

Relativistic Configuration Interaction Calculations for the K-Alpha X-Ray of Zinc

Yao Zang, Feng Hu

School of Mathematic and Physical Science, Xuzhou Institute of Technology, Xuzhou
Email: hufengscu@139.com

Received: Dec. 10th, 2013; revised: Dec. 31st, 2013; accepted: Jan. 10th, 2014

Copyright © 2014 Yao Zang, Feng Hu. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited. In accordance of the Creative Commons Attribution License all Copyrights © 2014 are reserved for Hans and the owner of the intellectual property Yao Zang, Feng Hu. All Copyright © 2014 are guarded by law and by Hans as a guardian.

Abstract: Relativistic configuration interaction calculations with the inclusion of Breit interaction, quantum electrodynamics and finite nuclear mass corrections have been carried out in the extended optimal level scheme using multi-configuration Dirac-Fock wavefunctions on the wavelengths, electric dipole transition rates and oscillator strengths of Zinc. Through the use of the active space method, the calculated values are compared with the other available data on He-like and Be-like zinc and are found to be in very good agreement with them. In this paper, we give accurate transition properties from Zn XXI through Zn XXIX. These data provide reference value for level lifetime, charge state distribution and average charge of zinc plasmas.

Keywords: Configuration Interaction; Wavelength; Energy Level; Oscillator Strength

锌 K-Alpha X 射线组态互相作用计算

臧 瑶, 胡 峰

徐州工程学院, 数学与物理科学学院, 徐州
Email: hufengscu@139.com

收稿日期: 2013 年 12 月 10 日; 修回日期: 2013 年 12 月 31 日; 录用日期: 2014 年 1 月 10 日

摘 要: 采用结合包含 Breit 相互作用、量子动力学效应和有限核质量修正的相对论的组态相互作用的方法以及多组态 Dirac-Fock 方法的能级优化法来计算锌离子的波长、电偶极跃迁速率以及振子强度。利用活动空间扩大法, 计算出的类氦和类铍的数据与实验数据符合很好。在此基础上本文给出了准确的锌离子类氦到类氟的跃迁特性。这些数据可以给锌等离子体的能级寿命、布居分布以及平均电荷提供参考。

关键词: 态相互作用; 波长; 能级; 振子强度

1. 引言

锌原子以及离子的激发态辐射寿命以及跃迁几率是天体物理研究的重要内容, 例如太阳内部或者尾部的化学组成^[1]。同样这些参数在低温等离子体的研究中也非常重要, 这是因为锌被用做是包括金属蒸气激光器在内的不同光源的触发媒质^[2]。

在惯性约束聚变(ICF)和高能量密度物理当中, X 射线光谱是非常重要诊断手段之一^[3-5]。通过测量 X 射线光谱可以推断出靶压缩区域密度, 从而达到研究惯性约束聚变核爆靶的目的。高质量的 X 射线辐射数据取决于背光靶的光子能力。最近 Barrios 等人^[6]用可分辨的和大规模的 X 射线测量仪给出靶的激光到 X

射线的转化效率。在实验中，他们测量了类氦的共振跃迁 $1s^2-1s2p(^1P)$ 、互组合线跃迁 $1s^2-1s2p(^3P)$ 以及它们的伴线跃迁 $1s^2(2s,2p)l-1s2p(2s,2p)l$ ，其中的 $l = 1, 2, 3$ ，也即测量了类锂、类铍和类硼跃迁。

虽然在很多科学应用当中，高离化态锌的锌精准的跃迁数据都是非常重要的，但是系统的关于锌的 $K\alpha X$ 射线计算仍然是缺失的，尤其是类氦到类氙的数据。尽管 Barrios 等人在文章中给出了类锂、类铍和类硼跃迁数据，但是其数据是以图像形式给出的，不够详细。因此给出详细的研究的就十分必要。因此基于此目的，我们要完善在很多科学应用中都需要精确的此类数据。

在本工作中，我们展示和讨论了在相对论组态相互作用框架下采用多组态 Dirac-Fock 方法得到的锌原子从类氦到类氙离子的跃迁波长、吸收振子强度、跃迁几率和线强度。相对论组态相互作用方法包含 Breit 相互作用、量子动力学效应和有限核质量修正的相对论的组态相互作用。在计算中我们还考虑了相邻的旁观轨道的作用。计算所用的 GraspVU 程序是由美国范德比尔特大学的 Charlotte Froese Fischer 教授和合作者在 Grasp92 程序的基础上修改并扩展而来的^[7-10]。当前计算结果可以填补锌离子 $K\alpha X$ 射线计算数据的空白，这些数据可以给锌等离子体的能级寿命、布居分布以及平均电荷提供参考。

