

539.1 (03)
5458

А. А. РАДЦИГ, Б. М. СМИРНОВ

СПРАВОЧНИК

по атомной и молекулярной физике

Учебник
атомной
и молекулярной
физики
486501



МОСКВА АТОМИЗДАТ 1980

УДК 530.6(083.5)

Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. — М.: Атомиздат, 1980. — 240 с.

Представлены значения параметров, характеризующих строение и свойства атомов, ионов и молекул. Приведенные данные носят справочный характер и включают всестороннюю информацию об атомных частицах — потенциалы ионизации и возбуждения, энергии сродства к электрону и протону, энергии диссоциации, времена жизни возбужденных состояний, силы осцилляторов и т. п. Материал представлен в компактной форме, удобной для использования. Кратко комментируется способ получения приводимых данных, указывается их надежность.

На специалистов-исследователей физических и технических специальностей, имеющих дело с газом или плазмой, а также с объектами, включающими в себя атомы, ионы и молекулы. Может быть полезен аспирантам и студентам старших курсов физических и физико-технических специальностей.

Рис. 26. Табл. 54. Список литературы 96 наименований.

ИБ № 496

**Александр Александрович Радциг
Борис Михайлович Смирнов**

**СПРАВОЧНИК ПО АТОМНОЙ
И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКЕ**

Редактор В. Н. Безрукова

Художественный редактор А. Т. Кирьянов

Переплет художника О. В. Камаева

Технический редактор Н. А. Власова

Корректор Е. В. Журина

Сдано в набор 01.02.79.

Подписано к печати 22.02.80.

Т-03757.

Формат 60×90^{1/16}

Бумага тип № 2

Гарн. шрифта литературная

Печать высокая

Усл. печ. л. 15,0.

Уч.-изд. л. 19.08.

Тираж 10 500 экз.

Зак. тип. 229.

Зак. изд. 76118

Цена 1 р. 20 к.

Атомиздат, 103031 Москва К-31, ул. Жданова, 5

Московская типография № 10 Союзполиграфпрома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли. 113114 Москва М-114, Шлюзовая наб., 10

P 20401-121
034(01)-80 30-79 • 1704070000

© Атомиздат, 19

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящий справочник содержит информацию о структуре и свойствах атомных и молекулярных частиц и о некоторых параметрах их ядер. В него включены данные, которые в той или иной форме привлекаются при исследовании атомных и молекулярных процессов в физике, химии и оптике газа, физике и химии плазмы, физической и радиационной химии, геофизике, астрофизике, физике твердого тела и в целом ряде смежных с ними областей науки и техники.

В практике ученого, предмет исследования которого связан с атомными и молекулярными системами, возникает ситуация, когда ему необходима конкретная информация по параметрам атомов и молекул. Тогда он должен обратиться к соответствующим справочным пособиям, обзорам или оригинальным статьям. Хорошо, если он знает, где можно найти эти параметры, и имеет представление о надежности определения искомых данных. Но может быть и так, что все это выходит за круг непосредственных интересов исследователя: ему нужно знать только значения определенных величин и необходимо, чтобы они были надежными, но ему неважно (а подчас и «неинтересно»), как получена эта информация. Опыт показывает, что для поиска такой информации и, особенно, для оценки ее надежности необходима помощь специалиста. В данном случае, предлагая читателю «Справочник по атомной и молекулярной физике», мы выступаем в роли таких специалистов, отобравших наиболее употребительную информацию по параметрам атомов и молекул с оценкой погрешности приводимых данных.

При написании обзора или монографии, включающих в себя наиболее современные данные, автор всегда стремится к тому, чтобы не потерять какую-то информацию по исследуемой проблеме. Однако подход к использованию имеющейся информации должен быть весьма дифференцированным: определенная ее часть может быть использована для широкого круга задач, но есть и такая, которая была получена «за компанию», и при современном состоянии соседних областей науки она практически мало кого интересует. Учитывая это и рассчитывая на читателя, не связанного в своей практической деятельности с определением парамет-

ров атомных и молекулярных частиц, мы решили построить данный справочник следующим образом.

Во-первых, в тех случаях, когда имеется обширная информация о какой-то величине, мы ограничиваемся простыми и наиболее широко используемыми системами частиц. Это позволило в небольшом по объему издании собрать сведения, охватывающие широкий круг индивидуальных свойств атомных и простых молекулярных частиц, которые наиболее часто используются в практике физиков. Во-вторых, ориентируясь на читателя, которого не интересует способ получения данной информации, во многих случаях мы указываем точность соответствующих числовых характеристик. Введенное в справочнике деление величин по классам точности имеет следующий вид.

Класс точности	Погрешность определения величины, %
<i>A</i>	≤ 1
<i>B</i>	1 — 3
<i>C</i>	3 — 10
<i>D</i>	> 10

В список литературы, прилагаемый к каждому разделу справочника, мы включили только наиболее информативные публикации — обзоры, справочники, монографии и, редко, оригинальные работы, к которым читатель может обратиться для более подробного ознакомления с вопросом. Как правило, не приводится перечень оригинальных статей последнего времени, из которых берется информация, неучтенная в цитируемой обзорной литературе. Кроме того, не указаны способы определения усредненных характеристик и оценки их точности, которые проводились в каждом конкретном случае с учетом имеющейся информации при дополнительном анализе методов их получения. Хотя, такое отношение к приводимой информации непривычно для научной литературы, это согласуется с основной целью справочника — сделать его простым и информативным. Конечно, в таком случае приходится рассчитывать на доверие читателя к авторам.

Несколько слов о материале справочника. Стремясь сделать его более широким для пользования, мы включили в качестве введения сводку фундаментальных физических постоянных и единиц измерения. Это заняло относительно небольшое место в тексте, но, по нашему мнению, будет весьма полезным для данного справочника. Далее, наряду с количественными характеристиками параметров атомов и молекул мы включили в справочник материал, дающий краткое описание строения атома и молекулы и тем самым объясняющий появление некоторых параметров, приводимых далее в таблицах, на диаграммах и графиках. Такой вводный текст рассчитан на читателя, не связанного в своей работе непосредственно с атомной и молекулярной физикой.

Основная информация справочника содержится в его таблицах и графиках. При выборе способов представления данных мы делали основной упор на достижение их информативности и наглядности. Так, силы осцилляторов наиболее сильных оптических переходов в атомах приводятся на соответствующих гротриановских диаграммах переходов в спектре частиц. Это, конечно, вынудило опустить данные для переходов на высоковозбужденные уровни атомных частиц, но одновременно сделало картину оптических переходов между низколежащими уровнями простой и наглядной. Для подробного знакомства с полной схемой наблюдаемых уровней энергии и длин волн переходов читателю придется обратиться к имеющимся таблицам спектральных линий и вероятностей переходов между ними, упомянутым в списке литературы. Аналогичным образом мы старались поступать и в других ситуациях. В частности, мы отказались от таблиц франк-кондоновских факторов — интегралов перекрытия между ядерными волновыми функциями молекул для разных электронных состояний. Порядок величины этих характеристик может быть оценен по простым формулам с использованием параметров молекул, приводимых в справочнике. В то же время включение таблиц этих величин для различных электронно-колебательных состояний потребовало бы заметного увеличения объема книги.

Задумывая данную книгу, мы исходили из того, что подобного рода практические руководства позволяют справиться с огромным потоком новой информации путем ее разумной систематизации. Мы надеемся, что предлагаемый справочник будет полезен для широкого круга исследователей.

ВВЕДЕНИЕ

Глава 1

ЕДИНИЦЫ ИЗМЕРЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

§ 1.1. Системы единиц измерения физических величин

Система единиц измерения образуется совокупностью нескольких условно выбираемых основных единиц и всех прочих производных единиц, связанных определенными зависимостями с основными единицами измерения. Из практических соображений целесообразно строить системы с тремя — шестью основными единицами измерения, к которым предъявляются требования сохранения постоянства, возможности проверки, воспроизведения и восстановления при утрате эталона. По соглашению в качестве основных единиц измерения были установлены следующие [1]:

единица длины — метр (м), содержит 1 650 763,73 длины волн в вакууме спектральной линии излучения изотопа криптона ^{86}Kr , соответствующей переходу электрона с уровня $5d_5$ на уровень $2p_{10}$ (в обозначениях Пашена или, соответственно, между состояниями $4p^5(^2P_3/2)5p \rightarrow 4p^5(^2P_3/2)6d$);

единица массы — килограмм (кг), как масса платино-иридиевого эталона Международной палаты мер и весов (Париж);

единица силы — килограмм-сила (кгс, или кГ, кг *), как вес платино-иридиевого эталона в месте расположения Палаты (Севр, Франция), где ускорение силы тяжести зафиксировано равным $9,80665 \text{ м/с}^2$;

единица времени — секунда (с), равная продолжительности 9 192 631 770,0 периодов излучения, соответствующего переходу между двумя сверхтонкими компонентами основного состояния изотопа цезия ^{133}Cs ;

единица силы тока — ампер (А), представляющий силу неизменяющегося тока, который, проходя по двум параллельным проводникам бесконечной длины и исчезающее малого кругового сечения, расположенным на расстоянии 1 м один от другого в вакууме, вызвал бы между этими проводниками силу, равную $2 \cdot 10^{-7}$ ньютона на каждый метр длины (определение в Международной системе единиц — СИ); при этом точно фиксировано численное значение магнитной постоянной $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$, а электрическая постоянная ϵ_0 определяется равенством $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$, где c — скорость света в вакууме;

единица температуры — кельвин (К) — единица измерения температуры по термодинамической шкале, в которой для

температуры *тройной* точки воды установлено значение 273,16 К (точно);

единица силы света — *кандела* (кд), равная силе света, испускаемого абсолютно черным телом площадью $1/600\,000 \text{ м}^2$ в перпендикулярном направлении при температуре затвердевания платины и давлении $101\,325 \text{ Н/м}^2$;

единица количества вещества — *моль* (моль), определяемый как количество вещества, содержащее столько же структурных элементов (атомов, молекул, ионов и т. п.), сколько атомов содержится в 0,012 кг изотопа углерода ^{12}C .

На основе перечисленных единиц и их десятичных долей были построены основные системы единиц измерения: наиболее удобная для физики гауссова система единиц СГС (см, г, с); вводимая в действие с 01.01.80 в качестве государственного стандарта СССР Международная система единиц (СИ) (м, кг, с, А, К, кд, моль); техническая система единиц МКГСС (м, кгс, с). В табл. 1.1 содержится перечень используемых обозначений единиц измерения физических величин в упомянутых системах; в табл. 1.2 приведен список приставок, употребляемых для образования кратных и дольных единиц измерения. Перевод единиц измерения из одной системы в другую осуществляется с помощью формул разности [1].

Таблица 1.1

Обозначения единиц

Наименование	Обозначение		Наименование	Обозначение	
	русское	международное		русское	международное
Ампер	А	А	Люмен	лм	lm
Ангстрем	Å	Å	Максвелл	Мкс	Mx
Атмосфера (норм.)	атм	atm	Метр	м	m
Барн	б	barn (b)	Миллиметр ртутного столба	мм рт. ст.	mm Hg
Беккерель	Бк	Bq	Минуга	мин	min
Ватт	Вт	W	Моль	моль	mol
Вебер	Вб	Wb	Ньютон	Н	N
Вольт	В	V	Ом	Ом	Ω
Гаусс	Гс	Gs	Паскаль	Па	Pa
Генри	Г	H	Радиан	рад	rad
Герц	Гц	Hz	Рентген	Р	R
Грамм	г	g	Сантиметр	см	cm
Грей	Гр	Gy	Секунда	с	s
Децибел	дБ	dB	Сименс	См	S
Джоуль	Дж	J	Стерадиан	ср	sr
Дина	дин	dyn	Сутки	сут	d
Калория	кал	cal	Тесла	Тл	T
Кандела	кд	cd	Торр	Торр	torr
Кельвин	К	K	Фарад	Ф	F
Килограмм	кг	kg	Час	ч	h
Кулон	Кл	C	Электронвольт	эВ	eV
Кюри	Ки	Ci	Эрг	эрг	erg
Литр	л	l	Эрстед	Э	Oe
Люкс	лк	lx			

Таблица 1.2

Десятичные приставки для образования кратных и дольных единиц измерения

Наименование	Множитель	Обозначение	
		русское	международное
Экса	10^{18}	Э	E
Пета	10^{15}	П	P
Тера	10^{12}	Т	T
Гига	10^9	Г	G
Мега	10^6	М	M
Кило	10^3	к	k
Гекто	10^2	г	h
Дека	10	да	da
Деци	10^{-1}	д	d
Санти	10^{-2}	с	c
Милли	10^{-3}	м	m
Микро	10^{-6}	мк	μ
Нано	10^{-9}	н	n
Пико	10^{-12}	п	p
Фемто	10^{-15}	ф	f
Атто	10^{-18}	а	a

§ 1.2. Фундаментальные физические постоянные

В табл. 1.3 представлены численные значения ряда наиболее широко используемых фундаментальных физических постоянных, выраженные в единицах систем СГС и СИ. Эти значения получены на основе данных бюллетеня CODATA [2], содержащем перечень рекомендуемых согласованных значений постоянных за 1973 г., в число которых включены существенно уточненные значения постоянных Ридберга R_∞ [3] и Авогадро N_A [4], а также основанные на них производные величины.

Таблица 1.3

Значения фундаментальных постоянных

Название	Обозначение, формулa	Мантисса значения	Порядок значения			Погрешность, 10^{-6}
			СИ	СГС	СИ	
Скорость света в вакууме	c	2,99792458	10^{10}	$\text{см} \cdot \text{с}^{-1}$	10^8	0,004
Заряд электрона	e	1,60219 4,80324	10^{-20}	ед. СГСМ ед. СГСЭ	10^{-19}	3 3
Постоянная Планка	$\hbar = h/2\pi$	6,6262 1,05459	10^{-34}	эрг·с эрг·с	10^{-34}	5 5
Постоянная Ридберга	$R_\infty = m_e e^4 / 4\pi \hbar^3 c$	1,09737315	10^5	см^{-1}	10^7	0,003
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = e^2 / \hbar c$	7,29735 1,370360	10^{-3} 10^2	10^{-3} 10^2	10^{14}	0,8 0,8
Соотношение Джозефсона между частотой и напряжением	$2e/h$	4,83594 1,44978	10^{17}	$\text{с}^{-1} \cdot \text{ед. СГСЭ}^{-1}$	$10^{14} \text{ с}^{-1} \cdot \text{В}^{-1}$	3 3
Квант магнитного потока	$\Phi_0 = h/2e$	2,06785	10^{-7}	МкС	10^{-15}	3
Радиус Бора	$a_0 = \alpha/4\pi R_\infty$	5,29177	10^{-9}	см	10^{-11}	0,8
Комptonовская длина волны электрона	$\lambda_C = \lambda_C / 2\pi$	2,42631	10^{-10}	см	10^{-12}	2
Классический радиус электрона	$\tilde{\lambda}_C = \alpha^2 / 2 R_\infty$	3,86159	10^{-11}	см	10^{-13}	2
Число Авогадро	$r_e = \alpha \tilde{\lambda}_C$	2,81794	10^{-13}	см	10^{-15}	2
Атомная единица массы (1/12 часть массы изотопа ^{12}C)	N_A 1 а. е. м. = 10^{-3} кг·моль $^{-1}/N_A$	6,022045 1,66057	10^{23}	моль^{-1}	10^{24}	0,2 0,2
Энергетический эквивалент атомной единицы массы	$E = mc^2$	1,49244 931,50 МэВ	10^{-3}	эрг	10^{-10}	0,2 3

Продолжение табл. 1.3

Наименование	Обозначение, фор-мула	Мантисса значения	Порядок значения		Погрешность, 10^{-6}
			СГС	СИ	
Масса покоя электрона	m_e	9,10953	10^{-28} Г	10^{-31} кг	0,6
Масса покоя протона	m_p	1,67265	10^{-24} Г	10^{-27} кг	0,2
Отношение масс прогона и электрона	m_p/m_e	1,0072765 1,836152	a. е. М. 10^3	a. е. М. 10^3	0,01 0,4
Масса покоя нейтрона	m_n	1,67495	10^{-24} Г	10^{-27} кг	0,2
Удельный заряд электрона	e/m_e	1,0086650 1,75880	a. е. М. 10^{17}	a. е. М. 10 ¹¹ Кл·кг ⁻¹	0,04
Число Фарадея	$F = eN_A$	9,6485 2,89253	10^{14} ед. СГСЭ·Г ⁻¹ дин·с·Г ⁻¹	10^4 Кл·моль ⁻¹ —	3 3
Квант циркуляции	$\hbar/2m_e$	3,63695	—	10^{-4} Дж·с·кг ⁻¹	3
Магнитная постоянная	μ_0	1,2566370	—	10^{-6} Г·м ⁻¹	2
Электрическая постоянная	$\varepsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	8,8541878	—	10^{-12} Ф·м ⁻¹	—
g -Фактор электрона	$g_e/2 = \mu_e/\mu_B$	1,00115966	—	—	0,004
Магнетон Бора*	$\mu_B = e\hbar/2 (c) m_e$	9,2741	10^{-21} эрг·Г ⁻¹	10^{-24} Дж·Т ⁻¹	4
Ядерный магнетон*	$\mu_N = e\hbar/2 (c) m_p$	5,0508	10^{-24} эрг·Г ⁻¹	10^{-27} Дж·Т ⁻¹	4
Магнитный момент электрона	μ_e	9,2848	10^{-21} эрг·Г ⁻¹	10^{-24} Дж·Т ⁻¹	4
Магнитный момент протона	μ_p	1,41062	10^{-23} эрг·Г ⁻¹	10^{-26} Дж·Т ⁻¹	4

* В формулах множитель в круглых скобках используется только в системе единиц СГС.

Продолжение табл. 1.3

Название	Обозначение, фор-мула	Магнитсса значения	Порядок значения		Погрешность, 10^{-6}
			СГС	СИ	
Отношение магнитных моментов электрона и протона	μ_e/μ_p	6,5821069	10 ²	10 ²	0,010
Гравитационная постоянная	G	6,67	10 ⁻⁵ дин·см ² ·г ⁻¹	10 ⁻¹¹ Н·м ² ·кг ⁻¹	600
Универсальная газовая постоянная	R	8,314 1,9859	— —	$\text{Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$ $\text{кал}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$	30 30
Объем моля идеального газа	$V_m = RT_0/p_0$	2,2414	$10^4 \text{ см}^3\cdot\text{моль}^{-1}$	$10^{-2} \text{ м}^3\cdot\text{моль}^{-1}$	30
$(T_0 = 0^\circ\text{C} = 273,15\text{K}; p_0 = 1 \text{ атм})$					
Число Лошмидта — плотность идеального газа	$L_0 = N_A/V_m$	2,6868	10^{19} см^{-3}	10^{13} м^{-3}	30
$(T_0 = 0^\circ\text{C}, p_0 = 1 \text{ атм})$					
Постоянная Больцмана	$k = R/N_A$	1,3807	$10^{-16} \text{ эрг}\cdot\text{К}^{-1}$	$10^{-23} \text{ Дж}\cdot\text{К}^{-1}$	30
Постоянная Стефана	$\sigma = (\pi^2/60) \cdot k^4 / \hbar^3 c^2$	5,670	$10^{-5} \text{ эрг}\cdot\text{с}^{-1}\cdot\text{см}^{-2}\cdot\text{К}^{-4}$	$10^{-8} \text{ Вт}\cdot\text{м}^{-2}\cdot\text{К}^{-4}$	100
Первая радиационная постоянная	$c_1 = 2\pi\hbar c^2$	3,7418	$10^{-5} \text{ эрг}\cdot\text{см}^2\cdot\text{с}^{-1}$	$10^{-16} \text{ Вт}\cdot\text{м}^2$	5
Вторая радиационная постоянная	$c_2 = hc/k$	1,4388	см·К	$10^{-2} \text{ м}\cdot\text{К}$	30
Ускорение силы тяжести					
нормальное (Севр, Франция)	g_0	9,80665	$10^2 \text{ см}\cdot\text{с}^{-2}$	$\text{м}\cdot\text{с}^{-2}$	—
местное — СПА	$g_{(\text{CB})}$	9,801043	$10^2 \text{ см}\cdot\text{с}^{-2}$	$\text{м}\cdot\text{с}^{-2}$	0,02
местное — Англия	$g_{(\text{BFS})}$	9,811818	$10^2 \text{ см}\cdot\text{с}^{-2}$	$\text{м}\cdot\text{с}^{-2}$	0,02

Число приведенных значащих цифр для рассматриваемых численных значений постоянных получено в результате такого их округления, что возможные в дальнейшем уточнения могут изменить лишь последнюю цифру в пределах ± 1 . В последней графе табл. 1.3 указаны погрешности современного определения рассмотренных фундаментальных постоянных.

§ 1.3. Система атомных единиц

Для того чтобы избежать появления слишком большого количества численных множителей в формулах физических законов и определений, относящихся к области атомной физики, прибегают к сокращению числа универсальных постоянных. Этого добиваются, производя сокращение числа основных единиц измерения величин, и тогда многие универсальные постоянные становятся равными либо единице, либо безразмерному постоянному числу. Системы, в которых максимально возможное число универсальных постоянных приравнено единице, называются «естественными системами».

В одной из наиболее употребительных естественных систем — в системе атомных единиц — приравнены единице заряд (e) и масса (m_e) электрона и постоянная Планка (\hbar). Переход в формулах к атомным единицам производится, формально, приравниванием $e=m_e=\hbar=1$. Из этих величин можно построить только одну комбинацию с заданной размерностью, которая и является единицей измерения для искомой величины. В этой системе единиц длины служат $\hbar^2/m_e e^2 \approx 0,529 \cdot 10^{-8}$ см, энергии — $m_e e^4/\hbar^2 \approx 27,212$ эВ и т. п.

Удобство введенной системы единиц состоит в том, что здесь параметры атомных объектов по порядку величины не сильно отличаются от единицы. В табл. 1.4 включены соответствующие атомные единицы измерения и приведены их численные значения в обычных единицах системы СГС и СИ.

§ 1.4. Таблицы переводных множителей

В целях облегчения практических расчетов удобно пользоваться таблицами перевода одних единиц измерения какой-либо величины в другие единицы (табл. 1.5—1.8). Слева в такой таблице расположены единицы измерения, которые нужно выразить в других единицах, а вверху — единицы измерения, через которые они должны быть выражены. При составлении переводных таблиц использовались соотношения, основанные прямо или косвенно на эксперименте, определяющие соотношения и расчеты на основе формул размерности [1]. Численные значения переводных множителей даны с таким числом знаков, чтобы при возможном их уточнении изменение произошло не более чем на единицу в последней значащей цифре. Все значения приведены в системах единиц, употребительных в атомной физике.

Таблица 1.4

Система атомных единиц измерения*

Единица	Обозначение	Значение в системе СГС или СИ
Заряд (заряд электрона)	e	$4,8032 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ = = $1,6022 \cdot 10^{-20}$ ед. СГСМ
Масса (масса электрона)	m_e	$9,1095 \cdot 10^{-28}$ г
Момент количества движения (постоянная Планка/2π)	$\hbar = h/2\pi$	$1,0546 \cdot 10^{-34}$ эрг·с
Длина (боровский радиус)	$a_0 = \hbar^2/m_e e^2$	$5,2918 \cdot 10^{-9}$ см = $0,52918 \text{ \AA}$
Скорость	$v_0 = e^2/\hbar$	$2,1877 \cdot 10^8$ см·с ⁻¹
Импульс	$p_0 = m_e e^2/\hbar$	$1,9929 \cdot 10^{-19}$ г·см·с ⁻¹
Энергия	$\varepsilon_0 = m_e e^4/\hbar^2$	$4,3598 \cdot 10^{-11}$ эрг = = $27,212$ эВ
Время	$\tau_0 = \hbar^3/m_e e^4$	$2,4189 \cdot 10^{-17}$ с
Частота	$\nu_0 = m_e e^4/\hbar^3$	$4,1341 \cdot 10^{16}$ с ⁻¹
Напряженность электрического поля	$E_0 = m^2 e^5/\hbar^4$	$1,7153 \cdot 10^7$ ед. СГСЭ = = $5,1422 \cdot 10^9$ В·см ⁻¹
Сечение рассеяния	$\sigma_0 = a_0^2$	$2,8003 \cdot 10^{-17}$ см ²
Объем	$V_0 = a_0^3$	$1,4818 \cdot 10^{-25}$ см ³ = = $1,4818 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^3$
Плотность числа частиц	$n_0 = a_0^{-3}$	$6,7483 \cdot 10^{24}$ см ⁻³
Константа скорости парного процесса	$k_0 = e^2 a_0^2/\hbar = \hbar^3/m_e^2 e^6$	$6,126 \cdot 10^{-9}$ см ³ ·с ⁻¹
Константа скорости тройного процесса	$\mathcal{K}_0 = e^2 a_0^5/\hbar = \hbar^9/m_e^5 e^8$	$9,078 \cdot 10^{-34}$ см ⁶ ·с ⁻¹
Плотность тока	$j_0 = en_0 v_0 = m^3 e^9/\hbar^7$	$7,0912 \cdot 10^{22}$ ед. СГСЭ = = $2,3654 \cdot 10^{13}$ А·см ⁻²

* В этой системе приравнены единице следующие универсальные постоянные: $e = m_e = \hbar = 1$.

Переводные множители для единиц энергии

Единица измерения	эВ	Дж	эр	ккал/моль
1 эВ*	1	$1,6022 \cdot 10^{-19}$	$1,6022 \cdot 10^{-12}$	23,045
1 Дж	$6,2415 \cdot 10^{18}$	1	10^7	$1,4384 \cdot 10^{20}$
1 эрг	$6,2415 \cdot 10^{11}$	10^{-7}	1	$1,4384 \cdot 10^{13}$
1 ккал/моль**	$4,3393 \cdot 10^{-2}$	$6,9524 \cdot 10^{-21}$	$6,9524 \cdot 10^{-14}$	1
1 см ⁻¹	$1,2398 \cdot 10^{-4}$	$1,9865 \cdot 10^{-23}$	$1,9865 \cdot 10^{-16}$	$2,8573 \cdot 10^{-3}$
1 К	$8,6173 \cdot 10^{-5}$	$1,3806 \cdot 10^{-23}$	$1,3806 \cdot 10^{-16}$	$1,9859 \cdot 10^{-3}$
1 а. е.	27,2116	$4,3598 \cdot 10^{-18}$	$4,3598 \cdot 10^{-11}$	$6,2709 \cdot 10^2$
1 Ру	13,6058	$2,1799 \cdot 10^{-18}$	$2,1799 \cdot 10^{-11}$	$3,1355 \cdot 10^2$

* По формуле Эйнштейна $E=mc^2$ и энергия, соответствующая 1 а. е. м. (1 а. е. м. =

** 1 кал = 4,1868 Дж — механический эквивалент тепла.

Связь между единицами мощности

Единица измерения	эр·с ⁻¹	Вт	кВт	кгс·м·с ⁻¹
1 эрг·с ⁻¹	1	10^{-3}	10^{-10}	$1,0197 \cdot 10^{-8}$
1 Вт	10^3	1	10^{-3}	0,1020
1 кВт	10^{10}	10^3	1	$1,0197 \cdot 10^2$
1 кгс·м·с ⁻¹ **	$9,8066 \cdot 10^7$	9,8066	$9,8066 \cdot 10^{-3}$	1
1 кал·с ⁻¹	$4,1868 \cdot 10^7$	4,1868	$4,1868 \cdot 10^{-3}$	0,4269
1 ккал·ч ⁻¹	$1,163 \cdot 10^7$	1,163	$1,163 \cdot 10^{-3}$	0,1186
1 л. с.	$7,3508 \cdot 10^9$	735,08	$7,3508 \cdot 10^{-1}$	75
1 БТЕ·с ⁻¹	$1,0536 \cdot 10^{10}$	$1,0536 \cdot 10^3$	1,0536	107,5

* БТЕ — Британская тепловая единица.

** Используется значение местного ускорения силы тяжести по данным для Севра, Фран

Связь между единицами давления*

Единица измерения	дин·см ⁻²	Н·м ⁻²	кгс·м ⁻²
1 дин·см ⁻²	1	0,1	$1,0197 \cdot 10^{-2}$
1 Н·м ⁻² (паскаль)	10	1	$1,0197 \cdot 10^{-1}$
1 кгс·м ⁻² (мм вод. ст.)**	$9,807 \cdot 10^1$	9,807	1
1 кгс·см ⁻² (ат)	$9,807 \cdot 10^5$	$9,807 \cdot 10^4$	10^4
1 атм	$1,0132 \cdot 10^6$	$1,0132 \cdot 10^5$	$1,0332 \cdot 10^4$
1 мм рт. ст. (Тор)**	$1,3332 \cdot 10^3$	$1,3332 \cdot 10^2$	13,595

* Используется значение местного ускорения силы тяжести по данным для Севра, Франция;

** Килограмм-сила (кгс) есть сила, сообщающая массе 1 кг нормальное ускорение g_0 .

*** Плотность ртути $\rho_{\text{Hg}}=13,595 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$.

Таблица 1.5

см^{-1}	град	а. е.	Ry
8065,48	11604,5	$3,6749 \cdot 10^{-2}$	$7,3498 \cdot 10^{-2}$
$5,0340 \cdot 10^{22}$	$7,2430 \cdot 10^{22}$	$2,2937 \cdot 10^{17}$	$4,5873 \cdot 10^{17}$
$5,0340 \cdot 10^{15}$	$7,2430 \cdot 10^{15}$	$2,2937 \cdot 10^{10}$	$4,5873 \cdot 10^{10}$
$3,4999 \cdot 10^2$	$5,0356 \cdot 10^2$	$1,5946 \cdot 10^{-3}$	$3,1893 \cdot 10^{-3}$
1	1,4388	$4,5563 \cdot 10^{-6}$	$9,1127 \cdot 10^{-6}$
$6,9502 \cdot 10^{-1}$	1	$3,1668 \cdot 10^{-6}$	$6,3335 \cdot 10^{-6}$
$2,1947 \cdot 10^5$	$3,1578 \cdot 10^5$	1	2
$1,0974 \cdot 10^5$	$1,5789 \cdot 10^5$	0,5	1

$\frac{1}{12} m$ (^{12}C , эквивалентна 931,50 МэВ)).

Таблица 1.6

$\text{кал} \cdot \text{с}^{-1}$	$\text{ккал} \cdot \text{ч}^{-1}$	л. с.	$\text{БТЕ} \cdot \text{с}^{-1}*$
$2,3885 \cdot 10^{-8}$	$8,5985 \cdot 10^{-8}$	$1,3604 \cdot 10^{-10}$	$9,4912 \cdot 10^{-11}$
0,2388	0,8598	$1,3604 \cdot 10^{-3}$	$9,4912 \cdot 10^{-4}$
$2,3885 \cdot 10^3$	$8,5985 \cdot 10^2$	1,3604	0,9491
2,3423	8,4322	$1,33 \cdot 10^{-2}$	$9,3023 \cdot 10^{-3}$
1	3,6	$5,6957 \cdot 10^{-3}$	$3,9738 \cdot 10^{-3}$
0,2778	1	$1,5821 \cdot 10^{-3}$	$1,1038 \cdot 10^{-3}$
175,57	632,05	1	0,6977
251,65	905,94	1,433	1

дия: $g_0 = 9,80665 \text{ м} \cdot \text{с}^{-2}$.

Таблица 1.7

ат	атм	мм рт. ст.
$1,0197 \cdot 10^{-6}$	$9,8693 \cdot 10^{-7}$	$7,5007 \cdot 10^{-4}$
$1,0197 \cdot 10^{-5}$	$9,8693 \cdot 10^{-6}$	$7,5007 \cdot 10^{-3}$
10^{-4}	$9,6785 \cdot 10^{-5}$	$7,3556 \cdot 10^{-2}$
1	$9,6785 \cdot 10^{-1}$	$7,3556 \cdot 10^2$
$1,0332$	1	760
$1,3595 \cdot 10^{-3}$	$1,3158 \cdot 10^{-3}$	1

$g_0 = 9,80665 \text{ м} \cdot \text{с}^{-2}$.

Таблица 1.8

Связь между единицами эффективных поперечных сечений рассеяния

Единица измерения	см^2	\AA^2	a^2_0	πa^2_0	b
1 см^2	1	10^{16}	$3,5711 \cdot 10^{16}$	$1,1367 \cdot 10^{16}$	10^{24}
1 \AA^2	10^{-16}	1	3,5711	1,1367	10^8
1 a^2_0	$2,8003 \cdot 10^{-17}$	$2,8003 \cdot 10^{-1}$	1	$3,1831 \cdot 10^{-1}$	$2,8003 \cdot 10^7$
1 πa^2_0	$8,7973 \cdot 10^{-17}$	$8,7973 \cdot 10^{-1}$	3,1416	1	$8,7973 \cdot 10^7$
1 барн	10^{-24}	10^{-8}	$3,5711 \cdot 10^{-8}$	$1,1367 \cdot 10^{-8}$	1

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сена Л. А. Единицы физических величин и их размерности. 2-е изд. М., «Наука», 1977; Обозначения, единицы измерения и терминология в физике. Документ У. И. Р. 20 (1978).—«Успехи физ. наук», 1979, т. 129, с. 290.
2. CODATA Bull. N 11 (Dec. 1973); Recommended consistent values of the fundamental physical constants (см. пер. «Успехи физ. наук», 1975, т. 115, с. 623).
3. Goldsmith J. E. M., Weber E. W., Hänsch T. W. «Phys. Rev. Lett.», 1978, v. 41, p. 1525.
4. Cohen J. G. Proc. Inter. Scole Physik (E. Fermi). Milan, 1976, p. 94.

Часть I

АТОМ И АТОМНЫЙ ИОН

Глава 2

ИЗОТОПНЫЙ СОСТАВ И АТОМНАЯ МАССА ЭЛЕМЕНТОВ

§ 2.1. Стабильные и долгоживущие радиоактивные изотопы

В следующих двух таблицах представлены параметры ядер элементов с различным изотопным составом. В табл. 2.1 включены данные о стабильных изотопах — их распространенность, спин ядра, магнитный момент, который выражен в единицах ядерных магнетонов $\mu_N = 5,0508 \cdot 10^{-24}$ эрг·Гс⁻¹. В табл. 2.2 сведены характеристики радиоактивных изотопов ядер в основном состоянии, период полураспада $T_{1/2}$ которых превышает период полураспада нейтрона (10,6 мин). Каналы распада радиоактивных изотопов обозначены следующим образом: β^- — бета-распад с вылетом электрона; β^+ — бета-распад с вылетом позитрона; α -распад с вылетом α -частицы (ядра иона гелия He^{2+}); EC — захват ядром электрона с внутренней электронной оболочки; sf — спонтанное деление ядра. При наличии двух каналов распада первым указывается более эффективный канал. Представленная информация взята из работ [1—3].

Таблица 2.1

Параметры стабильных изотопов

Атом- ный номер	Изо- топ	Распра- щенность, %	Спин ядра i	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N	Атом- ный номер	Изо- топ	Распра- щенность, %	Спин ядра i	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N
1	^1H	99,985	1/2	2,79285		^{17}O	0,04	5/2	-1,8938
	^2H	0,015	1	0,85744		^{18}O	0,20	0	0
2	^3He	$1,4 \cdot 10^{-4}$	1/2	-2,12762	9	^{19}F	100	1/2	2,6289
	^4He	≈ 100	0	0		^{20}Ne	90,51	0	0
3	^6Li	7,5	1	0,82205	10	^{21}Ne	0,27	3/2	-0,6618
	^7Li	92,5	3/2	3,2564		^{22}Ne	9,22	0	0
4	^9Be	100	3/2	-1,178		^{23}Na	100	3/2	2,2175
5	^{10}B	20	3	1,8006	11	^{24}Mg	79	0	0
	^{11}B	80	3/2	2,6886		^{25}Mg	10,0	5/2	-0,8554
6	^{12}C	98,9	0	0		^{26}Mg	11,0	0	0
	^{13}C	1,1	1/2	0,7024		^{27}Al	100	5/2	3,6415
7	^{14}N	99,63	1	0,40376					
	^{15}N	0,37	1/2	-0,2832	13				
8	^{16}O	99,76	0	0					

Продолжение табл. 2.1

Атом-ный номер	Изо-топ	Распра-щенность, %	Спин ядра <i>i</i>	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N	Атом-ный номер	Изо-топ	Распра-щенность, %	Спин ядра <i>i</i>	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N
14	^{28}Si	92,2	0	0	29	^{63}Cu	69,2	3/2	2,22
	^{29}Si	4,7	1/2	-0,5553		^{65}Cu	30,8	3/2	2,38
	^{30}Si	3,1	0	0		^{64}Zn	48,6	0	0
15	^{31}P	100	1/2	1,1316	30	^{66}Zn	27,9	0	0
16	^{32}S	95,0	0	0		^{67}Zn	4,1	5/2	0,876
	^{33}S	0,75	3/2	0,644		^{68}Zn	18,8	0	0
	^{34}S	4,21	0	0		^{70}Zn	0,6	0	0
17	^{35}Cl	75,8	3/2	0,82187	31	^{69}Ga	60,1	3/2	2,017
	^{37}Cl	24,2	3/2	0,68412		^{71}Ga	39,9	3/2	2,562
18	^{36}Ar	0,34	0	0	32	^{70}Ge	20,5	0	0
	^{38}Ar	0,06	0	0		^{72}Ge	27,4	0	0
	^{40}Ar	99,60	0	0		^{73}Ge	7,8	9/2	-0,8795
19	^{39}K	93,26	3/2	0,3915		^{74}Ge	36,5	0	0
	^{41}K	6,73	3/2	0,215		^{76}Ge	7,8	0	0
20	^{40}Ca	96,94	0	0	33	^{75}As	100	3/2	1,439
	^{42}Ca	0,65	0	0		^{74}Se	0,6	0	0
	^{43}Ca	0,13	7/2	-1,317		^{76}Se	9,0	0	0
	^{44}Ca	2,09	0	0		^{77}Se	7,6	1/2	0,534
	^{46}Ca	3·10 ⁻³	0	0		^{78}Se	23,5	0	0
	^{48}Ca	0,19	0	0		^{80}Se	49,8	0	0
21	^{45}Sc	100	7/2	4,756	35	^{82}Se	9,2	0	0
22	^{46}Ti	8,25	0	0	36	^{79}Br	50,7	3/2	2,1064
	^{47}Ti	7,45	5/2	-0,7885		^{81}Br	49,3	3/2	2,271
	^{48}Ti	73,7	0	0		^{78}Kr	0,35	0	0
	^{49}Ti	5,4	7/2	-1,1042		^{80}Kr	2,25	0	0
	^{50}Ti	5,2	0	0		^{82}Kr	11,6	0	0
23	^{50}V	0,25	6	3,3475		^{83}Kr	11,5	9/2	-0,9707
	^{51}V	99,75	7/2	5,151		^{84}Kr	57,0	0	0
	^{52}Cr	4,35	0	0		^{85}Kr	17,3	0	0
24	^{52}Cr	83,79	0	0	37	^{85}Rb	72,17	5/2	1,353
	^{53}Cr	9,50	3/2	-0,47		^{87}Rb	27,83	3/2	2,751
	^{54}Cr	2,36	0	0		^{84}Sr	0,6	0	0
25	^{55}Mn	100	5/2	3,47	38	^{86}Sr	9,8	0	0
26	^{54}Fe	5,8	0	0		^{87}Sr	7,0	9/2	-1,093
	^{56}Fe	91,7	0	0		^{88}Sr	82,6	0	0
	^{57}Fe	2,1	1/2	0,0907		^{89}Y	100	1/2	-0,1374
27	^{55}Fe	0,3	0	0	40	^{90}Zr	51,5	0	0
	^{59}Co	100	7/2	4,6		^{91}Zr	11,2	5/2	-1,304
	^{58}Ni	68,3	0	0		^{92}Zr	17,1	0	0
	^{60}Ni	26,1	0	0		^{94}Zr	17,4	0	0
	^{61}Ni	1,1	3/2	-0,750		^{96}Zr	2,8	0	0
28	^{62}Ni	3,6	0	0					
	^{64}Ni	0,9	0	0					

Продолжение табл. 2.1

Атом- ный номер	Изо- топ	Распра- шенност, %	Спин ядра <i>i</i>	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N	Атом- ный номер	Изо- топ	Распра- шенност, %	Спин ядра <i>i</i>	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N
41	⁹³ Nb	100	9/2	6,17	52	¹²⁶ Te	18,7	0	0
42	⁹² Mo	14,8	0	0		¹²⁸ Te	31,7	0	0
	⁹⁴ Mo	9,3	0	0		¹³⁰ Te	34,5	0	0
	⁹⁵ Mo	15,9	5/2	-0,914	53	¹²⁷ I	100	5/2	2,81
	⁹⁶ Mo	16,7	0	0	54	¹²⁴ Xe	0,1	0	0
	⁹⁷ Mo	9,6	5/2	-0,9327		¹²⁶ Xe	0,09	0	0
	⁹⁸ Mo	24,1	0	0		¹²⁸ Xe	1,9	0	0
	¹⁰⁰ Mo	9,6	0	0		¹²⁹ Xe	26,4	1/2	-0,778
44	⁹⁶ Ru	5,5	0	0		¹³⁰ Xe	4,1	0	0
	⁹⁸ Ru	1,9	0	0		¹³¹ Xe	21,2	3/2	0,692
	⁹⁹ Ru	12,7	5/2	-0,64		¹³² Xe	26,9	0	0
	¹⁰⁰ Ru	12,6	0	0		¹³⁴ Xe	10,4	0	0
	¹⁰¹ Ru	17,0	5/2	-0,72		¹³⁶ Xe	8,9	0	0
	¹⁰² Ru	31,6	0	0	55	¹³³ Cs	100	7/2	2,582
45	¹⁰⁴ Ru	18,7	0	0	56	¹³⁰ Ba	0,1	0	0
	¹⁰³ Rh	100	1/2	-0,088		¹³² Ba	0,1	0	0
46	¹⁰² Pd	1,0	0	0		¹³⁴ Ba	2,4	0	0
	¹⁰⁴ Pd	11,0	0	0		¹³⁵ Ba	6,6	3/2	0,838
	¹⁰⁵ Pd	22,2	5/2	-0,642		¹³⁶ Ba	7,9	0	0
	¹⁰⁶ Pd	27,3	0	0		¹³⁷ Ba	11,2	3/2	0,937
	¹⁰⁸ Pd	26,7	0	0		¹³⁸ Ba	71,7	0	0
47	¹¹⁰ Pd	11,8	0	0	57	¹³⁹ La	~100	7/2	2,78
	¹⁰⁷ Ag	51,8	1/2	-0,1137	58	¹³⁶ Ce	0,2	0	0
48	¹⁰⁹ Ag	48,2	1/2	-0,1307		¹³⁸ Ce	0,2	0	0
	¹⁰⁶ Cd	1,3	0	0		¹⁴⁰ Ce	88,5	0	0
	¹⁰⁸ Cd	0,9	0	0		¹⁴² Ce	11,1	0	0
	¹¹⁰ Cd	12,5	0	0	59	¹⁴¹ Pr	100	5/2	4,1
	¹¹¹ Cd	12,8	1/2	-0,595	60	¹⁴² Nd	27,2	0	0
	¹¹² Cd	24,1	0	0		¹⁴³ Nd	12,2	7/2	-1,06
	¹¹³ Cd	12,2	1/2	0,622		¹⁴⁴ Nd	23,8	0	0
	¹¹⁴ Cd	28,7	0	0		¹⁴⁵ Nd	8,3	7/2	-0,66
49	¹¹⁶ Cd	7,5	0	0		¹⁴⁶ Nd	17,2	0	0
	¹¹³ In	4,3	9/2	5,53		¹⁴⁸ Nd	5,7	0	0
50	¹¹⁵ In	95,7	9/2	5,54		¹⁵⁰ Nd	5,6	0	0
	¹¹² Sn	1,0	0	0	62	¹⁴⁴ Sm	3,1	0	0
	¹¹⁴ Sn	0,2	0	0		¹⁴⁷ Sm	15,1	7/2	-0,81
	¹¹⁵ Sn	0,4	1/2	-0,919		¹⁴⁸ Sm	11,3	0	0
	¹¹⁶ Sn	14,7	0	0		¹⁴⁹ Sm	13,9	7/2	-0,67
	¹¹⁷ Sn	7,7	1/2	-1,001		¹⁵⁰ Sm	7,4	0	0
	¹¹⁸ Sn	24,3	0	0		¹⁵² Sm	26,6	0	0
	¹¹⁹ Sn	8,6	1/2	-1,047		¹⁵⁴ Sm	22,6	0	0
	¹²⁰ Sn	32,4	0	0	63	¹⁵¹ Eu	47,9	5/2	3,47
	¹²² Sn	4,6	0	0		¹⁵³ Eu	52,1	5/2	1,53
	¹²⁴ Sn	5,6	0	0	64	¹⁵² Gd	0,2	0	0
51	¹²¹ Sb	57,3	5/2	3,36		¹⁵⁴ Gd	2,1	0	0
	¹²³ Sb	42,7	7/2	2,55		¹⁵⁵ Gd	14,8	3/2	-0,26
52	¹²⁰ Te	0,1	0	0		¹⁵⁶ Gd	20,6	0	0
	¹²² Te	2,5	0	0		¹⁵⁷ Gd	15,7	3/2	-0,34
	¹²³ Te	0,9	1/2	-0,737		¹⁵⁸ Gd	24,8	0	0
	¹²⁴ Te	4,6	0	0		¹⁶⁰ Gd	21,8	0	0
	¹²⁵ Te	7,0	1/2	-0,888	65	¹⁵⁹ Tb	100	3/2	2,01

Продолжение табл. 2.1

Атом- ный номер	Изо- топ	Распра- щенность, %	Спин ядра <i>i</i>	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N	Атом- ный номер	Изо- топ	Распра- щенность, %	Спин ядра <i>i</i>	Магнитный момент в единицах ядерных магнетонов μ_N
66	^{156}Dy	0,1	0	0	75	^{185}Re	37,4	$5/2$	3,19
	^{158}Dy	0,1	0	0		^{187}Re	62,6	$5/2$	3,22
	^{160}Dy	2,3	0	0	76	^{186}Os	1,6	0	0
	^{161}Dy	19,0	$5/2$	-0,48		^{187}Os	1,6	$1/2$	0,065
	^{162}Dy	25,5	0	0		^{188}Os	13,3	0	0
	^{163}Dy	24,9	$5/2$	0,67		^{189}Os	16,1	$3/2$	0,7
	^{164}Dy	28,1	0	0		^{190}Os	26,4	0	0
67	^{165}Ho	100	$7/2$	4,17		^{192}Os	41,0	0	0
68	^{162}Er	0,1	0	0	77	^{191}Ir	37,3	$3/2$	0,15
	^{164}Er	1,6	0	0		^{193}Ir	62,7	$3/2$	0,16
	^{166}Er	33,4	0	0	78	^{190}Pt	0,01	—	—
	^{167}Er	22,9	$7/2$	-0,57		^{192}Pt	0,79	0	0
	^{168}Er	27,1	0	0		^{194}Pt	32,9	0	0
	^{170}Er	14,9	0	0		^{195}Pt	33,8	$1/2$	0,61
69	^{169}Tm	100	$1/2$	-0,23		^{196}Pt	25,3	0	0
70	^{168}Yb	0,1	0	0		^{198}Pt	7,2	0	0
	^{170}Yb	3,2	0	0	79	^{197}Au	100	$3/2$	0,146
	^{171}Yb	14,4	$1/2$	0,49	80	^{196}Hg	0,15	0	0
	^{172}Yb	21,9	0	0		^{198}Hg	10,0	0	0
	^{173}Yb	16,2	$5/2$	-0,68		^{199}Hg	16,85	$1/2$	0,506
	^{174}Yb	31,6	0	0		^{200}Hg	23,1	0	0
	^{176}Yb	12,6	0	0		^{201}Hg	13,2	$3/2$	-0,560
71	^{175}Lu	97,4	$7/2$	2,23		^{202}Hg	29,8	0	0
	^{176}Lu	2,6	7	3,2		^{204}Hg	6,9	0	0
72	^{174}Hf	0,2	0	0	81	^{203}Ti	29,5	$1/2$	1,62
	^{176}Hf	5,2	0	0		^{205}Ti	70,5	$1/2$	1,64
	^{177}Hf	18,6	$7/2$	0,79	82	^{204}Pb	1,4	0	0
	^{178}Hf	27,1	0	0		^{206}Pb	24,1	0	0
	^{179}Hf	13,7	$9/2$	-0,64		^{207}Pb	22,1	$1/2$	0,59
	^{180}Hf	35,2	0	0		^{208}Pb	52,4	0	0
73	^{180}Ta	0,01	0	0	83	^{209}Bi	100	$9/2$	4,3
	^{181}Ta	99,99	$7/2$	2,4	90	$^{232}\text{Th}^*$	100	0	0
74	^{180}W	0,1	0	0	91	$^{231}\text{Pa}^{*2}$	100	$3/2$	2,0
	^{182}W	26,3	0	0	92	$^{234}\text{U}^{*3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	0	0
	^{183}W	14,3	$1/2$	0,118		$^{235}\text{U}^{*4}$	0,720	$7/2$	-0,35
	^{184}W	30,7	0	0		$^{238}\text{U}^{*5}$	99,275	0	0
	^{186}W	28,6	0	0					

* $T_{1/2} = 1,6 \cdot 10^{11}$ лет.

