chen，“用于天体物理学的多组态狄拉克-哈特里-福克计算基准：从Cr XI到Zn XVII的类硅离子”，《天体物理学杂志增刊》257, 56 (2021)。[46]J. Q. Li、C. Y. Zhang、G. Del Zanna、P. Jönsson、M. Godefroid、G. Gaigalas、P. Rynkun、L. Radži¯ut˙e、K. Wang、R. Si 和 C. Y. Chen，“用于天体物理学的大规模多组态狄拉克-哈特里-福克计算：从O III到Mg VII的类碳离子”，《天体物理学杂志增刊》260, 50 (2022)。[47]R. Si、Y. T. Li、K. Wang、C. Y. Chen、G. Gaigalas、M. Godefroid 和 P. Jönsson，“GRASPG——基于组态态函数生成器的GRASP2018扩展”，Computer Physics Communications 312, 109604 (2025)。[48]P. Jönsson、G. Gaigalas、J. Biero´n、C. Froese Fischer 和 I. Grant，“新版本：Grasp2K相对论原子结构程序包”，Computer Physics Communications 184, 2197–2203 (2013)。[49]C. Froese Fischer、G. Gaigalas、P. Jönsson 和 J. Biero´n，“GRASP2018——通用相对论原子结构程序包的Fortran 95版本”，Computer Physics Communications 237, 184–187 (2019)。[50]Y. Li、J. Li、C. Song、C. Zhang、R. Si、K. Wang、M. Godefroid、G. Gaigalas、P. Jönsson 和 C. Chen，“GRASP的rmcdhf和rci程序的性能测试与改进”，Atoms 11, 12 (2023)。[51]Y. T. Li、K. Wang、R. Si、M. Godefroid、G. Gaigalas、C. Y. Chen 和 P. Jönsson，“降低计算负荷——基于组态态函数生成器的原子多组态计算”，Computer Physics Communications 283, 108562 (2023)。[52]C. Froese Fischer、M. Godefroid、T. Brage、P. Jönsson 和 G. Gaigalas，“ 复杂原子的高级多组态方法：I. 能量和波函数 ”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》49, 182004 (2016)。[53]C. Froese Fischer、P. Jönsson 和 M. Godefroid，“钠的若干双电子性质”，《物理评论A》57, 1753–1758 (1998)。[54]A. Papoulia、J. Ekman、G. Gaigalas、M. Godefroid、S. Gustafsson、H. Hart- man、W. Li、L. Radži¯ut˙e、P. Rynkun、S. Schiffmann、K. Wang 和 P. Jönsson，“多组态计算中涉及里德伯系列的跃迁数据推荐使用库仑规范（速度规范）”，Atoms 7, 106 (2019)。[55]J. Olsen、B. O. Roos、P. Jørgensen 和 H. J. A. Jensen，“适用于完备和受限组态相互作用空间的基于行列式的组态相互作用算法”，《化学物理学杂志》89, 2185–2192 (1988)。[56]L. Sturesson、P. Jönsson 和 C. Froese Fischer，“JJGEN：一种用于生成jj耦合组态态函数列表的灵活程序”，Computer Physics Communications 177, 539–550 (2007)。[57]G. Gaigalas、T. ˇ Zalandauskas 和 Z. Rudzikas，“等效电子壳层的LS-jj变换矩阵”，《原子数据与核数据表》84, 99–190 (2003)。[58]G. Gaigalas、T. ˇ Zalandauskas 和 S. Fritzsche，“由相对论计算得到的原子能级的光谱LSJ标记法”，Computer Physics Communications 157, 239–253 (2004)。[59]G. Gaigalas、C. Froese Fischer、P. Rynkun 和 P. Jönsson，“JJ2LSJ变换与能级的唯一标记”，Atoms 5, 6 (2017)。[60]G. Gaigalas、Z. Rudzikas 和 C. Froese Fischer，“原子结构计算中自旋—角积分的高效处理方法”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》30, 3747 (1997)。[61]J. Olsen、M. R. Godefroid、P. Jönsson、P. Å. Malmqvist 和 C. Froese Fischer，“使用非正交轨道计算原子的跃迁概率”，《物理评论E》52, 4499–4508 (1995)。[62]P. Jönsson 和 C. Froese Fischer，“C III中$2s^2\ {}^1S_0$ - $2s2p\ {}^3P_1$ 互组合跃迁的多组态狄拉克-福克计算”，《物理评论A》57