2. 方法

本文所用的多组态 Dirac-Fock 理论(MCDFF)方法在文献^[7-11]中已有详细描述，这里仅作扼要的介绍。在多组态 Dirac-Fock 理论中，一个核电荷数为 Z 、具有 N 个电子的原子或离子体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量为(原子单位)。

$$\hat{H}^{DC} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_D(i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N (\hat{r}_i - \hat{r}_j)^{-1} \quad (1)$$

这里的 \hat{H}_i 是第 i 个电子的 Dirac 哈密顿量，可表示为

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(\hat{r}_i) \quad (2)$$

其中 $V_{nuc}(\hat{r}_i)$ 是核势场， α 和 β 分别是 Dirac 矢量和标量矩阵， \hat{p}_i 是第 i 个电子的动量算符， c 是真空中光速。

在中心场近似下单电子的旋轨波函数可表示为

$$\psi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ iQ_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix} \quad (3)$$

式中 κ 为 Dirac 量子数， $P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 分别为相对论径向波函数的大小分量， $\chi_{\kappa m}$ 为自旋函数。

N 电子体系的组态波函数 $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 是所有单电子旋-轨波函数组成的 N 阶 Slater 行列式波函数 $|\Psi_p\rangle$ 的线性组合，即

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_{rp} |\Psi_p\rangle \quad (4)$$

在 MCDF 方法中，任一原子态 α 的波函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 由具有相同 P 、 J 和 M 量子数的组态波函数， $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 线性组合而成，即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) \Gamma_r(PJM) \quad (5)$$

式中 n_c 是组态波函数的个数， $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数。

对角化由原子波函数(5)式构造的哈密顿矩阵，则可得相关原子态的能量和组态混合系数。对于其他高阶效应，如 Breit 修正和主要的量子电动力学 QED 效应，可作为微扰处理。

3. 结果讨论

当前计算采用的包含多能级的能级优化法，这样可以考虑不同能级的占比。采用 jj 耦合态作为基准态，首先用 Dirac-Fock 方法计算了 $1s2s^12p^m$ and $1s^22s^12p^{m-1}$ 相关的组态能级。随后电子关联效应被加入得到计算中，以使得主要由单激发和双激发产生感兴趣的相关组态(即参考组态)能够在同样的 LS 对称下进行计算。虚轨道的设置主要系统的采用一个一个增加主量子数而不限制轨道角量子数。早期的计算^[12]表明这种处理办法在电子数目小于等于 4 时是行之有效的。对于组态中电子数目大于 4 而言，如果采取双激发组态数目可能会非常庞大，从而使得计算受制于存储的限制而不能继续进行。然而我们为了解释两种激发在不同主量子数下的差异，我们采用多组态 Dirac-Fock 方法计算 $1s2p$ 和 $1s^2$ 的能级值，在此计算中，我们考虑了主量子数扩展到 $n = 8$ 时所产生的所以轨道。当 $n = 8$ 时，单激发产生的组态数目为 122，而双激发产生的组态数目却高达 1424。

表 1 展示了类氦实验值^[13]以及随多组态的活动轨道增加的计算值。表中第二栏展示的是计算当中每一步扩展轨道最大主量子数。从表 1 可以出，双激发的量子数扩展到了 $n = 8$ ，而对于单激发，量子数也扩展到且限制 $n = 8$ 。对于双激发，最大的偏差只有 2870 cm^{-1} ，大概比实验值小 0.003%，而对于单激发，最大偏差达到了 $14,557 \text{ cm}^{-1}$ 。当前计算表明，主量子数目扩展到 $n = 6$ 和 $n = 8$ 计算值的差异可以忽略不计，这一点也可以从文献[14]得到印证。在那篇文献中，作者指出，双激发的组态数目随活动空间的大小成指数级的增加，这样可以导致软件出现问题。为了保证组态数目在合理的情形，因此在计算中主要考虑单激

发。同样为了保证组态数目合理，在整个计算当中主量子数限制在 $n \leq 6$ 。

为了验证当前模型和确保在此模型基础上的计算是正确的，我们在表 2 列出了类 2 锌离子的跃迁振子强度的比较。我们把多组态和组态相互作用下的长度和速度规范下有关线振子强度的轨道设置增加值记住 n 。在表 2，我们选择了两类跃迁。从表 2 可以看出，两种规范下得出的值非常接近，这也证明了我们当前计算值的准确性。随着 n 值的增加，两种规范符合的更好。同时我们发现长度规范下的计算值通常更加稳定，这是因为在相似区域它们对原子或者离子的优化程序的波函数考虑的更加详细。因此，在当前

Table 1. Energies of the $1s2p(^3P_{2,1,0}$ and $^1P_1)$ terms of zinc(in cm^{-1}) for single and double excitation of the active sets of orbitals
表1. 随活动轨道数目变化的单激发和双激发的锌的 $1s2p(^3P_{2,1,0}$ 和 $^1P_1)$ 能级值