*² $T_{1/2} = 3,3 \cdot 10^4$ лет.

*³ $T_{1/2} = 2,6 \cdot 10^5$ лет.

*⁴ $T_{1/2} = 7,0 \cdot 10^8$ лет.

*⁵ $T_{1/2} = 4,5 \cdot 10^9$ лет.

Таблица 2.2

Параметры долгоживущих радиоактивных изотопов

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра <i>i</i>	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
0	1n	1/2	-1,9130	10,6 мин	β^-
1	3H	1/2	2,979	12,33 года	β^-
4	^{10}Be	—	—	$2,7 \cdot 10^6$ лет	β^-
6	^{11}C	3/2	1,0	0,34 ч	β^+, EC
	^{14}C	0	0	5700 лет	β^-
7	^{13}N	1/2	$\pm 0,322$	0,17 ч	β^+
9	^{18}F	1	0,8	1,83 ч	β^+, EC
11	^{22}Na	3	1,75	2,6 года	β^+, EC
	^{24}Na	4	1,69	15,0 ч	β^-
12	^{28}Mg	—	—	21,4 ч	β^-
13	^{26}Al	5	2,8	$7,4 \cdot 10^5$ лет	β^+, EC
14	^{31}Si	—	—	2,6 ч	β^-
	^{32}Si	—	—	650 лет	β^+
15	^{32}P	1	-0,252	14,3 сут	β^-
	^{33}P	—	—	24,8 сут	β^-
16	^{35}S	3/2	1,0	87 сут	β^-
17	^{36}Cl	2	1,285	$3,0 \cdot 10^5$ лет	β^-, EC
	^{38}Cl	2	2,0	0,62 ч	β^-
	^{39}Cl	—	—	1 ч	β^-
18	^{37}Ar	3/2	0,9	35 сут	EC
	^{39}Ar	7/2	-1,3	270 лет	β^-
	^{41}Ar	—	—	1,83 ч	β^-
	^{42}Ar	—	—	33 года	β^-
19	^{40}K	4	-1,30	$1,3 \cdot 10^9$ лет	β^-, EC
	^{42}K	2	-1,14	12,4 ч	β^-
	^{43}K	3/2	$\pm 0,16$	22 ч	β^-
	^{44}K	—	—	0,37 ч	β^-
	^{45}K	3/2	$\pm 0,17$	0,3 ч	β^-
20	^{41}Ca	7/2	-1,595	$8 \cdot 10^4$ лет	EC
	^{45}Ca	—	—	160 сут	β^-
	^{47}Ca	—	—	4,5 сут	β^-
21	^{43}Sc	7/2	4,6	3,9 ч	β^+, EC
	^{44}Sc	2	2,6	3,9 ч	β^+, EC
	^{46}Sc	4	3,0	84 сут	β^-
	^{47}Sc	7/2	5,3	3,4 сут	β^-
	^{48}Sc	6	—	44 ч	β^-
	^{49}Sc	—	—	0,95 ч	β^-
22	^{44}Ti	—	—	48 лет	EC
	^{45}Ti	7/2	0,09	3,1 ч	β^+, EC
23	^{47}V	3/2	—	0,52 ч	β^+
	^{48}V	4	$\pm 1,6$	16 сут	β^+, EC
	^{49}V	7/2	$\pm 4,5$	1 год	EC
	^{50}V	6	3,347	$6 \cdot 10^{16}$ лет	EC
24	^{49}Cr	5/2	$\pm 0,48$	0,70 ч	β^+
	^{51}Cr	7/2	$\pm 0,93$	27,7 сут	EC
25	^{51}Mn	5/2	$\pm 3,57$	0,75 ч	β^+
	^{52}Mn	6	3,06	5,6 сут	β^+, EC
	^{53}Mn	7/2	$\pm 5,02$	$3,7 \cdot 10^6$ лет	EC
	^{56}Mn	3	3,23	2,58 ч	β^-
26	^{52}Fe	—	—	8,5 ч	β^+, EC
	^{55}Fe	—	—	2,9 года	EC
	^{59}Fe	3/2	$\pm 1,1$	46 сут	β^-

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
27	^{55}Co	7/2	$\pm 4,5$	18 ч	β^+, EC
	^{56}Co	4	3,83	77 сут	EC, β^+
	^{57}Co	7/2	4,72	270 сут	EC
	^{58}Co	2	4,04	71 сут	EC, β^+
	^{60}Co	5	3,80	5,3 года	β^-
	^{61}Co	—	—	1,7 ч	β^-
	^{62}Co	—	—	0,23 ч	β^-
	^{56}Ni	—	—	6,1 сут	EC
28	^{57}Ni	—	—	1,5 сут	EC, β^+
	^{59}Ni	—	—	10^5 лет	EC
	^{63}Ni	—	—	92 года	β^-
	^{65}Ni	—	—	2,56 ч	β^-
	^{60}Cu	2	1,22	0,38 ч	β^+, EC
29	^{61}Cu	3/2	2,13	3,3 ч	β^+, EC
	^{64}Cu	1	$-0,22$	12,9 ч	EC, β^-, β^+
	^{67}Cu	—	—	59 ч	β^-
	^{62}Zn	—	—	9,1 ч	EC, β^+
30	^{68}Zn	3/2	$-0,282$	0,64 ч	β^+, EC
	^{65}Zn	5/2	0,77	240 сут	EC, β^+
	^{69}Zn	—	—	1 ч	β^-
	^{72}Zn	0	—	46 ч	β^-
31	^{66}Ga	0	—	9,4 ч	β^+, EC
	^{67}Ga	3/2	1,85	3,3 сут	EC
	^{68}Ga	2	$\pm 0,012$	1,1 ч	β^+, EC
	^{70}Ga	1	—	0,35 ч	β^-
	^{72}Ga	3	$-0,132$	14,1 ч	β^-
32	^{73}Ga	—	—	5 ч	β^-
	^{66}Ge	—	—	2,4 ч	EC, β^+
	^{67}Ge	—	—	0,3 ч	β^+, EC
	^{68}Ge	—	—	280 сут	EC
33	^{69}Ge	—	—	40 ч	EC, β^+
	^{71}Ge	1/2	0,55	11 сут	EC
	^{77}Ge	—	—	11 ч	β^-
	^{78}Ge	—	—	1,5 ч	β^-
	^{76}As	4	—	0,9 ч	EC, β^+
	^{71}As	—	—	2,7 сут	EC, β^+
	^{72}As	2	$\pm 2,2$	1,1 сут	EC, β^+
	^{73}As	—	—	80 сут	EC
34	^{74}As	—	—	18 сут	EC, β^-, β^+
	^{76}As	2	$-0,91$	1,1 сут	β^-
	^{77}As	—	—	1,6 сут	β^-
	^{78}As	—	—	1,5 ч	β^-
	^{70}Se	—	—	0,7 ч	β^+
	^{72}Se	—	—	8,7 сут	EC
	^{73}Se	—	—	7 ч	β^+, EC
	^{75}Se	5/2	—	120 сут	EC
35	^{79}Se	7/2	$-1,02$	$6,5 \cdot 10^4$ лет	β^-
	^{81}Se	—	—	0,3 ч	β^-
	^{83}Se	—	—	0,4 ч	β^-
	^{75}Br	—	—	1,7 ч	β^+, EC
	^{76}Br	1	$\pm 0,55$	16 ч	β^+, EC
	^{77}Br	3/2	—	2,4 сут	β^+, EC
	^{80}Br	1	$\pm 0,514$	0,3 ч	β^-, EC, β^+
	^{82}Br	5	1,63	1,47 сут	β^-

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
35	^{83}Br	—	—	2,4 ч	β^-
	^{84}Br	—	—	0,53 ч	β^-
36	^{74}Kr	—	—	0,2 ч	β^+
	^{76}Kr	—	—	15 ч	EC
	^{77}Kr	—	—	1,2 ч	β^+, EC
	^{79}Kr	—	—	35 ч	EC, β^+
	^{81}Kr	—	—	$2 \cdot 10^5$ лет	EC
	^{85}Kr	9/2	$\pm 1,00$	10,7 лет	β^-
	^{87}Kr	—	—	1,3 ч	β^-
37	^{88}Kr	—	—	2,8 ч	β^-
	^{81}Rb	3/2	2,4	4,6 ч	EC, β^+
	^{83}Rb	5/2	1,4	86 сут	EC
	^{84}Rb	2	-1,3	33 сут	EC, β^+
	^{86}Rb	2	-1,69	18,8 сут	β^-
	^{87}Rb	3/2	2,75	$4 \cdot 8 \cdot 10^{10}$ лет	β^-
	^{88}Rb	2	$\pm 0,51$	0,30 ч	β^-
38	^{89}Rb	—	—	0,25 ч	β^-
	^{82}Sr	—	—	1,0 сут	EC
	^{83}Sr	—	—	1,4 сут	EC, β^+
	^{85}Sr	—	—	64 сут	EC
	^{89}Sr	—	—	53 сут	β^-
	^{90}Sr	—	—	28 лет	β^-
	^{91}Sr	—	—	9,7 ч	β^-
39	^{92}Sr	—	—	2,7 ч	β^-
	^{84}Y	—	—	0,7 ч	β^+
	^{85}Y	—	—	5 ч	β^+, EC
	^{86}Y	—	—	15 ч	EC, β^+
	^{87}Y	—	—	3,3 сут	EC
	^{88}Y	—	—	110 сут	EC
	^{90}Y	2	$-1,63$	2,7 сут	β^-
40	^{91}Y	1/2	$\pm 0,164$	59 сут	β^-
	^{92}Y	—	—	3,5 ч	β^-
	^{93}Y	—	—	10 ч	β^-
	^{94}Y	—	—	0,3 ч	β^-
	^{95}Y	—	—	0,2 ч	β^-
	^{85}Zr	—	—	1,4 ч	β^+, EC
	^{86}Zr	—	—	16 ч	EC
41	^{87}Zr	—	—	1,5 ч	β^+, EC
	^{88}Zr	—	—	85 сут	EC
	^{89}Zr	—	—	3,3 сут	EC, β^+
	^{93}Zr	—	—	$1,5 \cdot 10^6$ лет	β^-
	^{95}Zr	—	—	65 сут	β^-
	^{88}Nb	—	—	0,3 ч	β^+
	^{89}Nb	—	—	2 ч	β^+, EC
42	^{90}Nb	—	—	14,6 ч	β^+, EC
	^{91}Nb	—	—	8 лет	EC
	^{92}Nb	—	—	10 сут	EC
	^{94}Nb	—	—	$2 \cdot 10^4$ лет	β^-
	^{96}Nb	—	—	1 сут	β^-
	^{97}Nb	—	—	1,2 ч	β^-
	^{98}Nb	—	—	0,8 ч	β^-
	^{100}Nb	—	—	0,2 ч	β^-
	^{90}Mo	—	—	5,7 ч	EC, β^+
	^{91}Mo	—	—	0,26 ч	β^+
	^{93}Mo	—	—	$3 \cdot 10^3$ лет	EC

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
42	^{98}Mo	—	—	2,8 сут	β^-
	^{101}Mo	—	—	0,24 ч	β^-
	^{102}Mo	—	—	0,2 ч	β^-
43	^{93}Tc	—	—	2,8 ч	EC, β^+
	^{94}Tc	—	—	4,9 ч	EC, β^+
	^{95}Tc	—	—	20 ч	EC
	^{96}Tc	6	$\pm 5,4$	4,3 сут	EC
	^{97}Tc	—	—	$2,6 \cdot 10^6$ лет	EC
	^{98}Tc	—	—	$1,5 \cdot 10^6$ лет	β^-
	^{99}Tc	—	—	$2,1 \cdot 10^5$ лет	β^-
	^{101}Tc	9/2	5,68	0,23 ч	β^-
	^{104}Tc	—	—	0,3 ч	β^-
44	^{94}Ru	—	—	1 ч	EC
	^{95}Ru	—	—	1,6 ч	EC, β^+
	^{97}Ru	—	—	2,9 сут	EC
	^{103}Ru	—	—	40 сут	β^-
	^{105}Ru	—	—	4,4 ч	β^-
	^{106}Ru	—	—	1,0 года	β^-
	^{97}Rh	—	—	0,6 ч	β^+
45	^{99}Rh	—	—	4,6 ч	EC, β^+
	^{100}Rh	—	—	21 ч	EC, β^+
	^{101}Rh	—	—	3 года	EC
	^{102}Rh	—	—	2,9 года	β^+, β^-
	^{105}Rh	—	—	1,5 сут	β^-
	^{107}Rh	—	—	0,36 ч	β^-
	^{109}Rh	—	—	1 ч	β^-
46	^{98}Pd	—	—	0,3 ч	EC
	^{99}Pd	—	—	0,36 ч	β^+
	^{100}Pd	—	—	3,7 сут	EC
	^{101}Pd	—	—	8,4 ч	EC, β^*
	^{103}Pd	—	—	17 сут	EC
	^{107}Pd	—	—	$7 \cdot 10^6$ лет	β^-
	^{109}Pd	—	—	13,5 ч	β^-
	^{111}Pd	—	—	0,37 ч	β^-
	^{112}Pd	—	—	21 ч	β^-
47	^{103}Ag	7/2	4,5	1,1 ч	EC, β^+
	^{104}Ag	5	4,0	1,1 ч	β^+, EC
	^{105}Ag	1/2	$\pm 0,10$	41 сут	EC
	^{106}Ag	1	2,9	0,4 ч	β^+, EC
	^{111}Ag	1/2	-0,15	7,5 сут	β^-
	^{112}Ag	2	$\pm 0,055$	3,1 ч	β^-
	^{113}Ag	1/2	$\pm 0,16$	5,3 ч	β^-
	^{115}Ag	—	—	0,35 ч	β^-
	^{103}Cd	—	—	0,2 ч	β^+
48	^{104}Cd	—	—	0,95 ч	EC
	^{105}Cd	5/2	-0,74	0,91 ч	EC, β^+
	^{107}Cd	5/2	-0,615	6,5 ч	EC, β^+
	^{109}Cd	5/2	-0,83	1,3 года	EC
	^{115}Cd	1/2	-0,65	2,2 сут	β^-
	^{117}Cd	—	—	3 ч	β^-
49	^{118}Cd	—	—	0,8 ч	β^-
	^{107}In	—	—	0,5 ч	β^+, EC
	^{108}In	—	—	1 ч	EC, β^+
	^{109}In	9/2	5,5	4,2 ч	EC, β^+
	^{110}In	2	4,36	1,1 ч	β^+, EC

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра I	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
49	^{111}In	9/2	5,5	2,8 сут	EC
	^{112}In	1	2,8	0,24 ч	β^-, EC, β^+
	^{117}In	9/2	—	0,8 ч	β^-
50	^{109}Sn	—	—	0,30 ч	$EC; \beta^+$
	^{110}Sn	—	—	4 ч	EC
	^{111}Sn	7/2	—	0,6 ч	EC, β^+
	^{113}Sn	1/2	$\pm 0,88$	115 сут	EC
	^{121}Sn	3/2	$\pm 0,70$	1,1 сут	β^-
	^{123}Sn	—	—	0,7 ч	β^-
	^{125}Sn	—	—	9,6 сут	β^-
	^{126}Sn	—	—	10^5 лет	β^-
	^{128}Sn	—	—	1 ч	β^-
	^{115}Sb	5/2	3,46	0,5 ч	EC, β^+
51	^{116}Sb	3	—	0,25 ч	β^+, EC
	^{117}Sb	5/2	3,4	2,8 ч	EC, β^+
	^{118}Sb	5/2	3,45	38 ч	EC
	^{120}Sb	1	$\pm 2,3$	0,27 ч	β^+, EC
	^{122}Sb	2	$-1,90$	2,7 сут	β^-, EC
	^{124}Sb	3	$\pm 1,2$	60 сут	β^-
	^{126}Sb	7/2	$\pm 2,6$	2,7 года	β^-
	^{128}Sb	8	$\pm 1,3$	12 сут	β^-
	^{127}Sb	7/2	$\pm 2,6$	3,9 сут	β^-
	^{128}Sb	8	$\pm 1,3$	9 ч	β^-
52	^{129}Sb	—	—	4,3 ч	β^-
	^{131}Sb	—	—	0,4 ч	β^-
	^{119}Te	0	—	2,5 ч	EC
	^{117}Te	1/2	—	1,1 ч	EC, β^+
	^{118}Te	—	—	6 сут	EC, β^+
	^{119}Te	1/2	$\pm 0,25$	16 ч	EC, β^+
	^{121}Te	—	—	17 сут	EC
	^{127}Te	3/2	$\pm 0,66$	9,4 ч	β^-
	^{128}Te	3/2	$\pm 0,66$	1,1 ч	β^-
	^{131}Te	—	—	0,4 ч	β^-
53	^{132}Te	—	—	1,3 ч	β^-
	^{118}I	—	—	0,2 ч	β^+, EC
	^{120}I	—	—	1,4 ч	EC, β^+
	^{121}I	—	—	2,1 ч	EC, β^+
	^{123}I	5/2	—	13 ч	EC
	^{124}I	2	—	4,2 сут	EC, β^+
	^{125}I	5/2	3	60 сут	EC
	^{126}I	2	—	13 сут	EC, β^-, β^+
	^{128}I	1	—	0,42 ч	β^-, EC
	^{129}I	7/2	2,62	$1,6 \cdot 10^7$ лет	β^-
54	^{130}I	5	—	12,3 ч	β^-
	^{131}I	7/2	2,74	8,0 сут	β^-
	^{132}I	4	$\pm 3,09$	2,3 ч	β^-
	^{133}I	7/2	2,86	21 ч	β^-
	^{134}I	—	—	0,87 ч	β^-
	^{135}I	7/2	—	6,7 ч	β^-
	^{121}Xe	—	—	0,65 ч	β^+
	^{122}Xe	—	—	20 ч	EC
	^{123}Xe	—	—	2,1 ч	EC, β^+
	^{125}Xe	—	—	17 ч	EC
^{127}Xe	—	—	—	36,4 сут	EC
	—	—	—	5,3 сут	β^-

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
54	^{135}Xe	—	—	9,1 ч	β^-
	^{138}Xe	—	—	0,3 ч	β^-
55	^{125}Cs	$1/2$	1,41	0,8 ч	β^+, EC
	^{127}Cs	$1/2$	1,46	6,2 ч	EC, β^+
	^{129}Cs	$1/2$	1,48	32 ч	EC
	^{130}Cs	1	1,4	0,5 ч	β^+, EC, β^-
	^{131}Cs	$5/2$	3,54	9,7 сут	EC
	^{132}Cs	2	2,22	6,5 сут	EC
	^{134}Cs	4	2,99	2,06 года	β^-
	^{135}Cs	$7/2$	2,73	$3 \cdot 10^6$ лет	β^-
	^{136}Cs	5	3,7	13 сут	β^-
	^{137}Cs	$7/2$	2,84	30 лет	β^-
56	^{138}Cs	3	0,5	0,54 ч	β^-
	^{126}Ba	—	—	1,6 ч	EC
	^{128}Ba	—	—	2,4 сут	EC
	^{129}Ba	—	—	2,6 ч	EC, β^+
	^{131}Ba	—	—	12 сут	EC
	^{133}Ba	—	—	10 лет	EC
	^{139}Ba	—	—	1,4 ч	β^-
	^{140}Ba	—	—	12,8 сут	β^-
	^{141}Ba	—	—	0,3 ч	β^-
	^{131}La	$3/2$	—	1,0 ч	EC, β^+
57	^{132}La	2	—	5 ч	β^+
	^{133}La	$5/2$	—	4 ч	EC, β^+
	^{135}La	$5/2$	—	19 ч	EC
	^{137}La	$7/2$	2,69	$6 \cdot 10^4$ лет	EC
	^{140}La	3	0,73	40 ч	β^-
	^{141}La	—	—	3,9 ч	β^-
	^{142}La	—	—	1,5 ч	β^-
	^{143}La	—	—	0,2 ч	β^-
	^{130}Ce	0	—	0,5 ч	EC, β^+
	^{132}Ce	0	—	4,2 ч	EC, β^+
58	^{133}Ce	$9/2$	—	5,4 ч	EC, β^+
	^{134}Ce	0	—	72 ч	EC
	^{135}Ce	$1/2$	—	17 ч	EC
	^{137}Ce	$3/2$	$\pm 0,9$	9 ч	EC
	^{139}Ce	$3/2$	0,9	137 сут	EC
	^{141}Ce	$7/2$	1,0	33 сут	β^-
	^{143}Ce	$3/2$	—	33 ч	β^-
	^{144}Ce	—	—	285 сут	β^-
	^{134}Pr	$5/2$	—	0,3 ч	β^+
	^{135}Pr	$3/2$	—	0,4 ч	EC, β^+
59	^{136}Pr	2	—	0,23 ч	EC, β^+
	^{137}Pr	$5/2$	—	1,3 ч	EC, β^+
	^{138}Pr	7	—	2,1 ч	EC, β^+
	^{139}Pr	$5/2$	—	4,5 ч	EC, β^+
	^{142}Pr	2	$-0,23$	19 ч	β^-
	^{143}Pr	$7/2$	—	13,6 сут	β^-
	^{144}Pr	0	—	0,29 ч	β^-
	^{145}Pr	—	—	6,0 ч	β^-
	^{146}Pr	—	—	0,40 ч	β^-
	^{147}Pr	—	—	0,2 ч	β^-
60	^{137}Nd	$1/2$	—	0,9 ч	β^+
	^{140}Nd	0	—	3,3 сут	EC, β
	^{141}Nd	$3/2$	—	2,4 ч	EC, β

Продолжение табл. 2.

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
60	^{147}Nd	5/2	$\pm 0,55$	11 сут	β^-
	^{149}Nd	5/2	$\pm 0,35$	1,7 ч	β^-
	^{151}Nd	—	—	0,2 ч	β^-
61	^{141}Pm	5/2	—	0,3 ч	β^+, EC
	^{143}Pm	—	$\pm 3,8$	265 сут	EC
	^{144}Pm	5	$\pm 1,7$	350 сут	EC
	^{145}Pm	—	—	18 лет	EC
	^{146}Pm	—	—	2 года	EC, β^-
	^{147}Pm	7/2	2,6	2,6 года	β^-
	^{148}Pm	1	2,1	5,4 сут	β^-
	^{149}Pm	7/2	$\pm 3,3$	53 ч	β^-
	^{150}Pm	—	—	3,7 ч	β^-
	^{151}Pm	5/2	$\pm 1,8$	28 ч	β^-
62	^{142}Sm	0	—	1,2 ч	EC
	^{145}Sm	—	$\pm 0,9$	340 сут	EC
	^{151}Sm	—	—	80 лет	β^-
	^{153}Sm	3/2	$-0,022$	47 ч	β^-
	^{155}Sm	3/2	—	0,4 ч	β^-
	^{156}Sm	—	—	9,4 ч	β^-
	^{145}Eu	5/2	—	6 сут	EC, β^+
63	^{146}Eu	4	—	4,6 сут	EC, β^+
	^{147}Eu	5/2	—	22 сут	EC
	^{148}Eu	5	—	58 сут	EC
	^{149}Eu	5/2	—	110 сут	EC
	^{150}Eu	0	—	13 ч	β^-
	^{152}Eu	3	$-1,94$	13 лет	EC, β^-
	^{154}Eu	3	$\pm 2,0$	8,5 лет	β^-
	^{155}Eu	5/2	2,0	5 лет	β^-
	^{156}Eu	3	1,97	15 сут	β^-
	^{157}Eu	—	—	15 ч	β^-
	^{158}Eu	—	—	0,9 ч	β^-
64	^{159}Eu	—	—	0,3 ч	β^-
	^{147}Gd	7/2	—	1,4 сут	EC
	^{148}Gd	—	—	90 сут	EC
	^{149}Gd	7/2	—	10 сут	EC
	^{150}Gd	—	—	$2 \cdot 10^6$ лет	α
	^{151}Gd	7/2	—	120 сут	EC
	^{153}Gd	3/2	—	240 сут	EC
65	^{159}Gd	3/2	$\pm 0,4$	18 ч	β^-
	^{147}Tb	—	—	0,4 ч	EC, β^+
	^{148}Tb	—	—	1,1 ч	EC, β^+
	^{149}Tb	—	—	4,1 ч	EC, α
	^{150}Tb	—	—	3,1 ч	β^+, α, EC
	^{151}Tb	1/2	—	18 ч	EC
	^{152}Tb	2	—	17 ч	EC, β^+
	^{153}Tb	5/2	—	55 ч	EC
	^{154}Tb	0	—	21 ч	EC
	^{155}Tb	3/2	—	5 сут	EC
	^{156}Tb	3	$\pm 1,4$	5 сут	EC
	^{157}Tb	3/2	$\pm 2,0$	150 лет	EC
	^{158}Tb	3	$\pm 1,75$	150 лет	EC, β^-
	^{160}Tb	3	$\pm 1,70$	72 сут	β^-
	^{161}Tb	3/2	—	7 сут	β^-
	^{162}Tb	—	—	2 ч	β^-
	^{163}Tb	—	—	7 ч	β^-

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
66	^{151}Dy	7/2	—	0,3 ч	EC, β^+, α
	^{152}Dy	0	—	2,4 ч	EC, β^+, α
	^{153}Dy	7/2	$\pm 0,7$	6 ч	EC, α
	^{155}Dy	3/2	$\pm 0,3$	10 ч	EC, β^+
	^{157}Dy	3/2	$\pm 0,30$	8,1 ч	EC
	^{159}Dy	3/2	—	140 сут	EC
	^{165}Dy	7/2	$\pm 0,5$	2,3 ч	β^-
	^{166}Dy	0	0	3,3 сут	β^-
	^{155}Ho	5/2	—	0,3 ч	EC, β^+
67	^{156}Ho	1	—	1 ч	EC, β^+
	^{157}Ho	7/2	—	0,3 ч	β^+
	^{159}Ho	7/2	—	0,6 ч	EC
	^{160}Ho	5	—	0,4 ч	EC
	^{161}Ho	7/2	—	3 ч	EC
	^{162}Ho	1	—	0,2 ч	EC
	^{166}Ho	0	0	1,1 сут	β^-
	^{167}Ho	—	—	3 ч	β^-
	^{157}Er	3/2	—	0,4 ч	β^+
68	^{158}Er	0	—	2,3 ч	EC, β^+
	^{159}Er	3/2	—	0,6 ч	EC, β^+
	^{160}Er	0	—	2,2 сут	EC
	^{161}Er	3/2	$-0,37$	3,2 ч	EC
	^{163}Er	5/2	0,56	1,4 ч	EC
	^{165}Er	5/2	$\pm 0,66$	10 ч	EC
	^{169}Er	1/2	0,51	9,4 сут	β^-
	^{172}Er	—	—	2 сут	β^-
	^{161}Tm	7/2	—	0,5 ч	EC, β^+
69	^{162}Tm	1	—	0,4 ч	β^+, EC
	^{163}Tm	1/2	$\pm 0,08$	1,8 ч	β^+, EC
	^{165}Tm	1/2	$\pm 0,14$	30 ч	EC
	^{166}Tm	2	$\pm 0,09$	7,7 ч	EC, β^+
	^{167}Tm	1/2	$-0,20$	9,3 сут	EC
	^{168}Tm	3	—	90 сут	EC, β^+
	^{170}Tm	1	$\pm 0,248$	130 сут	β^-
	^{171}Tm	1/2	$\pm 0,23$	1,9 года	β^-
	^{172}Tm	2	—	64 ч	β^-
70	^{173}Tm	—	—	8 ч	β^-
	^{164}Yb	—	—	1,3 ч	EC
	^{166}Yb	—	—	2,4 сут	EC
	^{167}Yb	—	—	0,3 ч	EC
	^{169}Yb	7/2	$\pm 0,6$	32 сут	EC
	^{175}Yb	7/2	$\pm 0,6$	4 сут	β^-
	^{177}Yb	—	—	1,9 ч	β^-
	^{167}Lu	7/2	—	0,9 ч	EC, β^+
	^{169}Lu	7/2	—	1,5 сут	EC, β^+
71	^{170}Lu	0	0	2 сут	β^+, EC
	^{171}Lu	7/2	—	8 сут	EC
	^{172}Lu	—	—	6,7 сут	EC
	^{173}Lu	—	—	1,4 года	EC
	^{174}Lu	—	—	4 года	EC
	^{176}Lu	7	3,2	$3,6 \cdot 10^6$ лет	β^-, EC
	^{177}Lu	7/2	2,24	6,7 сут	β^-
	^{179}Lu	—	—	4,6 ч	β^-

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N^*	$T_{1/2}$	Канал распада
72	^{168}Hf	—	—	0,4 ч	EC
	^{169}Hf	—	—	1,5 ч	EC, β^+
	^{170}Hf	—	—	10 ч	EC
	^{171}Hf	—	—	12 ч	EC
	^{172}Hf	—	—	5 лет	EC
	^{173}Hf	—	—	1,0 сут	EC
	^{175}Hf	—	—	70 сут	EC
	^{181}Hf	—	—	42 сут	β^-
	^{182}Hf	—	—	10^7 лет	β^-
	^{183}Hf	—	—	1,0 ч	β^-
73	^{172}Ta	—	—	0,5 ч	β^+, EC
	^{173}Ta	—	—	3 ч	EC
	^{174}Ta	—	—	1,2 ч	EC, β^+
	^{175}Ta	—	—	10 ч	EC
	^{176}Ta	—	—	8,0 ч	EC
	^{177}Ta	—	—	2,4 сут	EC
	^{178}Ta	—	—	2,1 ч	EC, β^+
	^{179}Ta	—	—	1,6 года	EC
	^{182}Ta	3	$\pm 2,6$	115 сут	β^-
	^{183}Ta	7/2	—	5 сут	β^-
74	^{184}Ta	—	—	9 ч	β^-
	^{185}Ta	—	—	0,8 ч	β^-
	^{173}W	—	—	0,3 ч	EC
	^{174}W	—	—	0,5 ч	EC
	^{175}W	—	—	0,6 ч	EC
	^{176}W	—	—	2 ч	EC
	^{178}W	—	—	22 сут	EC, β^+
	^{179}W	—	—	0,6 ч	EC
	^{181}W	—	—	130 сут	EC
	^{185}W	3/2	—	75 сут	β^-
75	^{187}W	3/2	—	1,0 сут	β^-
	^{188}W	—	—	2,9 сут	β^-
	^{177}Re	—	—	0,3 ч	β^+
	^{178}Re	—	—	0,3 ч	β^+
	^{179}Re	—	—	0,3 ч	EC
	^{181}Re	—	—	18 ч	EC
	^{182}Re	—	—	2,7 сут	EC
	^{183}Re	—	—	71 сут	EC, β^-
	^{184}Re	—	$\pm 3,1$	38 сут	β^-, EC
	^{186}Re	1	$\pm 2,5$	3,7 сут	β^-
76	^{188}Re	1	1,74	17 ч	β^-
	^{180}Os	—	—	0,36 ч	EC
	^{181}Os	—	—	2 ч	EC
	^{182}Os	—	—	21 ч	EC
	^{183}Os	—	—	14 ч	EC
	^{185}Os	—	—	95 сут	EC
	^{191}Os	—	—	15 сут	β^-
	^{193}Os	—	—	1,3 сут	β^-
	^{194}Os	—	—	6 лет	β^-
	^{182}Ir	—	—	0,25 ч	EC
77	^{183}Ir	—	—	0,9 ч	EC
	^{184}Ir	—	—	3,2 ч	EC, β^+
	^{185}Ir	—	—	15 ч	EC
	^{186}Ir	—	—	15 ч	EC, β^+

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
77	^{187}Ir	—	—	12 ч	EC
	^{188}Ir	—	—	1,7 сут	EC
	^{189}Ir	—	—	12 сут	EC
	^{190}Ir	—	—	11 сут	EC
	^{192}Ir	4	1,9	74 сут	β^- , EC
	^{194}Ir	1	$\pm 0,4$	19 ч	β^-
	^{195}Ir	—	—	3 ч	β^-
	^{196}Ir	—	—	2 ч	β^-
	^{185}Pt	—	—	1 ч	EC
	^{186}Pt	—	—	2,6 ч	EC
78	^{187}Pt	—	—	2,5 ч	EC
	^{188}Pt	—	—	10 сут	EC
	^{189}Pt	—	—	11 ч	EC
	^{191}Pt	—	—	3,0 сут	EC
	^{197}Pt	1/2	$\pm 0,5$	18 ч	β^-
	^{199}Pt	—	—	0,5 ч	β^-
	^{186}Au	—	—	0,2 ч	EC
	^{189}Au	—	—	0,5 ч	EC
	^{190}Au	1	$\pm 0,07$	0,6 ч	EC, β^+
	^{191}Au	3/2	$\pm 0,14$	3,2 ч	EC
79	^{192}Au	1	$\pm 0,008$	5 ч	EC, β^+
	^{193}Au	3/2	$\pm 0,14$	17 ч	EC
	^{194}Au	1	$\pm 0,07$	1,7 сут	EC, β^+
	^{195}Au	3/2	$\pm 0,15$	183 сут	EC
	^{196}Au	2	$\pm 0,6$	6,2 сут	EC, β^-
	^{198}Au	2	0,59	2,7 сут	β^-
	^{199}Au	3/2	0,27	3,1 сут	β^-
	^{200}Au	—	—	0,8 ч	β^-
	^{201}Au	—	—	0,4 ч	β^-
	^{190}Hg	—	—	0,4 ч	EC
80	^{191}Hg	—	—	0,9 ч	EC
	^{192}Hg	—	—	5 ч	EC, β^+
	^{193}Hg	3/2	$-0,63$	4 ч	EC
	^{194}Hg	—	—	1,2 года	EC
	^{195}Hg	1/2	0,54	10 ч	EC
	^{197}Hg	1/2	0,527	2,7 сут	EC
	^{203}Hg	5/2	0,85	1,9 сут	β^-
	^{193}Tl	1/2	—	0,4 ч	EC
	^{194}Tl	2	—	0,5 ч	EC
	^{195}Tl	1/2	1,6	1,2 ч	EC, β^+
81	^{196}Tl	2	$\pm 0,07$	1,8 ч	EC
	^{197}Tl	1/2	1,6	2,8 ч	EC
	^{198}Tl	2	$\pm 0,001$	5,3 ч	EC
	^{199}Tl	1/2	1,6	7,4 ч	EC
	^{200}Tl	2	$\pm 0,04$	1,1 сут	EC
	^{201}Tl	1/2	1,6	3,0 сут	EC
	^{202}Tl	2	$\pm 0,06$	12 сут	EC
	^{204}Tl	2	$\pm 0,09$	3,8 года	β^- , EC
	^{196}Pb	—	—	0,6 ч	EC
	^{197}Pb	—	—	1 ч	EC
82	^{193}Pb	—	—	2,4 ч	EC
	^{199}Pb	—	—	1,5 ч	EC
	^{200}Pb	—	—	20 ч	EC
	^{201}Pb	—	—	9 ч	EC
	^{202}Pb	—	—	$3 \cdot 10^5$ лет	EC

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
82	^{203}Pb	—	—	52 ч	EC
	^{205}Pb	—	—	$3 \cdot 10^7$ лет	EC
	^{209}Pb	—	—	3,3 ч	β^-
	^{210}Pb	—	—	22 года	β^-
	^{211}Pb	—	—	0,6 ч	β^-
	^{214}Pb	—	—	0,44 ч	β^-
83	^{199}Bi	9/2	—	0,41 ч	EC
	^{201}Bi	9/2	—	1,8 ч	EC
	^{202}Bi	5	—	1,6 ч	EC
	^{203}Bi	9/2	4,6	11,8 ч	EC
	^{204}Bi	6	4,3	11,2 ч	EC
	^{205}Bi	9/2	4,2	15 сут	EC
	^{206}Bi	6	4,6	6,2 сут	EC
	^{207}Bi	—	—	30 лет	EC
	^{208}Bi	—	—	$4 \cdot 10^5$ лет	EC
	^{210}Bi	1	—0,045	5 сут	β^-
84	^{212}Bi	—	—	1 ч	β^-, α
	^{213}Bi	—	—	0,8 ч	β^-, α
	^{214}Bi	—	—	0,3 ч	β^-
	^{201}Po	3/2	—	0,25 ч	EC, α
	^{202}Po	0	0	0,7 ч	EC, α
	^{203}Po	5/2	—	0,6 ч	EC, α
	^{204}Po	0	0	3,6 ч	EC, α
	^{205}Po	5/2	0,3	1,8 ч	EC
	^{206}Po	0	0	9 сут	EC, α
	^{207}Po	5/2	0,3	6 ч	EC
85	^{208}Po	—	—	2,93 года	α
	^{209}Po	1/2	0,8	102 года	α
	^{210}Po	0	0	138 сут	α
	^{205}At	—	—	0,4 ч	EC, α
	^{206}At	—	—	0,5 ч	α, EC
	^{207}At	—	—	1,8 ч	EC, α
	^{208}At	—	—	1,6 ч	EC, α
	^{209}At	—	—	5,5 ч	EC, α
	^{210}At	—	—	8,3 ч	EC
	^{211}At	9/2	—	7,2 ч	α, EC
86	^{208}Rn	—	—	0,4 ч	EC, α
	^{209}Rn	—	—	0,5 ч	EC, α
	^{210}Rn	—	—	2,4 ч	α, EC
	^{211}Rn	—	—	16 ч	EC, α
	^{212}Rn	—	—	0,4 ч	α
	^{221}Rn	—	—	0,4 ч	β^-, α
	^{222}Rn	—	—	3,82 сут	α
	^{212}Fr	—	—	0,32 ч	EC, α
	^{222}Fr	—	—	0,25 ч	β^-
	^{223}Fr	—	—	0,35 ч	β^-
88	^{222}Ra	—	—	11,4 сут	α
	^{224}Ra	—	—	3,65 сут	α
	^{225}Ra	—	—	15 сут	β^-
	^{226}Ra	—	—	1620 лет	α
	^{227}Ra	—	—	0,7 ч	β^-
	^{228}Ra	—	—	6,7 года	β^-
	^{230}Ra	—	—	1 ч	β^-

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
89	^{224}Ac	—	—	3 ч	EC, α
	^{225}Ac	—	—	10 сут	α
	^{226}Ac	—	—	1 сут	β^-, EC
	^{227}Ac	3/2	1,1	22 года	β^-, α
	^{228}Ac	3	—	6,1 ч	β^-
	^{229}Ac	—	—	1,1 ч	β^-
	^{228}Th	—	—	0,5 ч	α
90	^{227}Th	—	—	18,7 сут	α
	^{228}Th	—	—	1,9 года	α
	^{229}Th	5/2	0,5	7300 лет	α
	^{230}Th	—	—	$8 \cdot 10^4$ лет	α
	^{231}Th	—	—	25,5 ч	β^-
	^{232}Th	0	0	$1,4 \cdot 10^{10}$ лет	α
	^{233}Th	—	—	0,37 ч	β^-
91	^{234}Th	—	—	24 сут	β^-
	^{227}Pa	—	—	0,64 ч	α, EC
	^{228}Pa	—	—	22 ч	EC, α
	^{229}Pa	—	—	1,5 сут	EC, α
	^{230}Pa	—	—	17 сут	EC, β^-
	^{231}Pa	3/2	$\pm 2,0$	$3,3 \cdot 10^4$ лет	α
	^{232}Pa	—	—	1,3 сут	β^-
92	^{233}Pa	3/2	3,5	27 сут	β^-
	^{234}Pa	—	—	6,7 ч	β^-
	^{235}Pa	—	—	0,4 ч	β^-
	^{236}Pa	—	—	0,2 ч	β^-
	^{237}Pa	—	—	0,65 ч	β^-
	^{228}U	—	—	1 ч	EC, α
	^{230}U	—	—	20 сут	α
93	^{232}U	—	—	70 лет	α
	^{233}U	5/2	0,6	$1,59 \cdot 10^8$ лет	α
	^{234}U	0	0	$2,6 \cdot 10^8$ лет	α
	^{235}U	7/2	-0,3	$7,04 \cdot 10^8$ лет	α
	^{236}U	—	—	$2,4 \cdot 10^7$ лет	α
	^{237}U	1/2	—	6,7 сут	β^-
	^{238}U	0	0	$4,5 \cdot 10^8$ лет	α
94	^{239}U	—	—	0,4 ч	β^-
	^{240}U	—	—	14 ч	β^-
	^{231}Np	—	—	0,9 ч	EC, α
	^{232}Np	—	—	0,2 ч	EC
	^{233}Np	—	—	0,6 ч	EC
	^{234}Np	—	—	4,4 сут	EC
	^{235}Np	—	—	1,1 года	EC
95	^{236}Np	—	—	20 ч	EC, β^-
	^{237}Np	5/2	3,1	$2,1 \cdot 10^8$ лет	α
	^{238}Np	2	—	2,1 сут	β^-
	^{239}Np	5/2	0,3	2,35 сут	β^-
	^{240}Np	—	—	1,1 ч	β^-
	^{241}Np	—	—	0,3 ч	α, β^-
	^{232}Pu	—	—	0,6 ч	EC, α
96	^{233}Pu	—	—	0,3 ч	EC
	^{234}Pu	—	—	9 ч	EC, α
	^{235}Pu	—	—	0,4 ч	EC
	^{236}Pu	—	—	2,8 года	α
	^{237}Pu	7/2	—	46 сут	EC
	^{238}Pu	—	—	89 лет	α

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
94	^{239}Pu	1/2	0,20	$2,411 \cdot 10^4$ лет	α
	^{240}Pu	—	—	6600 лет	α
	^{241}Pu	5/2	-0,71	14 лет	β^-
	^{242}Pu	—	—	$3,8 \cdot 10^5$ лет	α
	^{243}Pu	—	—	5,0 ч	β^-
	^{244}Pu	—	—	$8 \cdot 10^7$ лет	α
	^{245}Pu	—	—	10 ч	β^-
	^{246}Pu	—	—	11 сут	β^-
	^{237}Am	—	—	1,4 ч	EC
	^{238}Am	—	—	1,9 ч	EC
95	^{239}Am	—	—	12 ч	EC
	^{240}Am	—	—	2,1 сут	EC
	^{241}Am	5/2	1,6	433 года	α
	^{242}Am	1	0,39	16 ч	β^-, EC
	^{243}Am	5/2	1,6	$7,4 \cdot 10^3$ лет	α
	^{244}Am	—	—	10 ч	β^-
	^{245}Am	—	—	2 ч	β^-
	^{246}Am	—	—	0,4 ч	β^-
	^{247}Am	—	—	0,4 ч	β^-
	^{238}Cm	—	—	2,5 ч	EC, α
96	^{239}Cm	—	—	3 ч	EC
	^{240}Cm	—	—	27 сут	α
	^{241}Cm	—	—	36 сут	EC, α
	^{242}Cm	0	0	162 сут	α
	^{243}Cm	5/2	$\pm 0,4$	28 лет	α
	^{244}Cm	—	—	18 лет	α
	^{245}Cm	7/2	$\pm 0,5$	$8 \cdot 10^3$ лет	α
	^{246}Cm	—	—	$3 \cdot 10^3$ лет	α
	^{247}Cm	9/2	$\pm 0,4$	$1,6 \cdot 10^7$ лет	α
	^{248}Cm	—	—	$5 \cdot 10^5$ лет	α, sf
97	^{249}Cm	—	—	1,1 ч	β^-
	^{250}Cm	—	—	$2 \cdot 10^4$ лет	sf
	^{243}Bk	—	—	4,5 ч	EC
	^{244}Bk	—	—	4,4 ч	EC
	^{245}Bk	—	—	5,0 сут	EC
	^{246}Bk	—	—	1,8 сут	EC
	^{247}Bk	—	—	58,3 сут	α
	^{248}Bk	—	—	20 ч	β^-, EC
	^{249}Bk	7/2	± 2	310 сут	β^-
	^{250}Bk	—	—	2 ч	β^-
98	^{251}Bk	—	—	1 ч	β^-
	$^{244}\text{ Cf}$	—	—	0,3 ч	α
	$^{245}\text{ Cf}$	—	—	35 ч	α, sf
	$^{247}\text{ Cf}$	—	—	2,5 ч	EC
	$^{248}\text{ Cf}$	—	—	1 год	α
	$^{249}\text{ Cf}$	—	—	400 лет	α
	$^{250}\text{ Cf}$	—	—	13 лет	α, sf
	$^{251}\text{ Cf}$	—	—	10^3 лет	α
	$^{252}\text{ Cf}$	—	—	2,6 года	α, sf
	$^{253}\text{ Cf}$	—	—	18 сут	β^-
99	$^{254}\text{ Cf}$	—	—	60 сут	sf
	$^{248}\text{ Es}$	—	—	0,4 ч	EC
	$^{249}\text{ Es}$	—	—	2 ч	EC
	$^{250}\text{ Es}$	—	—	8 ч	EC

Продолжение табл. 2.2

Атомный номер	Символ и массовое число	Спин ядра i	μ/μ_N	$T_{1/2}$	Канал распада
99	^{251}Es	—	—	1,5 сут	EC
	^{252}Es	—	—	140 сут	α
	^{253}Es	7/2	4,1	20,5 сут	α
	^{254}Es	—	—	270 сут	α
	^{255}Es	—	—	40 сут	β^-, α
	^{250}Fm	—	—	0,5 ч	α, EC
	^{251}Fm	—	—	7 ч	EC, α
100	^{252}Fm	—	—	1 сут	α, sf
	^{253}Fm	—	—	3 сут	EC, α
	^{254}Fm	—	—	3,2 ч	α
	^{255}Fm	—	—	20 ч	α, sf
	^{256}Fm	—	—	3 ч	sf, α
	^{257}Fm	—	—	90 сут	α, sf
	^{255}Md	—	—	0,6 ч	EC, α
101	^{256}Md	—	—	1,3 ч	EC, α
	^{257}Md	—	—	3 ч	α
	^{258}Md	—	—	50 сут	α

§ 2.2. Атомные массы элементов и массы изотопов

Приведенные ниже данные характеризуют атомные массы элементов и массы ряда наиболее распространенных, долгоживущих изотопов. В принятой терминологии «атомная масса элемента» $A_r(E)$ («относительная атомная масса») определяет усредненную по естественному изотопному составу массу атома элемента, выраженную в единицах массы выделенного изотопа углерода: $m(^{12}\text{C}) = 12$ а. е. м. Переход к этой системе атомных единиц массы произошел на рубеже 60-х годов нашего столетия.