《物理评论A》57, 4967–4970 (1998). [63]M. Andersson 和 P. Jönsson，“HFSZEEMAN——一款利用 MCDHF 波函数计算弱场和中间场下精细结构与超精细结构塞曼分裂的程序”，Computer P hysics Communications 178, 156 170 2008– ( ). [64]W. Li、J. Grumer、T. Brage 和 P. Jönsson，“Hfszeeman95——一款计算弱磁场和中间磁场下以及超精细结构诱导跃迁率的程序”，Computer Physics Communications 253, 107211 (2020). [65]P. Jönsson、M. Godefroid、G. Gaigalas、J. Ekman、J. Grumer、W. Li、J. Li、T. Brage、I. P. Grant、J. Biero´n 和 C. Froese Fischer，“GRASP中实现的相对论理论导论”，Atoms 11, 7 (2022). [66]C. Nazé、E. Gaidamauskas、G. Gaigalas、M. Godefroid 和 P. Jönsson，“ RIS3：一款用于相对论同位素位移计算的程序”，Computer Physics Communications 184, 2187–2196 (2013). [67]J. Ekman、P. Jönsson、M. Godefroid、C. Nazé、G. Gaigalas 和 J. Biero´n，“ RIS 4：一款用于相对论同位素位移计算的程序”，Computer Physics Communications 235, 433–446 (2019). [68]J. Ekman、P. Jönsson、S. Gustafsson、H. Hartman、G. Gaigalas、M. R. Godefroid 和 C. Froese Fischer，“高精度光谱计算：从 Ar XIII 到 Zn XXV 的碳等电子序列的能量、跃迁速率和朗德g因子”，《天文学与天体物理学》564, A24 (2014). [69]C. Froese Fischer，“理论跃迁数据准确度的评估”，Physica Scripta T134, 014019 (2009). [70]J. Ekman、M. Godefroid 和 H. Hartman，“计算跃迁速率不确定度估计的验证与实施”，Atoms 2, 215 224 2014– ( ). [71]A. Kramida，“原子能级、波长和跃迁概率数据的关键评估”，Fusion Science and Technology 63, 313 323 2013– ( ). [72]A. Kramida，“利用蒙特卡罗随机试验评估理论原子跃迁概率的不确定度”，Atoms 2, 86–122 (2014). [73]A. Kramida，“原子谱线和跃迁概率数据不确定度的评估”，The European Physical Journal D 78 (2024), 10.1140/epjd/s10053-024-00820-y. [74]I. P. Grant，“规范不变性与相对论辐射跃迁”，《物理学杂志B：原子与分子物理》7, 1458–1475 (1974). [75]J. Kaniauskas、I. Kickin 和 Z. Rudzikas，“多电子原子电子跃迁的相对论研究”，Lit. Fiz. Sb. 14, 463–475 (1974). [76]P. Rynkun、S. Banerjee、G. Gaigalas、M. Tanaka、L. Radži¯ut˙e 和 D. Kato，“Ce IV能级和跃迁的理论研究”，《天文学与天体物理学》658, A82 (2022). [77]L. Kitovien˙e、G. Gaigalas、P. Rynkun、M. Tanaka 和 D. Kato，“Ge等电子序列的理论研究”，《物理与化学参考数据》53, 033101 (2024). [78]G. Gaigalas、P. Rynkun、S. Banerjee、M. Tanaka、D. Kato 和 L. Radži¯ut˙e，“Pr IV能级和跃迁的理论研究”，《皇家天文学会月报》517, 281–293 (2022). [79]G. Gaigalas、P. Rynkun、L. Radži¯ut˙e、D. Kato、M. Tanaka 和 P. Jönsson，“Er^{2+}的能级结构和跃迁数据”，《天体物理学杂志增刊》248, 13 (2020). [80]M. K. Chen，“Be束缚态的能量和振子强度”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》31, 4523– 4535 (1998). [81]J. R. Fuhr 和 W. L. Wiese，“铍和硼的原子跃迁概率表”，《物理与化学参考数据》39 (2010), 10.1063/1.3286088. [82]B. Il Nam，《 MCHF/MCDHF数据库》，未发表。