	活动轨道	3P_0	3P_1	3P_2	1P_1
双激发	3	72,159,501	72,180,287	72,409,370	72,572,986
	4	72,161,879	72,182,575	72,411,732	72,574,829
	5	72,162,521	72,183,174	72,412,363	72,575,223
	6	72,163,115	72,183,768	72,412,957	72,575,769
	7	72,163,285	72,183,933	72,413,125	72,575,913
单激发	8	72,163,409	72,184,058	72,413,249	72,576,030
	8	72,151,645	72,172,158	72,401,163	72,564,343
实验值		72,165,900	72,186,600	72,415,600	72,578,900

Table 2. Selected line strengths obtained from MCDF and RCI model. Percent differences were computed according to the formula $[S_v - S_l] \times 100/\max\{S_v, S_l\}$

表2. 多组态Dirac-Fock和组态相互作用下两种跃迁的线强度。不确定度采用公式 $[S_v - S_l] \times 100/\max\{S_v, S_l\}$

跃迁	n	线强度(速度规范)	线强度(长度规范)	不确定(%)
$^3P_1-^1S_0$	3	4.9586(-4)	4.9471(-4)	0.232
	4	4.9522(-4)	4.9414(-4)	0.328
	5	4.9446(-4)	4.9383(-4)	0.127
	6	4.9443(-4)	4.9381(-4)	0.125
	7	4.9441(-4)	4.9380(-4)	0.123
	8	4.9441(-4)	4.9380(-4)	0.123
$^1P_1-^1S_0$	3	3.0369(-3)	3.0207(-3)	0.533
	4	3.0235(-3)	3.0123(-3)	0.370
	5	3.0179(-3)	3.0074(-3)	0.348
	6	3.0166(-3)	3.0066(-3)	0.331
	7	3.0128(-3)	3.0057(-3)	0.235
	8	3.0126(-3)	3.0055(-3)	0.235

的计算中, 我们都将采用长度规范。

为了检验当前计算的真实性, 我们把当前计算得到的类氦到类锂的锌离子的跃迁值与 GRASP²^[15]以及其他实验和理论值进行了比较。当前计算得到的波长与实验值^[16-18]吻合很好。然而通过表 3 详细的比较之

Table 3. Comparisons between our calculated values and the experimental values for He-like and Li-like zinc
表3. 类氦、类锂锌离子的当前计算值与实验值的比较

电偶极跃迁	波长(Å)	跃迁几率(s ⁻¹)	振子强度
1s2p-1s ²			
³ P ₁ - ¹ S ₀	1.3853(0) ^a	1.2534(14) ^a	1.0819(-1) ^a
	1.3857(0) ^b	1.2503(14) ^b	1.0798(-1) ^b
	1.3853(0) ^c	1.251(14) ^c	1.080(-1) ^c
		1.258(14) ^d	
¹ P ₁ - ¹ S ₀	1.3778(0) ^a	7.7597(14) ^a	6.6258(-1) ^a
	1.3782(0) ^b	7.9099(14) ^b	6.7572(-1) ^b
	1.3778(0) ^c	7.763(14) ^c	6.629(-1) ^c
		7.747(14) ^d	
1s2s2p-1s ² 2s			
⁴ P _{1/2} - ² S _{1/2}	1.3954(0) ^a	1.7505(13) ^a	1.0221(-2) ^a
	1.3969(0) ^b	1.8901(13) ^b	1.1059(-2) ^b
	1.3953(0)		
⁴ P _{3/2} - ² S _{1/2}	1.3945(0) ^a	5.9739(13) ^a	6.9666(-2) ^a
	1.3960(0) ^b	6.0531(13) ^b	7.0732(-2) ^b
	1.3943(0) ^c		
⁽³ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	1.3850(0) ^a	8.1909(14) ^a	9.4428(-1) ^a
	1.3868(0) ^b	8.1625(14) ^b	9.4134(-1) ^b
	1.3848(0) ^c		
⁽³ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	1.3824(0) ^a	4.0112(14) ^a	2.2987(-1) ^a
	1.3837(0) ^b	4.1978(14) ^b	2.4098(-1) ^b
	1.3823(0) ^c		
⁽¹ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	1.3817(0) ^a	1.2415(14) ^a	1.4325(-2) ^a
	1.3835(0) ^b	1.3236(13) ^b	1.5193(-2) ^b
	1.3816(0) ^c		
⁽¹ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	1.3879(0) ^a	4.6128(14) ^a	2.6646(-1) ^a
	1.3903(0) ^b	4.5132(14) ^b	2.6158(-1) ^b
	1.3878(0) ^c		