Ввиду наличия у большинства элементов изотопов, атомная масса элемента не может рассматриваться в качестве постоянной в природе величины, а зависит от происхождения образца, содержащего исследуемый элемент. Отсюда понятна важность установления согласованных значений рассматриваемой величины, учитывающих достигнутый уровень научных и технологических применений химических элементов. Эту задачу взяла на себя Комиссия по атомным массам элементов при Международном союзе чистой и прикладной химии. Приводимые ниже значения атомных масс элементов соответствуют официальному бюллетеню этой организации [4] по данным за 1977 г.

Погрешность в определении атомной массы элемента определяется суммарной погрешностью измерения массы изотопов и распространенности изотопов в исследуемом образце; эта полная погрешность и приведена в табл. 2.3. В принятой записи погрешность величины определяется видом последней цифры. Если последняя цифра имеет нормальный размер, то оцениваемая погрешность $\leq \pm 1$ в этой значащей цифре; последняя цифра уменьшена по

размеру наполовину, если погрешность находится в пределах ± 1 — ± 3 для этой значащей цифры. Наконец, если расчетная погрешность превышала ± 3 , то число цифр уменьшалось на единицу. По рекомендации упомянутой Комиссии значения атомных масс элементов отмечены также дополнительными метками, снабжающими пользователя информацией о надежности приводимых данных:

w — элемент, для которого известные вариации изотопного состава в нормальных образцах земного происхождения препятствуют более точному определению атомной массы; значения $A_r(E)$ следует относить к любому «нормальному» образцу;

x — элемент, для которого известны геологические образцы с аномальным изотопным составом, так что наблюдаемое в этих случаях расхождение атомной массы элемента от приведенной в табл. 2.3 может существенно превысить установленную погрешность;

y — элемент, для которого могут иметь место вариации величины A_r по отношению к приведенным в табл. 2.3 значениям из-за неумышленных и неидентифицированных изменений изотопного состава в коммерчески доступных образцах;

z — элемент, для которого величина A_r соответствует наиболее долгоживущему изотопу.

Таблица 2.3

Атомные массы элементов $A_r(E)$ (на 1977 г.) и массы наиболее распространенных изотопов (на 1977 г.)

[по соглашению $m(^{12}\text{C}) \equiv 12$ а. е. м.; 1 а. е. $m_0 = 1,660551 \cdot 10^{-24}$ г = 931,50 МэВ]

Атомный номер	Символ элемента	Название элемента	Атомная масса, а. е. м.	Примечание	
				Символ и массовое число изотопа	Масса изотопа, а. е. м.
0	<i>n</i>	Нейтрон	1,0079 ^w		1,00866
1	H	Водород	1,0079 ^w	¹ H—водород	1,007825
				² H—дейтерий	2,01410
				³ H—тритий	3,01605
2	He	Гелий	4,00260 ^x	³ He—гелий—3	3,01603
				⁴ He—гелий—4	4,00260
3	Li	Литий	6,94 ₁ ^{w, x, y}	⁶ Li	6,01512
				⁷ Li	7,01600
4	Be	Бериллий	9,01218	⁹ Be	9,01218
5	B	Бор	10,81 ^{w, y}	¹⁰ B	10,0129
				¹¹ B	11,0093
6	C	Углерод	12,011 ^w	¹² C	12
				¹³ C	13,00335
7	N	Азот	14,0067	¹⁴ N	14,00307
				¹⁵ N	15,00011
8	O	Кислород	15,999 ^{w, z}	¹⁶ O	15,99491
				¹⁷ O	16,99913
				¹⁸ O	17,99916

Продолжение табл. 2.3

Атомный номер	Символ элемента	Название элемента	Атомная масса, а. е. м.	Примечание	
				Символ и массовое число изотопа	Масса изотопа, а. е. м.
9	F	Фтор	18,998403	¹⁹ F	18,99840
10	Ne	Неон	20,17 ^y ₉	²⁰ Ne	19,99244
				²² Ne	21,99138
11	Na	Натрий	22,98977	²³ Na	22,98977
12	Mg	Магний	24,305 ^x	²⁴ Mg	23,9850
				²⁵ Mg	24,9858
				²⁶ Mg	25,9826
13	Al	Алюминий	26,98154	²⁷ Al	26,9815
14	Si	Кремний	28,085 ₆	²⁸ Si	27,9769
				²⁹ Si	28,9765
15	P	Фосфор	30,97376	³¹ P	30,97376
16	S	Сера	32,06 ^w	³² S	31,9721
				³⁴ S	33,9679
17	Cl	Хлор	35,453	³⁵ Cl	34,9689
				³⁷ Cl	36,9659
18	Ar	Аргон	39,94 ^w ₈ , ^x	³⁶ Ar	35,9675
				⁴⁰ Ar	39,9624
19	K	Калий	39,098 ₃	³⁹ K	38,9637
				⁴¹ K	40,9618
20	Ca	Кальций	40,08 ^x	⁴⁰ Ca	39,9626
				⁴² Ca	41,9586
				⁴⁴ Ca	43,9555
21	Sc	Скандий	44,9559	⁴⁵ Sc	44,95591
22	Ti	Титан	47,9 ₀	⁴⁸ Ti	47,94795
23	V	Ванадий	50,9415	⁵¹ V	50,94396
24	Cr	Хром	51,996	⁵² Cr	51,9405
				⁵³ Cr	52,9407
25	Mn	Марганец	54,9380	⁵⁵ Mn	54,93805
26	Fe	Железо	55,84 ₇	⁵⁴ Fe	53,9396
				⁵⁶ Fe	55,9349
				⁵⁷ Fe	56,9354
27	Co	Кобальт	58,9332	⁵⁹ Co	58,93320
28	Ni	Никель	58,70	⁵⁸ Ni	57,9353
				⁶⁰ Ni	59,9308
29	Cu	Медь	63,54 ^w ₆	⁶³ Cu	62,9296
				⁶⁵ Cu	64,9278
30	Zn	Цинк	65,38	⁶⁴ Zn	63,9291
				⁶⁶ Zn	65,9260
				⁶⁸ Zn	67,9248
31	Ga	Галлий	69,72	⁶⁹ Ga	68,9256
				⁷¹ Ga	70,9247
32	Ge	Германий	72,5 ₉	⁷⁰ Ge	69,9242
				⁷² Ge	71,9221
				⁷⁴ Ge	73,9212
33	As	Мышьяк	74,9216	⁷⁵ As	74,92160
34	Se	Селен	78,9 ₆	⁷⁸ Se	77,9173
				⁸⁰ Se	79,9165
35	Br	Бром	79,904	⁷⁹ Br	78,9183
				⁸¹ Br	80,9163

Продолжение табл. 2.3

Атомный номер	Символ элемента	Название элемента	Атомная масса, а. е. м.	Примечание	
				Символ и массовое число изотопа	Масса изотопа, а. е. м.
36	Kr	Криптон	83,80 ^{x,y}	⁸² Kr ⁸³ Kr ⁸⁴ Kr ⁸⁵ Kr ⁸⁵ Rb ⁸⁷ Rb ⁸⁶ Sr ⁸⁷ Sr ⁸⁸ Sr ⁸⁹ Y ⁹⁰ Zr ⁹¹ Zr ⁹² Zr ⁹⁴ Zr ⁹⁵ Nb ⁹² Mo ⁹⁵ Mo ⁹⁶ Mo ⁹⁸ Mo ⁹⁷ Tc* ⁹⁸ Tc* ⁹⁹ Tc*	81,9135 82,9141 83,9115 84,9125 84,9118 86,9092 85,9093 86,9089 87,9056 88,90586 89,9047 90,9056 91,9050 93,9063 92,90638 91,9068 94,9058 95,9047 97,9054 96,9064 97,9072 98,9062
37	Rb	Рубидий	85,467 ^{x,y}		
38	Sr	Стронций	87,62 ^x		
39	Y	Иттрий	88,9059		
40	Zr	Цирконий	91,22 ^x		
41	Nb	Ниобий	92,9064		
42	Mo	Молибден	95,94		
43	Tc	Технеций	[98]		
44	Ru	Рутений	101,0 ^{x,y}	¹⁰¹ Ru ¹⁰² Ru ¹⁰⁴ Ru ¹⁰³ Rh ¹⁰⁴ Pd ¹⁰⁵ Pd ¹⁰⁶ Pd ¹⁰⁸ Pd ¹¹⁰ Pd ¹⁰⁷ Ru ¹⁰¹ Ru ¹⁰³ Ru ¹⁰⁴ Ru ¹⁰² Rh ¹⁰³ Pd ¹⁰⁴ Pd ¹⁰⁵ Pd ¹⁰⁷ Pd ¹⁰⁹ Pd ¹⁰⁶ Ag ¹⁰⁸ Ag ¹¹² Cd ¹¹⁴ Cd ¹¹³ In ¹¹⁵ In ¹¹⁶ Sn ¹¹⁸ Sn ¹²⁰ S ¹²¹ Sb ¹²³ Sb ¹²⁶ Te ¹²⁸ Te ¹³⁰ Te ¹²⁶ I ¹²⁹ Xe ¹³¹ Xe ¹³² Xe ¹³³ Cs ¹³⁷ Ba ¹³⁸ Ba ¹³⁹ La	100,9056 101,9043 103,9054 102,90550 103,9040 104,9051 105,9035 107,9039 109,9052 106,9051 108,9048 111,9028 113,9034 112,9041 114,9039 115,9017 117,9016 119,9022 120,9038 122,9042 125,9033 127,9045 129,9062 126,90448 128,9048 130,9051 131,9041 132,90543 136,9058 137,9052 138,90636
45	Rh	Родий	102,9055		
46	Pd	Палладий	106,4 ^x		
47	Ag	Серебро	107,868 ^x		
48	Cd	Кадмий	112,41 ^x		
49	In	Индий	114,82 ^x		
50	Sn	Олово	118,6 ₉		
51	Sb	Сурьма	121,7 ₅		
52	Te	Теллур	127,6 ^{x,y}		
53	I	Иод	126,9045		
54	Xe	Ксенон	131,30 ^{x,y}		
55	Cs	Цезий	132,9054		
56	Ba	Барий	137,33 ^x		
57	La	Лантан	138,905 ^{x,y}		

Продолжение табл. 2.3

Атомный номер	Символ элемента	Название элемента	Атомная масса, а. е. м.	Примечание	
				Символ и массовое число изотопа	Масса изотопа, а. е. м.
58	Ce	Церий	140,12 ^x	¹⁴⁰ Ce ¹⁴² Ce	139,9054 141,9092
59	Pr	Празеодим	140,9077	¹⁴¹ Pr	140,90766
60	Nd	Неодим	144,2 ^x ₄	¹⁴² Nd ¹⁴³ Nd ¹⁴⁴ Nd ¹⁴⁶ Nd ¹⁴⁵ Pm*	141,9077 142,9098 143,9101 145,9131 144,9145
61	Pm	Прометий	[145]	¹⁴⁶ Pm* ¹⁴⁷ Pm*	145,9175 146,9190
62	Sm	Самарий	150,4 ^x	¹⁴⁷ Sm ¹⁴⁸ Sm ¹⁴⁹ Sm ¹⁵⁰ Sm ¹⁵² Sm ¹⁵⁴ Sm	146,9149 147,9148 148,9172 151,9197 153,9222
63	Eu	Европий	151,96 ^x	¹⁵¹ Eu ¹⁵³ Eu	150,937 152,935
64	Gd	Гадолиний	157,2 ^x ₅	¹⁵⁵ Gd ¹⁵⁶ Gd ¹⁵⁷ Gd ¹⁵⁸ Gd ¹⁶⁰ Gd	154,9226 155,9221 156,9240 157,9241 159,9271
65	Tb	Тербий	158,9254	¹⁵⁹ Tb	158,92535
66	Dy	Диспрозий	162,5 ₉	¹⁶¹ Dy ¹⁶² Dy ¹⁶³ Dy ¹⁶⁴ Dy	160,9269 161,9268 162,9287 163,9292
67	Ho	Гольмий	164,9304	¹⁶⁵ Ho	164,93033
68	Er	Эрбий	167,2 ₆	¹⁶⁶ Er ¹⁶⁷ Er ¹⁶⁸ Er ¹⁷⁰ Er	165,9303 166,9321 167,9324 169,9355
69	Tm	Тулций	168,9342	¹⁶⁹ Tm	168,93423
70	Yb	Иттербий	173,0 ₄	¹⁷¹ Yb ¹⁷² Yb ¹⁷³ Yb ¹⁷⁴ Yb ¹⁷⁶ Yb	170,9363 171,9364 172,9382 173,9389 175,9426
71	Lu	Лю	174,96 ₇	¹⁷⁵ Lu ¹⁷⁶ Lu	174,9408 175,9427
72	Hf	Гафний	178,4 ₉	¹⁷⁷ Hf ¹⁷⁸ Hf ¹⁷⁹ Hf ¹⁸⁰ Hf	176,9432 177,9437 178,9458 179,9466
73	Ta	Тантал	180,947 ₉	¹⁸¹ Ta	180,94801
74	W	Вольфрам	183,8 ₅	¹⁸² W ¹⁸³ W ¹⁸⁴ W ¹⁸⁶ W ¹⁸⁵ Re	181,9482 182,9502 183,9510 185,9544 184,9530
75	Re	Рений	186,207	¹⁸⁷ Re	186,9558

Продолжение табл. 2.3

Атомный номер	Символ элемента	Название элемента	Атомная масса, а. е. м.	Примечание	
				Символ и массовое число изотопа	Масса изотопа, а. е. м.
76	Os	Осмий	190,2 ^x	¹⁸⁸ Os ¹⁸⁹ Os ¹⁹⁰ Os ¹⁹² Os ¹⁹¹ Ir ¹⁹³ Ir ¹⁹⁴ Pt ¹⁹⁵ Pt ¹⁹⁶ Pt ¹⁹⁸ Pt	187,9559 188,9582 189,9585 191,9615 190,9606 192,9629 193,9627 194,9648 195,9649 197,9679
77	Ir	Иридий	192,2 ₂	¹⁹¹ Ir	190,9606
78	Pt	Платина	195,0 ₉	¹⁹⁴ Pt ¹⁹⁵ Pt ¹⁹⁶ Pt ¹⁹⁷ Pt	193,9627 194,9648 195,9649 197,9679
79	Au	Золото	196,9665	¹⁹⁷ Au	196,96656
80	Hg	Ртуть	200,5 ₉	¹⁹⁸ Hg ¹⁹⁹ Hg ²⁰⁰ Hg ²⁰¹ Hg ²⁰² Hg	197,9668 198,9683 199,9683 200,9703 201,9706
81	Tl	Таллий	204,3 ₇	²⁰³ Tl ²⁰⁵ Tl	202,9723 204,9744
82	Pb	Свинец	207,2 ^{w, x}	²⁰⁶ Pb ²⁰⁷ Pb ²⁰⁸ Pb	205,9744 206,9759 207,9766
83	Bi	Висмут	208,9804	²⁰⁹ Bi	208,98039
84	Po	Полоний	[209]	²⁰⁸ Po* ²⁰⁹ Po*	207,9812 208,9824
85	At	Астат	[210]	²¹⁰ At*	209,9871
86	Rn	Радон	[222]	²²² Rn*	222,0176
87	Fr	Франций	[223]	²²³ Fr*	223,0197
88	Ra	Радий	226,0254 ^{x, z}	²²⁵ Ra* ²²⁸ Ra*	226,02541 228,0311
89	Ac	Актиний	227,0278 ^z	²²⁷ Ac*	227,02775
90	Th	Торий	232,0381 ^{x, z}	²³² Th ²³³ Th* ²³⁰ Th*	232,03805 229,0318 230,0331
91	Pa	Протактиний	231,0359 ^z	²³¹ Pa*	231,03588
92	U	Уран	238,029 ^{x, y}	²³² U* ²³³ U* ²³⁴ U* ²³⁵ U* ²³⁶ U* ²³⁸ U*	232,03714 233,03963 234,04095 235,04393 236,04556 238,05079
93	Np	Нептуний	237,0482 ^z	²³⁵ Np* ²³⁷ Np*	235,04406 237,04817
94	Pu	Плутоний	[244]	²³⁸ Pu* ²³⁹ Pu* ²⁴⁰ Pu* ²⁴¹ Pu* ²⁴² Pu* ²⁴⁴ Pu*	238,04956 239,05216 240,05381 241,05685 242,05874 244,06420
95	Am	Америций	[243]	²⁴¹ Am* ²⁴³ Am*	241,0568 243,0614
96	Cm	Кюрий	[247]	²⁴³ Cm* ²⁴⁴ Cm* ²⁴⁵ Cm*	243,0614 244,0627 245,0655

Продолжение табл. 2.3

Атомный номер	Символ элемента	Название элемента	Атомная масса, а. е. м.	Примечание	
				Символ и массовое число изотопа	Масса изотопа, а. е. м.
96				$^{246}\text{Cm}^*$ $^{247}\text{Cm}^*$ $^{248}\text{Cm}^*$ $^{250}\text{Cm}^*$ $^{247}\text{Bk}^*$ $^{249}\text{Bk}^*$ $^{248}\text{Cf}^*$ $^{249}\text{Cf}^*$ $^{250}\text{Cf}^*$ $^{251}\text{Cf}^*$ $^{252}\text{Cf}^*$ $^{253}\text{Es}^*$ $^{254}\text{Es}^*$ $^{252}\text{Fm}^*$ $^{253}\text{Fm}^*$ $^{255}\text{Fm}^*$ $^{257}\text{Fm}^*$	246,0672 247,0703 248,0723 250,0784 247,0703 249,0750 248,0722 249,0748 250,0764 251,0796 252,0816 253,0848 254,0880 252,0825 253,0852 255,0900 257,0951
97	Bk	Берклий	[247]		
98	Cf	Калифорний	[251]		
99	Es	Эйнштейний	[252]		
100	Fm	Фермий	[257]		
101	Md	Менделевий	[258]		
102	No	Нобелий	[259]	$^{252}\text{No}^*$ $^{256}\text{No}^*$ $^{259}\text{No}^*$	252,0890 256,0943 259,1009
103	Lr	Лоуренсий	[260]	—	—

Помимо рекомендованных значений атомных масс элементов в табл. 2.3 включены также значения масс для ряда распространенных в современной технологии изотопов [5]. Зная изотопный состав элемента в исследуемом образце, по ним рассчитывается значение атомной массы элемента. Звездочкой (*) отмечены наиболее долгоживущие изотопы элемента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Holden N. E. Isotopic composition of the elements and their variation in nature: a preliminary report, Information analysis center report. National nuclear data center, Brookhaven national laboratory, March 1977.
- Lederer C. M., Shirley V. S. (eds). Tables of Isotopes (7th edition), John Wiley & Sons, Inc., N.-Y., 1978.
- Fuller G. H. «J. Phys. Chem. Ref. Data», 1976, v. 5, p. 835;
Fuller G. H., Cohen V. W. «Nucl. Data Tables», 1969, v. A5, p. 433.
- Atomic weights of the elements 1977.—«Pure Appl. Chem.», 1979, v. 51, p. 405.
- Wapstra A. H., Bos K. «Atomic Data and Nucl. Data Tables», 1977, v. 19, p. 177; Wapstra A. H., Gove N. B. «Nucl. Data Tables», 1971, v. 9, p. 265.

Глава 3

СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМНЫХ ЧАСТИЦ

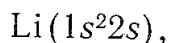
§ 3.1. Электронные конфигурации и термы основных состояний атомов

Состояния электронов в атоме. Строго говоря, состояния системы электронов и ядра, образующих атомную частицу, можно рассматривать только в целом. Приближенная и наиболее употребительная модель атомной частицы связана с представлением, согласно которому каждый электрон движется в некотором эффективном центрально-симметрическом поле, созданном ядром и всеми остальными электронами (или, как говорят, в *самосогласованном* поле).

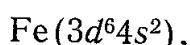
В нерелятивистском приближении характер движения отдельного электрона в центральном поле полностью определяется значениями его орбитального момента количества движения $l = 0, 1, 2, \dots$, проекцией этого момента на некоторое направление $l_z = m = l, l-1, \dots, -l$, а также энергией (все моменты частиц в квантовой механике измеряются в единицах \hbar — постоянной Планка, которую для краткости опускают). Для обозначения состояний с различными l существует общепринятая символика, устанавливающая их соответствие с буквами латинского алфавита:

l , ед. \hbar	0	1	2	3	4	5	6
Принятое обозначение	s	p	d	f	g	h	i

Состояния электрона с заданным l нумеруют в порядке возрастания их энергии главным квантовым числом n , пробегающим значения $l+1, l+2, \dots$. Состояния отдельных электронов с различными n и l принято обозначать символом, состоящим из цифры, указывающей значение n , и буквы, указывающей значение l , а если имеется несколько электронов с одинаковыми значениями n и l , то их число обозначают в виде соответствующего показателя степени. Например, совокупность электронов в атоме лития в основном состоянии обозначается следующим образом:



так что два электрона находятся в состоянии с главным квантовым числом 1 и нулевым орбитальным моментом, а один — в состоянии с $n=2$ и $l=0$. Аналогично внешние электроны атома железа в основном состоянии заполняют состояния



так что шесть электронов находятся в состоянии с $n=3$ и $l=2$, а два — в состоянии с $n=4$ и $l=0$. О распределении электронов в атомной частице по состояниям с различными значениями n и l говорят как об *электронной конфигурации*.

Далее, каждое состояние электрона в центральном поле характеризуется определенной четностью, зависящей целиком от его орбитального момента l . Четные состояния отвечают четным l и соответствующая волновая функция электрона не меняется при преобразовании инверсии координат, и наоборот. Соответственно состояние системы невзаимодействующих электронов четно, если сумма моментов частиц принимает четные значения; классификация состояний электронов по их четности необходима для установления правил отбора для излучательных переходов атомных частиц.

Наконец, любой частице следует приписать наличие собственного момента количества движения («спин») s и проекции спина на выбранное направление s_z , которые не связаны с ее движением в пространстве. Для электрона $s=1/2$, а $s_z=\pm 1/2$ (в единицах \hbar). В итоге полная характеристика состояния электрона осуществляется заданием четырех квантовых чисел: n , l , l_z и s_z . При заданных числах n и l имеется $2(2l+1)$ состояний электрона с различными значениями чисел l_z и s_z (*вырождение уровня* nl). Поскольку из-за принципа Паули в каждом состоянии с квантовыми числами n , l , l_z , s_z может находиться только один электрон, то не более чем $2(2l+1)$ электронов в атомной частице могут иметь одинаковые значения n и l ; электроны, обладающие этим последним свойством, называются эквивалентными, а их совокупность образует заполненную либо незаполненную *оболочку* данного типа. Таким образом в заполненных *s*-оболочке имеются 2 электрона, в p — 6 электронов, в d — 10 электронов, в f — 14 электронов и т. д. Впрочем, употребительна также терминология, согласно которой об электронах с главными квантовыми числами $n=1, 2, 3, 4, 5, 6\dots$ говорят как об электронах соответственно *K*-, *L*-, *M*-, *N*-, *O*-, *P*-... оболочек, так что в *K*-оболочке могут находиться 2 электрона ($1s^2$), в *L* — 8 электронов ($2s^2 2p^6$), в *M* — 18 электронов ($3s^2 3p^6 3d^{10}$), в *N* — 32 электрона ($4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14}$) и т. д.

Учет релятивистских эффектов приводит к тому, что энергия электрона начинает зависеть и от взаимной ориентации его моментов l и s , которые отдельно уже не сохраняются; в итоге каждый уровень энергии электрона nl должен характеризоваться значением полного момента электрона $j=l\pm 1/2$ (*тонкое расщепление уровней*), которое принято указывать справа внизу после спектроскопического обозначения l : например, $np_{1/2}$ или $nd_{5/2}$ и т. д. К уровню энергии электрона nlj относятся $(2j+1)$ состояний, отличающихся значением проекции его полного момента $m_j=l_z+s_z$. Правило отбора по квантовому числу j имеет вид: $\Delta j=0, \pm 1$, а совокупность линий, образованных переходами между компонентами тонкой структуры уровней nl и $n'l'$, называется *мультиплетом* (оптические переходы $nlj \rightarrow n'l'j'$).

Систематика уровней атомных частиц. Приведем принятые в спектроскопии обозначения электронных состояний атомов и атомных ионов. В приближении центрального поля энергия атомной частицы полностью определяется заданием электронной конфигурации $\{nl\}$. Если учесть нецентральные электростатические межэлектронные взаимодействия и спин-орбитальное взаимодействие электронов, то уровень энергии $n_1l_1, n_2l_2\dots$ расщепляется на целый ряд подуровней. Практически оказалось достаточным строить систематику этих подуровней на основе двух предельных подходов, когда одно из отмеченных выше взаимодействий считается малым по сравнению с другим. Экспериментальные данные показывают, что при переходе от легких элементов к тяжелым происходит более или менее непрерывный переход от случая, когда электростатическое взаимодействие превышает спин-орбитальное (*LS-связь*), к обратному случаю (*jj-связь*), хотя последний случай в чистом виде встречается редко и гораздо большее значение имеет промежуточный тип связи.

Учет только электростатического взаимодействия электронов приводит к расщеплению уровня, соответствующего заданной электронной конфигурации, на ряд подуровней (термов), характеризуемых квантовыми числами полного орбитального момента электронов L и полного спина электронов S . Возможные значения L и S находят, применяя общие правила сложения моментов отдельных электронов l_i и s_i и принцип Паули; для значений полного момента L принята символика:

L , ед. \hbar	0	1	2	3	4	5	6	7	8
Принятое обозначение	S	P	D	F	G	H	I	K	L

четность состояний, относящихся к данному терму LS , отмечают индексом справа вверху от L (0 — нечетное состояние, четные состояния никак не отмечают). Если принять во внимание релятивистские эффекты, то терм LS расщепится на ряд компонент (*тонкое расщепление*), которым ствечают различные значения полного момента электронов $J=L+S$, пробегающие при заданных L и S диапазон величин: $L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$. В итоге уровни энергии атомной частицы в этом приближении характеризуют заданными значениями L, S, J и четностью с помощью принятого обозначения:

$$^{2S+1}L_J^{(0)},$$

где слева вверху указана *мультиплетность* терма $(2S+1)$, отмечаяющая при $L>S$ число уровней с различными J для терма LS , а справа внизу указывают значение полного момента электронов J . Например, $^2P_0^{(0)}$ обозначает нечетный уровень энергии

с $L=1$, $S=1/2$, $J=3/2$, а уровню 5D_4 отвечают квантовые числа $L=2$, $S=2$, $J=4$ и положительная четность состояния. Наконец, отметим, что в рассматриваемом приближении каждый уровень с заданными значениями L , S , J остается вырожденным по направлениям вектора J ; кратность этого вырождения $(2J+1)$. Поскольку к терму LS относятся всего $(2L+1)(2S+1)$ состояний, отличающихся значениями проекций моментов на выделенное направление, а сумма $\sum_J (2J+1) = (2L+1)(2S+1)$, если перенаправление,

брать все возможные для данных LS значения J , то в итоге получаем, что спин-орбитальное взаимодействие не меняет числа состояний для терма LS .

Для рассмотренного выше случая LS -связи типична группировка уровней энергии, когда расстояние между разными термами одной электронной конфигурации значительно меньше, чем между одинаковыми термами разных конфигураций; кроме того, расстояние между соседними термами существенно превышает разность между компонентами тонкой структуры каждого из термов (фактически это и составляет условие относительной малости релятивистских эффектов). Эмпирически было установлено, что для данной электронной конфигурации наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным значением S и наибольшим (возможным при этом S) значением L (правило Хунда).

В случае jj -связи спин-орбитальное взаимодействие электронов существенно превышает электростатическое межэлектронное взаимодействие (точнее, ту его часть, которая связана с зависимостью энергии от квантовых чисел L и S) и можно говорить лишь о сохранении полного момента электрона j , поскольку моменты l и s в отдельности не сохраняются. При этом состояние каждого электрона задается четырьмя квантовыми числами $nljm_j$, причем при заданном j имеем $l=j \pm 1/2$. Если отбросить электростатическое взаимодействие электронов, то энергия каждого электрона будет зависеть только от значений nlj , а каждое j -состояние будет $(2j+1)$ -кратно вырождено; энергия уровня атомной частицы определяется набором квантовых чисел $n_l i_l j_i$ для каждого электрона. Если учесть теперь электростатическое взаимодействие электронов, то уровень энергии $\{n_l i_l j_i\}$ расщепится на ряд подуровней, характеризуемых значениями полного момента электронной подсистемы J . Возможные значения J находят сложением моментов j_i в полный момент заданной электронной конфигурации и учетом принципа Паули. Состояния с заданными значениями моментов j_1 , j_2 и J обозначают $(j_1 j_2)_J$, так что $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$. Для заданной электронной конфигурации общее число уровней с заданным значением J одинаково как в случае LS -связи, так и в случае jj -связи.

Для сильно возбужденных состояний некоторых атомных частиц (в частности, атомов благородных газов, иона Cu II и т. п.) реализуется случай промежуточной jl -связи, когда спин-орбитальное взаимодействие электронов атомного остатка превышает элек-

статическое взаимодействие сильновозбужденного валентного электрона с электронами остатка. При этом атомный остаток можно характеризовать значениями орбитального и спинового моментов, а его связь с сильновозбужденным электроном — описывать в приближении jj -связи. Пусть квантовые числа L , S и j характеризуют моменты электронов атомного остатка, а l — возбужденного электрона. Состояние $LSjl$ при учете электростатического взаимодействия выделенного электрона с атомным остатком даст ряд подуровней, каждому из которых отнесено значение квантового числа K суммарного момента $j+l=K$. С учетом спин-орбитального взаимодействия возбужденного электрона каждый из уровней $LSjlK$ распадается на две компоненты, которым надо присвоить значения полного момента электронов атомной частицы J , причем $J=K\pm 1/2$.

В итоге уровни энергии рассматриваемой атомной частицы характеризуется набором квантовых чисел $LSjlKJ$, который условились обозначать следующим образом:

$$^{2s+1}L_j nl[K]_J,$$

где n — главное квантовое число валентного электрона. Для случая jl -связи характерна группировка уровней энергии, когда расстояние между уровнями $LSjlK$ и $LS'j'K'$ существенно меньше аналогичного показателя для уровней $LSjlK$ и $L'S'j'lK$, относящихся к разным состояниям атомного остатка, и много больше дублетного расщепления уровня $LSjlK$ по квантовому числу J .

Электронные конфигурации и термы основных состояний атомов. Основным состоянием атомной частицы называется *состояние с наименьшей возможной энергией*. При переходе от одного невозбужденного атома к другому увеличивается на единицу заряд ядра Z и к электронной оболочке добавляется один электрон, который занимает наименее из незанятых состояний, разрешенных принципом Паули. Энергия связи добавляемого электрона изменяется в целом немонотонно по мере роста атомного номера элемента (Z), и последовательное заполнение электронных оболочек нарушается своеобразной конкуренцией между ns -, nd - и nf -состояниями. Это связано с особенностью d - и f -состояний, когда электрон находится здесь существенно ближе к ядру, чем в s - и p -состояниях. В итоге последовательно заполняющиеся группы состояний электронов можно распределить следующим образом:

$1s \dots$	2 электрона	$5s4d5p \dots$	18 электронов
$2s2p \dots$	8 электронов	$6s4f5d6p \dots$	32 электрона
$3s3p \dots$	8 электронов	$7s6d5f \dots$	
$4s3d4p \dots$	18 электронов		

Элементы с заполненными d - и f -оболочками (или не содержащие их вообще) называют элементами *главных групп*, а все элементы с заполняющимися d - и f -оболочками — элементами *промежуточных групп*. В табл. 3.1, 3.2 приведены электронные конфигу-

рации и термы основных состояний этих элементов. В табл. 3.2 представлены конфигурации электронов сверх заполненных электронных оболочек. Индекс внизу слева у символа элемента указывает на его *атомный номер* в периодической таблице элементов, соответствующий заряду ядра Z .

Таблица 3.1

Электронные конфигурации и термы элементов главных групп

Главное квантовое число	Заполняющиеся электронные оболочки								Заполненные электронные оболочки
	ns	ns^2	s^2np	s^2np^2	s^2np^3	s^2np^4	s^2np^5	s^2np^6	
2	³ Li	⁴ Be	⁵ B	⁶ C	⁷ N	⁸ O	⁹ F	¹⁰ Ne	$1s^2$
3	¹¹ Na	¹² Mg	¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P	¹⁶ S	¹⁷ Cl	¹⁸ Ar	$2s^22p^6$
4	¹⁹ K	²⁰ Ca	—	—	—	—	—	—	$3s^23p^6$
4	²⁹ Cu	³⁰ Zn	³¹ Ga	³² Ge	³³ As	³⁴ Se	³⁵ Br	³⁶ Kr	$3d^{10}$
5	³⁷ Rb	³⁸ Sr	—	—	—	—	—	—	$4s^24p^6$
5	⁴⁷ Ag	⁴⁸ Cd	⁴⁹ In	⁵⁰ Sn	⁵¹ Sb	⁵² Te	⁵³ I	⁵⁴ Xe	$4d^{10}$
6	⁵⁵ Cs	⁵⁶ Ba	—	—	—	—	—	—	$5s^25p^6$
6	⁷⁹ Au	⁸⁰ Hg	⁸¹ Tl	⁸² Pb	⁸³ Bi	⁸⁴ Po	⁸⁵ At	⁸⁶ Rn	$4f^{14}5d^{10}$
7	⁸⁷ Fr	⁸⁸ Ra	—	—	—	—	—	—	$6s^26p^6$
Терм основного состояния	$^2S_{1/2}$	1S_0	$^2P_{1/2}$	3P_0	$^4S_{3/2}$	3P_2	$^2P_{3/2}$	1S_0	—

Таблица 3.2

Электронные конфигурации и термы элементов промежуточных групп

1. Группа железа (заполнена электронная оболочка аргона)

Атом	²¹ Sc	²² Ti	²³ V	²⁴ Cr	²⁵ Mn	²⁶ Fe	²⁷ Co	²⁸ Ni
Электронная конфигурация	$3d4s^2$	$3d^24s^2$	$3d^34s^2$	$3d^54s$	$3d^54s^2$	$3d^64s^2$	$3d^74s^2$	$3d^84s^2$
Терм основного состояния	$^2D_{3/2}$	3F_2	$^4F_{3/2}$	7S_3	$^6S_{5/2}$	5D_4	$^4F_{9/2}$	3F_4

2. Группа палладия (заполнена электронная оболочка криптона)

Атом	³⁹ Y	⁴⁰ Zr	⁴¹ Nb	⁴² Mo	⁴³ Tc	⁴⁴ Ru	⁴⁵ Rh	⁴⁶ Pd
Электронная конфигурация	$4d5s^2$	$4d^25s^2$	$4d^45s$	$4d^65s$	$4d^55s^2$	$4d^75s$	$4d^85s$	$4d^{10}$
Терм основного состояния	$^2D_{3/2}$	3F_2	$^6D_{1/2}$	7S_3	$^6S_{5/2}$	5F_5	$^4F_{9/2}$	1S_0

Продолжение табл. 3.2

3. Группа платины (для лантана заполнена электронная оболочка атома ксенона, для остальных — электронная оболочка ксенона и электронная оболочка, содержащая 14 4f-электронов)

Атом	$_{57}\text{La}$							
Электронная конфигурация	$5d6s^2$							
Терм основного состояния	$^2D_{3/2}$							
Атом	$_{71}\text{Lu}$	$_{72}\text{Hf}$	$_{73}\text{Ta}$	$_{74}\text{W}$	$_{75}\text{Re}$	$_{76}\text{Os}$	$_{77}\text{Ir}$	$_{78}\text{Pt}$
Электронная конфигурация	$5d6s^2$	$5d^26s^2$	$5d^36s^2$	$5d^46s^2$	$5d^56s^2$	$5d^66s^2$	$5d^76s^2$	$5d^96s$
Терм основного состояния	$^2D_{3/2}$	3F_2	$^4F_{3/2}$	5D_0	$^6S_{5/2}$	5D_4	$^4F_{9/2}$	3D_3

4. Группа редкоземельных элементов (заполнена электронная оболочка ксенона)

Атом	$_{58}\text{Ce}$	$_{59}\text{Pr}$	$_{60}\text{Nd}$	$_{61}\text{Pm}$	$_{62}\text{Sm}$	$_{63}\text{Eu}$	
Электронная конфигурация	$4f5d6s^2$		$4f^36s^2$		$4f^46s^2$		$4f^66s^2$
Терм основного состояния	$^1G_{\frac{9}{2}}$		$^4I_{\frac{9}{2}}$		5I_4		$^6H_{\frac{5}{2}}$
Атом	$_{64}\text{Gd}$	$_{65}\text{Tb}$	$_{66}\text{Dy}$	$_{67}\text{Ho}$	$_{68}\text{Er}$	$_{69}\text{Tm}$	$_{70}\text{Yb}$
Электронная конфигурация	$4f^75d6s^2$	$4f^96s^2$	$4f^{10}6s^2$	$4f^{11}6s^2$	$4f^{12}6s^2$	$4f^{13}6s^2$	$4f^{14}6s^2$
Терм основного состояния	9D_2	$^6H_{\frac{15}{2}}$	5I_8	$^4I_{\frac{15}{2}}$	3H_6	$^2F_{\frac{7}{2}}$	1S_0

5. Группа актиноидов (заполнена электронная оболочка радона)

Атом	$_{89}\text{Ac}$	$_{90}\text{Th}$	$_{91}\text{Pa}$	$_{92}\text{U}$
Электронная конфигурация	$6d7s^2$	$6d^27s^2$	$5f^2 (^3H_4) 6d7s^2$	$5f^3 (^4I_{\frac{9}{2}}) 6d7s^2$
Терм основного состояния	$^2D_{3/2}$	3F_2	$(4, \frac{3}{2})_{11/2}$	$\left(\frac{9}{2}, -\frac{3}{2}\right)_6^0$

Продолжение табл. 3.2

Атом	$_{93}\text{Np}$	$_{94}\text{Pu}$	$_{95}\text{Am}$	$_{96}\text{Cm}$
Электронная конфигурация	$5f^4 ({}^5I_4) 6d7s^2$	$5f^6 7s^2$	$5f^7 7s^2$	$5f^7 ({}^8S^0_{7/2}) 6d7s^2$
Терм основного состояния	$\left(4, -\frac{3}{2}\right)_{11/2}$	7F_0	${}^8S^0_{7/2}$	$\left(\frac{7}{2}, \frac{3}{2}\right)_2$
Атом	$_{97}\text{Bk}$	$_{98}\text{ Cf}$	$_{99}\text{Es}$	$_{100}\text{Fm}$
Электронная конфигурация	$5f^9 7s^2$	$5f^{10} 7s^2$	$5f^{11} 7s^2$	$5f^{12} 7s^2$
Терм основного состояния	${}^6H^0_{15/2}$	5I_8	${}^4I^0_{15/2}$	3H_6
				$\left\{ {}^2F^0_{7/2} \right\}$
				$\left\{ {}^1S_0 \right\}$
Атом	$_{101}\text{Md}$	$_{102}\text{No}$		
	$\left\{ {}^5f^{13} 7s^2 \right\}$	$\left\{ {}^5f^{14} 7s^2 \right\}$		

§ 3.2. Периодическая система элементов

Особенности строения электронных термов и связанные с ними физико-химические свойства атомов нашли свое отражение в Периодической системе элементов Д. И. Менделеева. Согласно принятому в настоящее время способу, все элементы в природе подразделяют таблично горизонтальными строками на семь периодов и вертикальными столбцами на восемь групп, условно вынося часть элементов за границы указанного деления ($_{27}\text{Co}$, $_{28}\text{Ni}$, $_{45}\text{Rh}$, $_{46}\text{Pd}$, $_{77}\text{Ir}$, $_{78}\text{Pt}$, лантаноиды и актиноиды). На форзаце приведена получающаяся в результате таблица элементов, в которой указаны: символ и название элемента, его атомный номер (Z) и атомная масса (или массовое число наиболее устойчивого изотопа), заполняющаяся электронная оболочка и первые три потенциала ионизации элемента в электронвольтах (эВ).

§ 3.3. Параметры волновых функций валентных электронов в атомах, положительных и отрицательных ионах

Данные о структуре электронных оболочек атомных частиц представляют интерес для физики атомных столкновений, молекулярной физики, физики твердого тела и т. п. С появлением быстродействующих ЭВМ и эффективных программ решений соответствующих волновых уравнений (в приближении самосогласованного поля) результаты численных расчетов уровней энергии многоэлектронных систем и распределений электронной плотности превратились в надежный источник сведений о структуре изолированных атомов и ионов.

В следующих табл. 3.3—3.5 приведены параметры радиальных волновых функций внешних (валентных) электронов атомных частиц с зарядом ядра $Z \leqslant 55$. Эти функции заданы в аналитич-

ском виде и получены путем разложения в ряд по базису слэтеровских атомных орбиталей в рамках нерелятивистского приближения [6]:

$$\begin{aligned}\varphi(nlm) &= \sum_i C_i \chi_{n_i l m}(r, \theta, \varphi); \\ \chi_{n_i l m}(r, \theta, \varphi) &= R_{n_i l}(r) Y_{l m}(\theta, \varphi); \\ R_{n_i l}(r) &= [(2n_i)!]^{-1/2} (2\zeta_i)^{n_i+1/2} r^{n_i-1} \exp(-\zeta_i r) = N_i r^{n_i-1} \exp(-\zeta_i r).\end{aligned}$$

Здесь nlm — квантовые числа электрона; $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — нормированная шаровая функция, а радиальные части функций φ и χ нормированы на единицу с весом r^2 ; C_i , ζ_i , N_i — коэффициенты, характеризующие радиальное распределение электронной плотности. Кроме того, в таблицах приведены расчетные значения средних степеней расстояния валентного электрона от ядра:

$$\langle r^\alpha \rangle = \int_0^\infty r^\alpha |\varphi|^2 r^2 dr,$$

$\alpha = -1, 0, 2$, а также асимптотические параметры A и γ , определяющие амплитуду волновой функции валентного электрона в области расстояний r от ядра, удаленных по сравнению со средним размером атомных частиц. Указанные параметры характеризуют асимптотику решения одноэлектронного волнового уравнения при $r\gamma \gg 1$, где $(-\gamma^2/2)$ — потенциал ионизации атомной частицы:

$$-\frac{1}{2} \Delta_r \varphi + [l(l+1)/r^2 - Z_{\text{ост}}/r] \varphi = -(\gamma^2/2) \varphi(nl|r), \quad r \rightarrow \infty,$$

так что $Z_{\text{ост}}$ — заряд атомного остатка, равный 0, 1 и 2 соответственно для отрицательного иона, атома и одноэлектронного положительного иона. Решение этого последнего уравнения имеет вид

$$\lim_{r\gamma \gg 1} \varphi(nl|r) \approx A r^{Z_{\text{ост}}/\gamma - 1} \exp(-r\gamma) \left\{ 1 - \frac{Z_{\text{ост}}}{2r\gamma^2} \left(\frac{Z_{\text{ост}}}{\gamma} - 1 \right) + \frac{l(l+1)}{2r\gamma} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right\},$$

где асимптотический коэффициент A находят сшивкой данного решения с самосогласованной волновой функцией валентного электрона [7]. Для элементов с зарядом ядра $Z > 55$ имеются данные только о цифровых волновых функциях электронов [8, 9], поэтому в таблице собраны лишь значения величин $\langle r^\alpha \rangle$, r_{\max} (положение главного максимума волновой функции), A и γ для валентного электрона в соответствующем нейтральном атоме.