可查阅：https://nlte.nist.gov/MCHF/ (2002). [83]M. Chen、K. Cheng 和 W. Johnson，“C III中$2s^2\ {}^1S_0 - 2s2p\ {}^3P_1$ 互组合跃迁的大规模相对论组态相互作用计算”，《物理评论A》64 (2001), 10.1103/phys-reva.64.042507.[84]I. Bergström、J. Bromander、R. Buchta、L. Lundin 和 I. Martinson，“Be I、Be II、B I、B II、C II和C III激发项的平均寿命”，《物理快报A》28, 721–722 (1969年). [85]J. Bromander、R. Buchta 和 L. Lundin，“通过真空紫外区多重态测得的铍、硼和碳激发项的平均寿命”，《物理快报A》29, 523–524 (1969年)。

[86]T. Andersen、K. A. Jessen 和 G. Sørensen，“中性和离子铍、硼物种激发电子态的平均寿命测量”，《物理评论》188, 76–81 (1969年). [87]J. Bromander，“Be、B和C光谱中的寿命和振子强度”，Physica Scripta 4, 61–63 (1971年). [88]T. Andersen、J. R. Roberts 和 G. Sørensen，“Al II和Be I受扰系列激发电子态的平均寿命测量”，Physica Scripta 4, 52–54 (1971年). [89]S. Hontzeas、I. Martinson、P. Erman 和 R. Buchta，“利用束箔研究Be I和Be II的能级与辐射寿命”，Physica Scripta 6, 55–60 (1972年). [90]O. Poulsen、T. Andersen 和 N. J. Skouboe，“快束零场能级交叉测量：离子态和中性铍激发态的辐射寿命、精细结构和超精细结构”，《物理学杂志B：原子与分子物理》8, 1393–1405 (1975年). [91]H. Kerkhoff、M. Schmidt 和 P. Zimmermann，“通过选择性激光激发测量Be I的2s3s ^{3}S和2s3d ^{3}D态的寿命”，《物理快报A》80, 11–13 (1980年). [92]R. E. Irving、M. Henderson、L. J. Curtis、I. Martinson 和 P. Bengtsson，“Be I和B II中2s^2 ^{1}S - 2s2p ^{1}P跃迁的精确跃迁概率”，《加拿大物理学杂志》77, 137–143 (1999年). [93]R. Schnabel 和 M. Kock，“利用非线性时间分辨激光诱导荧光技术测量Be I共振线的f值”，《物理评论A》61 (2000), 10.1103/physreva.61.062506. [94]R. Moccia 和 P. Spizzo，“Be的单光子跃迁概率和光电离截面计算”，《物理学杂志B：原子与分子物理》18, 3537–3554 (1985年). [95]T. N. Chang，“镁和铍束缚激发态的辐射寿命”，《物理评论A》41, 4922–4929 (1990年). [96]C. Froese Fischer、G. Gaigalas 和 M. Godefroid，“类铍序列中的2s^2 ^{1}S$_0$ – 2 3 ^{3} s p P$_1^\circ$互组合线”，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》30, 3333–3342 (1997年). [97]X. Wang、P. Quinet、Q. Li、Q. Yu、Y. Li、Q. Wang、Y. Gong 和 Z. Dai，“Be I若干能级的辐射寿命、分支比和振子强度”，《定量光谱学与辐射传输杂志》212, 112–119 (2018年). [98]S. Schiffmann、T. Brage、P. G. Judge、A. R. Paraschiv 和 K. Wang，“天体物理学相关的朗德g因子原子结构计算及其在太阳日冕磁测量中的直接应用”，《天体物理学杂志》923, 186 (2021年). [99]W. Li、P. Rynkun、L. Radži¯ut˙e、G. Gaigalas、B. Atalay、A. Papoulia、K. Wang、H. Hartman、J. Ekman、T. Brage、C. Y. Chen 和 P. Jönsson，“天体物理学相关离子的朗德g因子多组态狄拉克-哈特里-福克计算：B II、C I-IV、Al I-II、Si I-IV、P II、S II、Cl III、Ar IV、Ca I、Ti II、Zr III和Sn II”，《天文学与天体物理学》639, A25 (2020年). [100]S. J. Wu、B. S. Yan、R. Si、K. Wang 和 C. Y. Chen，“类硅 Kr XXIII的能级、跃迁速率、寿命和朗德g因子计算”，《定量光谱学与辐射传输杂志》316, 108907 (2024年)。

[101]N. J. Stone，“核磁偶极矩和电四极矩：测量及其作为可获取数据的编目”，《物理与化学参考数据杂志》44（2015），10.1063/1.4917489。[102]M. Puchalski、J. Komasa 和 K. Pachucki，“ ^{9}Be 中 2 3P 态的超精细结构及核四极矩”，《物理评论研究》3（2021），10.1103/physrevresearch.3.013293。[103]A. G. Blachman 和 A. Lurio，“4Be^9 亚稳态 (1s^{2}2s2p) ^{3}P 态的超精细结构及核电四极矩”，《物理评论》153，164–176（1967）。[104]S. N. Ray、T. Lee 和 T. P. Das，“铍原子激发态 (1s^{2}2s2p ^{3}P) 磁超精细相互作用的多体理论”，《物理评论A》7，1469–1479（1973）。[105]S. N. Ray、T. Lee 和 T. P. Das，“用多体微扰理论研究铍原子激发态 (2 3P) 中的核四极相互作用”，《物理评论A》8，1748–1752（1973）。[106]D. R. Beck 和 C. A. Nicolaides，“Be⁻两个最低束缚态的精细结构和超精细结构及其前两个电离阈值”，《国际量子化学杂志》26，467–481（1984）。[107]D. Sundholm 和 J. Olsen，“关于 Be(^{3}P$_0$) 超精细结构的大规模多组态 Hartree–Fock 计算： ^{9}Be 的核四极矩”，《化学物理快报》177，91–97（1991）。[108]P. Jönsson 和 C. Froese Fischer，“铍、硼和碳低激发态超精细相互作用常数的大规模多组态 Hartree–Fock 计算”，《物理评论A》48，4113–4123（1993）。[109]F. Wang、B. Gou、X. Wu 和 L. Han，“类铍体系低激发态的能量、振子强度和超精细结构”，《现代物理学国际杂志C辑》14，549–560（2003）。[110]C. Chen，“铍原子 1s^{2}2snp ^{3}P (n = 2 – 4) 态的能量、精细结构和超精细结构”，《原子、分子与光物理学杂志》2012，1–6（2012）。[111]W. Sun、P. P. Zhang、P. P. Zhou、S. L. Chen、Z. Q. Zhou、Y. Huang、X. Q. Qi、Z. C. Yan、T. Y. Shi、G. W. F. Drake、Z. X. Zhong、H. Guan 和 K. L. Gao，“采用光学Ramsey技术测量 ^{6}Li$^+$ 的超精细结构和Zemach半径”，《物理评论快报》131（2023），10.1103/physrevlett.131.103002。[112]F. Karpeshin 和 M. Trzhaskovskaya，“超精细结构中 Bohr–Weisskopf效应的理论”，《核物理A》941，66–77（2015）。[113]M. Wang、W. Huang、F. Kondev、G. Audi 和 S. Naimi，“AME 2020原子质量评估（II）。表格、图表和参考文献*”，《中国物理C》45，030003（2021）。[114]I. Angeli 和 K. Marinova，“实验核基态电荷半径表：更新版”，《原子数据与核数据表》99，69–95（2013）。[115]M. Puchalski、K. Pachucki 和 J. Komasa，“铍原子的同位素位移”，《物理评论A》89（2014），10.1103/physreva.89.012506。[116]J. Wen、J. C. Travis、T. B. Lucatorto、B. C. Johnson 和 C. W. Clark，“测量铍中双光子跃迁的同位素位移”，《物理评论A》37，4207–4212（1988）。[117]K. T. Chung 和 X. W. Zhu，“铍原子 1s^{2}2snl 激发态的能量、精细结构和同位素位移”，《物理评论A》48，1944–1954（1993）。