a, 当前 GRASP² 计算值; b, 当前 GRASP² 计算值; c, 文献[16]; d, 文献[17], e, 文献[18]。

后, 我们发现用 GASP² 计算得到的值要比用 GRASP² 计算得到的值更加精确, 却更加与实验值接近。当前 GASP² 计算得到的值与实验值的最大偏差只有 0.007%, 而 GRASP² 计算值与实验值最大偏差达到了 0.181%。这是因为在 GRASP² 计算中, 采用平均能级优化方法。相比较在 GRASP² 计算中只优化一个轨道而言, GASP² 计算可以同时优化所以同一布居的轨道, 这是两种计算方法最大的差别, 也是结果有偏差最主要的原因。同时在 GASP² 计算中, 程序首先计算低阶的本征值和能级。在随后优化过程中, 加入了全空间的 Breit 相互作用, 且对低阶的本征值和能级进行对角化矩阵运算。最后, 在计算中我们考虑了量子动力学效应。这里量子动力学效应主要包含两个部分, 其中最主要的是自能, 其次是真空极化。我们在图 1、2 中展示了类氦到类氦的跃迁初末态中 Breit 相互作用以及量子动力学效应对组态能级的影响。从图可以看出, Breit 相互作用以及量子动力学效应是修正的主要部分, 而自能又是量子动力学效应的主要部分。随着初末态电子数目的增加, Breit 对于能量的修正显得越来越明显, 而自能改变很少, 真空极化几乎不变化。从两幅图, 我们得出这样的结论, 就是随着电离态的减少, 尤其是中性原子而言, Breit 相互作用将显著增强。这可以用以下的内容来解释, 相比于高离化态离子, 低离化度原子和中性原子的核电荷数与核外电子数目相当, 核外电子和核的相互作用限制增强, 也即电子关联作用显得更加重要。

基于上述模型, 我们在附录中给出了锌原子类氦到类氦的 K α X 射线的长度规范下的跃迁波长, 跃迁几率, 吸收振子强度以及两种规范值的比。尽管要全部检验本文报道的计算值是不可能的, 但是表 3 中锌离子类氦和类锂的数据值与早期的理论值^[17,18]和实验值^[16]吻合的情形可以看做是当前计算准确性的检验。

4. 结论

为了满足在各种科学应用中需要非常精确跃迁数据的需要, 采用多组态 Dirac-Fock 方法的能级优化法计算了锌原子从类氦到类氦离子的跃迁波长、吸收振子强度、跃迁几率和线强度。同时我们发现随活动空间的增加长度规范下的计算值更加稳定。这些数据可以给锌等离子体的能级寿命、布居分布以及平均电

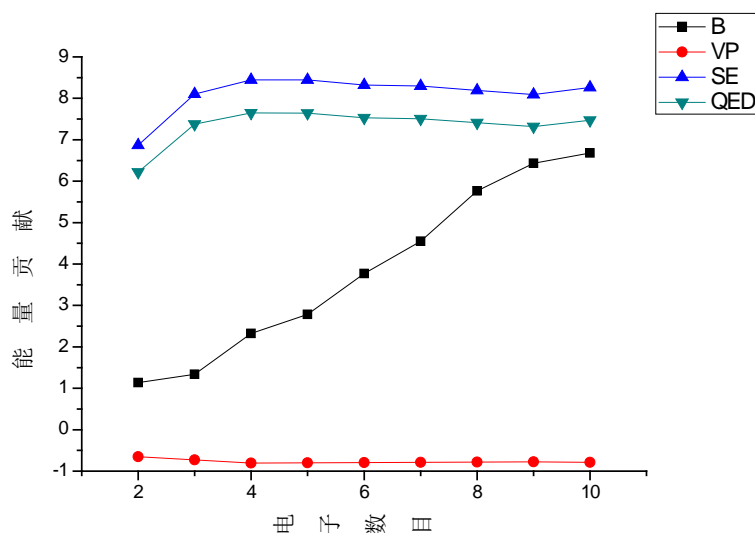


Figure 1. Contributions from Breit interaction (B), self-energy (SE), vacuum polarization (V) to the final the weighted sum of configurations from Zn XXIX through Zn XXI

图1. Breit相互作用(B)、自能(SE)和真空极化(V)锌原子对类氩到类氟末态的贡献

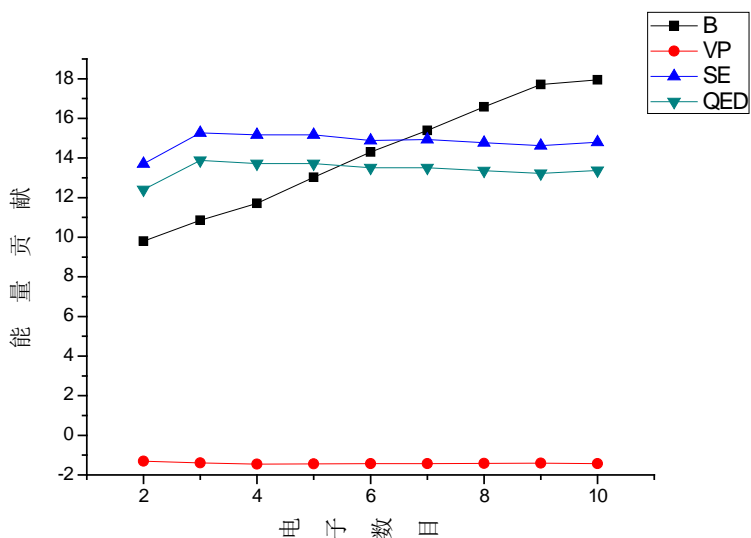


Figure 2. Contributions from Breit interaction (B), self-energy (SE), vacuum polarization (V) to the initial the weighted sum of configurations from Zn XXIX through Zn XXI