Таблица 3.3

Параметры волновых функций валентных электронов в атомах, а. е.
 $Z = 2$, Гелий — $\text{He}({}^1S_0)$, $\varphi(1s)$

$\chi\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
1s	1,4171	0,7684	3,374
1s	2,3768	0,2235	7,329
1s	4,3963	0,0408	18,44
1s	6,5270	-0,0099	33,35
1s	7,9425	0,0023	44,77

$$\langle r \rangle = 0,927; \langle r^2 \rangle = 1,185;$$

$$A = 2,87 \pm 0,01; \gamma = 1,344$$

$Z = 4$, Бериллий — $\text{Be}({}^1S_0)$, $\varphi(2s)$

$\chi\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
1s	3,4712	-0,1709	12,93
1s	6,3686	-0,0146	32,14
2s	0,778	0,2119	0,6169
2s	0,9407	0,6250	0,9910
2s	1,4873	0,2666	3,115
2s	2,718	-0,0992	14,07

$$\langle r \rangle = 2,649; \langle r^2 \rangle = 8,426;$$

$$A = 1,62 \pm 0,04; \gamma = 0,828$$

$Z = 6$, Углерод — $\text{C}({}^3P_0)$, $\varphi(2p)$

$\chi\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	0,9807	0,2824	1,100
2p	1,4436	0,5470	2,891
2p	2,6005	0,2320	12,59
2p	6,5100	0,0103	124,9

$$\langle r \rangle = 1,743; \langle r^2 \rangle = 3,890;$$

$$A = 1,30 \pm 0,07; \gamma = 0,910$$

$Z = 3$, Литий — $\text{Li}({}^2S_{1/2})$, $\varphi(2s)$

$\chi\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
1s	2,4767	-0,1463	7,796
1s	4,6987	-0,0152	20,37
2s	0,3835	0,0038	0,1052
2s	0,6606	0,9805	0,4095
2s	1,07	0,1097	1,3675
2s	1,632	-0,1102	3,929

$$\langle r \rangle = 3,874; \langle r^2 \rangle = 17,74;$$

$$A = 0,82 \pm 0,01; \gamma = 0,630$$

$Z = 5$, Бор — $\text{B}({}^2P_{1/2})$, $\varphi(2p)$

$\chi\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	0,8748	0,5362	0,8265
2p	1,3699	0,4034	2,536
2p	2,3226	0,1165	9,493
2p	5,5948	0,0082	85,49

$$\langle r \rangle = 2,205; \langle r^2 \rangle = 6,146;$$

$$A = 0,88 \pm 0,03; \gamma = 0,781$$

$Z = 7$, Азот — $\text{N}({}^4S_{3/2})$, $\varphi(2p)$

$\chi\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	1,1607	0,2664	1,676
2p	1,7047	0,5232	4,381
2p	3,0394	0,2735	18,60
2p	7,1748	0,0129	159,2

$$\langle r \rangle = 1,447; \langle r^2 \rangle = 2,707;$$

$$A = 1,5 \pm 0,1; \gamma = 1,034$$

$Z = 8$, Кислород — O (3P_2), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	1,1439	0,1692	1,616
2p	1,8173	0,5797	5,141
2p	3,4499	0,3235	25,53
2p	7,5648	0,0166	181,7

$$\langle r \rangle = 1,239; \langle r^2 \rangle = 2,001;$$

$$A = 1,3 \pm 0,1; \gamma = 1,00$$

$Z = 10$, Неон — Ne (1S_0), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	1,4521	0,2180	2,934
2p	2,3817	0,5334	10,11
2p	4,4849	0,3293	49,19
2p	9,1346	0,0187	291,2

$$\langle 1/r \rangle = 1,435; \langle r \rangle = 0,965; \langle r^2 \rangle = 1,228$$

$$A = 1,76 \pm 0,10; \gamma = 1,259$$

$Z = 12$, Магний — Mg (1S_0), $\varphi(3s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2s	4,4051	-0,1323	47,03
2s	2,9954	-0,1127	17,93
3s	1,4723	0,4724	1,633
3s	0,8917	0,6101	0,2823

$$\langle r \rangle = 3,253; \langle r^2 \rangle = 12,42;$$

$$A = 1,32 \pm 0,03; \gamma = 0,750$$

$Z = 14$, Кремний — Si (3P_0), $\varphi(3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	7,9691	0,0508	207,0
2p	4,1376	0,1774	40,21
3p	1,8190	-0,4216	3,422
3p	1,0646	-0,6577	0,5249

$$\langle r \rangle = 2,788; \langle r^2 \rangle = 9,254;$$

$$A = 1,10 \pm 0,06; \gamma = 0,774$$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 9$, Фтор — F (2P_0)_{3/2}, $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	1,2657	0,1783	2,081
2p	2,0580	0,5619	7,016
2p	3,9285	0,3366	35,32
2p	8,2041	0,0190	222,6

$$\langle r \rangle = 1,085; \langle r^2 \rangle = 1,544;$$

$$A = 1,59 \pm 0,08; \gamma = 1,132$$

$Z = 11$, Натрий — Na (${}^2S_{1/2}$), $\varphi(3s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2s	3,8593	-0,1183	33,79
2s	2,3943	-0,0662	10,24
3s	1,2528	0,2794	0,9279
3s	0,7461	0,7814	0,1512

$$\langle r \rangle = 4,209; \langle r^2 \rangle = 20,70;$$

$$A = 0,74 \pm 0,01; \gamma = 0,615$$

$Z = 13$, Алюминий — Al (2P_0)_{1/2}, $\varphi(3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	7,2078	-0,0448	161,1
2p	3,6541	-0,1498	29,47
3p	1,6828	0,2679	2,606
3p	0,9138	0,8038	0,3076

$$\langle r \rangle = 3,434; \langle r^2 \rangle = 14,01;$$

$$A = 0,61 \pm 0,03; \gamma = 0,663$$

$Z = 15$, Фосфор — P (${}^4S_{3/2}$), $\varphi(3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	8,7449	0,0526	261,1
2p	4,6300	0,2012	53,28
3p	2,0645	-0,4908	5,331
3p	1,2267	-0,5940	0,8620

$$\langle r \rangle = 2,369; \langle r^2 \rangle = 6,694;$$

$$A = 1,65 \pm 0,10; \gamma = 0,878$$

$Z = 16$, Сера — $S(^3P_2)$, $\varphi(3p)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$2p$	9,5125	-0,0524	322,3
$2p$	6,1205	-0,2201	68,51
$3p$	2,3379	0,5377	8,239
$3p$	1,3333	0,5615	1,154

$\langle r \rangle = 2,069$; $\langle r^2 \rangle = 5,116$;
 $A = 1,11 \pm 0,07$; $\gamma = 0,873$

$Z = 18$, Аргон — $Ar(^1S_0)$, $\varphi(3p)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$2p$	11,07	-0,0494	470,8
$2p$	6,1066	-0,5614	106,4
$3p$	2,9034	0,5696	17,58
$3p$	1,6226	0,5431	2,294

$\langle 1/r \rangle = 0,814$; $\langle r \rangle = 1,663$; $\langle r^2 \rangle = 3,311$;
 $A = 2,11 \pm 0,04$; $\gamma = 1,076$

$Z = 20$, Кальций — $Ca(^1S_0)$, $\varphi(4s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$2s$	9,3003	-0,0212	304,6
$2s$	7,2676	0,1465	164,4
$3s$	3,6997	-0,2091	41,07
$3s$	2,5701	-0,0965	11,48
$4s$	1,4341	0,5179	0,5709
$4s$	0,8667	0,5836	0,0592

$\langle r \rangle = 4,218$; $\langle r^2 \rangle = 20,45$;
 $A = 0,95 \pm 0,06$; $\gamma = 0,670$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 17$, Хлор — $Cl(^3P_0)_{3/2}$, $\varphi(3p)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$2p$	10,29	-0,0514	392,0
$2p$	5,6130	-0,2377	86,19
$3p$	2,6242	0,5554	12,34
$3p$	1,4746	0,5519	1,642

$\langle r \rangle = 1,842$; $\langle r^2 \rangle = 4,059$;
 $A = 1,78 \pm 0,07$; $\gamma = 0,976$

$Z = 19$, Калий — $K(^3S_{1/2})$, $\varphi(4s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$2s$	8,5026	-0,0140	243,4
$2s$	6,7454	0,1097	136,5
$3s$	3,4800	-0,1555	33,15
$3s$	2,3268	-0,0788	8,102
$4s$	1,2053	0,4058	0,2611
$4s$	0,7277	0,6757	0,0270

$\langle r \rangle = 5,244$; $\langle r^2 \rangle = 31,54$;
 $A = 0,52 \pm 0,03$; $\gamma = 0,565$

$Z = 21$, Скандий — $Sc(^3D_{3/2})$, $\varphi(4s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$2s$	7,7646	0,1508	194,0
$3s$	3,9271	-0,2234	50,61
$3s$	2,7006	-0,0792	13,65
$4s$	1,5384	0,5172	0,7829
$4s$	0,9141	0,5870	0,0752

$\langle r \rangle = 3,96$; $\langle r^2 \rangle = 18,07$;
 $A = 1,11 \pm 0,04$; $\gamma = 0,693$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 22$, Титан — Ti (3F_2), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	8,2522	0,1495	225,9
3s	4,1466	-0,2320	61,22
3s	2,7991	-0,0615	15,47
4s	1,6185	0,5172	0,9838
4s	0,9489	0,5874	0,0890

$$\langle r \rangle = 3,766; \langle r^2 \rangle = 16,39; \\ A = 1,16 \pm 0,04; \gamma = 0,708$$

$Z = 24$, Хром — Cr (7S_3), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	9,1541	0,1458	292,8
3s	4,7273	-0,2023	96,84
3s	3,1374	-0,0524	23,07
4s	1,7444	0,4536	1,378
4s	0,9623	0,6545	0,0948

$$\langle r \rangle = 3,843; \langle r^2 \rangle = 17,21; \langle 1/r \rangle = 0,329; \\ A = 1,13 \pm 0,03; \gamma = 0,705$$

$Z = 26$, Железо — Fe (5D_4), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	10,131	0,1509	377,2
3s	5,2166	-0,2138	136,7
3s	3,4762	-0,0510	33,02
4s	1,9252	0,5016	2,148
4s	1,0774	0,6071	0,1576

$$\langle r \rangle = 3,242; \langle r^2 \rangle = 12,25; \\ A = 1,40 \pm 0,06; \gamma = 0,761$$

$Z = 28$, Никель — Ni (3F_4), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	11,05	0,1529	468,3
3s	5,7963	-0,2005	197,7
3s	3,8721	-0,0542	48,17
4s	2,0771	0,4929	3,023
4s	1,1389	0,6188	0,2023

$$\langle r \rangle = 3,055; \langle r^2 \rangle = 10,93; \\ A = 1,42 \pm 0,01; \gamma = 0,749$$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 23$, Ванадий — V (${}^4F_{3/2}$), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	8,7282	0,1487	259,9
3s	4,3956	-0,2309	75,08
3s	2,9401	-0,054	18,37
4s	1,6973	0,5133	1,219
4s	0,9828	0,5919	0,1042

$$\langle r \rangle = 3,607; \langle r^2 \rangle = 15,07; \\ A = 1,18 \pm 0,02; \gamma = 0,704$$

$Z = 25$, Марганец — Mn (${}^6S_{5/2}$), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	9,6693	0,1498	335,7
3s	4,9405	-0,2181	113,0
3s	3,2909	-0,0513	27,26
4s	1,8449	0,5046	1,773
4s	1,0441	0,6024	0,1368

$$\langle r \rangle = 3,349; \langle r^2 \rangle = 13,05; \\ A = 1,31 \pm 0,04; \gamma = 0,739$$

$Z = 27$, Кобальт — Co (${}^4F_{9/2}$), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	10,589	0,1518	421,3
3s	5,5025	-0,2074	164,8
3s	3,6714	-0,0521	39,98
4s	2,0014	0,4976	2,558
4s	1,1084	0,6125	0,1791

$$\langle r \rangle = 3,144; \langle r^2 \rangle = 11,55; \\ A = 1,42 \pm 0,04; \gamma = 0,760$$

$Z = 29$, Медь — Cu (${}^2S_{1/2}$), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	C_i	N_i
2s	11,45	0,1308	512,2
3s	6,1933	-0,1533	249,3
3s	4,0847	-0,0422	58,08
4s	2,0076	0,4143	2,594
4s	1,0368	0,6983	0,1326

$$\langle 1/r \rangle = 0,382; \langle r \rangle = 3,331; \langle r^2 \rangle = 13,08; \\ A = 1,29 \pm 0,01; \gamma = 0,754$$

$Z = 30$, Цинк — Zn (1S_0), $\varphi(4s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
2s	11,91	0,1550	564,9
3s	6,4259	-0,1848	283,6
3s	4,2954	-0,0608	69,26
4s	2,2212	0,4843	4,088
4s	1,1951	0,6304	0,2513

$$\langle r \rangle = 2,898; \langle r^2 \rangle = 9,869;$$

$$A = 1,69 \pm 0,08; \gamma = 0,831$$

$Z = 32$, Германий — Ge (3P_0), $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
3p	6,7820	-0,1557	342,5
3p	4,2606	-0,0736	67,31
4p	2,2886	0,4669	4,677
4p	1,2516	0,6437	0,3094

$$\langle r \rangle = 2,904; \langle r^2 \rangle = 9,951;$$

$$A = 1,29 \pm 0,06; \gamma = 0,762$$

$Z = 34$, Селен — Se (3P_2), $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
3p	7,2781	-0,2015	438,5
3p	4,6810	-0,0934	93,57
4p	2,7150	0,5509	10,09
4p	1,5114	0,5721	0,7229

$$\langle r \rangle = 2,309; \langle r^2 \rangle = 6,256;$$

$$A = 1,52 \pm 0,08; \gamma = 0,847$$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 31$, Галлий — Ga (${}^2P_{1/2}$), $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
3p	6,5222	-0,1261	298,8
3p	4,0381	-0,0571	55,79
4p	2,0596	0,4061	2,910
4p	1,0709	0,7055	0,1534

$$\langle r \rangle = 3,424; \langle r^2 \rangle = 13,90;$$

$$A = 0,60 \pm 0,02; \gamma = 0,664$$

$Z = 33$, Мышьяк — As (${}^4S_{3/2}$), $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
3p	7,0563	-0,175	393,5
3p	4,5083	-0,0871	82,03
4p	2,4974	0,5156	6,928
4p	1,4078	0,5960	0,5252

$$\langle r \rangle = 2,561; \langle r^2 \rangle = 7,716;$$

$$A = 1,58 \pm 0,08; \gamma = 0,850$$

$Z = 35$, Бром — Br (${}^2P_{3/2}$), $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
3p	7,6018	-0,2134	510,7
3p	5,0178	-0,1076	119,3
4p	2,9199	0,5821	14,00
4p	1,6241	0,5472	0,9993

$$\langle r \rangle = 2,112; \langle r^2 \rangle = 5,224;$$

$$A = 1,83 \pm 0,03; \gamma = 0,932$$

$Z = 36$, Криптон — Kr (1S_0), $\varphi(4p)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	7,9359	-0,2192	593,7
$3p$	5,3714	-0,1237	151,4
$4p$	3,1274	0,6039	19,06
$4p$	1,7460	0,5302	1,384

$$\langle r \rangle = 0,669; \langle r \rangle = 1,952;$$

$$\langle r^2 \rangle = 4,455; A = 2,22 \pm 0,03; \gamma = 1,014$$

$Z = 38$, Странций — Sr (1S_0), $\varphi(5s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	9,603	0,0228	1157
$3s$	7,1809	0,1242	418,4
$4s$	4,1612	-0,1986	68,92
$4s$	2,8205	-0,1154	11,98
$5s$	1,6304	0,5087	0,3494
$5s$	0,9613	0,6091	0,0191

$$\langle r \rangle = 4,633; \langle r^2 \rangle = 24,50;$$

$$A = 0,86 \pm 0,04; \gamma = 0,647$$

$Z = 40$, Цирконий — Zr (3F_2), $\varphi(5s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	10,81	0,0144	1754
$3s$	7,8217	0,1502	564,3
$4s$	4,4526	-0,2554	93,47
$4s$	3,0309	-0,0634	16,55
$5s$	1,7957	0,5559	0,5945
$5s$	1,0428	0,5633	0,0299

$$\langle r \rangle = 4,078; \langle r^2 \rangle = 19,05;$$

$$A = 1,15 \pm 0,06; \gamma = 0,709$$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 37$, Рубидий — Rb (${}^2S_{1/2}$), $\varphi(5s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	9,3132	0,0245	1039
$3s$	6,7684	0,0884	340,1
$4s$	3,8861	-0,1667	50,66
$4s$	2,5250	-0,0739	7,278
$5s$	1,3802	0,4481	0,1398
$5s$	0,804	0,6557	0,0072

$$\langle r \rangle = 5,632; \langle r^2 \rangle = 36,18;$$

$$A = 0,48 \pm 0,02; \gamma = 0,554$$

$Z = 39$, Иттрий — Y (${}^2D_{3/2}$), $\varphi(5s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	10,28	0,0196	1468
$3s$	7,489	0,1383	484,7
$4s$	4,2802	-0,2364	78,25
$4s$	2,9141	-0,0806	13,87
$5s$	1,7052	0,5590	0,4473
$5s$	0,9973	0,5686	0,0234

$$\langle r \rangle = 4,300; \langle r^2 \rangle = 21,14;$$

$$A = 1,02 \pm 0,07; \gamma = 0,685$$

$Z = 41$, Ниобий — Nb (${}^6D_{1/2}$), $\varphi(5s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	11,31	0,0148	2049
$3s$	7,9335	0,1531	593,0
$4s$	4,6835	-0,2611	117,3
$4s$	3,1068	-0,0502	18,51
$5s$	1,8474	0,5507	0,6948
$5s$	1,0654	0,5668	0,0337

$$\langle r \rangle = 0,298; \langle r \rangle = 4,207; \langle r^2 \rangle = 20,37;$$

$$A = 1,16 \pm 0,06; \gamma = 0,711$$

$Z = 42$, Молибден — Mo (7S_3), $\varphi(5s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3s	8,2694	0,1644	685,6
4s	4,9249	-0,2615	147,1
4s	3,2627	-0,053	23,06
5s	1,9412	0,5478	0,9123
5s	1,1033	0,5749	0,0408

$$\langle 1/r \rangle = 0,307; \langle r \rangle = 4,079; \langle r^2 \rangle = 19,19;$$

$$A = 1,23 \pm 0,07; \gamma = 0,722$$

$Z = 44$, Рутений — Ru (5F_5), $\varphi(5s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3s	8,9592	0,1704	907,6
4s	5,3203	-0,2554	208,3
4s	3,5534	-0,0328	33,87
5s	2,0443	0,5238	1,213
5s	1,1310	0,5997	0,0468

$$\langle 1/r \rangle = 0,324; \langle r \rangle = 3,877; \langle r^2 \rangle = 17,42;$$

$$A = 1,22 \pm 0,07; \gamma = 0,736$$

$Z = 46$, Палладий — Pd (1S_0), $\varphi(4d)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3d	16,12	-0,0685	7085
3d	9,1000	-0,2381	958,5
4d	5,79	0,2391	304,7
4d	3,4769	0,5889	30,71
4d	1,7379	0,3837	1,355

$$\langle 1/r \rangle = 0,893; \langle r \rangle = 1,533; \langle r^2 \rangle = 2,951;$$

$$A = 0,26 \pm 0,01; \gamma = 0,783$$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 43$, Технеций — Tc ($^6S_{5/2}$), $\varphi(5s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3s	8,8204	0,1750	859,3
4s	5,0392	-0,2743	163,1
4s	3,4213	-0,0350	28,56
5s	2,0196	0,5546	1,134
5s	1,1471	0,5655	0,0505

$$\langle r \rangle = 3,650; \langle r^2 \rangle = 15,34;$$

$$A = 1,28 \pm 0,06; \gamma = 0,736$$

$Z = 45$, Родий — Rh ($^4F_{9/2}$), $\varphi(5s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3s	9,313	0,1722	1039
4s	5,5376	-0,2468	249,4
4s	3,7113	-0,0282	41,18
5s	2,0886	0,5119	1,365
5s	1,1416	0,6127	0,0492

$$\langle 1/r \rangle = 0,331; \langle r \rangle = 3,795; \langle r^2 \rangle = 16,73;$$

$$A = 1,19 \pm 0,08; \gamma = 0,741$$

$Z = 47$, Серебро — Ag ($^2S_{1/2}$), $\varphi(5s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3s	10,14	0,1654	1399
4s	5,8718	-0,2176	324,6
4s	3,9877	-0,0557	56,90
5s	2,6640	0,2528	5,203
5s	1,6501	0,5102	0,3733
5s	1,0419	0,3948	0,0298

$$\langle 1/r \rangle = 0,344; \langle r \rangle = 3,656; \langle r^2 \rangle = 15,59;$$

$$A = 1,18 \pm 0,09; \gamma = 0,746$$

$Z = 48$, Кадмий — Cd (1S_0), φ ($5s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	10,48	0,1974	1568
$4s$	6,0667	-0,2692	376,0
$4s$	4,1340	-0,0222	66,92
$5s$	2,3520	0,5436	2,622
$5s$	1,2920	0,5819	0,0972

$$\langle r \rangle = 3,237; \langle r^2 \rangle = 12,17;$$

$$A = 1,6 \pm 0,1; \gamma = 0,813$$

$Z = 50$, Олово — Sn (3P_0), φ ($5p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	10,18	0,1295	1419
$4p$	6,4829	-0,2121	507,1
$4p$	4,2737	-0,0805	77,71
$5p$	2,3587	0,5310	2,664
$5p$	1,3201	0,5938	0,1094

$$\langle r \rangle = 3,286; \langle r^2 \rangle = 12,53;$$

$$A = 1,02 \pm 0,08; \gamma = 0,735$$

$Z = 52$, Теллур — Te (3P_2), φ ($5p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	11,14	0,2002	1944
$4p$	6,9546	-0,2499	695,2
$4p$	4,7319	-0,1156	122,9
$5p$	2,7367	0,5934	6,033
$5p$	1,5618	0,5402	0,2759

$$\langle r \rangle = 2,701; \langle r^2 \rangle = 8,411;$$

$$A = 1,65 \pm 0,07; \gamma = 0,814$$

Продолжение табл. 3.3

$Z = 49$, Индий — In (2P_0), φ ($5p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	9,8279	0,1052	1255
$4p$	6,2086	-0,1849	417,2
$4p$	4,0263	-0,0553	59,42
$5p$	2,1421	0,4874	1,568
$5p$	1,1494	0,6415	0,0511

$$\langle r \rangle = 3,778; \langle r^2 \rangle = 16,65;$$

$$A = 0,58 \pm 0,05; \gamma = 0,652$$

$Z = 51$, Сурьма — Sb (${}^4S_3/2$), φ ($5p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	10,59	0,1571	1631
$4p$	6,738	-0,2319	602,9
$4p$	4,5108	-0,1026	99,09
$5p$	2,5594	0,5610	4,174
$5p$	1,4736	0,5633	0,2004

$$\langle r \rangle = 2,952; \langle r^2 \rangle = 10,07;$$

$$A = 1,67 \pm 0,08; \gamma = 0,797$$

$Z = 53$, Иод — I (2P_0), φ ($5p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	11,34	0,2190	2070
$4p$	7,2450	-0,2639	835,7
$4p$	4,9772	-0,1361	154,3
$5p$	2,9205	0,6140	8,625
$5p$	1,6711	0,5258	0,4002

$$\langle r \rangle = 2,502; \langle r^2 \rangle = 7,201;$$

$$A = 1,94 \pm 0,09; \gamma = 0,876$$

$Z = 54$, Ксенон — Xe (1S_0), $\varphi(5p)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	τ_i	C_i	N_i
$3p$	10,97	0,1679	1844
$4p$	7,6011	-0,2787	1037
$4p$	5,2292	-0,1577	192,7
$5p$	3,0947	0,6344	11,86
$5p$	1,7808	0,5103	0,5677

$$\langle 1/r \rangle = 0,547; \langle r \rangle = 2,338; \langle r^2 \rangle = 6,277;$$

$$A = 2,4 \pm 0,1; \gamma = 0,944$$

Продолжение табл. 3.3
 $Z = 55$, Цезий — Cs (${}^2S_{1/2}$), $\varphi(6s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	τ_i	C_i	N_i
$4s$	8,3108	0,0513	1550
$4s$	5,2332	0,1927	193,3
$5s$	4,8313	-0,2161	137,4
$5s$	2,8150	-0,1647	7,045
$6s$	1,7238	0,2310	0,1425
$6s$	1,0242	0,8515	0,0048

$$\langle r \rangle = 6,306; \langle r^2 \rangle = 44,99;$$

$$A = 0,41 \pm 0,05; \gamma = 0,535$$

Z	Элемент	$\varphi(nl)$	r_{\max}	$\langle 1/r \rangle$	$\langle r \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	A	γ
56	Барий — Ba (1S_0)	$\varphi(6s)$	$4,5 \pm 0,5$	—	5,257	31,27	$0,72 \pm 0,09$	0,619
57	Лантан — La (${}^2D_{3/2}$)	$\varphi(6s)$	4,159	0,250	4,931	27,56	$0,7 \pm 0,2$	0,642
73	Тантал — Ta (${}^4F_{3/2}$)	$\varphi(6s)$	$1,6 \pm 0,2$	—	3,920	17,59	$1,31 \pm 0,10$	0,761
74	Вольфрам — W (5D_0)	$\varphi(6s)$	$1,4 \pm 0,2$	—	3,798	16,54	$1,35 \pm 0,09$	0,766
78	Платина — Pt (3D_3)	$\varphi(6s)$	3,006	0,332	3,759	16,37	$1,4 \pm 0,1$	0,813
79	Золото — Au (${}^2S_{1/2}$)	$\varphi(6s)$	2,948	0,337	3,701	16,89	$1,4 \pm 0,1$	0,823
80	Ртуть — Hg (1S_0)	$\varphi(6s)$	2,678	0,376	3,328	12,80	$1,8 \pm 0,2$	0,876
81	Таллий — Tl (${}^2P_{1/2}^0$)	$\varphi(6p)$	$3,0 \pm 0,2$	—	3,926	17,88	$0,65 \pm 0,03$	0,670
82	Свинец — Pb (3P_0)	$\varphi(6p)$	$2,8 \pm 0,2$	—	3,457	13,78	$1,1 \pm 0,2$	0,739
83	Висмут — Bi (${}^4S_{3/2}^0$)	$\varphi(6p)$	$2,6 \pm 0,2$	—	3,137	11,30	$1,5 \pm 0,3$	0,732
86	Радон — Rn (1S_0)	$\varphi(6p)$	2,139	0,495	2,543	7,370	$2,3 \pm 0,1$	0,889
90	Торий — Th (3F_2)	$\varphi(7s)$	4,223	0,246	4,984	28,07	$0,94 \pm 0,07$	0,675
92	Уран — U (5L_6)	$\varphi(7s)$	4,266	0,242	5,050	28,84	$0,89 \pm 0,06$	0,670
94	Плутоний — Pu (7F_6)	$\varphi(7s)$	4,362	0,235	5,177	30,31	$0,73 \pm 0,03$	0,612

Таблица 3.4
 Параметры волновых функций валентных электронов в положительных ионах, а. е.

$Z = 3$, Литий — Li⁺ (1S_0), $\varphi(1s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	τ_i	C_i	N_i
$1s$	2,4638	0,8946	7,734
$1s$	4,7036	0,1184	20,40
$1s$	6,4669	-0,0023	32,89
$1s$	1,3579	0,0044	3,165

$$A = 6,5 \pm 0,2; \gamma = 2,358$$

$Z = 4$, Бериллий — Be⁺ (${}^2S_{1/2}$), $\varphi(2s)$

$x\text{-базис}$ $n_i l$	τ_i	C_i	N_i
$1s$	3,4977	-0,2046	13,08
$1s$	6,5023	-0,0157	33,16
$2s$	1,1838	1,1080	1,7661
$2s$	2,6277	-0,1329	12,92

$$A = 2,67 \pm 0,01; \gamma = 1,157$$

$Z = 5$, Бор — B^+ (1S_0), $\varphi(2s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
1s	4,4299	-0,2029	18,65
1s	7,8634	-0,0194	44,10
2s	1,5924	0,7349	3,695
2s	4,0102	-0,0922	37,19
2s	1,2502	0,3453	2,018

$$A = 6,7 \pm 0,6; \gamma = 1,360$$

$Z = 7$, Азот — N^+ (3P_0), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	1,9759	0,5629	6,337
2p	3,3858	0,2026	24,36
2p	1,4789	0,2761	3,071
2p	8,0019	0,0088	209,1

$$A = 2,9 \pm 0,1; \gamma = 1,475$$

$Z = 9$, Фтор — F^+ (3P_2), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	2,3317	0,6033	9,586
2p	4,2480	0,2913	42,95
2p	1,6422	0,1609	3,991
2p	9,5323	0,0111	232,9

$$A = 3,1 \pm 0,2; \gamma = 1,603$$

$Z = 11$, Натрий — Na^+ (1S_0), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	2,8948	0,5428	16,46
2p	5,2651	0,3048	73,45
2p	1,9589	0,2163	6,201
2p	10,69	0,0141	432,8

$$A = 3,7 \pm 0,2; \gamma = 1,864$$

Продолжение табл. 3.4

$Z = 6$, Углерод — C^+ (${}^2P_{1/2}$), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	1,8778	0,3998	5,580
2p	3,078	0,1230	19,19
2p	1,3927	0,5119	2,643
2p	7,0112	0,0078	150,3

$$A = 2,53 \pm 0,08; \gamma = 1,339$$

$Z = 8$, Кислород — O^+ (${}^4S_{3/2}$), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	2,2445	0,5537	8,715
2p	3,8417	0,2331	33,40
2p	1,6413	0,2588	3,985
2p	8,5940	0,0107	250,0

$$A = 3,3 \pm 0,2; \gamma = 1,607$$

$Z = 10$, Неон — Ne^+ (${}^2P_{3/2}$), $\varphi(2p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	2,5710	0,5810	12,24
2p	4,7236	0,3052	56,00
2p	1,7524	0,1672	4,694
2p	9,811	0,0138	348,1

$$A = 3,4 \pm 0,2; \gamma = 1,735$$

$Z = 12$, Магний — Mg^+ (${}^2S_{1/2}$), $\varphi(3s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2s	4,5253	-0,2058	50,30
3s	1,4135	0,65	1,416
3s	1,0632	0,4065	0,523
3s	3,5536	-0,0958	35,67

$$A = 2,31 \pm 0,01; \gamma = 1,051$$

$Z = 13$, Алюминий — $\text{Al}^+ ({}^1S_0)$, $\varphi(3s)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2s	4,8362	-0,2429	59,39
3s	1,7751	0,5546	3,142
3s	1,2538	0,5263	0,9306
3s	3,8880	-0,0981	48,86
$A = 3,1 \pm 0,1; \gamma = 1,176$			

$Z = 15$, Фосфор — $\text{P}^+ ({}^3P_0)$, $\varphi(3p)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	6,4620	-0,1775	122,6
3p	2,0224	0,5888	4,960
3p	1,3437	0,4831	1,186
3p	4,8429	-0,1044	105,4
$A = 2,5 \pm 0,2; \gamma = 1,204$			

$Z = 17$, Хлор — $\text{Cl}^+ ({}^3P_2)$, $\varphi(3p)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	7,4953	-0,1995	177,6
3p	2,6483	0,5730	12,74
3p	1,6571	0,5213	2,470
3p	5,8297	-0,1145	201,7
$A = 3,1 \pm 0,1; \gamma = 1,323$			

$Z = 19$, Калий — $\text{K}^+ ({}^1S_0)$, $\varphi(3p)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	8,6173	-0,2100	251,7
3p	3,2482	0,5822	26,04
3p	1,9456	0,5298	4,332
3p	6,8838	-0,1264	360,9
$A = 3,9 \pm 0,2; \gamma = 1,525$			

Продолжение табл. 3.4

$Z = 14$, Кремний — $\text{Si}^+ ({}^2P_1/2)$, $\varphi(3p)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	5,7813	-0,1658	92,80
3p	1,7078	0,6127	2,745
3p	1,1477	0,4500	0,6830
3p	4,2737	-0,0895	68,04
$A = 1,8 \pm 0,1; \gamma = 1,096$			

$Z = 16$, Сера — $\text{S}^+ ({}^4S_3/2)$, $\varphi(3p)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	6,8792	-0,1940	143,3
3p	2,3323	0,5724	8,169
3p	1,5361	0,5079	1,894
3p	5,2639	-0,1054	141,1
$A = 3,2 \pm 0,2; \gamma = 1,309$			

$Z = 18$, Аргон — $\text{Ar}^+ ({}^2P_{3/2})$, $\varphi(3p)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
2p	7,9504	-0,2094	205,8
3p	2,9565	0,5752	18,73
3p	1,7999	0,5296	3,298
3p	6,3001	-0,1166	264,6
$A = 3,4 \pm 0,3; \gamma = 1,425$			

$Z = 20$, Кальций — $\text{Ca}^+ ({}^2S_{1/2})$, $\varphi(4s)$

$n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3s	3,9588	-0,2037	52,05
3s	3,0161	-0,1088	20,09
4s	3,091	-0,0560	18,07
4s	1,4260	0,6038	0,6564
4s	1,0026	0,5348	0,1140
4s	0,8683	-0,0699	0,0597
$A = 1,62 \pm 0,02; \gamma = 0,934$			

$Z = 22$, Титан — $\text{Ti}^+ ({}^4F_{3/2})$, $\varphi (4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3s$	4,8903	-0,2565	109,0
$3s$	0,3421	0,0007	0,0099
$4s$	3,7168	-0,1538	41,46
$4s$	1,7424	0,4723	1,371
$4s$	1,1924	0,6000	0,2487
$4s$	0,9598	0,0113	0,0937

$$A = 2,06 \pm 0,03; \gamma = 0,999$$

$Z = 29$, Медь — $\text{Cu}^+ ({}^1S_0)$, $\varphi (3d)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3d$	4,7056	0,3357	95,30
$3d$	7,3863	0,2380	461,8
$3d$	2,9366	0,3617	18,30
$3d$	1,6928	0,2292	2,661

$$A = 0,46 \pm 0,05; \gamma = 1,221$$

$Z = 35$, Бром — $\text{Br}^+ ({}^3P_2)$, $\varphi (4p)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3p$	8,6400	-0,1204	799,4
$3p$	5,8999	-0,2374	210,3
$4p$	4,7239	0,0360	122,0
$4p$	2,8909	0,5699	13,38
$4p$	1,8189	0,4931	1,663
$4p$	1,3175	0,0191	0,3898

$$A = 2,5 \pm 0,3; \gamma = 1,266$$

Продолжение табл. 3.4

$Z = 26$, Железо — $\text{Fe}^+ ({}^6D_{9/2})$, $\varphi (4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3s$	7,0523	-0,0591	392,7
$3s$	4,7126	-0,3075	95,80
$4s$	3,8393	0,0340	47,97
$4s$	1,8653	0,6795	1,863
$4s$	1,1933	0,4029	0,2496
$4s$	0,8315	-0,0279	0,0491

$$A = 2,68 \pm 0,08; \gamma = 1,091$$

$Z = 30$, Цинк — $\text{Zn}^+ ({}^2S_{1/2})$, $\varphi (4s)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3s$	6,9485	-0,0448	372,9
$3s$	5,7019	-0,2575	186,6
$4s$	5,0410	0,0237	163,4
$4s$	2,1523	0,6092	3,548
$4s$	1,3285	0,4852	0,4046
$4s$	0,9337	-0,0296	0,0827

$$A = 3,01 \pm 0,09; \gamma = 1,149$$

$Z = 36$, Криптон — $\text{Kr}^+ ({}^2P_{3/2})$, $\varphi (4p)$

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3p$	9,3140	-0,100	1040
$3p$	6,5114	-0,2558	297,0
$4p$	5,1030	-0,0293	172,6
$4p$	3,3385	0,5171	25,58
$4p$	2,0615	0,5726	2,922
$4p$	1,3318	0,0409	0,4091

$$A = 3,7 \pm 0,2; \gamma = 1,338$$

$Z = 37$, Рубидий — $\text{Rb}^+ ({}^1S_0)$, $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	8,2772	-0,2204	687,9
$3p$	5,7561	-0,1811	192,9
$4p$	3,8296	0,3530	47,99
$4p$	2,6913	0,4829	9,699
$4p$	1,8758	0,3079	1,911

$$A = 3,82 \pm 0,04; \gamma = 1,416$$

$Z = 47$, Серебро — $\text{Ag}^+ ({}^1S_0)$, $\varphi(4d)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3d$	16,52	-0,0757	7731
$3d$	9,3647	-0,2533	1060
$4d$	5,7044	0,3214	285,0
$4d$	3,5287	0,5448	32,82
$4d$	2,0105	0,3180	2,610

$$A = 0,7 \pm 0,1; \gamma = 1,257$$

$Z = 53$, Иод — $\text{I}^+ ({}^3P_2)$, $\varphi(5p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	11,65	0,2860	2279
$4p$	7,3691	-0,2397	902,1
$4p$	5,1336	-0,2002	177,3
$5p$	3,3611	0,3261	18,68
$5p$	2,4710	0,4539	3,440
$5p$	1,7320	0,3598	0,4873

$$A = 2,9 \pm 0,2; \gamma = 1,186$$

Продолжение табл. 3.4

$Z = 38$, Стронций — $\text{Sr}^+ ({}^2S_{1/2})$, $\varphi(4p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	8,5295	-0,2413	764,1
$3p$	6,0050	-0,1957	223,7
$4p$	4,0192	0,4121	58,95
$4p$	2,7693	0,5428	11,03
$4p$	1,9765	0,1899	2,418

$$A = 1,39 \pm 0,02; \gamma = 0,900$$

$Z = 48$, Кадмий — $\text{Cd}^+ ({}^2S_{1/2})$, $\varphi(5s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$4s$	5,9977	-0,289	357,1
$4s$	4,0741	-0,0834	62,66
$5s$	3,3311	0,1504	17,78
$5s$	2,1883	0,5485	1,764
$5s$	1,4477	0,4366	0,1818

$$A = 2,8 \pm 0,1; \gamma = 1,115$$

$Z = 54$, Ксеноон — $\text{Xe}^+ ({}^2P_{3/2})$, $\varphi(5p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	13,25	-0,1174	3572
$3p$	12,23	0,3505	2696
$4p$	7,5294	-0,2548	993,8
$4p$	5,3351	-0,2065	210,9
$5p$	3,4263	0,4312	20,76
$5p$	2,4313	0,4318	3,147
$5p$	1,7727	0,2832	0,5538

$$A = 3,2 \pm 0,2; \gamma = 1,249$$

Продолжение табл. 3.4

$Z = 55$, Цезий — Cs⁺ (1S_0), φ ($5p$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i	χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$3p$	15,111	0,0017	5655	$4p$	4,2756	0,2724	77,87
$3p$	12,851	0,2245	3208	$5p$	2,7066	0,8307	5,677
$4p$	6,3264	-0,5587	454,0	$5p$	1,4687	0,1589	0,1967

$$A = 4,6 \pm 2,8; \gamma = 1,358$$

Таблица 3.5

Параметры волновых функций валентных электронов в отрицательных ионах, а.е.

$Z = 3$, Литий — Li⁻ (1S), φ ($2s$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$1s$	2,4747	-0,1003	7,786
$1s$	4,6921	-0,0110	20,33
$2s$	0,2676	0,3977	0,0428
$2s$	0,5340	0,5609	0,2406
$2s$	1,0113	0,2048	1,188
$2s$	1,6628	-0,0791	4,117

$$A = 1,0 \pm 0,3; \gamma = 0,212$$

$Z = 6$, Углерод — C⁻ (4S), φ ($2p$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$2p$	1,4705	0,3871	3,028
$2p$	2,4996	0,2037	11,41
$2p$	0,8837	0,3691	0,8476
$2p$	0,5368	0,1583	0,2438
$2p$	5,7105	0,0134	89,98

$$A = 0,74 \pm 0,10; \gamma = 0,306$$

$Z = 9$, Фтор — F⁻ (1S_0), φ ($2p$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$2p$	2,0754	0,4704	7,165
$2p$	3,9334	0,3084	35,43
$2p$	1,4660	0,0988	3,005
$2p$	0,9568	0,2470	1,034

$$A = 0,84 \pm 0,06; \gamma = 0,500$$

$Z = 5$, Бор — B⁻ (3P), φ ($2p$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$2p$	1,3068	0,1684	2,254
$2p$	2,0109	0,1587	6,621
$2p$	0,8673	0,4544	0,8089
$2p$	0,4205	0,3629	0,1324

$$A = 0,39 \pm 0,07; \gamma = 0,148$$

$Z = 8$, Кислород — O⁻ (2P), φ ($2p$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$2p$	1,7440	0,5275	4,638
$2p$	3,4297	0,3056	25,16
$2p$	0,8639	0,2889	0,8011
$2p$	0,4083	0,0089	0,1230

$$A = 0,65 \pm 0,08; \gamma = 0,328$$

$Z = 11$, Натрий — Na⁻ (1S), φ ($3s$)

χ -базис $n_i l$	ξ_i	c_i	N_i
$2s$	4,1303	-0,0954	40,63
$3s$	0,9574	0,5117	0,3620
$3s$	0,4169	0,6262	0,0197
$3s$	3,1346	-0,0291	22,99

$$A = 1,0 \pm 0,3; \gamma = 0,201$$

$Z = 13$, Алюминий — $\text{Al}^- ({}^3P)$, $\varphi (3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
$3p$	1,7365	0,1501	2,909
$3p$	0,4698	0,4561	0,0300
$3p$	3,9148	-0,0627	50,05
$3p$	1,0069	0,5603	0,4319

$$A = 0,51 \pm 0,10; \gamma = 0,192$$

$Z = 15$, Фосфор — $\text{P}^- ({}^3P)$, $\varphi (3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
$2p$	6,5044	-0,1370	124,6
$3p$	2,2228	0,3228	6,904
$3p$	0,7470	0,3101	0,1519
$3p$	4,9018	-0,0918	109,9
$3p$	1,3676	0,5174	1,261

$$A = 0,9 \pm 0,1; \gamma = 0,238$$

$Z = 17$, Хлор — $\text{Cl}^- ({}^1S)$, $\varphi (3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
$2p$	7,6297	-0,1622	185,7
$3p$	2,9265	0,3296	18,08
$3p$	1,0156	0,3027	0,4452
$3p$	5,9400	-0,1134	215,4
$3p$	1,8319	0,5244	3,508

$$A = 1,34 \pm 0,06; \gamma = 0,516$$

Продолжение табл. 3.5

$Z = 14$, Кремний — $\text{Si}^- ({}^4S)$, $\varphi (3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
$2p$	6,1438	-0,1147	108,0
$3p$	2,0551	0,1838	5,246
$3p$	0,6855	0,3953	0,1125
$3p$	4,4933	-0,0856	81,08
$3p$	1,2940	0,5570	1,039

$$A = 1,1 \pm 0,2; \gamma = 0,320$$

$Z = 16$, Сера — $\text{S}^- ({}^2P)$, $\varphi (3p)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
$2p$	7,0774	-0,1515	153,9
$3p$	2,6206	0,2974	12,28
$3p$	0,8997	0,3330	0,2913
$3p$	5,4249	-0,1043	156,8
$3p$	1,6580	0,5236	2,474

$$A = 0,10 \pm 0,09; \gamma = 0,391$$

$Z = 19$, Калий — $\text{K}^- ({}^1S)$, $\varphi (4s)$

χ -базис $n_i l$	ζ_i	C_i	N_i
$2s$	7,585	0,0464	183,0
$3s$	3,9935	-0,0762	53,66
$3s$	2,6383	-0,0923	12,58
$4s$	0,3520	0,3923	0,0010
$4s$	1,2652	0,2439	0,3248
$4s$	0,7045	0,5658	0,0233

$$A = 0,9 \pm 0,5; \gamma = 0,192$$

П р о д о л ж е н и е т а б л . 3 . 5

$Z = 26$, Железо — Fe^- (4S), φ ($4s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	4,7306	-0,1188	97,08
$4s$	1,9328	0,2895	2,186
$4s$	0,9992	0,5668	0,1123
$4s$	0,4855	0,3736	0,0044

$$A = 0,93 \pm 0,10; \gamma = 0,171$$

$Z = 28$, Никель — Ni^- (2D), φ ($4s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	6,0288	-0,1491	226,9
$4s$	2,198	0,2311	3,899
$4s$	1,2013	0,5154	0,2572
$4s$	0,5850	0,4742	0,0101

$$A = 1,3 \pm 0,7; \gamma = 0,309$$

$Z = 34$, Селен — Se^- (2P), φ ($4p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	8,7108	-0,0767	822,5
$3p$	5,8440	-0,2	203,4
$4p$	2,6621	0,4699	9,284
$4p$	1,5616	0,4889	0,8373
$4p$	0,8938	0,1964	0,0680

$$A = 1,3 \pm 0,1; \gamma = 0,385$$

$Z = 37$, Рубидий — Rb^- (1S), φ ($5s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$4s$	3,8861	-0,1106	50,66
$4s$	2,5250	-0,0697	7,278
$5s$	1,5190	0,2348	0,2368
$5s$	0,9375	0,3586	0,0167
$5s$	0,5629	0,5857	0,0010

$$A = 0,8 \pm 0,9; \gamma = 0,189$$

П р о д о л ж е н и е т а б л . 3 . 5

$Z = 27$, Кобальт — Co^- (3F), φ ($4s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	5,2702	-0,1156	141,7
$4s$	2,0219	0,2713	2,678
$4s$	1,0777	0,5407	0,1578
$4s$	0,5259	0,4133	0,0062

$$A = 1,1 \pm 0,3; \gamma = 0,257$$

$Z = 29$, Медь — Cu^- (1S), φ ($4s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3s$	6,6632	0,2757	322,0
$3s$	6,3797	0,4153	276,5
$4s$	2,0688	0,3062	2,969
$4s$	1,0758	0,5415	0,1565
$4s$	0,5267	0,3820	0,0063

$$A = 1,2 \pm 0,5; \gamma = 0,301$$

$Z = 35$, Бром — Br^- (1S), φ ($4p$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$3p$	8,6078	-0,0915	789,0
$3p$	5,8779	-0,2293	207,6
$4p$	2,8155	0,5170	11,88
$4p$	1,6858	0,4350	1,182
$4p$	1,0414	0,1889	0,1353

$$A = 1,49 \pm 0,04; \gamma = 0,498$$

$Z = 47$, Серебро — Ag^- (1S), φ ($5s$)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
$4s$	5,8596	-0,1751	321,6
$4s$	3,9820	-0,0186	56,53
$5s$	2,2709	0,3327	2,162
$5s$	1,2026	0,5534	0,0655
$5s$	0,5962	0,3754	0,0014

$$A = 1,3 \pm 0,7; \gamma = 0,309$$

Z = 50, Олово — Sn⁻ (⁴S), ϕ (5p)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3p	10,33	0,1177	1491
4p	6,4872	-0,1781	508,3
4p	4,2862	-0,0809	78,74
5p	2,4685	0,3899	3,421
5p	1,4281	0,5598	0,1686
5p	0,8017	0,2471	0,0070

$$A = 1,3 \pm 0,3; \gamma = 0,303$$

Z = 52, Теллур — Te⁻ (²P), ϕ (5p)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3p	11,03	0,1707	1881
4p	6,9706	-0,2238	702,4
4p	4,7572	-0,1156	125,9
5p	2,8219	0,4836	7,141
5p	1,6523	0,5322	0,3761
5p	0,9349	0,1790	0,0164

$$A = 1,5 \pm 0,2; \gamma = 0,374$$

Продолжение табл. 3.5

Z = 51, Сурьма — Sb⁻ (³P), ϕ (5p)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3p	10,63	0,1405	1650
4p	6,7509	-0,2009	608,1
4p	4,5451	-0,1007	102,5
5p	2,6459	0,4433	5,011
5p	1,5355	0,5471	0,2512
5p	0,8545	0,2089	0,0100

$$A = 1,2 \pm 0,2; \gamma = 0,278$$

Z = 53, Иод — I⁻ (¹S), ϕ (5p)

χ -базис $n_i l$	ζ_i	c_i	N_i
3p	11,69	0,2207	2306
4p	7,112	-0,2449	768,5
4p	4,9399	-0,1226	149,1
5p	3,0017	0,1522	10,03
5p	1,7759	0,5207	0,5592
5p	1,0267	0,1574	0,0275

$$A = 1,9 \pm 0,2; \gamma = 0,475$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. 3-е изд. М., «Наука», 1974.
- Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М., Физматгиз, 1963.
- Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1949.
- Фриш С. Э. Оптические спектры атомов. М., Физматгиз, 1963.
- Ельяшевич А. М. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
- Clementi E., Roetti C. «Atomic Data and Nucl. Data Tables», 1974, v. 14, p. 177; Sachdeva M. L., Puri S. P. «Phys. Rev. A», 1976, v. 14, p. 1603.
- Евсеев А. В., Радциг А. А., Смирнов Б. М. «Оптика и спектроскопия», 1978, т. 44, с. 833.
- Mann J. B. «Atomic Data and Nucl. Data Tables», 1973, v. 12, p. 1.
- Froese Fischer C. «Atomic Data», 1972, v. 4, p. 301; «Atomic Data and Nucl. Data Tables», 1973, v. 12, p. 87.