图2. Breit相互作用(B)、自能(SE)和真空极化(V)锌原子对类氩到类氟初态的贡献

荷提供参考。同时也可以指导未来设计的实验以及检验其他理论计算结果。

基金项目

国家自然科学基金(11304266)的资助。

参考文献 (References)

[1] Morton, D.C. (1991) Atomic data for resonance absorption lines. I—Wavelengths longward of the Lyman limit. *Astrophysical Journal Supplement Series*, **77**, 119-202.

[2] Little, Ch.E. (1999) Metal vapor lasers, physics, engineering and applications. John Wiley & Sons, Chichester-New York-Weinheim-Singapore-Toronto.

[3] Davidson, S.J., Foster, J.M., Smith, C.C., Warburton, K.A. and Rose, S.J. (1988) Investigation of the opacity of hot, dense aluminum in the region of its K edge. *Applied Physics Letters*, **52**, 847-849.

[4] Hawreliak, J., Lorenzana, H.E., Remington, B.A. and Wark, J.S. (2007) Nanosecond x-Ray diffraction from polycrystalline and amorphous materials in a pinhole camera geometry suitable for laser shock compression experiments. *Review of Scientific Instruments*, **78**, 083908.

[5] Maddox, B.R., Park, H.-S., Hawreliak, J., Elsholz, A., Van Maren, R., Remington, B.A., Comley, A. and Wark, J.S. (2010) Bragg diffraction using a 100 ps 17.5 keV x-ray backlighter and the Bragg diffraction imager. *Review of Scientific Instruments*, **81**,

- 10E522.
- [6] Barrios, M.A., Fournier, K.B., Regan, S.P., Landen, O., May, M., Opachich, Y.P., Widmann, K., Bradley, D.K. and Collins, G.W. (2013) Backlighter development at the National Ignition Facility (NIF): Zinc to zirconium. *High Energy Density Physics*, **9**, 626-634.
- [7] Dylla, K.G., Grant, I.P., Johnson, C.T., Parpia, F.A. and Plummer, E.P. (1989) GRASP: A general-purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications*, **55**, 425-456.
- [8] Parpia, F.A., Fischer, C.F. and Grant, I.P. (1996) GRASP92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations. *Computer Physics Communications*, **94**, 249-271.
- [9] Stathopoulos, A. and Fischer, C.F. (1994) A Davidson program for finding a few selected extreme eigenpairs of a large, sparse, real, symmetric matrix. *Computer Physics Communications*, **79**, 268-290.
- [10] Olsen, J., Godefroid, M.R., Jonsson, P.A., Malmquist, P.A. and Fischer, C.F. (1995) Transition probability calculations for atoms using nonorthogonal orbitals. *Physical Review E*, **52**, 4499-4508.
- [11] Hu, F., Yang, J.M., Wang, C.K., Jing, L.F., Chen, S.B., Jiang, G., Liu, H. and Hao, L.H. (2011) Multiconfiguration Dirac-Fock calculations on multi-valence-electron systems: Benchmarks on Ga-like ions. *Physical Review A*, **84**, 042506.
- [12] Mulye, Y.G. and Natarajan, L. (2004) Systematic studies on the Inter-combination lines of He-like to O-like argon. *Physica Scripta*, **69**, 24-29.
- [13] Sugar, J. and Musgrove, A. (1995) Energy levels of Zinc, Zn I through Zn XXX. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **24**, 1803-1827.
- [14] Natarajan, L. (2002) Spin-forbidden electric dipole transitions of highly ionized argon. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **35**, 3179-3190.
- [15] Norrington, P.H. (2002) DARC, the Dirac atomic R-matrix codes. <http://www.am.qub.ac.uk>
- [16] Johnson, W.R., Plante, D.R. and Sapirstein, J. (1995) Relativistic calculations of transition amplitudes in the helium isoelectronic sequence. *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **35**, 255-329.
- [17] Andreev, O.Y., Labzowsky, L.N. and Plunien, G. (2009) QED calculation of transition probabilities in two-electron ions. *Physical Review A*, **79**, 032515.
- [18] Yerokhin, V.A. and Surzhykov, A. (2012) Relativistic configuration-interaction calculation of energy levels of core-excited states in lithium like ions: Argon through krypton. *Physical Review A*, **86**, 042507.