Глава 4

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ АТОМОВ И ИОНОВ

§ 4.1. Потенциалы ионизации атомов и ионов

В табл. 4.1 представлены значения потенциалов ионизации *I* атомов и положительных ионов. В соответствии со спектроскопическими обозначениями цифра I соответствует атому, цифры II, III, IV—одно-, двух- и трехкратнозаряженному положительному иону. Указаны конфигурация валентной оболочки и электронный терм основного состояния атомов и ионов. Наряду с потенциалами ионизации атомов и ионов, выраженным в электронвольтах, представлены предельные значения для серий оптических переходов, отсчитанные от основного состояния. Эти значения также являются потенциалами ионизации, выраженным в см⁻¹ (переводный множитель: 1 эВ = 8065,479 ± 0,021 см⁻¹). Значения потенциалов ионизации, заключенные в квадратные скобки, а также обозначения электронной конфигурации и электронного терма, заключенные в фигурные скобки, менее надежны. Приведенные численные значения величин округлены таким образом, что возможные в дальнейшем уточнения могут изменить лишь последнюю значащую цифру.

Представленная информация получена, главным образом, в результате экстраполяции серий оптических переходов, инициируемых с помощью различных источников возбуждения спектров нейтральных и ионизованных частиц: гейслеровой трубки, искрового разряда в вакууме, электрической дуги или разрядной трубки с полым катодом, конденсированной дуги, лазерного источника и т. п. Для одноэлектронных систем мы воспользовались расчетными данными Эрикссона (Erickson G. W. «J. Phys. Chem. Ref. Data», 1977, v. 6, p. 831), в которых наиболее полно учтены достижения квантовой электродинамики.

Основная информация о потенциалах ионизации атомных частиц содержится в работах [1—4], и, кроме того, нами были использованы данные более поздних по времени журнальных статей.

Потенциалы ионизации атомов и ионов

Атом-ный номер	Эле-мент	AI		A II
		Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	
1	H	$1s - ^2S_{1/2}$	109678,774*	—
			13,5985*	
2	4He	$1s^2 - ^1S_0$	198310,76	$1s - ^2S_{1/2}$
			24,5876	
3	Li	$2s - ^2S_{1/2}$	43487,15	$1s^2 - ^1S_0$
			5,3918	
4	Be	$2s^2 - ^1S_0$	75192,1	$2s - ^2S_{1/2}$
			9,323	
5	B	$2p - ^2P_{1/2}^0$	66928,1	$2s^2 - ^1S_0$
			8,298	
6	C	$2p^2 - ^3P_0$	90820,4	$2p - ^2P_{1/2}^0$
			11,260	
7	N	$2p^3 - ^4S_{3/2}^0$	117225,7	$2p^2 - ^3P_0$
			14,534	
8	O	$2p^4 - ^3P_2$	109837,0	$2p^3 - ^4S_{3/2}^0$
			13,618	
9	F	$2p^5 - ^2P_{3/2}^0$	140524,5	$2p^4 - ^3P_2$
			17,423	
10	Ne	$2p^6 - ^1S_0$	173929,7	$2p^5 - ^2P_{3/2}^0$
			21,565	
11	Na	$3s - ^2S_{1/2}$	41449,44	$2p^6 - ^1S_0$
			5,1391	
12	Mg	$3s^2 - ^1S_0$	61671,02	$3s - ^2S_{1/2}$
			7,646	
13	Al	$3p - ^2P_{1/2}^0$	48278,37	$3s^2 - ^1S_0$
			5,9858	
14	Si	$3p^2 - ^3P_0$	65747	$3p - ^2P_{1/2}^0$
			8,152	
15	P	$3p^3 - ^4S_{3/2}$	84580	$3p^2 - ^3P_0$
			10,49	
16	S	$3p^4 - ^3P_2$	83558,0	$3p^3 - ^4S_{3/2}^0$
			10,36	
17	Cl	$3p^5 - ^2P_{3/2}^0$	104591	$3p^4 - ^3P_2$
			12,968	
18	Ar	$3p^6 - ^1S_0$	127109,9	$3p^5 - ^2P_{3/2}^0$
			15,760	
19	K	$4s - ^2S_{1/2}$	35009,77	$3p^6 - ^1S_0$
			4,3407	
20	Ca	$4s^2 - ^1S_0$	49305,96	$4s - ^2S_{1/2}$
			6,113	
21	Sc	$3d4s^2 - ^2D_{3/2}$	52922	$3d4s - ^3D_1$
			6,562	
22	Ti	$3d^24s^2 - ^3F_2$	55000	$3d^24s - ^4F_{3/2}$
			6,82	
23	V	$3d^34s^2 - ^4F_{3/2}$	54360	$3d^4 - ^5D_0$
			6,74	
24	Cr	$3d^54s - ^7S_3$	54570	$3d^5 - ^6S_{5/2}$
			6,766	
25	Mn	$3d^54s^2 - ^6S_{5/2}$	59981	$3d^54s - ^7S_3$
			7,4368	

* Верхняя цифра в таблице относится к оптическому пределу, нижняя — к потенциальному ионизации.

Таблица 4.1

Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	A III		A IV	
	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ
—	—	—	—	—
438908,89	—	—	—	—
54,418	—	—	—	—
610079,0	1s — ² S _{1/2}	987661	—	—
75,641		122,45	—	—
146882,9	1s ² — ¹ S ₀	1241259,4	1s — ² S _{1/2}	1756018,8
18,211		153,9		217,7
202887	2s — ² S _{1/2}	305931	1s ² — ¹ S ₀	2092001,4
25,155		37,931		259,4
196665	2s ² — ¹ S ₀	386240	2s — ² S _{1/2}	520178
24,384		47,89		64,49
238750	2p — ² P _{1/2} ⁰	382704	2s ² — ¹ S ₀	624866
29,602		47,45		77,47
283240	2p ² — ³ P ₀	443086	2p — ² P _{1/2} ⁰	624384
35,118		54,94		77,41
282059	2p ³ — ⁴ S _{3/2} ⁰	505780	2p ² — ³ P ₀	702830
34,971		62,71		87,14
330391,0	2p ⁴ — ³ P ₂	511800	2p ³ — ⁴ S _{3/2} ⁰	783300
40,964		63,46		97,12
381395	2p ⁵ — ² P _{3/2} ⁰	577800	2p ⁴ — ³ P ₂	797800
47,287		71,64		98,92
121267,6	2p ⁶ — ¹ S ₀	646400	2p ⁵ — ² P _{3/2} ⁰	881100
15,035		80,15		109,2
151863	3s — ² S _{1/2}	229445,7	2p ⁶ — ¹ S ₀	967800
18,828		28,448		120,0
131838,4	3s ² — ¹ S ₀	270139	3s — ² S _{1/2}	364093
16,346		33,493		45,14
159100	3p — ² P _{1/2} ⁰	243400	3s ² — ¹ S ₀	414312,4
19,73		30,18		51,37
188200	3p ² — ³ P ₀	280900	3p — ² P _{1/2} ⁰	38154,4
23,33		34,83		47,31
192070	3p ³ — ⁴ S _{3/2} ⁰	319500	3p ² — ³ P ₀	431226
23,81		39,61		53,47
222848,2	3p ⁴ — ³ P ₂	328600	3p ³ — ⁴ S _{3/2} ⁰	482400
27,63		40,74		59,81
255080	3p ⁵ — ² P _{3/2} ⁰	368800	3p ⁴ — ³ P ₂	491300
31,63		45,73		60,91
95751,9	3p ⁶ — ¹ S ₀	410642	3p ⁵ — ² P _{3/2} ⁰	541200
11,872		50,91		67,10
103000	3d — ² D _{3/2}	199700	3p ⁶ — ¹ S ₀	592600
12,80		24,76		73,47
109500	3d ² — ³ F ₂	221735	3d — ² D _{3/2}	348973
13,6		27,49		43,27
118200	3d ³ — ⁴ F _{3/2}	236400	3d ² — ³ F ₂	376700
14,66		29,31		46,71
133000	3d ⁴ — ⁵ D ₀	249700	3d ³ — ⁴ F _{3/2}	[396000]
16,50		30,96		[49]
126145	3d ⁵ — ⁶ S _{5/2}	271550	3d ⁴ — ⁵ D ₀	[413000]
15,640		33,67		[51,2]

Атом- ный номер	Эле- мент	A I		A II	
		Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	
26	Fe	$3d^6 4s^2 \rightarrow 5D_4$	63480 7,87	$3d^6 4s \rightarrow 6D_{9/2}$	
27	Co	$3d^7 4s^2 \rightarrow 4F_{9/2}$	63430 7,86	$3d^8 \rightarrow 3F_4$	
28	Ni	$3d^8 4s^2 \rightarrow 3F_4$	61580 7,63	$3d^9 \rightarrow 2D_{5/2}$	
29	Cu	$4s \rightarrow 2S_{1/2}$	62317 7,726	$3d^{10} \rightarrow 1S_0$	
30	Zn	$4s^2 \rightarrow 1S_0$	75768,1 9,394	$4s \rightarrow 2S_{1/2}$	
31	Ga	$4p \rightarrow 2P_{1/2}^0$	48387,6 5,999	$4s^2 \rightarrow 1S_0$	
32	Ge	$4p^2 \rightarrow 3P_0$	63710 7,90	$4p \rightarrow 2P_{1/2}^0$	
33	As	$4p^3 \rightarrow 4S_{3/2}^0$	79200 9,82	$4p^2 \rightarrow 3P_0$	
34	Se	$4p^4 \rightarrow 3P_2$	78658,2 9,752	$4p^3 \rightarrow 4S_{3/2}^0$	
35	Br	$4p^5 \rightarrow 2P_{3/2}^0$	95284,8 11,814	$4p^4 \rightarrow 3P_2$	
36	Kr	$4p^6 \rightarrow 1S_0$	112914,5 14,00	$4p^5 \rightarrow 2P_{3/2}^0$	
37	Rb	$5s \rightarrow 2S_{1/2}$	33690,81 4,1772	$4p^6 \rightarrow 1S_0$	
38	Sr	$5s^2 \rightarrow 1S_0$	45932,0 5,695	$5s \rightarrow 2S_{1/2}$	
39	Y	$4d5s^2 \rightarrow 2D_{3/2}$	50144 6,217	$5s^2 \rightarrow 1S_0$	
40	Zr	$4d^2 5s^2 \rightarrow 3F_2$	55100 6,837	$4d^2 5s \rightarrow 4F_{3/2}$	
41	Nb	$4d^4 5s \rightarrow 6D_{1/2}^0$	55500 6,88	$4d^4 \rightarrow 5D_0$	
42	Mo	$4d^5 5s \rightarrow 7S_3$	57300 7,099	$4d^5 \rightarrow 6S_{5/2}$	
43	Tc	$4d^5 5s^2 \rightarrow 6S_{5/2}$	58700 7,28	$4d^5 5s \rightarrow 7S_3$	
44	Ru	$4d^7 5s \rightarrow 5F_5$	59410 7,366	$4d^7 \rightarrow 4F_{9/2}$	
45	Rh	$4d^8 5s \rightarrow 4F_{9/2}$	60200 7,46	$4d^8 \rightarrow 3F_4$	
46	Pd	$4d^{10} \rightarrow 1S_0$	67236,0 8,336	$4d^9 \rightarrow 2D_{5/2}$	
47	Ag	$5s \rightarrow 2S_{1/2}$	61106,5 7,5763	$4d^{10} \rightarrow 1S_0$	
48	Cd	$5s^2 \rightarrow 1S_0$	72540,0 8,994	$5s \rightarrow 2S_{1/2}$	
49	In	$5s^2 5p \rightarrow 2P_{1/2}^0$	46670,10 5,7864	$5s^2 \rightarrow 1S_0$	
50	Sn	$5p^2 \rightarrow 3P_0$	59232 7,344	$5s^2 5p \rightarrow 2P_{1/2}^0$	
51	Sb	$5p^3 \rightarrow 4S_{3/2}^0$	69700 8,642	$5p^2 \rightarrow 3P_0$	

Продолжение табл. 4.1

Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	A III		A IV	
	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ
130524 16,18	$3d^6 - ^5D_4$	247221 30,65	$3d^5 - ^6S_{5/2}$	[442000] [54,8]
137572 17,06	$3d^7 - ^4F_{9/2}$	270200 33,5	$3d^6 - ^5D_4$	[413800] [51,3]
146541,6 18,17	$3d^8 - ^3F_4$	283700 35,2	$3d^7 - ^4F_{9/2}$	[442800] [54,9]
163669 20,29	$3d^9 - ^2D_{5/2}$	297100 36,8	$3d^8 - ^3F_4$	445000 55,2
144891 17,964	$3d^{10} - ^1S_0$	320390 39,72	$3d^9 - ^2D_{5/2}$	[479100] 59,4
165460 20,51	$4s - ^2S_{1/2}$	247700 30,7	$3d^{10} - ^1S_0$	517600 64,2
128521,3 15,935	$4s^2 - ^1S_0$	276036 34,2	$4s - ^2S_{1/2}$	368701 45,7
150200 18,62	$4p - ^2P_{1/2}^0$	228670 28,4	$4s^2 - ^1S_0$	404369 50,1
170900 21,19	$4p^2 - ^3P_0$	248583 30,82	$4p - ^2P_{1/2}^0$	346375 42,9
175900 21,81	$4p^3 - ^4S_{3/2}^0$	289529 35,90	$4p^2 - ^3P_0$	[381600] [47,3]
196474,8 24,36	$4p^4 - ^3P_2$	298020 36,95	$4p^3 - ^4S_{3/2}^0$	[423600] [52,5]
220050 27,28	$4p^5 - ^2P_{3/2}^0$	320000 39,7	$4p^4 - ^3P_2$	[424400] [52,6]
88964,0 11,030	$4p^6 - ^1S_0$	[351800] [43,6]	$4p^5 - ^2P_{3/2}^0$	460000 57
98700 12,24	$5s - ^2S_{1/2}$	165500 20,5	$4p^6 - ^1S_0$	[498600] [61,8]
105900 13,13	$4d^2 - ^3F_2$	185400 23,0	$4d - ^2D_{3/2}$	276970 34,3
115500 14,32	$4d^3 - ^4F_{3/2}$	202000 25,0	$4d^2 - ^3F_2$	308600 38,3
130300 16,16	$4d^4 - ^5D_0$	219100 27,2	$4d^3 - ^4F_{3/2}$	374180 46,4
123000 15,26	$4d^5 - ^6S_{5/2}$	238300 29,5	—	—
135200 16,76	$4d^6 - ^5D_4$	229600 28,5	—	—
145800 18,08	$4d^7 - ^4F_{9/2}$	250500 31,1	—	—
156700 19,43	$4d^8 - ^3F_4$	265600 32,9	—	—
173300 21,49	$4d^9 - ^2D_{5/2}$	280900 34,8	—	—
136374,7 16,908	$4d^{10} - ^1S_0$	302300 37,5	—	—
152195 18,87	$5s - ^2S_{1/2}$	226100 28,0	$4d^{10} - ^1S_0$	439000 54,4
118017 14,632	$5s^2 - ^1S_0$	246020 30,50	$5s - ^2S_{1/2}$	328550 40,74
133327,5 16,53	$5s^2 5p - ^2P_{1/2}^0$	204248 25,32	$5s^2 - ^1S_0$	356156 44,16

Атом- ный номер	Эле- мент	A I		A II	
		Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ , I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	
52	Te	$5p^4 - ^3P_2$	72670 9,010	$5p^3 - ^4S_{3/2}^0$	
53	I	$5p^5 - ^2P_{3/2}^0$	84295,0 10,451	$5p^4 - ^3P_2$	
54	Xe	$5p^6 - ^1S_0$	97834,0 12,130	$5p^5 - ^2P_{3/2}^0$	
55	Cs	$6s - ^2S_{1/2}$	31406,43 3,894	$5p^6 - ^1S_0$	
56	Ba	$6s^2 - ^1S_0$	42035,1 5,2117	$6s - ^2S_{1/2}$	
57	La	$5d6s^2 - ^2D_{3/2}$	44980 5,577	$5d^2 - ^3F_2$	
58	Ce	$4f5d6s^2 - ^1G_4^0$	44672 5,54	$4f5d^2 - ^4H_{7/2}^0$	
59	Pr	$4f^36s^2 - ^4I_{9/2}^0$	44070 5,46	$4f^36s - ^5I_4^0$	
60	Nd	$4f^46s^2 - ^5I_4$	44562 5,52	$4f^46s - ^6I_{7/2}$	
61	Pm	$4f^56s^2 - ^6H_{5/2}^0$	44800 5,55	$4f^56s - ^7H_2^0$	
62	Sm	$4f^66s^2 - ^7F_0$	45519 5,64	$4f^66s - ^8F_{1/2}$	
63	Eu	$4f^76s^2 - ^8S_{7/2}^0$	45735 5,67	$4f^76s - ^9S_4^0$	
64	Gd	$4f^75d6s^2 - ^9D_2^0$	49603 6,15	$4f^75d6s - ^{10}D_{5/2}^0$	
65	Tb	$4f^96s^2 - ^6H_{15/2}^0$	47295 5,86	$4f^96s - ^7H_8^0$	
66	Dy	$4f^{10}6s^2 - ^5I_8$	47900 5,94	$4f^{10}6s - ^6I_{17/2}$	
67	Ho	$4f^{11}6s^2 - ^4I_{15/2}^0$	48567 6,02	$4f^{11}6s - ^5I_8^0$	
68	Er	$4f^{12}6s^2 - ^3H_6$	49262 6,11	$4f^{12}6s - ^4H_{15/2}$	
69	Tm	$4f^{13}6s^2 - ^2F_{7/2}^0$	49880 6,18	$4f^{13}6s - ^3F_4^0$	
70	Yb	$4f^{14}6s^2 - ^1S_0$	50441,0 6,2539	$4f^{14}6s - ^2S_{1/2}$	
71	Lu	$4f^{14}5d6s^2 - ^2D_{3/2}$	43762,4 5,42	$4f^{14}6s^2 - ^1S_0$	
72	Hf	$5d^26s^2 - ^3F_2$	[56600] 7,5	$5d6s^2 - ^2D_{3/2}$	
73	Ta	$5d^36s^2 - ^4F_{3/2}$	63600 7,89	—	
74	W	$5d^46s^2 - ^5D_0$	64000 7,98	—	
75	Re	$5d^56s^2 - ^6S_{5/2}$	64000 7,88	—	
76	Os	$5d^66s^2 - ^5D_4$	70450 8,73	—	
77	Ir	$5d^76s^2 - ^4F_{9/2}$	73000 9,05	—	

Продолжение табл. 4.1

Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	A III		A IV	
	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ
150000	$5p^2 - {}^3P_0$	225500	$5s^2 5p - {}^2P_{1/2}^0$	301776
18,6		27,96	—	37,42
154304	$5p^3 - {}^4S_{3/2}^0$	[266000]	—	—
19,131		[32,98]	—	—
171068,4	$5p^4 - {}^3P_2$	259089	—	—
21,21		32,12	—	—
202263	—	—	—	—
25,08		—	—	—
80686,9	—	—	—	—
10,004		—	—	—
89200	$5d - {}^2D_{3/2}$	154675	$5p^6 - {}^1S_0$	49,95
11,1		19,18	—	—
87000	$4f^2 - {}^3H_4$	162900	$4f - {}^2F_{5/2}^0$	36,758
10,8		20,20	—	—
85000	$4f^3 - {}^4I_{9/2}^0$	174400	$4f^2 - {}^3H_4$	38,98
10,6		21,62	—	—
86000	$4f^4 - {}^5I_4$	179000	$4f^3 - {}^4I_{9/2}^0$	40,4
10,7		22,1	—	—
88000	{ $4f^5 - {}^6H_{5/2}^0$ }	180000	$4f^4 - {}^5I_4$	41,1
10,9		22,3	—	—
89300	$4f^6 - {}^7F_0$	189000	$4f^5 - {}^6H_{5/2}^0$	41,4
11,1		23,4	—	—
90660	$4f^7 - {}^8S_{7/2}^0$	201000	$4f^6 - {}^7F_0$	42,6
11,24		24,9	—	—
97500	$4f^7 5d - {}^9D_2^0$	166400	$4f^7 - {}^8S_{7/2}^0$	44,0
12,1		20,6	—	—
93000	$4f^9 - {}^6H_{15/2}^0$	176700	$4f^8 - {}^7F_6$	39,4
11,5		21,9	—	—
94100	{ $4f^{10} - {}^5I_8$ }	184000	$4f^9 - {}^6H_{15/2}^0$	41,4
11,7		22,8	—	—
95200	$4f^{11} - {}^4I_{15/2}^0$	184200	$4f^{10} - {}^5I_8$	42,5
11,8		22,8	—	—
96200	$4f^{12} - {}^3H_6$	183400	$4f^{11} - {}^4I_{15/2}^0$	42,7
11,9		22,7	—	—
97200	$4f^{13} - {}^2F_{7/2}^0$	191000	$4f^{12} - {}^3H_6$	42,7
12,1		23,7	—	—
98270	$4f^{14} - {}^1S_0$	202000	$4f^{13} - {}^2F_{7/2}^0$	43,6
12,18		25,05	—	—
112000	$4f^{14} 6s - {}^2S_{1/2}$	169050	$4f^{14} - {}^1S_0$	45,2
13,9		20,96	—	—
120000	$5d^2 - {}^3F_2$	187800	$5d - {}^2D_{3/2}$	268000
14,9		23,3	—	33,3
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—

Атом- ный номер	Эле- мент	A I		A II
		Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ , эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм
78	Pt	$5d^9 6s - ^3D_3$	72300 8,96	$5d^9 - ^2D_{5/2}$
79	Au	$5d^{10} 6s - ^2S_{1/2}$	74410,0 9,226	$5d^{10} - ^1S_0$
80	Hg	$6s^2 - ^1S_0$	84184,0 10,438	$5d^{10} 6s - ^2S_{1/2}$
81	Tl	$6s^2 6p - ^2P_{1/2}^0$	49266,7 6,108	$6s^2 - ^1S_0$
82	Pb	$6p^2 - ^3P_0$	59819,4 7,417	$6s^2 6p - ^2P_{1/2}^0$
83	Bi	$6p^3 - ^4S_{3/2}^0$	98790 12,248	$6p^2 - ^3P_0$
84	Po	$6p^4 - ^3P_2$	67885,3 8,417	—
85	At	$6p^5 - ^2P_{3/2}$	— 9,0	—
86	Rn	$6p^6 - ^1S_0$	86692 10,75	—
87	Fr	$7s - ^2S_{1/2}$	— 4,0	—
88	Ra	$7s^2 - ^1S_0$	42577,3 5,279	$7s - ^2S_{1/2}$
89	Ac	$6d7s^2 - ^2D_{3/2}$	42000 5,2	$7s^2 - ^1S_0$
90	Th	$6d^2 7s^2 - ^3F_2$	49000 6,1	$6d^2 7s - ^4F_{3/2}$
91	Pa	$5f^2 (^3H_4) 6d7s^2 (4, 3/2)_{11/2}$	47900 6,0	$5f^2 7s^2 - ^3H_4$
92	U	$5f^3 (^4I_{9/2}^0) 6d7s^2 (9/2, 3/2)_6^0$	49000 6,0	$5f^3 7s^2 - ^4I_{9/2}^0$
93	Np	$5f^4 (^5I_4) 6d7s^2 (4, 3/2)_{11/2}$	50000 6,2	—
94	Pu	$5f^6 7s^2 - ^7F_0$	49000 6,06	$5f^6 7s - ^8F_{1/2}$
95	Am	$5f^7 7s^2 - ^8S_{7/2}^0$	48300 6,0	$5f^7 7s - ^9S_4^0$
96	Cm	$5f^7 (^8S_{7/2}^0) 6d7s^2 (7/2, 3/2)_2$	48600 6,02	$5f^7 7s^2 - ^8S_{7/2}^0$
97	Bk	$5f^9 7s^2 - ^6H_{15/2}^0$	50200 6,23	$5f^9 7s - ^7H_8^0$
98	Cf	$5f^{10} 7s^2 - ^5I_8$	50800 6,30	$5f^{10} (^5I_6) 7s (8, 1/2)_{17/2}$
99	Es	$5f^{11} 7s^2 - ^4I_{15/2}^0$	51800 6,42	$5f^{11} (^4I_{15/2}^0) 7s (15/2, 1/2)_8^0$
100	Fm	$5f^{12} 7s^2 - ^3H_6$	52000 6,5	—
101	Md	$\{5f^{13} 7s^2 - ^2F_{7/2}^0\}$	53000 6,6	—
102	No	$\{5f^{14} 7s^2 - ^1S_0\}$	54000 6,6	$\{5f^{14} 7s - ^2S_{1/2}\}$

Продолжение табл. 4.1

	A III		A IV	
Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ	Конфигурация валентной оболочки — терм	Оптический предел, см ⁻¹ ; I, эВ
149720	—	—	—	—
18,56	—	—	—	—
165000	—	—	—	—
20,5	—	—	—	—
151280	5d ¹⁰ — 1S ₀	276000	—	—
18,76	—	34,22	—	—
164760	6s — 2S _{1/2}	240600	—	—
20,43	—	29,83	—	—
121243	6s ² — 1S ₀	257590	6s — 2S _{1/2}	341350
15,03	—	31,94	—	42,3
135000	6s ² 6p — 2P _{1/2} ⁰	206180	6s ² — 1S ₀	365500
16,7	—	25,56	—	45,3
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—
—	—	—	—	—
81842,31	—	—	—	—
10,15	—	—	—	—
95000	{6p ⁶ — 1S ₀ }	—	—	—
11,75	—	—	—	—
[93000]	5f6d — 3H ₄ ⁰	[161000]	5f — 2F _{5/2} ⁰	231900 28,7
—	—	—	{5f ² — 3H ₄ }	—
—	—	—	5f ³ — 4I _{9/2} ⁰	—
—	—	—	5f ⁴ — 5I ₄	—
—	—	—	5f ⁵ — 6H _{5/2} ⁰	—
—	5f ⁷ — 8S _{7/2} ⁰	—	5f ⁶ — 7F ₆	—
—	—	—	5f ⁷ — 8S _{7/2} ⁰	—
—	—	—	5f ⁸ — 7F ₆	—
—	—	—	5f ⁹ — 6H _{15/2} ⁰	—
—	5f ¹¹ — 4I _{15/2} ⁰	—	{5f ¹⁰ — 5I ₈ }	—
—	—	—	{5f ¹¹ — 4I _{15/2} ⁰ }	—
—	—	—	{5f ¹² — 3H ₆ }	—
—	{5f ¹⁴ — 1S ₀ }	—	{5f ¹³ — 2F _{7/2} ⁰ }	—

§ 4.2. Энергии сродства атомов к электрону

В таблице 4.2 представлены значения энергии сродства атомов к электрону, т. е. энергии, которую необходимо затратить на отрыв электрона от отрицательного иона. В соответствующих графах таблицы приведены спектроскопическое обозначение состояния отрицательного иона, структура внешней электронной оболочки и энергия связи электрона в ней. Данные в таблице распределены по классам точности, определенным в предисловии. Случай, когда объявляется отсутствие отрицательного иона данного сорта, разделены на два класса надежности: а — тот факт, что устойчивый отрицательный ион данного элемента не существует, установлен с достоверностью; б — для достоверного утверждения факта non-existence стабильного отрицательного иона требуется дополнительное исследование.

Данные табл. 4.2 взяты из монографии [5]; в ней, а также в монографиях [6, 7] и обзорах [8] приведено описание современных методов определения искомого значения энергии.

Таблица 4.2
Энергия сродства атомов к электрону

Атом- ный номер	Отрицательный ион и его терм	Конфигурация элек- тронной оболочки	Энергия связи электрона в отрицательном ионе, эВ	Классы точно- сти и надеж- ности
1	H ⁻ (¹ S)	1s ²	0,75416	A
2	He ⁻ (⁴ P)	1s 2s 2p	0,076	B
3	Li ⁻ (¹ S)	1s ² 2s ²	0,609	A
4	Be ⁻ (² S)	2s ² 3s	Не существует	a
5	B ⁻ (³ S)	2s ² 2p ²	0,3	D
6	C ⁻ (⁴ S)	2s ² 2p ³	1,27	A
	C ⁻ (² D)	2s ² 2p ³	0,035	B
7	N ⁻	2s ² 2p ⁴	Не существует	a
8	O ⁻ (² P)	2s ² 2p ⁵	1,465	A
9	F ⁻ (¹ S)	2s ² 2p ⁶	3,40	A
10	Ne ⁻	2p ⁶ 3s	Не существует	a
11	Na ⁻ (¹ S)	3s ²	0,548	A
12	Mg ⁻	—	Не существует	a
13	Al ⁻ (³ P ₀)	3p ²	0,5	D
14	Si ⁻ (⁴ S)	3p ³	1,394	A
	Si ⁻ (² D)	3p ³	0,526	B
	Si ⁻ (² P)	3p ³	0,034	B
15	P ⁻ (³ P)	3p ⁴	0,77	B
16	S ⁻ (² P)	3p ⁵	2,077	A
17	Cl ⁻ (¹ S)	3p ⁶	3,62	A
18	Ar ⁻	—	Не существует	a
19	K ⁻ (¹ S)	4s ²	0,501	A
20	Ca ⁻ (² D)	3d 4s ²	Не существует	a
21	Sc ⁻ (³ F)	3d ² 4s ²	Не существует	b
22	Ti ⁻ (⁴ F)	3d ³ 4s ²	0,2	D
23	V ⁻ (⁵ D)	3d ⁴ 4s ²	0,7	D
24	Cr ⁻ (⁶ S)	3d ⁵ 4s ²	0,66	B
25	Mn ⁻ (⁶ D)	3d ⁶ 4s ²	Не существует	b
26	Fe ⁻ (⁴ F)	3d ⁷ 4s ²	0,16	D

Продолжение табл. 4.2

Атом-ный номер	Отрицательный ион и его терм	Конфигурация электронной оболочки	Энергия связи электрона в отрицательном ионе, эВ	Классы точно-сти и надеж-ности
27	Co ⁻ (³ F)	3d ⁸ 4s ²	0,66	B
28	Ni ⁻ (² D)	3d ⁹ 4s ²	1,15	C
29	Cu ⁻ (¹ S)	3d ¹⁰ 4s ²	1,23	A
30	Zn ⁻	—	Не существует	б
31	Ga ⁻ (³ P)	4p ²	0,5	D
32	Ge ⁻ (⁴ S)	4p ³	1,20	B
33	As ⁻ (³ P)	4p ⁴	0,80	C
34	Se ⁻ (² P)	4p ⁵	2,021	A
35	Br ⁻ (¹ S)	4p ⁶	3,37	A
36	Kr ⁻	—	Не существует	а
37	Rb ⁻ (¹ S)	5s ²	0,4859	A
38	Sr ⁻ (² D)	4d ¹ 5s ²	Не существует	б
40	Zr ⁻ (⁴ F)	4d ³ 5s ²	0,8	D
41	Nb ⁻ (⁵ D)	4d ⁴ 5s ²	1,3	D
42	Mo ⁻ (⁶ S)	4d ⁵ 5s ²	1,1	D
43	Tc ⁻ (⁵ D)	4d ⁶ 5s ²	1,0	D
44	Ru ⁻ (⁴ F)	4d ⁷ 5s ²	1,5	D
45	Rh ⁻ (³ F)	4d ⁸ 5s ²	1,5	D
46	Pd ⁻ (² D)	4d ⁹ 5s ²	1,2	D
47	Ag ⁻ (¹ S)	4d ¹⁰ 5s ²	1,30	A
48	Cd ⁻	—	Не существует	а
49	In ⁻ (³ P)	5p ²	0,5	D
50	Sn ⁻ (⁴ S)	5p ³	1,25	B
51	Sb ⁻ (³ P)	5p ⁴	1,05	B
52	Te ⁻ (² P)	5p ⁵	1,9	C
53	I ⁻ (¹ S)	5p ⁶	3,07	A
54	Xe ⁻	—	Не существует	а
55	Cs ⁻ (¹ S)	6s ²	0,471	A
56	Ba ⁻ (² D)	5d 6s ²	Не существует	а
57	La ⁻ (³ F)	5d ² 6s ²	0,5	D
72	Hf ⁻ (⁴ F)	5d ³ 6s ²	Не существует	б
73	Ta ⁻ (⁵ D)	5d ⁴ 6s ²	0,8	D
74	W ⁻ (⁶ S)	5d ⁵ 6s ²	0,5	D
75	Re ⁻ (⁵ D)	5d ⁶ 6s ²	0,15	D
76	Os ⁻ (⁴ F)	5d ⁷ 6s ²	1,4	D
77	Ir ⁻ (³ F)	5d ⁸ 6s ²	2,0	D
78	Pt ⁻ (² D)	5d ⁹ 6s ²	2,13	A
79	Au ⁻ (¹ S)	5d ¹⁰ 6s ²	2,31	A
80	Hg ⁻	6s ² 6p, 6s ² 7s	Не существует	а
81	Tl ⁻ (³ P)	6p ²	0,5	D
82	Pb ⁻ (⁴ S)	6p ³	1,2	D
83	Bi ⁻ (³ P)	6p ⁴	1,0	D
84	Po ⁻ (² P)	6p ⁵	1,6	D

§ 4.3. Атом в постоянном электрическом и магнитном поле. Поляризуемость и магнитная восприимчивость атомных частиц

Электрическое поле. Однородное электрическое поле снимает вырождение атомных уровней по направлениям момента атома J , оставляя нерасщепленными уровни с $M_J = \pm |M_J|$ — проекцией момента на выделенное направление (эффект Штарка). Смещение ΔE_n уровня энергии E_n в достаточно слабом постоянном поле напряженности \mathcal{E} равно в низшем приближении теории возмущений

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2} \alpha_{zz}^{(n)} \mathcal{E}^2,$$

где $\alpha_{zz}^{(n)}$ — компонента тензора *поляризуемости* атома в направлении внешнего поля $\mathcal{E} = \mathcal{E}_z$, которая определяет также среднее значение индуцируемого полем дипольного момента атома

$$d_z^{(n)} = \frac{\partial \Delta E_n}{\partial \mathcal{E}} = \alpha_{zz}^{(n)} \mathcal{E}_z.$$

Поляризуемость атома зависит от его невозмущенного состояния n , в том числе от квантового числа M_J . В общем виде эта зависимость представляется в форме [9]

$$\alpha^{(n)} = \alpha_n + 2\beta_n \left[M_J^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right], \quad (4.1)$$

где α_n , β_n — постоянные величины; при суммировании по всем значениям M_J второе слагаемое в (4.1) обращается в нуль; оно равно нулю также и при $J=1/2$. Таким образом, поляризуемость атома, усредненная по всем M -состояниям уровня J , является скалярной величиной.

Поляризуемость атома простым образом связана с диэлектрической проницаемостью газа или пара, которая равна

$$\epsilon = 1 + 4\pi N \alpha. \quad (4.2)$$

Здесь N — плотность частиц газа. Если момент атомов, из которых состоит газ, отличен от нуля, то в формулу (4.2) входит усредненное по проекциям момента M_J значение поляризуемости.

В табл. 4.3 представлены значения скалярной поляризуемости атомных частиц [11—14]. Эти значения распределены по классам точности, согласно их определению (см. предисловие).

Магнитное поле. Магнитное поле расщепляет атомные уровни энергии, полностью снимая вырождение по направлениям полного момента атома J (эффект Зеемана). Энергия расщепления уровня, характеризующегося квантовыми числами J , L , S (приводимая зависимость справедлива в случае LS -связи), в достаточно слабом однородном магнитном поле напряженности H определяется соотношением [9]:

$$\Delta E_J = \mu_B g M_J H, \quad (4.3)$$

Таблица 4.3

Поляризуемость атомных частиц

Атом- ный номер	Атом, основной терм	Поляризуемость α		Класс точно- сти	Атом- ный номер	Атом, основной терм	Поляризуемость α		Класс точно- сти
		Å^3	a^3_0 , а. е.				Å^3	a^3_0 , а. е.	
1	H (2S)	$\alpha(n) (S) =$ $= \frac{n^4(2n^2+7)}{2} \times$ $\times a^3_0$, где n — главное квантовое число электрона		Точ- ное значе- ние	16	S (3P)	2,9	20	C
					17	Cl (2P)	2,2	15	C
					18	Cl ⁻ (1S)	2,8	18,9	C
					19	Ar (1S)	1,642	11,08	A
					20	Ar* (3P)	7,1	47,8	B
					21	K (2S)	42,5	286,8	B
					22	K ⁺ (1S)	1,2	8,1	C
					23	Ca (1S)	25	169	C
					24	Sc (2D)	20	140	D
					25	Tl (3F)	22	148	D
					26	V (4F)	19	128	D
2	He (1S)	0,205	1,383	A	27	Cr (7S)	11	74	D
	He (2S)	46,8	316	A	28	Mn (6S)	15	101	D
	He (2S)	119,0	803	A	29	Fe (5D)	13	88	D
3	Li (2S)	24	162	B	30	Co (4F)	11	74	D
	Li ⁺ (1S)	0,0285	0,1925	A	31	Ni (3F)	10	67	D
	Li ⁺ (2S)	6,965	47,0	A	32	Cu (2S)	6	40	D
	Li ⁺ (2S)	14,7	99	B	33	Zn (1S)	7	50	D
4	Be (1S)	5,6	37,8	B	34	Br (2P)	3,8	26	D
5	B (2P)	3,0	20,5	B	35	Br ⁻ (1S)	4,1	27,9	C
6	C (3P)	1,75	11,8	B	36	Kr (1S)	2,48	16,74	A
7	N (4S)	1,11	7,5	B	37	Kr* (3P)	50,6	341	B
8	O (3P)	0,80	5,41	B	38	Rb (2S)	46	310	B
9	F (2P)	0,56	3,76	B	39	Rb ⁺ (1S)	1,8	12,1	C
	F ⁻ (1S)	0,76	5,12	C	40	Sr (1S)	18	120	C
10	Ne (1S)	0,397	2,68	A	41	Ag (2S)	10	67	D
	Ne* (3P)	27,6	186	B	42	Cd (1S)	9,2	62	D
11	Na (2S)	24	162	B	43	I (2P)	3,5	24	D
	Na ⁺ (1S)	1,72	11,6	C	44	Xe (1S)	4,01	27,06	A
12	Mg (1S)	11	72	C	45	Xe* (3P)	63,2	426	B
13	Al (2P)	8,3	56	C	46	Cs (2S)	57	385	B
14	Si (3P)	5,5	37	C	47	Ba (1S)	42	283	C
15	P (4P)	3,6	24	C	48	W (5D)	17	115	D
					49	Hg (1S)	5,1	34,4	B

где $\mu_B = e\hbar/2mc$ — магнетон Бора; M_J — проекция полного момента на направление магнитного поля; g — множитель Ландé (гиромагнитный множитель), равный

$$g = 1 + [J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)] / [2J(J+1)].$$

Формула (4.3) получена в предположении, что квадратичными по полю эффектами можно пренебречь.

Если спин и орбитальный момент атома равны нулю ($L=S=0$), то сдвиг уровня энергии атома определяется соотношением [9]:

$$\Delta E = -\chi H^2/2,$$

где коэффициент χ — магнитная восприимчивость атома, характеризующая также индуцируемый полем средний магнитный момент атома

$$\bar{\mu}_z = \gamma H, \quad H = H_z.$$

В табл. 4.4 приведены измеренные и рассчитанные значения магнитной восприимчивости χ (в ед. 10^{-6} см³/моль) [15, 16].

Таблица 4.4

Магнитная восприимчивость атомов χ , 10^{-6} см³/моль

Атом	χ	Атом	χ
He	1,884 (A)	Ar	19,3 (B)
Be	13 (C)	Ca	44 (C)
Ne	7,0 (B)	Kr	29 (B)
Mg	23 (C)	Xe	45 (B)

§ 4.4. Сверхтонкое расщепление уровней атомов

Последовательный анализ уровней энергии атомной частицы должен включать в себя также учет взаимодействия электронов с угловыми моментами (спином) ядра. В итоге атомные уровни энергии расщепляются на ряд сверхтонких компонент, каждая из которых характеризуется набором четырех квантовых чисел $\{J, i, F, m_F\}$, где J — полный (орбитальный и спиновый) момент электронов; i — спин ядра; $F = J + i$ — полный момент атома; m_F — проекция полного момента F на ось квантования. Основную роль в сверхтонком расщеплении играет взаимодействие электронов с мультипольными моментами ядра наиболее низких порядков. В первом приближении моменты i и J можно считать сохраняющимися и тогда полная энергия атомного уровня представляется рядом [17—19]:

$$E_F = E_J + E_{M1} + E_{E2} = E_J + \frac{\hbar}{2} aK + \\ + \frac{3\hbar}{4} b \frac{K(K+1) - 2i(i+1)J(J+1)}{i(2i-1)J(2J-1)},$$

где E_J — энергия уровня без учета взаимодействий электронов с ядерными моментами; E_{M1} — энергия взаимодействия электронов с магнитным дипольным моментом ядра; E_{E2} — энергия взаимодействия электронов с электрическим квадрупольным моментом ядра; $K = F(F+1) - i(i+1) - J(J+1)$, a , b — параметры сверхтонкого расщепления уровней, причем магнитное взаимодействие примерно в 15 раз больше квадрупольного взаимодействия. Сверхтонкое расщепление уровней принято обозначать $\Delta\nu(F, F') = \Delta E_{FF'}/\hbar$, где $\Delta E_{FF'}$ — расстояние между двумя сверхтонкими

компонентами с полными моментами F и $F'=F-1$, измеренное в отсутствие внешнего магнитного поля.

Искомые параметры a , b сверхтонкого расщепления уровней и величину $\Delta\nu$ измеряют, пропуская пучок атомных или молекулярных частиц через стационарное неоднородное и перестраиваемое осциллирующее магнитные поля, вызывающие переходы между различными состояниями частиц. В табл. 4.5 приведены измеренные значения $\Delta\nu(F, F')$ (в ед. МГц и см^{-1}), а также параметры a , b (в ед. МГц) для ряда наиболее устойчивых изотопов ядер [19, 20].

Таблица 4.5

Параметры сверхтонкого расщепления уровней энергии стабильных изотопов атомов

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu(F, F')$, МГц	$\Delta E(F, F')$, 10^{-2} см^{-1}
1	$^1\text{H} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	(1, 0)	1420, 4057517	47,3797
		$^2S_{1/2}$	(1, 0)	177, 5568	5,92206
	$^2\text{H} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	(3/2, 1/2)	327, 384352	10,9204
		$^2S_{1/2}$	(3/2, 1/2)	40, 9244	1,36509
2	$^3\text{H} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	(1, 0)	1516, 7014708	50,5918
	^3He	3S_1	(3/2, 1/2)	6739, 701	224,812
	$^3\text{He}^+ (^2S_{1/2})$	$^1S_{1/2}$	(1, 0)	8665, 6499	289,055
3	$^6\text{Li} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	(3/2, 1/2)	228, 20526	7,61211
		$^2P_{1/2}$	—	$a = 17,37$	—
		$^2P_{3/2}$	—	$a = -1,16$	—
				$b = -0,1$	—
7	$^7\text{Li} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	(2, 1)	803, 50409	26,80203
		$^2P_{1/2}$	—	$a = 45,9$	—
		$^2P_{3/2}$	—	$a = -3,06$	—
				$b = -0,22$	—
4	$^9\text{Be} (^1S_0)$	3P_1	(5/2, 3/2)	354, 44	11,823
			(3/2, 1/2)	202, 95	6,7697
		3P_2	(7/2, 5/2)	435, 48	14,526
			(5/2, 3/2)	312, 02	10,408
			(3/2, 1/2)	187, 62	6,2583
5	$^{10}\text{B} (^2P_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	(7/2, 5/2)	429, 05	14,312
	$^{11}\text{B} (^2P_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	(2, 1)	732, 15	24,422
		$^2P_{3/2}$	(3, 2)	222, 7	7,428
			(2, 1)	144, 0	4,803
			(1, 0)	71	2,37

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu (F, F')$, МГц	$\Delta E (F, F')$, 10^{-3} см^{-1}
6	$^{13}\text{C} (^3P_0)$	3P_1	(3/2, 1/2)	4,3	0,14
		3P_2	(5/2, 3/2)	372,6	12,43
7	$^{14}\text{N} (^4S_{3/2})$	$^4S_{3/2}$	—	$a = 10,450929$	—
				$b = +1,3$	—
9	$^{19}\text{F} (^2P_{3/2})$	$^2P_{3/2}$	(2,1)	4020,0 [ЭПР]	134,1
		3P_2	(7/2, 5/2)	1034,5	34,51
10	$^{21}\text{Ne} (^1S_0)$		(5/2, 3/2)	599,4	19,99
			(3/2, 1/2)	303,9	10,14
			(2,1)	1771,62613	59,09513
11	$^{23}\text{Na} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	—	$a = 94,3$	—
		$^2P_{1/2}$	—	$a = 18,7$	—
		$^2P_{3/2}$	—	$b = 2,9$	—
12	$^{25}\text{Mg} (^1S_0)$	3P_1	(7/2, 5/2)	516,1	17,22
			(5/2, 3/2)	350,0	11,7
		3P_2	(9/2, 7/2)	567,3	18,92
			(7/2, 5/2)	452,3	15,09
			(5/2, 3/2)	329,0	10,97
			(3/2, 1/2)	199,8	6,66
13	$^{27}\text{Al} (^2P_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	(3,2)	1506,1	50,24
		$^2P_{3/2}$	(4,3)	392	13,1
			(3,2)	274	9,14
15	$^{31}\text{P} (^4S_{3/2})$	$^4S_{3/2}$	—	$a = +55,06$	—
17	$^{35}\text{Cl} (^2P_{3/2})$	$^2P_{3/2}$	(3,2)	670,0135	22,349
			(2,1)	355,2210	11,849
			(1,0)	150,1736	5,009
18	$^{37}\text{Cl} (^2P_{3/2})$	$^2P_{1/2}$	(2,1)	2074,38	69,19
		$^2P_{3/2}$	(3,2)	555,3043	18,523
			(2,1)	298,1277	9,944
19	$^{39}\text{K} (^2S_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	(1,0)	127,4408	4,251
		$^2S_{1/2}$	(2,1)	1726,7	57,60
		$^2P_{3/2}$	(2,1)	461,719720	15,40132
20	$^{40}\text{K} (^2S_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	—	$a = 28,9$	—
		$^2P_{3/2}$	—	$a = 6,1$	—
			—	$b = 2,8$	—
21	$^{41}\text{K} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	—	$a = -285,73$	—
		$^2P_{1/2}$	(2,1)	254,01387	8,47300

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu(F, F')$, МГц	$\Delta E(F, F')$, 10^{-3} см $^{-1}$
21	^{45}Sc ($^2D_{3/2}$)	$^2D_{3/2}$	(5, 4)	1329	44,3
			(4, 3)	1085,8	36,22
			$^2D_{5/2}$	(6, 5)	635,0
			(5, 4)	543,8	18,14
			(4, 3)	444,7	14,83
22	^{47}Ti (3F_2)	3F_2	—	$a = -85,703$	—
	^{49}Ti (3F_2)	3F_2	—	$b = +25,70$	—
23	^{51}V ($^4F_{3/2}$)	$^4F_{3/2}$	—	$a = -85,726$	—
			—	$b = +21,07$	—
24	^{53}Cr (7S_3)	7S_3	—	$a = 560,07$	—
			—	$b = 3,98$	—
25	^{55}Mn ($^6S_{5/2}$)	$^6S_{5/2}$	—	371,7	12,40
			(9/2, 7/2)	289,09	9,643
			(5/2, 3/2)	206,50	6,888
26	^{57}Fe (5D_4)	5D_4	—	$a = -72,4208$	—
			—	$b = -0,018$	—
27	^{59}Co ($^4F_{9/2}$)	$^4F_{9/2}$	—	$a = +38,08$	—
			(8, 7)	3655	121,9
28	^{61}Ni (3F_4)	3F_4	—	3169,4	105,7
			—	2695	89,9
			(6, 5)	2230,6	74,40
			(5, 4)	1774,5	59,19
			(4, 3)	—	—
29	^{63}Cu ($^2S_{1/2}$)	$^2S_{1/2}$	(2, 1)	11733,8174	391,398
	^{65}Cu ($^2S_{1/2}$)	$^2S_{1/2}$	(2, 1)	12568,780	419,250
30	^{67}Zn (1S_0)	3P_2	—	2418,1	80,66
			(9/2, 7/2)	1855,7	61,90
			(7/2, 5/2)	1312,1	43,77
			(5/2, 3/2)	781,9	26,08
			(3/2, 1/2)	—	—
31	^{69}Ga ($^2P_{1/2}$)	$^2P_{1/2}$	(2, 1)	2677,987	89,328
		$^2P_{3/2}$	—	$a = 190,794$	—
		$^2P_{3/2}$	—	$b = 62,523$	—
		$^2P_{1/2}$	(2, 1)	3402,69	113,50
		$^2P_{3/2}$	(3, 2)	766,696	25,574

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu(F, F')$, МГц	$\Delta E(F, F')$, 10^{-8} см $^{-1}$
31	$^{73}\text{Ge} (^3P_0)$	3P_1	(2, 1)	445,470	14,859
			(1, 0)	203,043	6,773
32	$^{73}\text{Ge} (^3P_0)$	3P_2	—	$a = 15,55$	—
			—	$b = -54,57$	—
		$^4S_{3/2}$	—	$a = -64,427$	—
			—	$b = +111,8$	—
33	$^{75}\text{As} (^4S_{3/2})$	$^4S_{3/2}$	—	$a = -66,20$	—
			—	$b = -0,53$	—
		3P_1	(3, 2)	819,45	27,33
			(2, 1)	595,12	19,85
51	$^{123}\text{Sb} (^4S_{3/2})$	$^4S_{3/2}$	(5, 4)	815,6	27,20
			(4, 3)	648,5	21,63
		$^2P_{3/2}$	(3, 2)	484,0	16,1
			(4, 3)	4226,17	140,97
53	$^{127}\text{I} (^2P_{3/2})$	$^2P_{3/2}$	(3, 2)	1965,9	65,58
			(2, 1)	737,49	24,60
		3P_2	(5/2, 3/2)	5961,258	198,85
			(7/2, 5/2)	2693,623	89,850
54	$^{129}\text{Xe} (^1S_0)$	3P_2	(5/2, 3/2)	1608,348	53,649
			(3/2, 1/2)	838,764	27,978
		$^6S_{1/2}$	(4, 3)	9192,631770	306,63342
			—	$a = 292$	—
55	$^{133}\text{Cs} (^2S_{1/2})$	$^6S_{1/2}$	—	$a = 50,3$	—
			—	$b = -0,4$	—
		$^5D_{5/2}$	—	$a = \pm 22$	—
		$^7S_{1/2}$	—	$a = 546$	—
57	$^{139}\text{La} (^2D_{3/2})$	$^2D_{3/2}$	(5, 4)	737,97	24,62
			(4, 3)	551,98	18,41
		$^2D_{5/2}$	(3, 2)	391,6	13,06
			(6, 5)	1120,90	37,39
		$^4F_{3/2}$	(5, 4)	912,79	30,45
			(4, 3)	716,29	23,89
		$^4F_{3/2}$	(3, 2)	529,1	17,65
			(5, 4)	2390,6	79,74
			(4, 3)	1925,5	64,23

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu(F, F')$, МГц	$\Delta E(F, F')$, 10^{-8} см^{-1}
57	$^{141}\text{Pr} (^4I_{9/2})$	$^4F_{5/2}$	(6, 5)	1808,9	60,34
			(5, 4)	1503,2	50,14
			(4, 3)	1199,8	40,02
			$^4P_{1/2}$	(4, 3)	9840,6
			$^4P_{3/2}$	(4, 3)	3707,8
		$^4P_{5/2}$	(4, 3)	3216,5	123,68
			—	107,3	
			—	$a = 926,209$	—
			—	$b = -11,88$	—
			—	$a = 730,393$	—
59	$^{141}\text{Pr} (^4I_{9/2})$	$^4I_{9/2}$	—	$b = -11,88$	—
			—	$a = 613,240$	—
			—	$b = -12,85$	—
			—	$a = 541,575$	—
			—	$b = -14,56$	—
		5I_4	(15/2, 13/2)	1418	47,3
			(13/2, 11/2)	1257,5	41,95
			(11/2, 9/2)	1084,7	36,18
			(9/2, 7/2)	901,5	30,07
			(7/2, 5/2)	710	23,7
60	$^{144}\text{Nd} (^5I_4)$ $^{145}\text{Nd} (^5I_4)$	5I_5	—	$a = -153,68$	—
			—	$b = 115,7$	—
			—	$a = -121,63$	—
			—	$b = +64,6$	—
			—	$a = -95,53$	—
		7F_1	—	$b = +61,0$	—
			—	$a = -33,494$	—
			—	$b = -58,692$	—
			—	$a = -41,184$	—
			—	$b = -62,23$	—
62	$^{147}\text{Sm} (^7F_0)$ $^{149}\text{Sm} (^7F_2)$	7F_2	—	$a = -50,240$	—
			—	$b = -33,68$	—
			—	$a = -27,611$	—
			—	$b = +16,962$	—
			—	$a = -33,951$	—
		7F_3	—	$b = 17,99$	—

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu (F, F')$, МГц	$\Delta E (F, F')$, 10^{-3} см^{-1}
62		7F_3	—	$a = -41,418$ $b = 9,75$	—
63	$^{151}\text{Eu} (^8S_{7/2})$	$^8S_{7/2}$	(6, 5) (5, 4) (4, 3)	120,67 100,29 80,05	4,025 3,345 2,67
	$^{153}\text{Eu} (^8S_{7/2})$	$^8S_{7/2}$	(6, 5) (5, 4) (4, 3)	54,04 44,00 35,00	1,803 1,47 1,17
64	$^{155}\text{Gd} (^9D_2)$	9D_2	—	$a = 36,575$ $b = 179,4$	—
		9D_3	—	$a = 4,92$ $b = -406,67$	—
		9D_4	—	$a = -6,86$ $b = -352,8$	—
	$^{157}\text{Gd} (^9D_2)$	9D_2	—	$a = 47,96$ $b = 191,2$	—
		9D_3	—	$a = 6,45$ $b = -433,2$	—
		9D_4	—	$a = -9,00$ $b = -375,9$	—
65	$^{159}\text{Tb} (^6H_{15/2})$	$^6H_{15/2}$	—	$a = 673,75$ $b = 1449,3$	—
		$^6H_{13/2}$	—	$a = 682,91$ $b = 1167,5$	—
		$^8G_{13/2}$	—	$a = 532,20$ $b = 928,9$	—
66	$^{161}\text{Dy} (^5I_8)$	5I_8	—	$a = -116,232$ $b = 1091,57$	—
	$^{163}\text{Dy} (^5I_8)$	5I_8	—	$a = 162,7543$ $b = 1152,86$	—
		5I_7	—	$a = 177,53$ $b = 1066,4$	—
67	$^{165}\text{Ho} (^4I_{15/2})$	$^4I_{15/2}$	(9, 8) (8, 7) (7, 6)	7184,8 6540,8 5842,4	239,7 218,2 194,9

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu (F, F')$, МГц	$\Delta E (F, F')$, 10^{-3} см $^{-1}$
67	$^{167}\text{Er} (^3H_6)$	3H_6	(6, 5)	5096, 3	170, 0
			(5, 4)	4309, 3	143, 7
68	$^{169}\text{Tm} (^2F_{7/2})$	$^2F_{7/2}$	—	$a = -120,486$	—
			(4, 3)	$b = -4552,96$	—
69	$^{175}\text{Lu} (^2D_{3/2})$	$^2D_{3/2}$	—	1496, 5507	49, 920
			(5, 4)	$a = -374,13766$	—
71	$^{176}\text{Lu} (^2D_{3/2})$	$^2D_{3/2}$	(4, 3)	2051, 2201	68, 421
			(3, 2)	345, 497	11, 524
			$^2D_{5/2}$	+496, 578	16, 564
			(6, 5)	1837, 570	61, 295
			(5, 4)	800, 343	26, 70
			(4, 3)	161, 815	5, 398
			(3, 2)	+157, 73	5, 26
			(2, 1)	+238, 058	7, 941
			—	$a = 139$	—
			—	$b = 2151$	—
72	$^{177}\text{Hf} (^3F_2)$	3F_2	(11/2, 9/2)	991, 792	33, 08
			(9/2, 7/2)	477, 008	15, 91
			(7/2, 5/2)	162, 887	5, 433
			(5/2, 3/2)	4, 864	0, 16
			(13/2, 11/2)	82, 132	2, 74
73	$^{181}\text{Ta} (^4F_{3/2})$	$^4F_{3/2}$	(11/2, 9/2)	392, 848	13, 104
			(9/2, 7/2)	541, 9104	18, 076
			(7/2, 5/2)	558, 672	18, 635
			(5, 4)	1822, 39	60, 79
			(4, 3)	2325, 54	77, 57
77	$^{191}\text{Ir} (^4F_{9/2})$	$^4F_{9/2}$	$^4F_{5/2}$	(6, 5)	1451, 48
			(5, 4)	1537, 53	51, 29
			(4, 3)	1444, 68	48, 19
			$^4F_{7/2}$	(4, 3)	1218, 37
			(6, 5)	659, 265	21, 991
	$^{193}\text{Ir} (^4F_{9/2})$	$^4F_{9/2}$	(5, 4)	189, 4400	6, 319
			(4, 3)	84, 050	2, 804
			(6, 5)	660, 090	22, 018
			(5, 4)	224, 478	7, 488
			(4, 3)	33, 535	1, 119

Продолжение табл. 4.5

Атомный номер Z	Изотоп элемента, основной терм	Электронный терм	Квантовые числа полного момента (F, F')	Сверхтонкое расщепление уровней	
				$\Delta\nu (F, F')$, МГц	$\Delta E (F, F')$, 10^{-3} см $^{-1}$
78	$^{195}\text{Pt} (^3D_3)$	3D_3	—	$a = 5717$	—
		3D_2	—	$a = 2610$	—
		3F_4	(9/2, 7/2)	3820,56	127,4
79	$^{197}\text{Au} (^2S_{1/2})$	$^2S_{1/2}$	(2,1)	6099,3202	203,452
		$^2D_{5/2}$	—	$a = 80,24$	—
		$^2D_{3/2}$	—	$b = 1049,8$	—
80	$^{199}\text{Hg} (^1S_0)$	3P_2	—	$a = 199,842$	—
		3P_2	(7/2, 5/2)	11382,629	379,68
			(5/2, 3/2)	8629,522	287,85
			(3/2, 1/2)	5377,49	179,37
81	$^{203}\text{Tl} (^2P_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	(1,0)	21105,449764	704,0026
		$^2P_{3/2}$	(2,1)	524,05995	17,4808
82	$^{205}\text{Tl} (^2P_{1/2})$	$^2P_{1/2}$	(1,0)	21310,833947	710,8534
		$^2P_{3/2}$	(2,1)	530,07655	17,6815
83	$^{207}\text{Pb} (^3P_0)$	1D_2	(5/2, 3/2)	1524,5	50,85
83	$^{209}\text{Bi} (^4S_{3/2})$	$^4S_{3/2}$	(6,5)	2884,67	96,22
			(5,4)	2171,42	72,43
			(4,3)	1584,50	52,85
		$^2P_{3/2}$	(6,5)	3598,65	120,04
			(5,4)	2251,04	75,09
			(4,3)	1311,9	43,76

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moore C. E. Ionization potentials and ionization limits derived from optical spectra. US Departament of Commerce, NSRDS-NBS, Sept. 1970, v. 34.
2. Ground levels and IP's for lanthanide and actinide atoms and ions. — «J. Phys. Chem. Ref. Data», 1974, v. 3, p. 771. Auth.: W. C. Martin, L. Hagan, J. Reader, J. Sugar; Martin W. C., Zalubas R., Hagan L. Atomic energy levels. — The rare-earth elements. NSRDS — NBS, April 1978, v. 60.
3. Kelly R. L., Harrison D. E., Jr. IP's, experimental and theoretical, of the elements hydrogen to krypton. — «Atomic Data», 1971, v. 3, p. 177.
4. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и средство к электрону. М., «Наука», 1974. Авт.: Л. В. Гурвич, Г. В. Караваевцев, В. Н. Кондратьев и др.
5. Смирнов Б. М. Отрицательные ионы. М., Атомиздат, 1978.
6. Massey H. S. W. Negative ions. 3d ed., Lond., Cambridge Univ. Press, 1976.
7. Page F. N., Good B. C. Negative ions and magnetrons. Wiley Intsc., 1974.

8. Steiner B. H. In: Case studies in atomic physics, 1972, v. 2, p. 483; Hotop H., Lineberger W. C. «J. Phys. Chem. Ref. Data», 1975, v. 4, p. 539; Walther H. In: Laser spectroscopy of atoms and molecules, ed. H. Walther, Springer-Verlag, 1976, p. 1; Moiseiwitsch B. L. In: Atomic processes and applications. Eds. P. Burke, B. Moiseiwitsch. Amsterdam—N. Y., North-Holland, 1976, Ch. 9.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. 3-е изд. М., «Наука», 1974.
10. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М., Физматгиз, 1963.
11. Teachout R. R., Pack R. T. «Atomic Data», 1971, v. 3, p. 195.
12. Leonard P. J. «Atomic Data and Nucl. Data Tables», 1974, v. 14, p. 21.
13. Miller T. M., Bederson B. «Advances At. Mol. Phys.», 1977, v. 13, p. 1.
14. Dalgarno A. «Adv. Phys.», 1962, v. 11, p. 281.
15. Reinsch E. A., Meyer W. «Phys. Rev. A», 1976, v. 14, p. 915.
16. Johnson W. R., Feiok F. D. «Phys. Rev.», 1968, v. 168, p. 22.
17. Freeman A. J., Frankel R. H. Hyperfine Interactions. N. Y., Academic Press, 1967.
18. Lindgren I., Rosen A. «Case Stud. Atomic Phys.», 1974, v. 4, p. 93.
19. Fuller G. H. «J. Phys. Chem. Ref. Data», 1976, v. 5, p. 835; Fuller G. H., Cohen V. W. «Nucl. Data Tables», 1969, v. A5, p. 433.
20. Arimondo E., Inguscio M., Violino P. «Rev. Mod. Phys.», 1977, v. 49, p. 31.

Глава 5

УРОВНИ ЭНЕРГИИ И СПЕКТРЫ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ

§ 5.1. Низколежащие термы атомов и ионов

В табл. 5.1 приведены значения энергий возбуждения низколежащих состояний нейтральных атомов и однозарядных положительных ионов, восстановленные в результате обработки спектров оптических переходов между различными состояниями частиц [1—4]. Уровни энергии частиц расположены в порядке их возрастания от уровня основного состояния; дается также классификация соответствующего электронного терма и электронной конфигурации возбужденных валентных электронов.

Таблица 5.1

1. Низколежащие электронные термы атомов

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
1	¹ H ($1s - ^2S_{1/2}$) 109678,774	$2p(^2P^0_{1/2})$ $2s(^2S_{1/2})$ $2p(^2P^0_{3/2})$ $3p(^2P^0_{1/2})$ $3s(^2S_{1/2})$ $3p(^2P^0_{3/2}), 3d(^2D_{3/2})$ $3d(^2D_{5/2})$	82258,921 82258,956 82259,286 97492,213 97492,223 97492,321 97492,357
2	¹ He ($1s^2 - ^1S_0$) 198310,76	$2s(^3S_1)$ $2s(^1S_0)$ $2p(^3P^0_2)$ $2p(^3P^0_1)$ $2p(^3P^0_0)$ $2p(^1P^0_1)$ $3s(^3S_1)$ $3s(^1S_0)$ $3p(^3P^0_2)$ $3p(^3P^0_1)$ $3p(^3P^0_0)$ $3d(^3D_{3, 2, 1})$ $3d(^1D_2)$ $3p(^1P^0_1)$	159856,069 166277,546 169086,864 169086,940 169087,928 171135,000 183236,89 184864,94 185564,65 185564,68 185564,95 186101,65 186105,07 186209,47
3	¹ Li ($2s - ^2S_{1/2}$) 43487,15	$2p(^2P^0_{1/2})$ $2p(^2P^0_{3/2})$	14903,65 14904,00

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
3		3s (² S _{1/2}) 3p (² P _{1/2, 3/2}) 3d (² D _{3/2}) 3d (² D _{5/2}) 4s (² S _{1/2}) 4p (² P _{1/2, 3/2}) 4d (² D _{3/2}) 4d (² D _{5/2}) 4f (² F _{5/2, 7/2})	27206,10 30925,63 31283,06 31283,10 35012,04 36469,79 36623,35 36623,37 36628,33
4	Be (2s ² — ¹ S ₀) 75192,1	2p (³ P ₀) 2p (³ P ₁) 2p (³ P ₂) 2p (¹ P ₁) 3s (³ S ₁) 3s (¹ S ₀) 2p ² (¹ D ₂) 3p (³ P _{0,1}) 3p (³ P ₂) 2p2d (³ D ₀) 2p2d (³ D ₁) 2p2d (³ D ₂) 3p (¹ P ₁)	21978,28 21978,92 21981,27 42565,35 52080,94 54677,26 56882,43 58907,45 58907,83 59693,65 59695,07 59697,08 60187,34
5	B (2p — ² P _{1/2}) 66928,1	2p (² F _{3/2}) 2s2p ² (⁴ P _{1/2}) 2s2p ² (⁴ P _{3/2}) 2s2p ² (⁴ P _{5/2}) 3s (² S _{1/2}) 2s2p ² (² D _{3/2, 5/2}) 3p (² P _{1/2, 3/2}) 3d (² D _{3/2}) 3d (² D _{5/2}) 4s (² S _{1/2})	15,254 28870 28875 28880 40039,65 47857,0 48613,6 54767,63 54767,80 55010,18
6	C (2p ² — ³ P ₀) 90820,4	2p ² (³ P ₁) 2p ² (³ P ₂) 2p ² (¹ D ₂) 2p ² (¹ S ₀)	16,40 43,40 10192,63 21648,01

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
6		$2s2p^3(^5S_2)$	33735,20
		$2p3s(^3P_0)$	60333,43
		$2p3s(^3P_1)$	60352,63
		$2p3s(^3P_2)$	60393,14
		$2p3s(^1P_1)$	61981,82
		$2s2p^3(^3D_3)$	64086,92
		$2s2p^3(^3D_1)$	64089,85
		$2s2p^3(^3D_2)$	64090,95
7	$N(2p^3 - ^4S_{3/2})$ 117225,7	$2p(^2D_{5/2})$	19224,46
		$2p(^2D_{3/2})$	19233,18
		$2p(^2P_{1/2})$	28838,92
		$2p(^2P_{3/2})$	28839,31
		$3s(^4P_{1/2})$	83284,07
		$3s(^4P_{3/2})$	83317,83
		$3s(^4P_{5/2})$	83364,62
		$3s(^2P_{1/2})$	86137,35
		$3s(^2P_{3/2})$	86220,51
		$2s2p^4(^4P_{5/2})$	88107,26
		$2s2p^4(^4P_{3/2})$	88151,17
		$2s2p^4(^4P_{1/2})$	88170,57
8	$O(2p^4 - ^3P_2)$ 109837,0	$2p(^3P_1)$	158,26
		$2p(^3P_0)$	226,98
		$2p(^1D_2)$	15867,86
		$2p(^1S_0)$	33792,58
		$3s(^5S_2)$	73768,20
		$3s(^3S_1)$	76794,98
		$3p(^5P_1)$	86625,76
		$3p(^5P_2)$	86627,78
		$3p(^5P_3)$	86631,45
		$3p(^3P_1)$	88630,59
		$3p(^3P_2)$	88631,15
		$3p(^3P_0)$	88631,30
		$4s(^5S_2)$	95476,73
		$4s(^3S_1)$	96225,05
9	$F(2p^5 - ^2P_0_{1/2})$ 140524,5	$2p(^2P_{3/2})$	404,1
		$3s(^4P_{5/2})$	102405,7

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
9		$3s(^4P_{3/2})$	102680,4
		$3s(^4P_{1/2})$	102840,4
		$3s(^2P_{3/2})$	104731,0
		$3s(^2P_{1/2})$	105056,3
		$3p(^4P^o_{5/2})$	115917,9
		$3p(^4P^o_{3/2})$	116040,9
		$3p(^4P^o_{1/2})$	116143,6
		$3p(^4D^o_{7/2})$	116987,4
		$3p(^4D^o_{5/2})$	117164,0
		$3p(^4D^o_{3/2})$	117308,6
		$3p(^4D^o_{1/2})$	117392,0
		$3p(^2D^o_{5/2})$	117622,9
		$3p(^2D^o_{3/2})$	117872,9
		$3p(^2S^o_{1/2})$	118405,3
		$3p(^4S^o_{3/2})$	118427,8
		$3p(^2P^o_{3/2})$	118936,8
		$3p(^2P^o_{1/2})$	119081,8
10	Ne ($2p^6 - ^1S_0$) 173929,7	$2p^5(^2P^o_{3/2})3s[3/2]^o_2$	134041,84
		$3s[3/2]^o_1$	134459,29
		$2p^5(^2P^o_{1/2})3s'[1/2]^o_0$	134818,64
		$3s'[1/2]^o_1$	135888,71
		$3p[1/2]_1$	148257,79
		$3p[5/2]_3$	149657,04
		$3p[5/2]_2$	149824,22
		$3p[3/2]_1$	150121,59
		$3p[3/2]_2$	150315,86
		$3p'[3/2]_1$	150772,11
		$3p'[3/2]_2$	150858,51
		$3p[1/2]_0$	150917,43
		$3p'[1/2]_1$	151038,45
		$3p'[1/2]_0$	152970,73
11	Na ($3s - ^2S_{1/2}$) 41449,44	$3p(^2P^o_{1/2})$	16956,183
		$3p(^2P^o_{3/2})$	16973,379
		$4s(^2S_{1/2})$	25739,860
		$3d(^2D_{5/2})$	29172,855
		$3d(^2D_{3/2})$	29172,904

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
11		$4p(^2P_1/2)$	30266,88
		$4p(^2P_3/2)$	30272,51
12	Mg ($3s^2 - ^1S_0$) 61671,02	$3p(^3P_0)$	21850,368
		$3p(^3P_1)$	21870,426
		$3p(^3P_2)$	21911,140
		$3p(^1P_1)$	35051,36
		$4s(^3S_1)$	41197,37
		$4s(^1S_0)$	43503,0
		$3d(^1D_2)$	46403,14
		$4p(^3P_0)$	47841,119
		$4p(^3P_1)$	47844,414
		$4p(^3P_2)$	47851,162
		$3d(^3D_2)$	47957,018
		$3d(^3D_3)$	47957,035
		$3d(^3D_1)$	47957,047
		$4p(^1P_1)$	49346,67
13	Al ($3p - ^2P_1/2$) 48278,37	$3p(^2P_3/2)$	112,06
		$4s(^2S_{1/2})$	25347,76
		$3s3p^2(^4P_{1/2})$	29020,41
		$3s3p^2(^4P_{3/2})$	29066,96
		$3s3p^2(^4P_{5/2})$	29142,78
		$3d(^2D_{3/2})$	32435,43
		$3d(^2D_{5/2})$	32436,78
		$4p(^2P_1/2)$	32949,80
		$4p(^2P_3/2)$	32965,64
		$5s(^2S_{1/2})$	37689,41
14	Si ($3p^2 - ^3P_0$) 65747	$3p^2(^3P_1)$	77,115
		$3p^2(^3P_2)$	223,157
		$3p^2(^1D_2)$	6298,850
		$3p^2(^1S_0)$	15394,370
		$3s3p^3(^5S_2)$	33326,053
		$4s(^3P_0)$	39683,163
		$4s(^3P_1)$	39760,285
		$4s(^3P_2)$	39955,053
		$4s(^1P_1)$	40991,884
		$3s3p^3(^3D_1)$	45276,188

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
14		3s3p ³ (³ D ₂) 3s3p ³ (³ D ₃) 4p(¹ P ₁) 3d(¹ D ₂) 4p(³ D ₁) 4p(³ D ₂) 4p(³ D ₃) 4p(³ P ₀) 4p(³ P ₁) 4p(³ P ₂) 4p(³ S ₁)	45293,629 45321,848 47284,061 47351,554 48020,074 48102,323 48264,292 49028,294 49060,601 49188,617 49399,670
15	P(3p ³ — ⁴ S _{3/2}) 84580	3p ³ (² D _{3/2}) 3p ³ (² D _{5/2}) 3p ³ (² P _{1/2}) 3p ³ (² P _{3/2}) 4s(² P _{1/2}) 4s(² P _{3/2}) 4p(² S _{1/2}) 3p ² (¹ D)4s(² D _{3/2}) 3p ² (¹ D)4s(² D _{5/2}) 4p(⁴ D _{1/2}) 4p(⁴ D _{3/2}) 4p(⁴ D _{5/2}) 4p(⁴ D _{7/2}) 4p(⁴ P _{1/2}) 4p(⁴ P _{3/2}) 4p(⁴ P _{5/2}) 4p(² D _{3/2}) 4p(⁴ S _{3/2}) 4p(² D _{5/2})	11360,8 11376,4 18722,65 18747,95 57876,70 58174,45 64239,5 65156,4 65157,2 65373,47 65450,02 65585,00 65787,38 66343,33 66360,12 66544,12 66813,04 66834,50 67113,82
16	S(3p ⁴ — ³ P ₂) 83558,0	3p ³ (⁴ S ₀)3p(³ P ₁) 3p(³ P ₀) 3p(¹ D ₂) 3p(¹ S ₀) 4s(⁵ S ₂) 4s(³ S ₁)	396,8 573,6 9239,0 22181,4 52623,88 55331,15

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
16		$4p(^5P_1)$ $4p(^5P_2)$ $4p(^5P_3)$ $4p(^3P_0)$ $4p(^3P_1)$ $4p(^3P_2)$ $3p^3(^2D^0) 4s' (^3D^0_1)$ $4s' (^3D^0_2)$ $4s' (^3D^0_3)$ $3d(^5D^0_4)$ $3d(^5D^0_0)$ $3d(^5D^0_1)$ $3d(^5D^0_2)$ $3d(^5D^0_3)$	63446,36 63457,33 63475,26 64891,71 64889,23 64892,89 67816,87 67825,72 67843,38 67878,03 67884,67 67885,97 67888,25 67890,45
17	Cl ($3p^5 - ^2P^0_{3/2}$) 104591,0	$3p^4(^3P) 3p (^2P^0_{1/2})$ $4s(^4P_{5/2})$ $4s(^4P_{3/2})$ $4s(^4P_{1/2})$ $4s(^2P_{3/2})$ $4s(^2P_{1/2})$ $4p(^4P^0_{5/2})$ $4p(^4P^0_{3/2})$ $4p(^4P^0_{1/2})$ $4p(^4D^0_{7/2})$ $3p^4(^1D) 4s' (^2D^0_{5/2})$ $4s' (^2D^0_{3/2})$ $4p(^4D^0_{5/2})$ $4p(^4D^0_{3/2})$ $4p(^2D^0_{5/2})$ $4p(^4D^0_{1/2})$ $4p(^2D^0_{3/2})$ $4p(^2S^0_{1/2})$ $4p(^2P^0_{3/2})$ $4p(^4S^0_{3/2})$ $4p(^2P^0_{1/2})$	881 71954,0 72484,20 72822,64 74221,44 74861,24 82914,54 83126,59 83360,55 83889,64 84115,68 84117,38 84127,90 84480,91 84643,69 84684,27 84984,04 85239,98 85438,04 85730,68 85913,44

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
18	Ar ($3p^6 - {}^2S_0$) 127109,9	$3p^5({}^2P_3/2)4s[3/2]_2$ $4s[3/2]_1$ $3p^5({}^2P_1/2)4s'[1/2]_0$ $4s'[1/2]_1$ $4p[1/2]_1$ $4p[5/2]_3$ $4p[5/2]_2$ $4p[3/2]_1$ $4p[3/2]_2$ $4p[1/2]_0$ $4p'[3/2]_1$ $4p'[3/2]_2$ $4p'[1/2]_1$ $4p'[1/2]_0$	93143,76 93750,60 94553,67 95399,83 104102,10 105462,76 105617,27 106087,26 106237,55 107054,27 107131,71 107289,07 107496,42 108722,62
19	K ($4s - {}^2S_{1/2}$) 35009,77	$4p({}^2P_1/2)$ $4p({}^2P_3/2)$ $5s({}^2S_{1/2})$ $3d({}^2D_{5/2})$ $3d({}^2D_{3/2})$ $5p({}^2P_1/2)$ $5p({}^2P_3/2)$ $4d({}^2D_{5/2})$ $4d({}^2D_{3/2})$ $6s({}^2S_{1/2})$ $4f({}^2F_{7/2, 5/2})$ $6p({}^2P_1/2)$ $6p({}^2P_3/2)$	12985,17 13042,89 21026,8 21534,42 21536,75 24701,44 24720,20 27397,01 27398,11 27450,65 28127,70 28999,29 29007,70
20	Ca ($4s^2 - {}^1S_0$) 49305,96	$4p({}^3P_0)$ $4p({}^3P_1)$ $4p({}^3P_2)$ $3d({}^3D_1)$ $3d({}^3D_2)$ $3d({}^3D_3)$ $3d({}^1D_2)$ $4p({}^1P_1)$ $5s({}^3S_1)$ $5s({}^1S_0)$	15157,901 15210,063 15315,943 20335,360 20349,260 20371,000 21849,634 23652,304 31539,495 33317,264

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Термы возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
21	Sc ($3d^4s^2 \rightarrow ^2D_{3/2}$) 52922	$3d^4s^2 (^2D_{5/2})$ $3d^24s (^4F_{3/2})$ $3d^24s (^4F_{5/2})$ $3d^24s (^4F_{7/2})$ $3d^24s (^4F_{9/2})$ $3d^24s (^2F_{5/2})$ $3d^24s (^2F_{7/2})$ $3d^4s^4p (^4F^0_{3/2})$ $3d^4s^4p (^4F^0_{5/2})$ $3d^4s^4p (^4F^0_{7/2})$ $3d^4s^4p (^4D^0_{1/2})$ $3d^4s^4p (^4D^0_{3/2})$ $3d^4s (^1D) 4p (^2D^0_{5/2})$ $3d^4s^4p (^4F^0_{9/2})$ $3d^4s (^1D) 4p (^2D^0_{3/2})$ $3d^4s^4p (^4D^0_{5/2})$ $3d^4s^4p (^4D^0_{7/2})$	168,34 11520,15 11557,64 11610,24 11677,31 14926,24 15041,98 15672,55 15756,51 15881,76 16009,71 16021,78 16022,72 16026,52 16096,86 16141,04 16210,80
22	Ti ($3d^24s^2 \rightarrow ^3F_2$) 55000	$3d^24s^2 (^3F_3)$ $3d^24s^2 (^3F_4)$ $3d^3 (^4F) 4s (^5F_1)$ $4s (^5F_2)$ $4s (^5F_3)$ $4s (^5F_4)$ $4s (^5F_5)$ $3d^24s^2 (^1D_2)$ $3d^24s^2 (^3P_0)$ $3d^24s^2 (^3P_1)$ $3d^24s^2 (^3P_2)$ $3d^3 (^4F) 4s (^3F_2)$ $4s (^3F_3)$ $4s (^3F_4)$ $3d^24s^2 (^1G_4)$ $3d^34s^2 (^4F_{5/2})$ $3d^34s^2 (^4F_{7/2})$ $3d^34s^2 (^4F_{9/2})$ $3d^4 (^5D) 4s (^6D_{1/2})$	170,132 386,874 6556,83 6598,75 6661,00 6742,76 6842,96 7255,37 8436,62 8492,42 8602,34 11531,76 11639,80 11776,81 12118,39 137,38 323,42 553,02 2112,32
23	V ($3d^34s^2 \rightarrow ^4F_{3/2}$) 54360		

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
23		$4s(^6D_{3/2})$ $4s(^6D_{5/2})$ $4s(^6D_{7/2})$ $4s(^6D_{9/2})$ $3d^4(^4D) 4s(^4D_{1/2})$ $4s(^4D_{3/2})$ $4s(^4D_{5/2})$ $4s(^4D_{7/2})$ $3d^3 4s^2 (^4P_{1/2})$ $3d^3 4s^2 (^4P_{3/2})$ $3d^3 4s^2 (^4P_{5/2})$	2153,20 2220,13 2311,37 2424,89 8412,94 8476,20 8578,52 8715,72 9544,54 9636,96 9824,58
24	Cr ($3d^5 4s \rightarrow ^7S_1$) 54570	$3d^5(^6S) 4s(^5S_1)$ $3d^4 4s^2 (^6D_0)$ (6D_1) (6D_2) (6D_3) (6D_4)	7593,16 7750,78 7810,82 7927,47 8095,21 8307,57
25	Mn ($3d^5 4s^2 \rightarrow ^6S_{5/2}$) 59981	$3d^6(^5D) 4s(^6D_{9/2})$ $4s(^6D_{7/2})$ $4s(^6D_{5/2})$ $4s(^6D_{3/2})$ $4s(^6D_{1/2})$ $3d^5 4s (^7S) 4p (^3P^o_{5/2})$ $4p (^8P^o_{7/2})$ $4p (^8P^o_{9/2})$	17052,29 17282,00 17451,52 17568,48 17637,15 18402,46 18531,64 18705,37
26	Fe ($3d^5 4s^2 \rightarrow ^5D_4$) 63480	$3d^6 4s^2 (^5D_3)$ (6D_2) (6D_1) (6D_0) $3d^7(^4F) 4s(^5F_5)$ $4s(^5F_4)$ $4s(^5F_3)$ $4s(^5F_2)$ $4s(^5F_1)$ $3d^7(^4F) 4s (^3F_4)$ $4s (^3F_3)$	415,932 704,004 888,129 978,072 6928,266 7376,760 7728,056 7985,780 8154,710 11976,234 12560,930

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
26		$4s(^3F_2)$	12968,549
		$3d^7(^4P) 4s(^5P_3)$	17550,175
		$4s(^5P_2)$	17726,981
		$4s(^5P_1)$	17927,376
27	Co ($3d^74s^2 - ^4F_{9/2}$) 63430	$3d^74s^2(^4F_{7/2})$ $(^4F_{5/2})$ $(^4F_{3/2})$ $3d^8(^3F) 4s(^4F_{9/2})$ $4s(^4F_{7/2})$ $4s(^4F_{5/2})$ $4s(^4F_{3/2})$ $3d^8(^3F) 4s(^2F_{7/2})$ $4s(^2F_{5/2})$	816,0 1406,84 1809,33 3482,82 4142,66 4690,18 5075,83 7442,41 8460,81
28	Ni ($3d^84s^2 - ^3F_4$) 61580	$3d^9(^2D) 4s(^3D_3)$ $4s(^3D_2)$ $3d^84s^2(^3F_3)$ $4s(^3D_1)$ $3d^84s^2(^3F_2)$ $3d^9(^2D) 4s(^1D_2)$ $3d^84s^2(^1D_2)$ $3d^{10}(^1S_0)$ $3d^84s^2(^3P_2)$ $3d^84s^2(^3P_1)$ $3d^84s^2(^3P_0)$ $3d^84s^2(^1G_4)$	204,786 879,813 1332,153 1713,080 2216,519 3409,925 13521,352 14728,847 15609,861 15734,018 16017,317 22102,349
29	Cu ($3d^{10}4s - ^2S_{1/2}$) 62317,2	$3d^94s^2(^2D_{5/2})$ $3d^94s^2(^2D_{3/2})$ $4p(^2P_1^0_{1/2})$ $4p(^2P_3^0_{3/2})$ $3d^94s(^3D) 4p'(^4P_5^0_{5/2})$ $4p'(^4P_3^0_{3/2})$ $4p'(^4F_9^0_{9/2})$ $4p'(^4P_1^0_{1/2})$ $4p'(^4F_7^0_{7/2})$ $4p'(^4F_5^0_{5/2})$ $4p'(^4F_3^0_{3/2})$ $5s(^2S_{1/2})$	11202,565 13245,423 30535,302 30783,686 39018,652 40113,99 40909,138 40943,73 41153,433 41562,895 42302,47 43137,209

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
30	Zn ($3d^{10}4s^2 - ^1S_0$) 75768,1	$4p(^3P^0_0)$ $4p(^3P^0_1)$ $4p(^3P^0_2)$ $4p(^1P^0_1)$ $5s(^3S_1)$ $5s(^3S_0)$ $5p(^3P^0_0)$ $5p(^3P^0_1)$ $5p(^3P^0_2)$ $4d(^1D_2)$ $4d(^3D_1)$ $4d(^3D_2)$ $4d(^3D_3)$ $5p(^1P^0_1)$	32311,308 32501,390 32890,317 46745,37 53672,241 55789,220 61247,2 61273,9 61330,1 62458,51 62768,75 62772,00 62776,95 62910,0 826,24
31	Ga ($4s^24p - ^2P^0_{1/2}$) 48387,6	$4p(^2P^0_{3/2})$ $5s(^2S_{1/2})$ $5p(^2P^0_{1/2})$ $5p(^2P^0_{3/2})$ $4d(^2D_{3/2})$ $4d(^5D_{5/2})$	24788,58 33044,06 33155,03 34781,67 34787,92 557,10
32	Ge ($4p^2 - ^3P_0$) 63710	$4p^2(^3P_1)$ $4p^2(^3P_2)$ $4p^2(^1D_2)$ $4p^2(^1S_0)$ $5s(^3P^0_0)$ $5s(^3P^0_1)$ $5s(^3P^0_2)$ $5s(^1P^0_1)$	1409,90 7125,26 16367,14 37451,53 37702,15 39117,77 40020,43
33	As ($4p^3 - ^4S^0_{3/2}$) 79200	$4p^3(^2D^0_{3/2})$ $4p^3(^2D^0_{5/2})$ $4p^3(^2P^0_{1/2})$ $4p^3(^2P^0_{3/2})$ $5s(^4P_{1/2})$ $5s(^4P_{3/2})$ $5s(^4P_{5/2})$ $5s(^2P_{1/2})$ $5s(^2P_{3/2})$	10592,5 10914,6 18186,1 18647,5 50693,8 51610,2 52897,9 53135,6 54605,3

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
34	Se ($4p^4 - {}^3P_2$) 78658,2	$4p^4({}^3P_1)$	1989,49
		$4p^4({}^3P_0)$	2534,35
		$4p^4({}^1D_2)$	9576,08
		$4p^4({}^1S_0)$	22446,03
		$5s({}^5S_2)$	48182,19
		$5s({}^3S_1)$	50996,93
		$5p({}^5P_1)$	59242,88
		$5p({}^5P_2)$	59287,91
		$5p({}^5P_3)$	59391,38
		$5p({}^3P_2)$	60677,46
		$5p({}^3P_1)$	60622,37
		$5p({}^3P_0)$	60696,07
35	Br ($4p^5 - {}^2P_3/2$) 95284,8	$4p^5({}^2P_{1/2})$	3685
		$5s({}^4P_{5/2})$	63429,82
		$5s({}^4P_{3/2})$	64900,50
		$5s({}^4P_{1/2})$	66877,16
		$5s({}^2P_{3/2})$	67176,87
		$5s({}^2P_{1/2})$	68963,52
		$5p({}^4P_{5/2})$	74665,67
		$5p({}^4P_{3/2})$	75002,52
		$5p({}^4D_{7/2})$	75514,82
		$5p({}^4D_{5/2})$	75690,44
		$5p({}^4P_{1/2})$	75807,33
		$4p^4({}^1S) 5s({}^2S_{1/2})$	75901,89
		$5p({}^4D_{3/2})$	76736,45
		$4p^4({}^1D) 5s({}^2D_{3/2})$	77305,93
		$5s({}^2D_{5/2})$	77324,11
		$5p({}^4D_{1/2})$	78069,29
36	Kr ($4p^6 - {}^1S_0$) 112914,5	$4p^5({}^2P_{3/2}) 5s[3/2]^0_2$	79972,535
		$5s[3/2]^0_1$	80917,561
		$4p^5({}^2P_{1/2}) 5s'[1/2]^0_0$	85192,414
		$5s'[1/2]^0_1$	85847,501
		$5p[1/2]_1$	91169,313
		$5p[5/2]_3$	92295,199
		$5p[5/2]_2$	92308,177
		$5p[3/2]_1$	92965,194