附录

 类氦到类氩的锌离子的 $K\alpha$ X 射线波长, 跃迁几率, 振子强度以及两种规范的之比。

跃迁	波长(Å)	跃迁几率(s^{-1})	振子强度	两种规范之比
1s2p-1s ²				
³ P ₁ - ¹ S ₀	1.3853(0)	1.2534(14)	1.0819(-1)	1.004
¹ P ₁ - ¹ S ₀	1.3778(0)	7.7597(14)	6.6258(-1)	1.002
1s2s2p-1s ² 2s				
⁴ P _{1/2} - ² S _{1/2}	1.3954(0)	1.7505(13)	1.0221(-2)	1.004
⁴ P _{3/2} - ² S _{1/2}	1.3945(0)	5.9739(13)	6.9666(-2)	1.003
(¹ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	1.3879(0)	4.6128(14)	2.6646(-1)	1.003
(³ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	1.3850(0)	8.1909(14)	9.4428(-1)	1.002
(³ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	1.3824 (0)	4.0112(14)	2.2987(-1)	1.002
(¹ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	1.3817(0)	1.2415(13)	1.4325(-2)	1.003
1s2s ² 2p-1s ² 2s ²				
³ P ₁ - ¹ S ₀	1.3987(0)	1.1762(14)	1.0349(-1)	0.990
¹ P ₁ - ¹ S ₀	1.3913(0)	7.5251(14)	6.5517(-1)	0.987
1s2s ² 2p ² -1s ² 2s ² 2p				
⁴ P _{1/2} - ² P _{1/2}	1.4067(0)	1.0487(14)	6.2222(-2)	0.981
² P _{3/2} - ² P _{1/2}	1.3944(0)	4.6721(12)	5.4472(-3)	0.975
² P _{1/2} - ² P _{1/2}	1.3997(0)	8.7278(14)	5.1268(-1)	0.981
⁴ P _{3/2} - ² P _{1/2}	1.4038(0)	1.6462(11)	1.9454(-4)	0.988
² D _{3/2} - ² P _{1/2}	1.3993(0)	5.5015(14)	6.4597(-1)	0.982
² S _{1/2} - ² P _{1/2}	1.3924(0)	2.2570(12)	1.3120(-3)	0.955
⁴ P _{1/2} - ² P _{3/2}	1.4112(0)	1.1893(12)	7.1012(-4)	0.964
² P _{3/2} - ² P _{3/2}	1.3988(0)	9.7818(14)	1.1477(0)	0.980
⁴ P _{5/2} - ² P _{3/2}	1.4069(0)	1.0778(14)	1.9189(-1)	0.983
² P _{1/2} - ² P _{3/2}	1.4041(0)	2.2183(14)	1.3113(-1)	0.982
⁴ P _{3/2} - ² P _{3/2}	1.4082(0)	2.9998(13)	3.5675(-2)	0.982
² D _{5/2} - ² P _{3/2}	1.4014(0)	3.1372(14)	5.5423(-1)	0.982
² D _{3/2} - ² P _{3/2}	1.3968(0)	4.7709(14)	1.2752(-1)	0.980
² S _{1/2} - ² P _{3/2}	1.6111(0)	3.4609(14)	2.7907(-1)	0.978
1s2s ² 2p ³ -1s ² 2s ² 2p ²				
³ S ₁ - ³ P ₀	1.4035(0)	1.5080(13)	1.3361(-2)	0.974
³ D ₁ - ³ P ₀	1.4071(0)	5.1941(14)	4.6250(-1)	0.980
³ P ₁ - ³ P ₀	1.4012(0)	2.7251(11)	2.4062(-4)	0.929
¹ P ₁ - ³ P ₀	1.3961(0)	6.6021(9)	5.7872(-6)	0.890
⁵ S ₂ - ³ P ₁	1.4145(0)	4.3517(13)	6.5263(-2)	0.980