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
36		$5p [3/2]_2$ $5p [1/2]_0$ $4d [1/2]_0$ $4d [1/2]_1$	93124,140 94093,662 96772,31 97086,0
37	Rb ($5s - ^2S_{1/2}$) 33690,81	$5p (^2P^o_{1/2})$ $5p (^2P^o_{3/2})$ $4d (^2D_{5/2})$ $4d (^2D_{3/2})$ $6s (^2S_{1/2})$ $6p (^2P^o_{1/2})$ $6p (^2P^o_{3/2})$ $5d (^2D_{3/2})$ $5d (^2D_{5/2})$ $7s (^2S_{1/2})$ $4f (^2F^o_{5/2}, ^7/2)$	12578,96 12816,56 19355,01 19355,45 20133,60 23715,19 23792,69 25700,56 25703,52 26311,46 26791,98
38	Sr ($5s^2 - ^1S_0$) 45932,0	$5p (^3P^o_0)$ $5p (^3P^o_1)$ $5p (^3P^o_2)$ $4d (^3D_1)$ $4d (^3D_2)$ $4d (^3D_3)$ $4d (^1D_2)$ $5p (^1P^o_1)$ $6s (^1S_1)$ $6s (^1S_0)$	14317,520 14504,351 14898,563 18159,056 18218,795 18319,267 20149,70 21698,482 29038,795 30591,80
39	Y ($4d5s^2 - ^2D_{3/2}$) 50144	$4d (^2D_{5/2})$ $5p (^2P^o_{1/2})$ $4d^2 (^4F) 5s (^4F_{3/2})$ $5s (^4F_{5/2})$ $5s (^4F_{7/2})$ $5p (^2P^o_{3/2})$ $4d^2 (^3F) 5s (^4F_{9/2})$	530,36 10529,20 10937,35 11078,61 11277,96 11359,70 11532,13
40	Zr ($4d^25s^2 - ^3F_2$) 55100	$4d^25s^2 (^3F_3)$ $4d^25s^2 (^3F_4)$ $4d^25s^2 (^3P_2)$ $4d^25s^2 (^3P_0)$	570,41 1240,84 4186,11 4196,85

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
40		$4d^2 5s^2 (^3P_1)$ $4d^3 (^4F) 5s (^5F_1)$ $5s (^5F_2)$ $4d^2 5s^2 (^1D_2)$ $4d^3 (^4F) 5s (^5F_3)$ $5s (^5F_4)$ $5s (^5F_5)$ $4d^2 5s^2 (^1G_4)$	4376,28 4870,53 5023,41 5101,68 5249,07 5540,54 5888,93 8057,30
41	Nb ($4d^4 5s - ^6D_{1/2}$) 55500	$5s (^6D_{3/2})$ $5s (^6D_{5/2})$ $5s (^6D_{7/2})$ $5s (^6D_{9/2})$ $4d^3 5s^2 (^4F_{3/2})$ $(^4F_{5/2})$ $(^4F_{7/2})$ $(^4F_{9/2})$ $4d^3 5s^2 (^4P_{1/2})$ $(^4P_{3/2})$ $(^4P_{5/2})$	154,19 391,99 695,25 1050,26 1142,79 1586,90 2154,11 2805,36 4998,17 5297,92 5965,45
42	Mo ($4d^5 5s - ^7S_3$) 57300	$4d^5 (^6S) 5s (^5S_2)$ $4d^4 5s^2 (^5D_0)$ $(^5D_1)$ $(^5D_2)$ $(^5D_3)$ $(^5D_4)$ $4d^5 (^4G) 5s (^5G_2)$ $5s (^5G_3)$ $5s (^5G_4)$ $5s (^5G_5)$ $5s (^5G_6)$ $4d^5 (^4P) 5s (^5P_3)$ $5s (^5P_2)$ $*5s (^5P_1)$	10768,33 10965,97 11142,83 11454,42 11858,54 12346,31 16641,08 16692,96 16747,73 16784,60 16783,96 18229,23 18356,53 18479,65
43	Tc ($4d^6 5s^2 - ^6S_{5/2}$) 58700	$4d^6 (^5D) 5s (^6D_{9/2})$ $5s (^6D_{7/2})$ $5s (^6D_{5/2})$	2572,89 3250,91 3700,55

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
43		5s (⁶ D _{3/2})	4002,58
		5s (⁶ D _{1/2})	4178,72
		4d ⁶ (⁵ D) 5s (⁴ D _{7/2})	10516,54
		5s (⁴ D _{5/2})	11063,08
		5s (⁴ D _{3/2})	11578,59
		5s (⁴ D _{1/2})	11890,96
44	Ru (4d ⁷ 5s — ⁵ F ₆) 59410	4d ⁷ (⁴ F) 5s (⁵ F ₄)	1190,64
		5s (⁵ F ₃)	2091,54
		5s (⁵ F ₂)	2713,24
		5s (⁵ F ₁)	3105,49
45	Rh (4d ⁸ 5s — ⁴ F _{9/2}) 60200	4d ⁸ (³ F) 5s (⁴ F _{7/2})	1529,97
		5s (⁴ F _{5/2})	2598,03
		4d ⁹ (² D _{5/2})	3309,86
		4d ⁸ (³ F) 5s (⁴ F _{3/2})	3472,68
		4d ⁹ (² D _{3/2})	5657,97
		4d ⁸ (³ F) 5s (² F _{7/2})	5690,97
46	Pd (4d ¹⁰ — ¹ S ₀) 67236,0	5s (² F _{5/2})	7791,23
		4d ⁹ (² D _{5/2}) 5s (³ D ₃)	6564,11
		5s (³ D ₂)	7754,99
		4d ⁹ (² D _{3/2}) 5s (³ D ₁)	10093,94
		4d ⁹ (² D _{3/2}) 5s (¹ D ₂)	11721,77
		4d ¹⁰ (¹ S) 5p (² P ⁰ _{1/2})	29552,05
47	Ag (4d ⁹ 5s ² — ² S _{1/2}) 61106,5	4d ⁹ 5s ² (² D _{5/2})	30242,26
		4d ¹⁰ (¹ S) 5p (² P ⁰ _{3/2})	30472,71
		4d ⁹ 5s ² (² D _{3/2})	34714,16
		4d ¹⁰ (¹ S) 6s (² S _{1/2})	42556,15
		5p (³ P ⁰ ₀)	30114,017
		5p (³ P ⁰ ₁)	30656,130
48	Cd (4d ¹⁰ 5s ² — ¹ S ₀) 72540,0	5p (³ P ⁰ ₂)	31826,996
		5p (¹ P ⁰ ₁)	43692,474
		6s (³ S ₁)	51484,013
		6s (¹ S ₀)	53310,16
		5p (² P ⁰ _{3/2})	2212,56
		6s (² S _{1/2})	24372,87
49	In (5p — ² P ⁰ _{1/2}) 46670,10	6p (² P ⁰ _{1/2})	31816,61
		6p (² P ⁰ _{3/2})	32114,79

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
49		$5d\ (^2D_{3/2})$	32892,12
50	$\text{Sn} (5p^2 - ^3P_0)$ 59232	$5d\ (^2D_{5/2})$	32915,42
		$5p^2 (^3P_1)$	1691,8
		$5p^2 (^3P_2)$	3427,7
		$5p^2 (^1D_2)$	8613,0
		$5p^2 (^1S_0)$	17162,6
		$6s (^3P^o_0)$	34640,8
		$6s (^3P^o_1)$	34914,2
		$6s (^3P^o_2)$	38628,8
		$6s (^1P^o_1)$	39257,1
51	$\text{Sb} (5p^3 - ^4S^o_{3/2})$ 69700	$5p^3 (^2D^o_{3/2})$	8512,1
		$5p^3 (^2D^o_{5/2})$	9854,1
		$5p^3 (^2P^o_{1/2})$	16395,6
		$5p^3 (^2P^o_{3/2})$	18464,5
		$5p^4 (^3P_0)$	4707
52	$\text{Te} (5p^4 - ^3P_2)$ 72670	$5p^4 (^3P_1)$	4751
		$5p^4 (^1D_2)$	10559
		$5p^4 (^1S_0)$	23199
		$5p^5 (^2P^o_{1/2})$	7603,15
53	$\text{I} (5p^5 - ^2P^o_{3/2})$ 84295,1	$5p^4 (^4P) 6s (^4P_{5/2})$	54633,46
		$6s (^2P_{3/2})$	56092,88
		$6s (^4P_{1/2})$	60896,27
		$6s (^4P_{3/2})$	61819,81
		$6s (^2P_{1/2})$	63186,76
		$6s [3/2]_2^o$	67068,047
54	$\text{Xe} (5p^6 - ^1S_0)$ 97834,0	$6s [3/2]_1$	68045,663
		$5p^5 (^2P^o_{1/2}) 6s' [1/2]_0^o$	76197,292
		$6s' [1/2]_1^o$	77185,560
		$5p^5 (^2P^o_{3/2}) 6p [1/2]_1$	77269,649
		$6p [5/2]_2$	78120,303
		$6p [5/2]_3$	78403,562
		$6p [3/2]_1$	78956,538
		$6p [3/2]_2$	79212,970

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, специальный предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
55	Cs ($6s - ^2S_{1/2}$) 31406,43	$6p (^2P^o_{1/2})$ $6p (^2P^o_{3/2})$ $5d (^2D_{3/2})$ $5d (^2D_{5/2})$ $7s (^2S_{1/2})$ $7p (^2P^o_{1/2})$ $7p (^2P^o_{3/2})$	11178,24 11732,35 14499,49 14597,08 18535,51 21765,65 21946,66
56	Ba ($6s^2 - ^1S_0$) 42035,1	$5d (^3D_1)$ $5d (^3D_2)$ $5d (^3D_3)$ $5d (^1D_2)$ $6p (^3P^o_0)$ $6p (^3P_1)$ $6p (^3P_2)$ $6p (^1P^o_1)$	9033,985 9215,518 9596,551 11395,382 12266,021 12636,616 13514,738 18060,264
57	La ($5d6s^2 - ^2D_{3/2}$) 44980	$5d6s^2 (^2D_{5/2})$ $5d^2 (^3F) 6s (^4F_{3/2})$ $6s (^4F_{5/2})$ $6s (^4F_{7/2})$ $6s (^4F_{9/2})$	1053,16 2668,19 3010,00 3494,53 4121,57
72	Hf ($4f^{14}5d^26s^2 - ^3F_2$) 56600	$5d^26s^2 (^3F_3)$ $5d^26s^2 (^3F_4)$	2356,68 4567,64
73	Ta ($5d^36s^2 - ^4F_{3/2}$) 63600	$5d^36s^2 (^4F_{5/2})$ $(^4F_{7/2})$ $(^4F_{9/2})$ $5d^36s^2 (^4P_{1/2})$ $(^4P_{3/2})$ $(^4P_{5/2})$	2010,10 3963,92 5621,04 6049,42 6068,91 9253,43
74	W ($5d^46s^2 - ^5D_0$) 64000	$5d^46s^2 (^5D_1)$ $5d^5 (^6S) 6s (^7S_3)$ $5d^46s^2 (^5D_2)$ $5d^46s^2 (^5D_3)$ $5d^46s^2 (^5D_4)$ $5d^46s^2 (^3P_0)$	1670,30 2951,29 3325,53 4830,00 6219,33 9528,07

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
75	Re ($5d^56s^2 - {}^6S_{5/2}$) 64000	$5d^56s^2 ({}^4P_{5/2})$ $5d^6 ({}^5D) 6s ({}^6D_{9/2})$ $5d^56s^2 ({}^4P_{3/2})$ $5d^6 ({}^5D) 6s ({}^6D_{7/2})$ $5d^56s^2 ({}^4G_{5/2})$	11583,96 11754,52 13826,12 14216,86 14621,46
76	Os ($5d^66s^2 - {}^5D_4$) 70450	$5d^66s^2 ({}^5D_2)$ $({}^5D_3)$ $5d^7 ({}^6F) 6s ({}^6F_5)$ $5d^66s^2 ({}^5D_1)$ $({}^5D_0)$ $5d^7 ({}^4F) 6s ({}^5F_4)$ $5d^8 ({}^3F) 6s ({}^4F_{9/2})$	2740,49 4159,32 5143,92 5766,14 6092,79 8742,83 2834,98 4078,94 5784,62 6323,91
77	Ir ($5d^76s^2 - {}^4F_{9/2}$) 73000	$5d^76s^2 ({}^4F_{3/2})$ $({}^4F_{5/2})$ $({}^4F_{7/2})$ $5d^8 ({}^3F) 6s ({}^4F_{7/2})$ $({}^4F_{5/2})$	7106,61 9877,54
78	Pt ($5d^96s - {}^3D_3$) 72300	$5d^9 ({}^2D_{5/2}) 6s ({}^3D_2)$ $5d^86s^3 ({}^3F_4)$ $5d^{10} ({}^1S_0)$ $5d^86s^2 ({}^3P_2)$	775,9 823,7 6140,0 6567,5
79	Au ($5d^{10}6s - {}^2S_{1/2}$) 74410,0	$5d^96s^2 ({}^2D_{5/2})$ $({}^2D_{3/2})$ $6p ({}^2P^0_{1/2})$ $({}^2P^0_{3/2})$	9161,3 21435,3 37358,9 41174,3
80	Hg ($5d^{10}6s^2 - {}^1S_0$) 84184,0	$6p ({}^3P^0_0)$ $6p ({}^3P^0_1)$ $6p ({}^3P_2)$ $6p ({}^1P^0_1)$ $7s ({}^3S_1)$ $7s ({}^1S_0)$	37645,08 39412,30 44042,977 54068,781 62350,456 63928,243
81	Tl ($6s^26p - {}^2P^0_{1/2}$) 49266,7	$6p ({}^2P^0_{3/2})$ $7s ({}^2S_{1/2})$ $7p ({}^2P^0_{1/2})$ $7p ({}^2P^0_{3/2})$ $6d ({}^2D_{3/2})$ $6d ({}^2D_{5/2})$	7792,7 26477,5 34159,9 35161,1 36117,9 36199,9

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
82	Pb ($6p^2 - {}^3P_0$) 59819,4	$6p^2 ({}^3P_1)$	7819,35
		$6p^2 ({}^3P_2)$	10650,47
		$6p^2 ({}^1D_2)$	21457,90
		$6p^2 ({}^1S_0)$	29466,81
		$7s ({}^3P_0)$	34959,90
		$7s ({}^3P_1)$	35287,24
		$6p^3 ({}^2D_3/2)$	11419,03
83	Bi ($6p^3 - {}^4S_3/2$) 98790	$6p^3 ({}^2D_5/2)$	15437,66
		$6p^3 ({}^2P_1)$	21661,0
		$7s ({}^4P_{1/2})$	32588,17
		$6p^3 ({}^2P_3/2)$	33164,84
		$7p ({}^3P_0)$	13078,44
88	Ra ($6p^6 7s^2 - {}^1S_0$) 42577,3	$6d ({}^3D_1)$	13715,85
		$6d ({}^3D_2)$	13993,97
		$7p ({}^3P_1)$	13999,38
		$6d ({}^3D_3)$	14707,35
		$7p ({}^3P_2)$	16688,54
		$6d ({}^1D_2)$	17081,45
		$7p ({}^1P_1)$	20715,71

2. Низколежащие электронные термы однозарядных положительных ионов

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
2	He ⁺ ($1s - {}^2S_{1/2}$) 438908,886	$2p ({}^2P_{1/2})$	329179,299
		$2s ({}^2S_{1/2})$	329179,768
		$2p ({}^2P_{3/2})$	329185,157
		$3p ({}^2P_{1/2})$	390140,831
		$3s ({}^2S_{1/2})$	390140,971
		$3d ({}^2D_{3/2})$	390142,564
		$3p ({}^2P_{3/2})$	390142,567
		$3d ({}^2D_{5/2})$	390143,143
3	Li ⁺ ($1s^2 - {}^1S_0$) 610079,4	$2s ({}^3S_1)$	476034,6
		$2s ({}^1S_0)$	491374,6
		$2p ({}^3P_1)$	494261,2
		$2p ({}^3P_2)$	494263,4

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
3		$2p(^1P_0)$	494266,6
		$2p(^1P_1)$	501808,6
4	$\text{Be}^+ (2s - ^2S_{1/2})$ 146882,9	$2p(^2P_{1/2})$	31928,76
		$2p(^2P_{3/2})$	31935,34
		$3s(^2S_{1/2})$	88231,91
		$3s(^2P_{1/2})$	96495,36
		$3s(^2P_{3/2})$	96497,28
		$3d(^2D_{3/2})$	98054,57
		$3d(^2D_{5/2})$	98055,12
5	$\text{B}^+ (2s^2 - ^1S_0)$ 202887	$2p^2(^3P_0)$	37336,7
		$2p^2(^3P_1)$	37342,4
		$2p^2(^3P_2)$	37358,3
		$2p(^1P_1)$	73396,6
		$2p^2(^3P_0)$	98912,6
		$2p^2(^3P_1)$	98921,8
		$2p^2(^3P_2)$	98934,3
6	$\text{C}^+ (2p - ^2P_{1/2})$ 196664,7	$2p(^2P_{3/2})$	63,42
		$2s2p^2(^4P_{1/2})$	43003,3
		$2s2p^2(^4P_{3/2})$	43025,3
		$2s2p^2(^4P_{5/2})$	43053,6
		$2s2p^2(^2D_{5/2})$	74930,10
		$2s2p^2(^2D_{3/2})$	74932,62
		$2s2p^2(^2S_{1/2})$	96493,74
7	$\text{N}^+ (2p^3 - ^3P_0)$ 238750	$2p(^3P_1)$	48,7
		$2p(^3P_2)$	130,8
		$2p(^1D_2)$	15316,2
		$2p(^1S_0)$	32688,8
		$2s2p^3(^5S_2)$	46784,6
		$2s2p^3(^3D_2)$	92250,3
		$2s2p^3(^3P_1)$	109216,6
		$2s2p^3(^3P_2)$	109217,6
		$2s2p^3(^3P_0)$	109223,5
		$2s2p^3(^1D_2)$	144187,94
		$2p3s(^3P_0)$	148908,59
		$2p3s(^3P_1)$	148940,17
		$2p3s(^3P_2)$	149076,52

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
8	O ⁺ ($2p^3 - {}^4S_3/2$) 283240	$2p({}^2D_5/2)$ $2p({}^2D_3/2)$ $2p({}^2P_3/2)$ $2p({}^2P_1/2)$ $2s2p^4({}^4P_5/2)$ $2s2p^4({}^4P_3/2)$ $2s2p^4({}^4P_1/2)$ $2s2p^4({}^2D_5/2)$ $2s2p^4({}^2D_3/2)$ $3s({}^4P_1/2)$ $3s({}^4P_3/2)$ $3s({}^4P_5/2)$	26808,4 26829,4 40466,9 40468,4 119837,7 120001,1 120083,5 165987,7 165996,0 185235,36 185340,68 185499,20
9	F ⁺ ($2p^4 - {}^3P_2$) 282059	$2p({}^3P_1)$ $2p({}^3P_0)$ $2s^22p^4({}^1D_2)$ $2s^22p^4({}^1S_0)$ $2s2p^5({}^3P_2)$ $2s2p^5({}^3P_1)$ $2s2p^5({}^3P_0)$ $3s({}^3S_2)$ $3s({}^3S_1)$ $3p({}^3P_1)$ $3p({}^3P_2)$ $3p({}^3P_3)$ $3p({}^3P_1)$	341,0 489,9 20873,4 44918,1 164797,88 165106,66 165279,19 176493,93 182864,40 202449,35 202460,69 202480,26 207699,07
10	Ne ⁺ ($2p^5 - {}^2P_3/2$) 330391,0	$2p^4({}^3P)2p({}^2P_1/2)$ $2s2p^6({}^2S_{1/2})$ $3s({}^4P_5/2)$ $3s({}^4P_3/2)$ $3s({}^4P_1/2)$ $3s({}^2P_3/2)$ $3s({}^2P_1/2)$ $3p({}^4P_5/2)$ $2p^4({}^1D)3s'({}^2D_5/2)$ $3s'({}^2D_3/2)$ $3p({}^4P_3/2)$	780,34 217047,61 219130,78 219647,46 219948,44 224087,02 224699,27 246192,45 246394,13 246397,49 246415,04

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
10		$3p(^4P^0_{1/2})$	246597,71
		$3p(^4D^0_{7/2})$	249108,64
		$3p(^4D^0_{5/2})$	249445,99
		$3p(^4D^0_{3/2})$	249695,53
		$3p(^4D^0_{1/2})$	249839,63
		$3p(^2D^0_{5/2})$	251011,18
		$3p(^2D^0_{3/2})$	251522,12
		$3p(^2S^0_{1/2})$	252798,48
		$3p(^4S^0_{3/2})$	252953,54
		$3p(^2P^0_{3/2})$	254165,01
		$3p(^2P^0_{1/2})$	254292,19
11	$\text{Na}^+ (2p^6 - ^1S_0)$ 381395	$2p^5(^2P^0_{3/2})3s [3/2]^0_2$	264928,2
		$3s [3/2]^0_1$	265693,2
		$2p^5(^2P^0_{1/2})3s' [1/2]^0_0$	266285,4
		$3s' [1/2]^0_1$	268766,8
		$3p [1/2]_1$	293224,2
		$3p [5/2]_3$	297252,5
		$3p [5/2]_2$	297639,3
		$3p [3/2]_1$	298169,1
		$3p [3/2]_2$	299193,7
		$3p' [3/2]_1$	299889,2
		$3p' [3/2]_2$	300107,7
		$3p [1/2]_0$	300391,6
		$3p' [1/2]_1$	300511,1
		$3p' [1/2]_0$	308864,3
12	$\text{Mg}^+ (3s - ^2S_{1/2})$ 121267,6	$3p (^2P^0_{1/2})$	35669,31
		$3p (^2P^0_{3/2})$	35760,88
		$4s (^2S_{1/2})$	69804,95
		$3d (^2D_{5/2})$	71490,19
		$3d (^2D_{3/2})$	71491,06
		$4p (^2P^0_{1/2})$	80619,50
		$4p (^2P^0_{3/2})$	80650,02
13	$\text{Al}^+ (3s^2 - ^1S_0)$ 151862,7	$3p (^3P^0_0)$	37393,0
		$3p (^3P^0_1)$	37453,9
		$3p (^3P^0_2)$	37577,8
		$3p (^1P^0_1)$	59852,0

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
13		$3p^2 ({}^1D_2)$ $4s ({}^3S_1)$ $3p^2 ({}^3P_0)$ $3p^2 ({}^3P_1)$ $3p^2 ({}^3P_2)$ $4s ({}^1S_0)$ $3d ({}^3D_3)$ $3d ({}^3D_2)$ $3d ({}^3D_1)$	85481,3 91274,5 94085,0 94147,5 94268,7 95350,6 95549,4 95550,5 95551,4
14	$Si^+ (3p - {}^2P_0_{1/2})$ 131838,4	$3p ({}^2P_0_{3/2})$ $3s3p^2 ({}^4P_{1/2})$ $3s3p^2 ({}^4P_{3/2})$ $3s3p^2 ({}^4P_{5/2})$ $3s3p^2 ({}^2D_{3/2})$ $3s3p^2 ({}^2D_{5/2})$ $4s ({}^2S_{1/2})$ $3s3p^2 ({}^2S_{1/2})$ $3d ({}^2D_{3/2})$ $3d ({}^2D_{5/2})$ $4p ({}^2P_0_{1/2})$ $4p ({}^2P_0_{3/2})$ $3s3p^2 ({}^2P_{1/2})$ $3s3p^2 ({}^2P_{3/2})$	287,32 42824,35 42932,68 43107,97 55309,61 55325,44 65500,73 76665,61 79338,76 79355,28 81191,60 81251,58 83802,21 84004,52
15	$P^+ (3p^2 - {}^3P_0)$ 159100	$3p^2 ({}^3P_1)$ $3p^2 ({}^3P_2)$ $3p^2 ({}^1D_2)$ $3p^2 ({}^1S_0)$ $3s3p^3 ({}^3D^0_1)$ $3s3p^3 ({}^3D^0_2)$ $3s3p^3 ({}^3D^0_3)$ $3s3p^3 ({}^3P^0_2)$ $3s3p^3 ({}^3P^0_1)$ $3s3p^3 ({}^3P^0_0)$ $3s3p^3 ({}^1D^0_2)$ $4s ({}^3P^0_0)$ $4s ({}^3P^0_1)$	164,8 469,0 8882,6 21576,2 65252,25 65273,18 65308,05 76764,96 76813,22 76824,0 77711,0 86598,3 86744,7

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
15		$4s(^3P^o_2)$ $3d(^3F^o_2)$ $3d(^3F^o_3)$ $3d(^3F^o_4)$ $4s(^1P^o_1)$	87125,4 87805,0 87967,7 88193,0 88894,0
16	$S^+ (3p^3 - ^4S^o_{3/2})$ 188200	$3p(^2D^o_{3/2})$ $3p(^2D^o_{5/2})$ $3p(^2P^o_{1/2})$ $3p(^2P^o_{3/2})$ $3s3p^4 (^4P_{5/2})$ $3s3p^4 (^4P_{3/2})$ $3s3p^4 (^4P_{1/2})$ $3s3p^4 (^3P_{3/2})$ $3s3p^4 (^2P_{1/2})$ $4s(^4P_{1/2})$ $4s(^4P_{3/2})$ $3d(^4F_{3/2})$ $4s(^4P_{5/2})$ $3d(^4F_{5/2})$ $3d(^4F_{7/2})$ $3d(^4F_{9/2})$	14851,9 14883,4 24524,2 24572,8 79394,8 79757,9 79968,0 105599,02 106044,16 109560,50 109831,28 110176,83 110268,33 110313,13 110508,48 110766,31
17	$Cl^+ (3p^4 - ^3P_2)$ 192070	$3p(^3P_1)$ $3p(^3P_0)$ $3p(^1D_2)$ $3p(^1S_0)$ $3s3p^5 (^3P^o_2)$ $3s3p^5 (^3P^o_1)$ $3s3p^5 (^3P^o_0)$ $4s(^5S^o_2)$ $3d(^5D^o_4)$ $3d(^5D^o_3)$ $3d(^5D^o_2)$ $3d(^5D^o_1)$ $3d(^5D^o_0)$ $4s(^3S^o_1)$ $3p^3(^2D)3d(^1P^o_1)$	696,0 996,5 11653,6 27878,0 93367,6 93999,9 94333,8 107879,7 110296,8 110297,7 110300,6 110303,1 110304,5 112609,4 115657,8

Продолжение табл. 5.1

Атом-ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
18	$\text{Ar}^+ (3p^5 - {}^2P_3/2)$ 222848,2	$3p({}^2P_1/2)$ $3s3p({}^2S_1/2)$ $3d({}^4D_{7/2})$ $3d({}^4D_{5/2})$ $3d({}^4D_{3/2})$ $3d({}^4D_{1/2})$ $4s({}^4P_{5/2})$ $4s({}^4P_{3/2})$ $4s({}^4P_{1/2})$ $4s({}^2P_{3/2})$ $4s({}^2P_{1/2})$	1432,0 108722,5 132328,22 132482,12 132631,64 132738,60 134242,62 135086,88 135602,62 138244,51 139259,22
19	$\text{K}^+ (3p^6 - {}^1S_0)$ 255080	$3p^5({}^2P_3/2)4s[3/2]^0_2$ $4s[3/2]^0_1$ $3d[1/2]^0_0$ $3d[1/2]^0_1$ $3d[3/2]^0_2$ $3p^5({}^2P_1/2)4s'[1/2]^0_0$ $4s'[1/2]^0_1$ $3d[7/2]^0_3$ $3d[5/2]^0_2$	162507,0 163237,0 163436,3 164496,1 164932,3 165149,5 166461,5 170835,4 171526,8
20	$\text{Ca}^+ (4s - {}^2S_{1/2})$ 95751,9	$3d({}^2D_{3/2})$ $3d({}^2D_{5/2})$ $4p({}^2P_1/2)$ $4p({}^2P_3/2)$ $5s({}^2S_{1/2})$ $4d({}^2D_{3/2})$ $4d({}^2D_{5/2})$ $5p({}^2P_1/2)$ $5p({}^2P_3/2)$	13650,19 13710,88 25191,51 25414,40 52166,93 56839,25 56858,46 60533,02 60611,28
21	$\text{Sc}^+ (3d4s - {}^3D_1)$ 103000	$3d4s({}^3D_2)$ $3d4s({}^3D_3)$ $3d4s({}^1D_2)$ $3d^2({}^3F_2)$ $3d^2({}^3F_3)$ $3d^2({}^3F_4)$ $3d^2({}^1D_2)$	67,68 177,63 2540,97 4802,75 4883,42 4987,64 10944,51

Продолжение табл. 5.1

Атом-ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
21		$4s^2 ({}^1S_0)$ $3d^2 ({}^3P_0)$ $3d^2 ({}^3P_1)$ $3d^2 ({}^3P_2)$ $3d^2 ({}^1G_4)$	11736,35 12074,00 12101,45 12154,34 14261,40
22	Tl+ ($3d^2 4s - {}^4F_{3/2}$) 109500	$3d^2 ({}^3F) 4s ({}^4F_{5/2})$ $3d^2 4s ({}^4F_{7/2})$ $3d^2 4s ({}^4F_{9/2})$ $3d^3 ({}^4F_{3/2})$ $3d^3 ({}^4F_{5/2})$ $3d^3 ({}^4F_{7/2})$ $3d^3 ({}^4F_{9/2})$ $3d^2 4s ({}^2F_{5/2})$ $3d^2 4s ({}^2F_{7/2})$ $3d^2 ({}^1D) 4s ({}^2D_{3/2})$ $4s ({}^2D_{5/2})$ $3d^3 ({}^2G_{7/2})$ $3d^3 ({}^2G_{9/2})$ $3d^3 ({}^4P_{1/2})$ $3d^3 ({}^4P_{3/2})$ $3d^3 ({}^4P_{5/2})$ $3d^4 ({}^5D_1)$ $3d^4 ({}^5D_2)$ $3d^4 ({}^5D_3)$ $3d^4 ({}^5D_4)$ $3d^3 ({}^4F) 4s ({}^5F_1)$ $4s ({}^5F_2)$ $4s ({}^5F_3)$ $4s ({}^5F_4)$ $4s ({}^5F_5)$ $3d^3 ({}^4F) 4s ({}^3F_2)$ $4s ({}^3F_3)$ $4s ({}^3F_4)$ $3d^4 ({}^3P_0)$ $3d^4 ({}^3P_1)$ $3d^4 ({}^3P_2)$	93,94 225,47 393,22 907,96 983,80 1087,21 1215,58 4628,61 4897,60 8710,47 8744,27 8997,69 9118,15 9363,71 9395,76 9518,05 36,05 106,63 208,89 339,21 2604,82 2687,01 2808,72 2968,22 3162,80 8640,21 8841,97 9097,81 11295,57 11514,76 11908,27
23	V+ ($3d^4 - {}^5D_0$) 118200		

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
23		$3d^4 ({}^3H_4)$ $3d^4 ({}^3H_5)$ $3d^4 ({}^3H_6)$	12545,14 12621,55 12706,25
24	$\text{Cr}^+ (3d^5 - {}^6S_{5/2})$ 133000	$3d^4 ({}^5D) 4s ({}^6D_{1/2})$ $4s ({}^6D_{3/2})$ $4s ({}^6D_{5/2})$ $4s ({}^6D_{7/2})$ $4s ({}^6D_{9/2})$ $3d^4 ({}^5D) 4s ({}^4D_{1/2})$ $4s ({}^4D_{3/2})$ $4s ({}^4D_{5/2})$ $4s ({}^4D_{7/2})$	11962,00 12032,72 12148,00 12303,98 12496,79 19528,38 19631,28 19798,01 20024,18
25	$\text{Mn}^+ (3d^5 4s - {}^7S_3)$ 126145	$3d^5 ({}^6S) 4s ({}^6S_2)$ $3d^6 ({}^5D_4)$ $3d^6 ({}^5D_3)$ $3d^6 ({}^5D_2)$ $3d^6 ({}^5D_1)$ $3d^6 ({}^5D_0)$ $3d^5 ({}^4G) 4s ({}^5G_6)$ $4s ({}^5G_5)$ $4s ({}^5G_4)$ $4s ({}^5G_3)$ $4s ({}^5G_2)$ $3d^6 ({}^3P_2)$ $3d^5 ({}^4P) 4s ({}^5P_3)$ $4s ({}^5P_2)$ $4s ({}^5P_1)$ $3d^6 ({}^3H_6)$ $3d^6 ({}^3H_5)$ $3d^6 ({}^3P_1)$ $3d^6 ({}^3H_4)$ $3d^6 ({}^3P_0)$	9472,97 14325,86 14593,82 14781,19 14901,18 14959,84 27547,25 27571,25 27583,57 27588,50 27589,28 29869,48 29889,52 29919,43 29951,42 30523,70 30679,51 30685,07 30796,07 31022,05
26	$\text{Fe}^+ (3d^6 4s - {}^6D_{9/2})$ 130524	$3d^6 ({}^5D) 4s ({}^6D_{7/2})$ $4s ({}^6D_{5/2})$ $4s ({}^6D_{3/2})$ $4s ({}^6D_{1/2})$	384,77 667,64 862,63 977,03

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
26		$3d^7 ({}^4F_{9/2})$ $3d^7 ({}^4F_{7/2})$ $3d^7 ({}^4F_{5/2})$ $3d^7 ({}^4F_{3/2})$ $3d^6 ({}^5D) 4s ({}^4D_{7/2})$ $4s ({}^4D_{5/2})$ $4s ({}^4D_{3/2})$ $4s ({}^4D_{1/2})$ $3d^7 ({}^4P_{5/2})$ $3d^7 ({}^4P_{3/2})$ $3d^7 ({}^4P_{1/2})$	1872,60 2430,08 2837,94 3117,48 7955,24 8391,92 8680,47 8846,76 13474,43 13673,21 13904,87
27	Co ⁺ ($3d^8 \rightarrow {}^3F_4$) 137572	$3d^8 ({}^3F_3)$ $3d^8 ({}^3F_2)$ $3d^7 ({}^4F) 4s ({}^5F_5)$ $4s ({}^5F_4)$ $4s ({}^5F_3)$ $4s ({}^5F_2)$ $4s ({}^5F_1)$ $4d^7 ({}^4F) 4s ({}^3F_4)$ $4s ({}^3F_3)$ $4s ({}^3F_2)$ $3d^8 ({}^3P_2)$ $3d^8 ({}^3P_1)$ $3d^8 ({}^3P_0)$ $3d^7 ({}^4P) 4s ({}^5P_3)$ $4s ({}^5P_2)$ $4s ({}^5P_1)$ $3d^9 ({}^2D_{5/2})$ $3d^8 ({}^4F) 4s ({}^4F_{9/2})$ $4s ({}^4F_{7/2})$ $4s ({}^4F_{5/2})$ $4s ({}^4F_{3/2})$ $3d^8 ({}^4F) 4s ({}^2F_{7/2})$ $4s ({}^2F_{5/2})$	950,3 1597,2 3350,5 4028,9 4560,8 4950,0 5204,5 9812,7 10708,1 11321,5 13261,1 13404,6 13593,5 17771,5 18031,5 18338,5 1506,9 8394,1 9330,5 10115,9 10664,2 13550,3 14995,6
28	Ni ⁺ ($3d^9 \rightarrow {}^2D_{5/2}$) 146541,6		

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
29	Cu ⁺ ($3d^{10} - ^1S_0$) 163669	$3d^9 (^2D_{5/2}) 4s (^3D_3)$	21928,60
		$4s (^3D_2)$	22847,03
		$3d^9 (^2D_{3/2}) 4s (^3D_1)$	23998,31
		$3d^9 (^2D_{3/2}) 4s (^1D_2)$	26264,52
30	Zn ⁺ ($3d^{10} 4s - ^2S_{1/2}$) 144891	$4p (^2P_0^0_{1/2})$	48480,6
		$4p (^2P_0^0_{3/2})$	49354,4
		$4s^2 (^2D_{5/2})$	62721,9
		$4s^2 (^2D_{3/2})$	65441,1
		$5s (^2S_{1/2})$	88436,8
31	Ga ⁺ ($4s^2 - ^1S_0$) 165460	$4p (^3P_0^0)$	47370
		$4p (^3P_1^0)$	47816
		$4p (^3P_2^0)$	48750
		$4p (^1P_1^0)$	70700
32	Ge ⁺ ($4p - ^2P_0^0_{1/2}$) 128521,3	$4p (^2P_0^0_{3/2})$	1767,1
		$4s4p^2 (^4P_{1/2})$	51575,5
		$4s4p^2 (^4P_{3/2})$	52290,5
		$4s4p^2 (^4P_{5/2})$	53366,7
		$5s (^2S_{1/2})$	62402,36
		$4p^2 (^3D_{3/2})$	65015,0
		$4p^2 (^3D_{5/2})$	65184,07
33	As ⁺ ($4p^2 - ^3P_0$) 150200	$4p^2 (^3P_1)$	1061
		$4p^2 (^3P_2)$	2540
		$4p^2 (^1D_2)$	10093
		$4p^2 (^1S_0)$	22593
34	Se ⁺ ($4p^3 - ^4S_0^0_{3/2}$) 170900	$4p^3 (^2D_0^0_{3/2})$	13168,2
		$4p^3 (^2D_0^0_{5/2})$	13784,4
		$4p^3 (^2P_0^0_{1/2})$	23038,3
		$4p^3 (^2P_0^0_{3/2})$	23894,8
		$4s4p^4 (^4P_{5/2})$	83876,7
		$4s4p^4 (^4P_{3/2})$	85579,5
		$4s4p^4 (^4P_{1/2})$	86437,7
		$4p^4 (^3P_1)$	3139
35	Br ⁺ ($4p^4 - ^3P_2$) 175900	$4p^4 (^3P_0)$	3840
		$4p^4 (^1D_2)$	11409
		$5s (^5S_2^0)$	93927,48

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
36	Kr ⁺ ($4p^5 - {}^2P_3/2$) 196474,8	$4p^5 ({}^2P_1/2)$ $4s4p^6 ({}^3S_1/2)$ $5s ({}^4P_{5/2})$ $5s ({}^4P_{3/2})$ $5s ({}^4P_{1/2})$	5371,00 109002,06 112830,0 115093,71 117604,73
37	Rb ⁺ ($4p^6 - {}^1S_0$) 220105	$5s [3/2] {}^0_2$ $5s [3/2] {}^0_1$ $5s [1/2] {}^0_0$ $5s [1/2] {}^0_1$ $4d ({}^3P_0)$ $4d ({}^3P_1)$ $4d ({}^3P_2)$ $4d ({}^3F_4)$ $4d ({}^3F_3)$ $4d ({}^3F_2)$ $4d ({}^3D_3)$ $4d ({}^2D_{3/2})$ $4d ({}^2D_{5/2})$ $5p ({}^2P_1/2)$ $5p ({}^2P_{3/2})$ $6s ({}^2S_{1/2})$	133341,61 134869,75 138794,38 140610,05 143022,34 143461,98 143955,87 145276,12 146832,59 148686,71 151877,03 14555,90 14836,24 23715,19 24516,65 47736,53
38	Sr ⁺ ($5s - {}^2S_{1/2}$) 88964,0	$4d ({}^2D) 5s ({}^3D_1)$ $5s ({}^3D_2)$ $5s ({}^3D_3)$ $4d ({}^2D) 5s ({}^1D_2)$ $4d^2 ({}^3F_2)$ $4d^2 ({}^3F_3)$ $4d^2 ({}^3F_4)$	840,18 1045,07 1449,75 3296,20 8003,12 8328,03 8743,33
39	Y ⁺ ($5s^2 - {}^1S_0$) 98700	$4d^2 ({}^3F) 5s ({}^4F_{5/2})$ $5s ({}^4F_{7/2})$ $5s ({}^4F_{9/2})$ $4d^3 ({}^4F_{3/2})$ $4d^3 ({}^4F_{5/2})$ $4d^3 ({}^4F_{7/2})$ $4d^3 ({}^4F_{9/2})$ $4d^2 ({}^1D) 5s ({}^2D_{3/2})$	314,67 763,44 1322,91 2572,21 2895,05 3299,64 3757,66 4248,30
40	Zr ⁺ ($4d^2 5s - {}^4F_{3/2}$) 105900		

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
40		$5s(^2D_{5/2})$	4505,50
41	$Nb^+ (4d^4 - ^5D_0)$ 115500	$4d^4 (^5D_1)$ $4d^4 (^5D_2)$ $4d^4 (^5D_3)$ $4d^4 (^5D_4)$ $4d^3 (^4F) 5s (^5F_1)$ $5s (^5F_2)$ $5s (^5F_3)$ $5s (^5F_4)$ $5s (^5F_5)$ $4d^4 (^3P_0)$ $4d^4 (^3P_1)$ $4d^4 (^3P_2)$	158,99 438,38 801,38 1224,87 2356,76 2629,07 3029,57 3542,50 4146,00 5562,26 6192,33 7261,33
42	$Mo^+ (4d^5 - ^6S_{5/2})$ 130300	$4d^4 (^5D) 5s (^6D_{1/2})$ $5s (^6D_{3/2})$ $5s (^6D_{5/2})$ $5s (^6D_{7/2})$ $5s (^6D_{9/2})$ $4d^5 (^4G_{5/2})$ $4d^5 (^4G_{7/2})$ $4d^5 (^4G_{9/2})$ $4d^5 (^4G_{11/2})$ $4d^5 (^4P_{5/2})$ $4d^5 (^4P_{3/2})$ $4d^5 (^4P_{1/2})$ $4d^5 (^4D_{1/2})$ $4d^5 (^4D_{7/2})$ $4d^5 (^4D_{3/2})$ $4d^5 (^4D_{5/2})$	11783,36 12034,06 12417,28 12900,33 13460,70 15199,25 15330,56 15427,73 15446,97 15691,22 15699,16 15890,12 16796,14 16946,78 17174,10 17344,10
43	$Tc^+ (4d^5 5s - ^7S_3)$ 123000	$4d^6 (^5D_4)$ $4d^6 (^5D_3)$ $4d^6 (^5D_2)$ $4d^6 (^5D_1)$ $4d^6 (^5D_0)$ $4d^5 (^6S) 5s (^5S_2)$	3461,27 4217,17 4669,22 4961,14 5100,98 12617,20

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
44	Ru ⁺ ($4d^7 - ^4F_{9/2}$) 135200	$4d^7 (^4F_{7/2})$ $4d^7 (^4F_{5/2})$ $4d^7 (^4F_{3/2})$ $4d^7 (^4P_{5/2})$ $4d^7 (^4P_{3/2})$ $4d^6 (^5D) 5s (^6D_{9/2})$ $4d^7 (^4P_{1/2})$	1523,4 2494,2 3104,7 8256,7 8477,4 9151,5 9373,4
45	Rh ⁺ ($4d^8 - ^3F_4$) 145800	$4d^8 (^3F_3)$ $4d^8 (^3F_2)$ $4d^8 (^1D_2)$ $4d^8 (^3P_1)$ $4d^8 (^3P_0)$ $4d^8 (^3P_2)$	2401,3 3580,7 8164,4 10515,0 10769,8 11643,7
46	Pd ⁺ ($4d^9 - ^2D_{5/2}$) 156700	$4d^9 (^2D_{3/2})$ $4d^8 (^3F) 5s (^4F_{9/2})$ $5s (^4F_{7/2})$ $5s (^4F_{5/2})$ $5s (^4F_{3/2})$	3539 25081,0 27094,3 28927,0 29945,6
47	Ag ($4d^{10} - ^1S_0$) 173300	$4d^9 (^2D_{5/2}) 5s (^3D_3)$ $5s (^3D_2)$ $4d^9 (^2D_{3/2}) 5s (^3D_1)$ $4d^9 (^2D_{3/2}) 5s (^1D_2)$	39163,9 40741,0 43738,7 46045,7
48	Cd ⁺ ($5s - ^2S_{1/2}$) 136374,7	$5p (^2P^o_{1/2})$ $5p (^2P^o_{3/2})$ $4d^9 (^2D_{5/2}) 5s^2 (^2D_{5/2})$ $4d^9 (^2D_{3/2}) 5s^2 (^2D_{3/2})$ $6s (^2S_{1/2})$	44136,08 46618,55 69258,91 74893,66 82990,66
49	In ⁺ ($5s^2 - ^1S_0$) 152195	$5p (^3P^o_0)$ $5p (^3P_1)$ $5p (^3P_2)$ $5p (^1P^o_1)$ $6s (^3S_1)$	42275 43349 45827 63033,81 93919,03
50	Sn ⁺ ($5p - ^2P^o_{1/2}$) 118017	$5p (^2P_{3/2})$ $5s5p^2 (^4P_{1/2})$ $5s5p^2 (^4P_{3/2})$ $5s5p^2 (^4P_{5/2})$ $6s (^2S_{1/2})$	4251,4 46464,2 48368,0 50730,0 56885,9