锌 K-Alpha X 射线组态互相作用计算

续表

$^3S_1-^3P_1$	1.4065(0)	7.5372(14)	6.706(-1)	0.979
$^1D_2-^3P_1$	1.4050(0)	4.0141(14)	1.1874(-1)	0.977
$^3D_1-^3P_1$	1.4101(0)	2.3160(13)	2.0711(-2)	0.974
$^3P_0-^3P_1$	1.4050(0)	2.0765(13)	3.0725(-2)	0.982
$^3D_2-^3P_1$	1.4089(0)	3.3680(14)	5.0111(-1)	0.980
$^3P_1-^3P_1$	1.4041(0)	2.3778(13)	2.1085(-2)	0.977
$^3P_2-^3P_1$	1.4013(0)	3.7690(12)	5.5474(-3)	0.967
$^1P_1-^3P_1$	1.3990(0)	2.7061(12)	2.3821(-3)	0.975
$^5S_2-^3P_2$	1.4157(0)	3.2218(13)	4.8402(-2)	0.978
$^3S_1-^3P_2$	1.4078(0)	2.7929(14)	2.4893(-1)	0.978
$^3P_0-^3P_2$	1.4062(0)	6.4855(14)	9.6134(-1)	0.979
$^3D_3-^3P_2$	1.4090(0)	2.5337(14)	5.2789(-1)	0.981
$^3D_1-^3P_2$	1.4113(0)	1.7349(14)	1.5541(-1)	0.978
$^3D_2-^3P_2$	1.4101(0)	2.0085(13)	2.9936(-2)	0.977
$^3P_1-^3P_2$	1.4054(0)	4.7536(14)	4.2224(-1)	0.977
$^3P_2-^3P_2$	1.4025(0)	3.9968(10)	5.8930(-5)	0.887
$^1P_1-^3P_2$	1.4002(0)	5.6294(11)	4.9640(-4)	0.943
$^5S_2-^1D_2$	1.4200(0)	7.5811(11)	1.1459(-3)	0.970
$^3S_1-^1D_2$	1.4120(0)	1.1692(14)	1.0485(-1)	0.979
$^3P_0-^1D_2$	1.4105(0)	2.1126(14)	3.1505(-1)	0.980
$^3D_3-^1D_2$	1.4133(0)	1.5264(14)	3.1996(-1)	0.981
$^3D_1-^1D_2$	1.4156(0)	3.2602(12)	2.9382(-3)	0.965
$^3D_2-^1D_2$	1.4144(0)	4.4675(13)	6.6991(-2)	0.982
$^3P_1-^1D_2$	1.4096(0)	6.9641(12)	6.2234(-3)	0.982
$^3P_2-^1D_2$	1.4067(0)	6.5594(14)	9.7296(-1)	0.978
$^1P_1-^1D_2$	1.4045(0)	6.9558(14)	6.1706(-1)	0.976
$^3S_1-^1S_0$	1.4159(0)	1.5026(10)	1.3548(-5)	1.068
$^3D_1-^1S_0$	1.4195(0)	5.5792(10)	5.0560(-5)	1.062
$^3P_1-^1S_0$	1.4135(0)	1.2140(14)	1.0908(-1)	0.981
$^1P_1-^1S_0$	1.4083(0)	4.1784(14)	3.7271(-1)	0.980
$1s2s^22p^4-1s^22s^22p^3$				
$^4P_{5/2}-^4S_{3/2}$	1.4136(0)	3.0704(14)	5.5189(-1)	0.973
$^4P_{3/2}-^4S_{3/2}$	1.4112(0)	4.9343(14)	5.8929(-1)	0.972
$^4P_{1/2}-^4S_{3/2}$	1.4106(0)	3.8707(14)	2.3091(-1)	0.971
$^2D_{3/2}-^4S_{3/2}$	1.4080(0)	9.2036(12)	1.0942(-2)	0.974
$^2D_{5/2}-^4S_{3/2}$	1.4063(0)	1.5142(12)	2.6935(-3)	0.957
$^2P_{1/2}-^4S_{3/2}$	1.4055(0)	1.4130(12)	8.3685(-4)	0.949

锌 K-Alpha X 射线组态互相作用计算

续表

$^2P_{3/2}-^4S_{3/2}$	1.4050(0)	4.9983(12)	5.9165(-3)	0.972
$^2S_{1/2}-^4S_{3/2}$	1.3999(0)	7.3392(10)	4.3123(-5)	0.975
$^4P_{5/2}-^2D_{3/2}$	1.4174(0)	6.9816(13)	1.2617(-1)	0.972
$^4P_{3/2}-^2D_{3/2}$	1.4150(0)	4.7170(13)	5.6637(-2)	0.972
$^4P_{1/2}-^2D_{3/2}$	1.4143(0)	5.0394(12)	3.0225(-3)	0.976
$^2D_{3/2}-^2D_{3/2}$	1.4118(0)	7.1867(14)	8.5900(-1)	0.972
$^2D_{5/2}-^2D_{3/2}$	1.4100(0)	6.4512(12)	1.1537(-2)	0.977
$^2P_{1/2}-^2D_{3/2}$	1.4092(0)	5.5891(14)	3.3280(-1)	0.969
$^2P_{3/2}-^2D_{3/2}$	1.4087(0)	4.5847(12)	5.4560(-3)	0.972
$^2S_{1/2}-^2D_{3/2}$	1.4036(0)	4.8149(12)	2.8442(-3)	0.961
$^4P_{5/2}-^2D_{5/2}$	1.4188(0)	5.6265(13)	1.0188(-1)	0.973
$^4P_{3/2}-^2D_{5/2}$	1.4164(0)	8.1732(13)	9.8329(-2)	0.970
$^2D_{3/2}-^2D_{5/2}$	1.4132(0)	1.3741(14)	1.6456(-1)	0.969
$^2D_{5/2}-^2D_{5/2}$	1.4114(0)	4.9027(14)	8.7853(-1)	0.971
$^2P_{3/2}-^2D_{5/2}$	1.4101(0)	7.1849(14)	8.5670(-1)	0.970
$^4P_{3/2}-^2P_{1/2}$	1.4189(0)	6.1974(11)	7.4823(-4)	0.982
$^4P_{1/2}-^2P_{1/2}$	1.4182(0)	8.3435(13)	5.0319(-2)	0.971
$^2D_{3/2}-^2P_{1/2}$	1.4157(0)	6.5370(12)	7.8565(-3)	0.978
$^2P_{1/2}-^2P_{1/2}$	1.4131(0)	5.6882(14)	3.4057(-1)	0.972
$^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$	1.4126(0)	2.5084(14)	3.0015(-1)	0.974
$^2S_{1/2}-^2P_{1/2}$	1.4074(0)	2.0476(12)	1.2161(-3)	0.947
$^4P_{5/2}-^2P_{3/2}$	1.4242(0)	9.200(10)	1.6786(-4)	0.941
$^4P_{3/2}-^2P_{3/2}$	1.4218(0)	2.6215(12)	3.1778(-3)	0.961
$^4P_{1/2}-^2P_{3/2}$	1.4211(0)	4.6666(12)	2.8257(-3)	0.967
$^2D_{3/2}-^2P_{3/2}$	1.4185(0)	3.5859(13)	4.3271(-2)	0.977
$^2D_{5/2}-^2P_{3/2}$	1.4168(0)	2.4492(14)	4.4220(-1)	0.974
$^2P_{1/2}-^2P_{3/2}$	1.4159(0)	1.5303(14)	9.1988(-2)	0.972
$^2P_{3/2}-^2P_{3/2}$	1.4154(0)	2.1445(14)	2.5764(-1)	0.973
$^2S_{1/2}-^2P_{3/2}$	1.4103(0)	9.5859(14)	5.7163(-1)	0.970
$1s2s^22p^5-1s^22s^22p^4$				
$^3P_2-^3P_2$	1.4216(0)	4.7746(14)	7.2324(-1)	0.974
$^3P_1-^3P_2$	1.4197(0)	4.3586(14)	3.9512(-1)	0.973
$^1P_1-^3P_2$	1.4153(0)	6.4215(12)	5.7848(-3)	0.969
$^3P_1-^3P_0$	1.4222(0)	2.4817(14)	2.2576(-1)	0.975
$^1P_1-^3P_0$	1.4177(0)	5.8343(8)	5.2740(-7)	0.389
$^3P_2-^3P_1$	1.4251(0)	1.9010(14)	2.8942(-1)	0.975
$^3P_1-^3P_1$	1.4233(0)	1.3390(14)	1.2200(-1)	0.974

锌 K-Alpha X 射线组态互相作用计算

续表

$^1P_1-^3P_1$	1.4188(0)	5.3223(13)	4.8187(-2)	0.973
$^3P_0-^3P_1$	1.4202(0)	7.4266(14)	2.2457(-1)	0.973
$^3P_2-^1D_2$	1.4270(0)	8.3793(13)	1.2790(-1)	0.975
$^3P_1-^1D_2$	1.4252(0)	1.4515(14)	1.3260(-1)	0.973
$^1P_1-^1D_2$	1.4207(0)	9.6762(14)	8.7834(-1)	0.972
$^3P_1-^1S_0$	1.4307(0)	1.5450(10)	1.4224(-5)	0.789
$^1P_1-^1S_0$	1.4262(0)	2.5232(14)	2.3083(-1)	0.977
$1s2s^22p^6-1s^22s^22p^5$				
$^2S_{1/2}-^2P_{3/2}$	1.4274(0)	7.1356(14)	4.3594(-1)	0.970
$^2S_{1/2}-^2P_{1/2}$	1.4314(0)	3.6635(14)	2.2507(-1)	0.971
$1s2s^22p^63s-1s^22s^22p^53s$				
$^3S_1-^3P_2$	1.4286(0)	5.9166(14)	5.4309(-1)	0.969
$^3S_1-^3P_1$	1.4328(0)	2.1521(14)	1.9871(-1)	0.970
$^1S_0-^3P_1$	1.4317(0)	4.4818(14)	1.3773(-1)	0.969
$^3S_1-^3P_0$	1.4326(0)	1.2154(14)	1.1218(-1)	0.970
$^3S_1-^1P_1$	1.4290(0)	1.4620(14)	1.3428(-1)	0.969
$^1S_0-^1P_1$	1.4279(0)	6.2675(14)	1.9158(-1)	0.968