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
51	$\text{Sb}^+ (5p^2 \rightarrow {}^3P_0)$ 133327,5	$5p^2 ({}^3P_1)$	3055,0
		$5p^2 ({}^3P_2)$	5659,0
		$5p^2 ({}^1D_2)$	12789,8
		$5p^2 ({}^1S_0)$	23905,0
52	$\text{Te}^+ (5p^8 \rightarrow {}^4S^o_{3/2})$ 150000	$5p^8 ({}^2D^o_{3/2})$	10222
		$5p^8 ({}^2D^o_{5/2})$	12423
		$5p^8 ({}^2P^o_{1/2})$	20546
		$5p^8 ({}^2P^o_{3/2})$	24033
53	$\text{I}^+ (5p^4 \rightarrow {}^3P_2)$ 154304	$5p^4 ({}^3P_0)$	6451
		$5p^4 ({}^3P_1)$	7090
		$5p^4 ({}^1D_2)$	13731
		$5p^4 ({}^1S_0)$	32629
54	$\text{Xe}^+ (5p^6 \rightarrow {}^2P^o_{3/2})$ 171068,4	$5p^6 ({}^2P^o_{1/2})$	10537,3
		$5s5p^6 ({}^2S_{1/2})$	90873,83
		$6s ({}^4P_{5/2})$	93068,40
		$6s ({}^4P_{3/2})$	95064,34
		$5d ({}^4D_{7/2})$	95437,60
		$5d ({}^4D_{5/2})$	95396,68
		$5d ({}^4D_{3/2})$	96033,44
		$5d ({}^4D_{1/2})$	96858,14
		$5p^5 ({}^2P^o_{3/2}) 5d [7/2]^o_3$	105949,74
55	$\text{Cs}^+ (5p^6 \rightarrow {}^1S_0)$ 202263	$5d [1/2]^o_1$	106222,77
		$6s [3/2]^o_2$	107392,33
		$5d [1/2]^o_0$	107563,14
		$6s [3/2]^o_1$	107905,01
		$5d [3/2]^o_2$	108304,19
		$5d [3/2]^o_1$	110945,18
		$5d [7/2]^o_4$	112236,53
		$5d [5/2]^o_2$	112795,08
		$5d [5/2]^o_3$	113716,61
		$5d ({}^2D_{3/2})$	4873,850
56	$\text{Ba}^+ (6s \rightarrow {}^2S_{1/2})$ 80686,9	$5d ({}^2D_{5/2})$	5674,824
		$6p ({}^2P^o_{1/2})$	20261,562
		$6p ({}^2P^o_{3/2})$	21952,422
		$5d^2 ({}^3F_3)$	1016,10
57	$\text{La}^+ (5d^2 \rightarrow {}^3F_2)$ 89000	$5d^2 ({}^1D_2) + 5d6s ({}^1D_2)$	1394,46
		$6s ({}^3D_1)$	1895,15

Продолжение табл. 5.1

Атом- ный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
57		$5d^2 (^3F_4)$ $6s (^3D_2)$ $6s (^3D_3)$	1970,70 2591,60 3250,35
72	Hf ⁺ ($5d6s^2 — ^2D_{3/2}$) 120000	$5d6s^2 (^2D_{5/2})$ $5d^2 (^3F) 6s (^4F_{3/2})$ $6s (^4F_{5/2})$ $6s (^4F_{7/2})$ $6s (^4F_{9/2})$	3050,88 3644,65 4904,85 6344,34 8361,76
73	Ta ⁺ ($5d^3 6s — ^5F_1$)	$5d^3 (^4F) 6s (^5F_2)$ $6s (^5F_3)$ $5d^2 6s^2 (^3F_2)$ $5d^2 6s^2 (^3P_0)$ $6s (^5F_4)$ $5d^2 6s^2 (^3P_1)$ $5d^2 6s^2 (^3P_2)$ $6s (^5F_5)$ $5d^2 6s^2 (^3F_3)$	1031,33 2642,19 3180,04 4124,77 4415,70 5330,66 5658,00 6186,72 6831,35
74	W ⁺ ($5d^4 6s — ^6D_{1/2}$)	$5d^4 (^5D) 6s (^6D_{3/2})$ $6s (^6D_{5/2})$ $6s (^6D_{7/2})$ $6s (^6D_{9/2})$ $5d^5 (^6S_{5/2})$	1518,78 3172,52 4716,32 6147,16 7420,43
75	Re ⁺ ($5d^5 6s — ^7S_3$)	$5d^4 6s^2 (^5D_0)$ $6s^2 (^5D_2)$ $6s^2 (^5D_1)$ $6s^2 (^5D_4)$ $6s^2 (^5D_3)$ $5d^5 (^6S) 6s (^6S_2)$	13777,3 14352,2 14824,0 14882,6 14930,5 17223,5
76	Os ⁺ ($5d^6 6s — ^6D_{9/2}$)	$5d^6 (^5D) 6s (^6D_{7/2})$ $6s (^6D_{5/2})$ $6s (^6D_{3/2})$ $6s (^6D_{1/2})$	3593,15 3928,94 5592,05 6636,57
78	Pt ⁺ ($5d^9 — ^2D_{5/2}$) 149720	$5d^8 (^3F) 6s (^4F_{9/2})$ $5d^9 (^2D_{3/2})$ $6s (^4F_{7/2})$ $6s (^4F_{5/2})$ $6s (^4F_{3/2})$	4786,6 8419,9 9356,2 13329,3 15791,4

Продолжение табл. 5.1

Атомный номер	Элемент, основной терм, оптический предел, см ⁻¹	Терм возбужденного состояния	Энергия терма, см ⁻¹
79	Au ⁺ ($5d^{10} - ^1S_0$) 165000	$5d^9 ({}^2D_{5/2}) 6s ({}^3D_3)$ $6s ({}^3D_2)$ $5d^9 ({}^2D_{3/2}) 6s ({}^3D_1)$	15039,0 17639,4 27764,5
80	Hg ⁺ ($6s - {}^2S_{1/2}$) 151280	$5d^9 6s^2 ({}^2D_{5/2})$ $6s^2 ({}^2D_{3/2})$ $6p ({}^2P^0_{1/2})$ $6p ({}^2P^0_{3/2})$	35514 50552 51485 60608
81	Tl ⁺ ($6s^2 - ^1S_0$) 164760	$6p ({}^3P^0_0)$ $6p ({}^3P_1)$ $6p ({}^3P_2)$ $6p ({}^1P^0_1)$ $7s ({}^3S_1)$	49451 52393 61725 75660 105225
82	Pb ⁺ ($6p - {}^2P^0_{1/2}$) 121243	$6p ({}^2P^0_{3/2})$ $6s 6p^2 ({}^4P_{1/2})$ $7s ({}^2S_{1/2})$ $6s 6p^2 ({}^4P_{3/2})$ $6d ({}^2D_{5/2})$ $6d ({}^2D_{3/2})$ $6s 6p^2 ({}^4P_{5/2})$	14081 57911 59448 66124 68964 69740 73905
83	Bi ⁺ ($6p^2 - {}^3P_0$) 135000	$6p^2 ({}^3P_1)$ $6p^2 ({}^3P_2)$ $6p^2 ({}^1D_2)$ $6p^2 ({}^1S_0)$	13324 17030 33936 44173
88	Ra ⁺ ($6p^6 7s - {}^2S_{1/2}$) 81842,3	$6d ({}^2D_{3/2})$ $6d ({}^2D_{5/2})$ $7p ({}^2P^0_{1/2})$ $7p ({}^2P^0_{3/2})$	12084,38 13743,11 21351,20 26208,86

§ 5.2. Спектры атомных частиц и силы осцилляторов переходов

На рис. 5.1—5.13 приведены схемы спектров оптических переходов для нейтральных атомов из первых двух периодов таблицы элементов, а также для атомов щелочных металлов. На этих схемах (называемых диаграммами Гротриана) в целях наглядности нанесены также энергии уровней, эВ, и значения сил осцилляторов

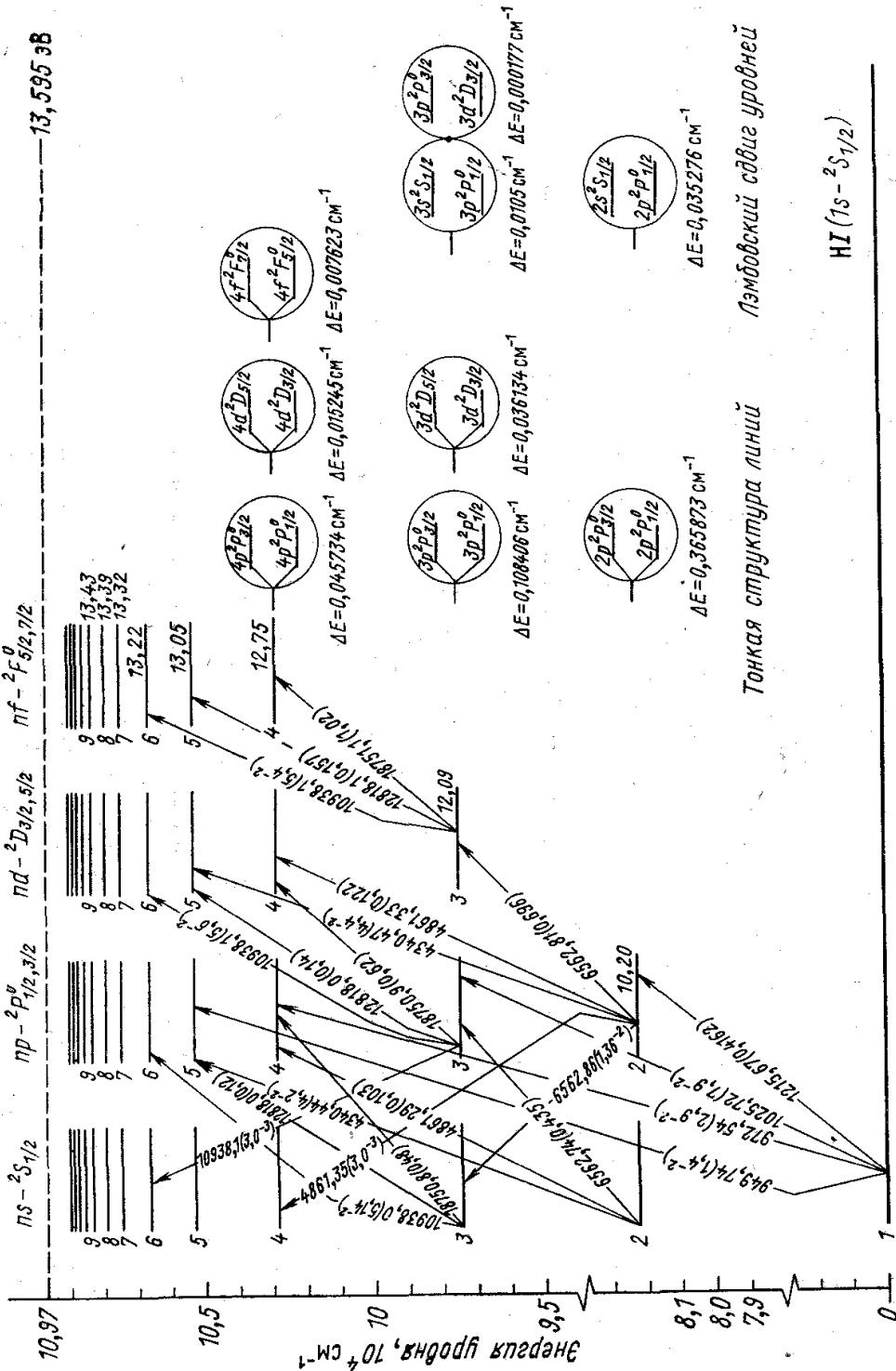


Рис. 5.1. Спектр атома водорода и силы осцилляторов оптических переходов: λ , $A(f_{n'm})$

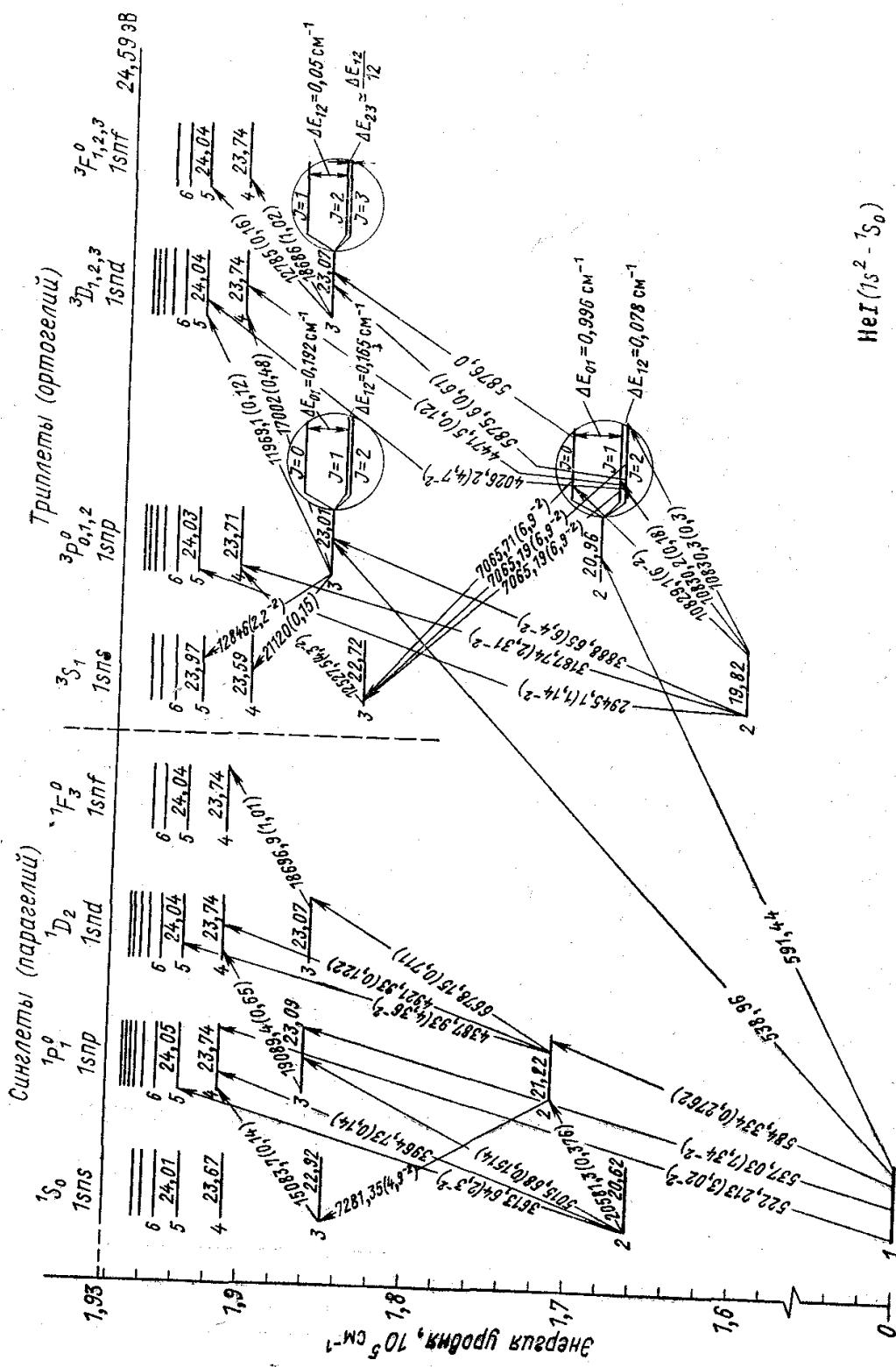


Рис. 5.2. Спектр атома гелия и силы осцилляторов оптических переходов: $\lambda, \hat{A}_n(f_{n,m})$

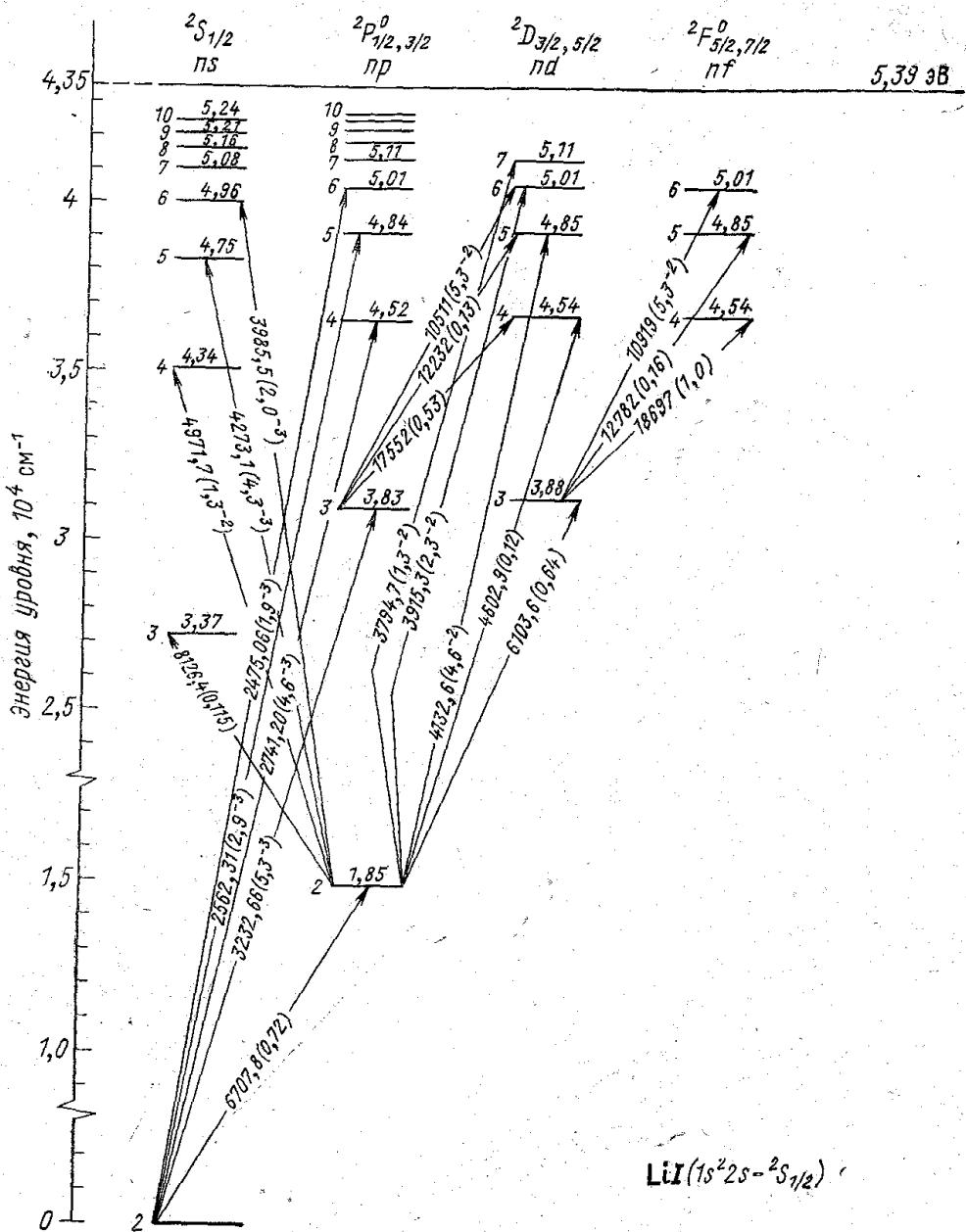


Рис. 5.3. Спектр атома лития и силы осцилляторов оптических переходов: $\lambda, \text{ \AA} (f_{n,m})$

Таблица 5.2

Силы осцилляторов атомов

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
H	$1S - 2P$	1215,7	0,416
	$1S - 3P$	1025,7	0,079
	$1S - 4P$	972,5	0,029

Продолжение табл. 5.2

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
H	$2S - 3P$	6562,7	0,435
	$2P - 3S$	6562,9	0,0136
	$2P - 3D$	6562,8	0,696
	$2S - 4P$	4861,29	0,103
	$2P - 4S$	4861,35	0,0030
	$2P - 4D$	4861,33	0,122
He	$1^1S - 2^1P$	584,3	0,276
	$1^1S - 3^1P$	537,0	0,0734
	$1^1S - 4^1P$	522,2	0,030
	$2^1S - 2^1P$	20581,3	0,376
	$2^1S - 3^1P$	5015,7	0,151
	$2^1S - 4^1P$	3964,7	0,14
	$2^3S - 2^3P$	10830	0,539
	$2^3S - 3^3P$	3888,6	0,0645
	$2^3S - 4^3P$	3187,7	0,023
	$2^1P - 3^1S$	7281,3	0,049
	$2^1P - 4^1S$	5048	0,008
	$2^1P - 3^1D$	6678,1	0,711
	$2^1P - 4^1D$	4921,9	0,121
	$2^3P - 3^3S$	7065	0,076
	$2^3P - 4^3S$	4713	0,012
Li	$2^3P - 3^3D$	5876	0,623
	$2^3P - 4^3D$	4472	0,123
	$2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$	6707,91	0,251
	$2^2S_{1/2} - 2^2P_{3/2}$	6707,76	0,502
Na	$2^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$	8126,23	0,115
	$2^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$	8126,45	0,115
	$3^2S_{1/2} - 3^2P_{1/2}$	5889,9	0,324
	$3^2S_{1/2} - 3^2P_{3/2}$	5895,9	0,648
	$3^2S_{1/2} - 4^2P_{1/2}$	3303,9	0,051
	$3^2S_{1/2} - 4^2P_{3/2}$	3302,9	0,102
	$3^2P_{1/2} - 4^2S_{1/2}$	22084,0	0,167
	$3^2P_{3/2} - 4^2S_{1/2}$	22057,0	0,335
K	$4^2S_{1/2} - 4^2P_{1/2}$	7699,0	0,347
	$4^2S_{1/2} - 4^2P_{3/2}$	7664,9	0,684
	$4^2P_{1/2} - 4^2S_{1/2}$	12434,3	0,051
	$4^2P_{3/2} - 4^2S_{1/2}$	12523,0	0,102

Продолжение табл. 5.2

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
Rb	$5^2S_{1/2} - 5^2P_{1/2}$	7947,6	0,363
	$5^2S_{1/2} - 5^2P_{3/2}$	7800,23	0,726
	$5^2P_{1/2} - 6^2S_{1/2}$	13237,3	0,187
	$5^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$	13667,0	0,364
Cs	$6^2S_{1/2} - 6^2P_{1/2}$	8943,5	0,394
	$6^2S_{1/2} - 6^2P_{3/2}$	8521,2	0,814
	$6^2S_{1/2} - 7^2P_{1/2}$	4593,2	$2,84 \cdot 10^{-3}$
	$6^2S_{1/2} - 7^2P_{3/2}$	4555,4	0,0174
	$6^2P_{1/2} - 5^2D_{3/2}$	30100	0,251
	$6^2P_{3/2} - 5^2D_{3/2}$	36127	0,0211
	$6^2P_{3/2} - 5^2D_{5/2}$	34892	0,204
	$6^2P_{3/2} - 7^2S_{1/2}$	13588	0,208
	$6^2P_{1/2} - 7^2S_{1/2}$	14695	0,171
	$6^2P_{1/2} - 6^2D_{3/2}$	8761,4	0,298
	$6^2P_{3/2} - 6^2D_{3/2}$	9208,5	0,0397
	$6^2P_{3/2} - 6^2D_{5/2}$	9172,3	0,332
Mg	$5^2D_{5/2} - 4F$	10123,6	0,324
	$5^2D_{3/2} - 4F$	10024,39	0,302
Ca	$3^1S_0 - 3^1P_1$	2852	1,2
	$3^1S_0 - 3^3P_1$	4571,1	$2,6 \cdot 10^{-6}$
Sr	$4^1S_0 - 4^1P_1$	4226,7	1,49
	$4^3P_2 - 4^3D_3$	4454,8	0,26
	$4^3P_1 - 4^3D_2$	4435,0	0,27
	$4^3P_0 - 4^3D_1$	4425,4	0,32
	$4^3P_2 - 4^3D_2$	4455,9	0,047
	$4^3P_1 - 4^3D_1$	4435,7	0,084
	$4^3P_2 - 4^3D_1$	4456,6	0,003
	$4^1S_0 - 4^3P_1$	6572,8	$4,2 \cdot 10^{-5}$
	$4^3P_2 - 5^3S_1$	6162,2	0,10
	$4^3P_1 - 5^3S_1$	6122,2	0,12
	$4^3P_0 - 5^3S_1$	5102,7	0,12
	$5^1S_0 - 5^1P_1$	4607,3	1,54

Продолжение табл. 5.2

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
Sr	$5^3P_2 \rightarrow 5^3D_3$	4962,2	0,33
	$5^3P_1 \rightarrow 5^3D_2$	4872,5	0,31
	$5^3P_2 \rightarrow 5^3D_2$	4967,9	0,06
Ba	$6^1S_0 \rightarrow 6^1P_1$	5535,5	1,40
	$6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$	7911,3	0,085
	$6^3P_2 \rightarrow 7^3S_1$	7906,0	0,31
	$6^3P_1 \rightarrow 7^3S_1$	7392,0	0,36
	$6^3P_0 \rightarrow 7^3S_1$	7195,0	0,50
	$6^3P_2 \rightarrow 6^3D_3$	5778,0	0,91
	$6^3P_2 \rightarrow 6^3D_3$	5800,0	0,21
Zn	$4^1S_0 \rightarrow 4^1P_1$	2139,0	1,2
	$4^1S_0 \rightarrow 4^3P_1$	3076,0	$1,7 \cdot 10^{-4}$
Cd	$5^1S_0 \rightarrow 5^1P_1$	2288,0	1,2
	$5^1S_0 \rightarrow 5^3P_1$	3261,0	0,0018
Hg	$6^1S_0 \rightarrow 6^1P_1$	1849,0	1,2
	$6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$	2537,0	0,03
	$6^3P_2 \rightarrow 7^3S_1$	5461,0	0,16
	$6^3P_1 \rightarrow 7^3S_1$	4358,0	0,15
	$6^3P_0 \rightarrow 7^3S_1$	4047,0	0,21
	$6^3P_1 \rightarrow 7^1S_0$	4078,0	0,006
	$6^3P_2 \rightarrow 6^3D_3$	3650,0	0,3
	$6^3P_1 \rightarrow 6^3D_1$	3131,6	0,2
	$6^3P_1 \rightarrow 6^3D_2$	3126,0	0,1
	$6^3P_0 \rightarrow 6^3D_1$	2967,0	0,4
	$6^3P_1 \rightarrow 6^1D_2$	3131,8	0,04
	$3^2P_{1/2} \rightarrow 4^2S_{1/2}$	3944,0	0,15
Al	$3^2P_{3/2} \rightarrow 4^2S_{1/2}$	3962,0	0,15
	$3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2D_{3/2, 5/2}$	3092,0	0,23
	$3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2D_{3/2}$	3089,0	0,22
	$3^2P_{1/2} \rightarrow 5^2S_{1/2}$	3652,0	0,023
	$3^2P_{3/2} \rightarrow 5^2S_{1/2}$	2660,0	0,024
	$3^2P_{3/2} \rightarrow 4^2D_{3/2, 5/2}$	2575,0	0,07
	$3^2P_{1/2} \rightarrow 4^2D_{3/2}$	2568,0	0,07
	$4^2P_{1/2} \rightarrow 5^2S_{1/2}$	4033,0	0,129
	$4^2P_{3/2} \rightarrow 5^2S_{1/2}$	4172,0	0,135
	$4^2P_{3/2} \rightarrow 4^2D_{5/2}$	2943,6	0,29

Продолжение табл. 5.2

Атом	Переход	Длина волны, Å	Сила осциллятора
Ga	$4^2P_{3/2} - 4^2D_{3/2}$	2944,2	0,038
	$4^2P_{1/2} - 4^2D_{3/2}$	2874,0	0,32
	$4^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$	2719,7	0,014
	$4^2P_{1/2} - 6^2S_{1/2}$	2659,9	0,014
	$4^2P_{1/2} - 5^2D_{3/2}$	2450,1	0,037
	$4^2P_{3/2} - 5^2D_{5/2}$	2500,2	0,037
In	$5^2P_{1/2} - 6^2S_{1/2}$	4101,8	0,144
	$5^2P_{3/2} - 6^2S_{1/2}$	4511,3	0,157
	$5^2P_{1/2} - 5^2D_{3/2}$	3039,4	0,36
	$5^2P_{3/2} - 5^2D_{5/2}$	3256,1	0,37
	$5^2P_{3/2} - 5^2D_{3/2}$	3258,6	0,06
	$5^2P_{1/2} - 7^2S_{1/2}$	2753,9	0,017
Tl	$5^2P_{3/2} - 7^2S_{1/2}$	2932,6	0,017
	$5^2P_{1/2} - 6^2D_{3/2}$	2560,2	0,045
	$5^2P_{3/2} - 6^2D_{5/2}$	2710,3	0,052
	$5^2P_{3/2} - 6^2D_{3/2}$	2713,4	0,006
	$6^2P_{1/2} - 7^2S_{1/2}$	3776,0	0,133
	$6^2P_{3/2} - 7^2S_{1/2}$	5350,0	0,151
Ne	$6^2P_{3/2} - 6^2D_{5/2}$	3519,0	0,346
	$6^2P_{3/2} - 6^2D_{3/2}$	3529,0	0,04
	$6^2P_{1/2} - 6^2D_{3/2}$	2768,0	0,29
	$2^1S_0 - 2^3P_1$	743,72	0,012
	$2^1S_0 - 2^1P_1$	735,895	0,12
	$3^1S_0 - 3^3P_1$	1066,6	0,036
Ar	$3^1S_0 - 3^1P_1$	1048,2	0,28
	$4^1S_0 - 4^3P_1$	1235,8	0,16
Kr	$4^1S_0 - 4^1P_1$	1164,6	0,14
	$5^1S_0 - 5^3P_1$	1469,6	0,26
Xe	$5^1S_0 - 5^1P_1$	1295,6	0,27

разрешенных оптических переходов в поглощении. Недостаток места на диаграммах вынудил нас ограничиться воспроизведением параметров спектров лишь наиболее интенсивных переходов, не затрагивая при этом слишком высоких уровней возбуждения или распадных состояний. Читатель, интересующийся более подробной картиной спектров рассматриваемых здесь элементов, может обратиться к имеющимся специальным руководствам, которыми мы

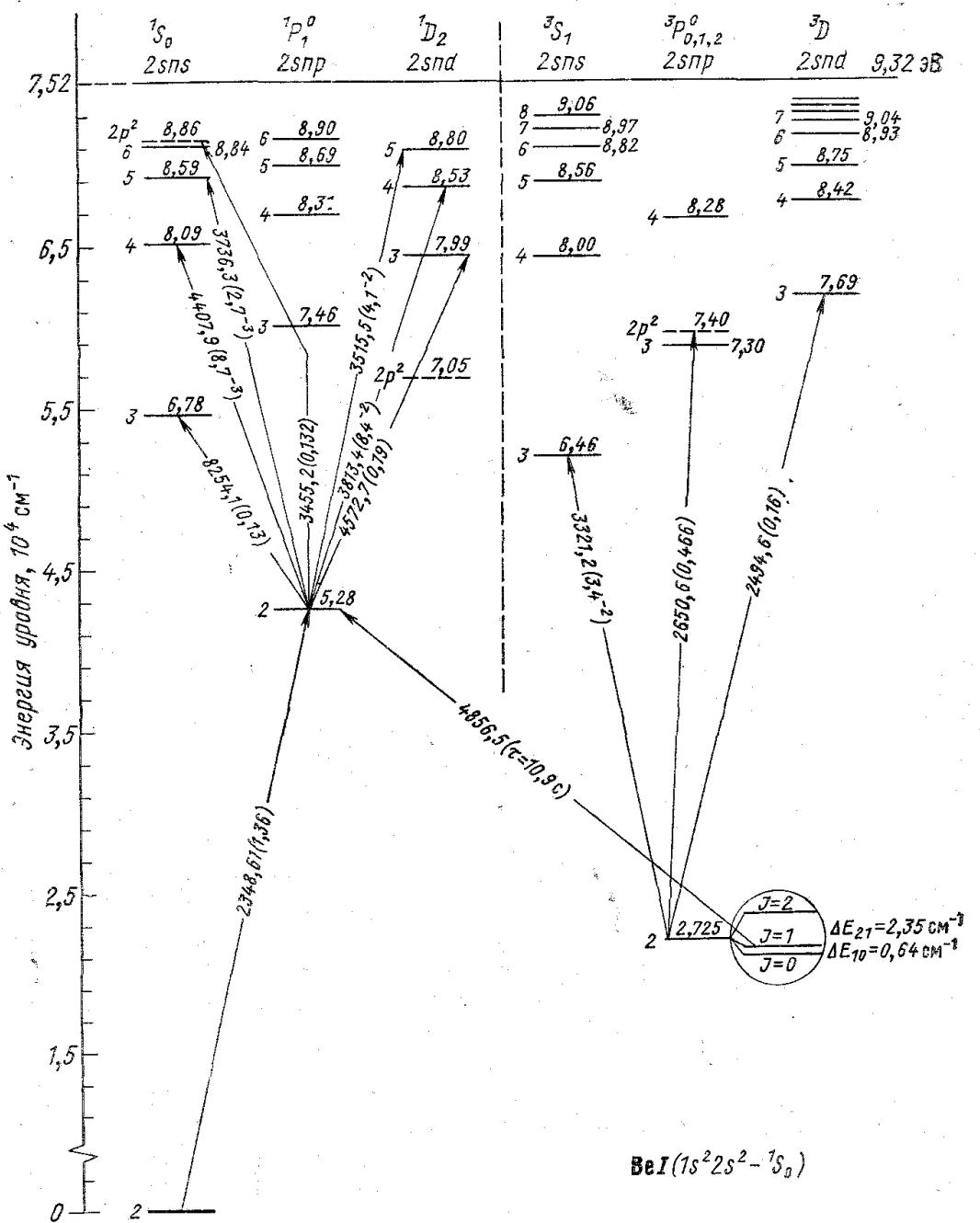


Рис. 5.4. Спектр атома берилля и силы осцилляторов оптических переходов:
 $\lambda, \text{\AA}$ (f_{nm})

пользовались при составлении приведенных диаграмм [1—7]. Отметим, что некоторые значения сил осцилляторов даны в сокращенной записи (например, $2^{-3} \equiv 0,002$), а нижний индекс у величины f_{nm} отмечает соответствующее квантовое число полного момента J верхнего уровня (либо нижнего и верхнего уровней).

В табл. 5.2 включены значения сил осцилляторов наиболее интенсивных оптических переходов в поглощении для элементов,

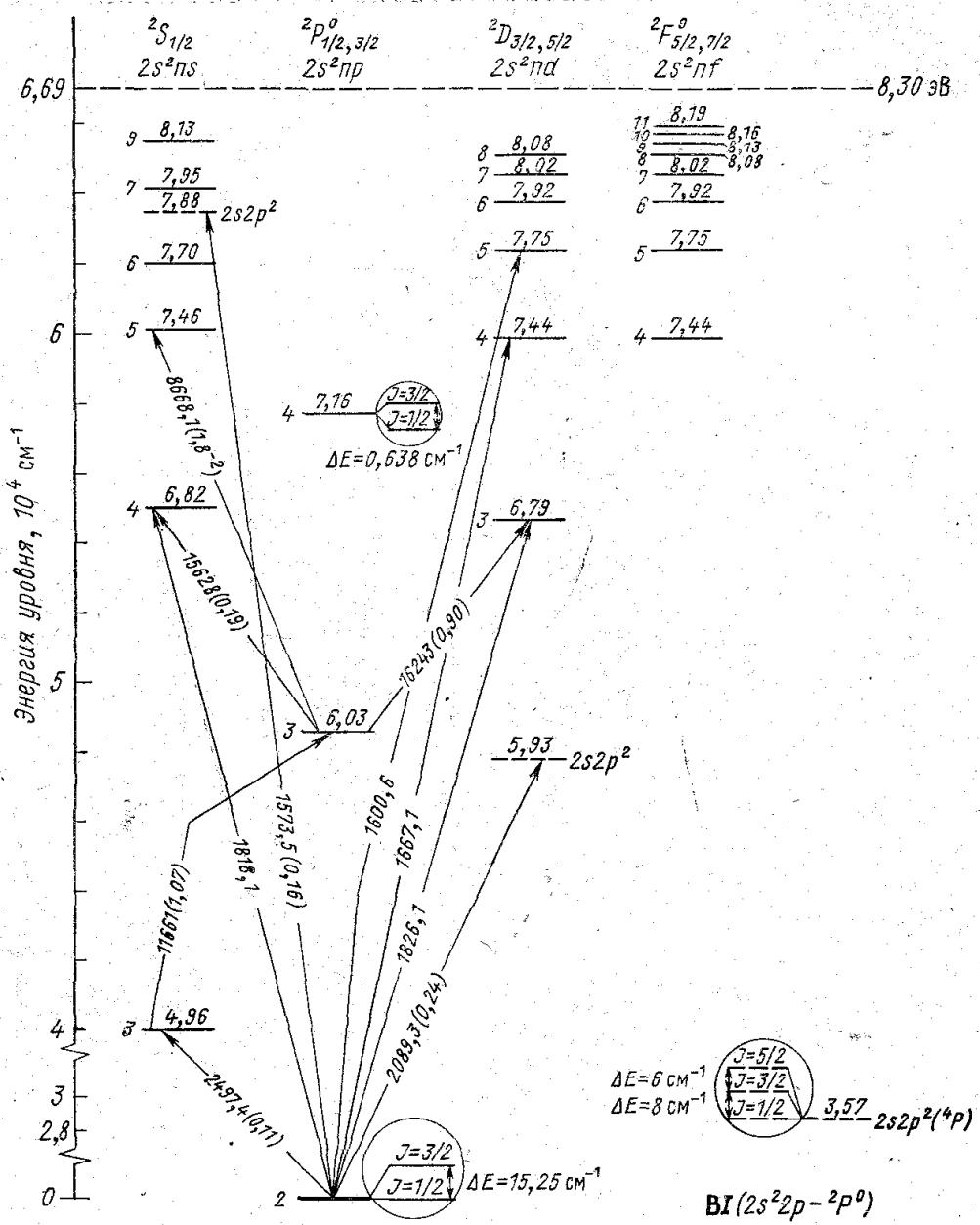


Рис. 5.5. Спектр атома бора и силы осцилляторов оптических переходов: $\lambda, \text{ \AA} (f_{nm})$

представляющих интерес при исследованиях лабораторной газоразрядной плазмы. В ряде случаев эти данные уточняют значения f_{nm} , приведенные на диаграммах 5.1—5.13, и, кроме того, здесь рассматриваются элементы, не попавшие в число тех, что приведены на указанных диаграммах.

В табл. 5.3 собраны значения времени жизни некоторых метастабильных состояний атомов и атомных ионов, играющих роль в процессах распада газообразной плазмы и характеризующих наиболее низколежащие возбужденные состояния атомных частиц.

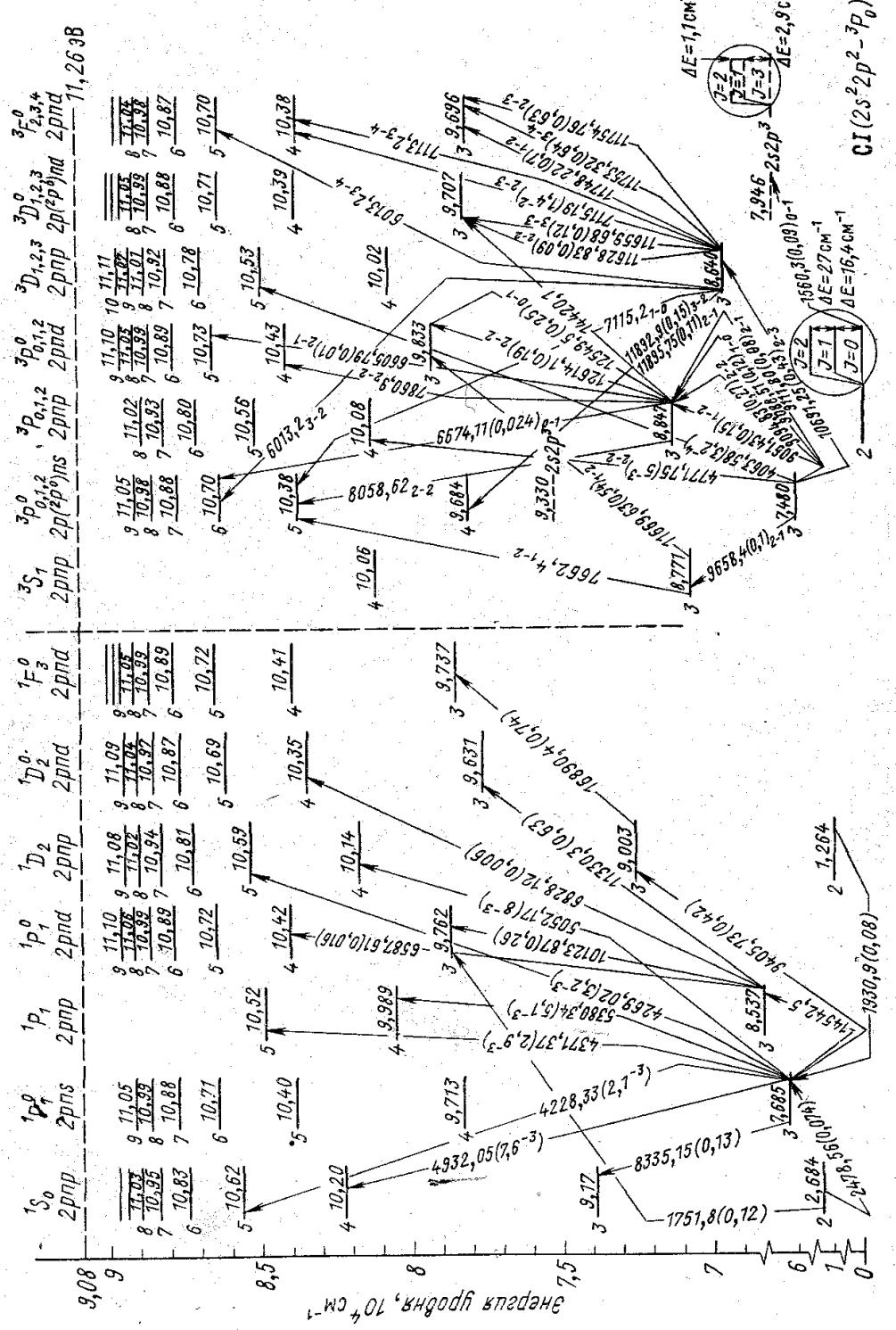


Рис. 5.6. Спектр атома углерода и силы осцилляторов оптических переходов: λ , Å (f_{nm})

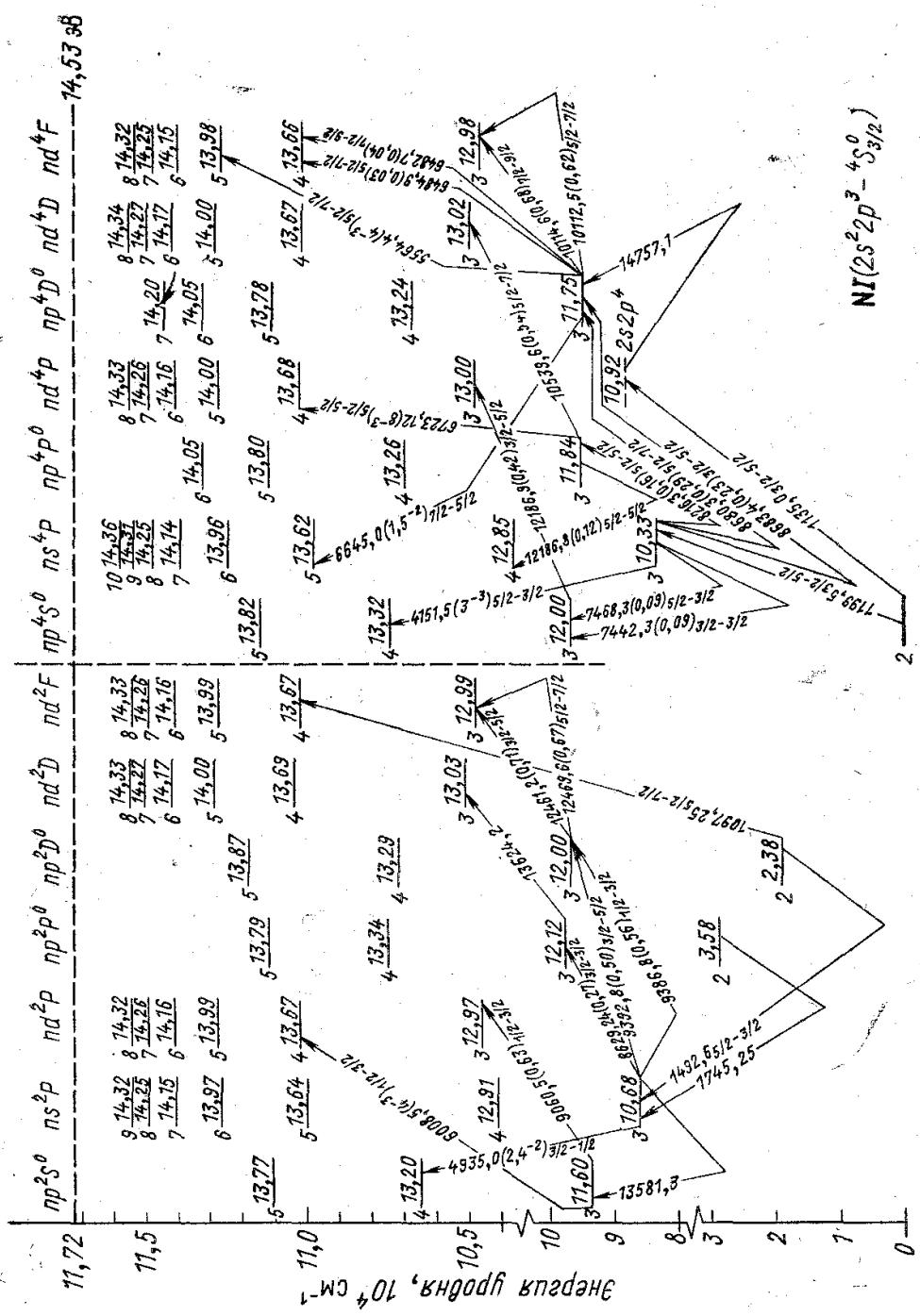


Рис. 5.7. Спектр атома азота и силы осцилляторов оптических переходов: λ , \AA ($f_{n,m}$)

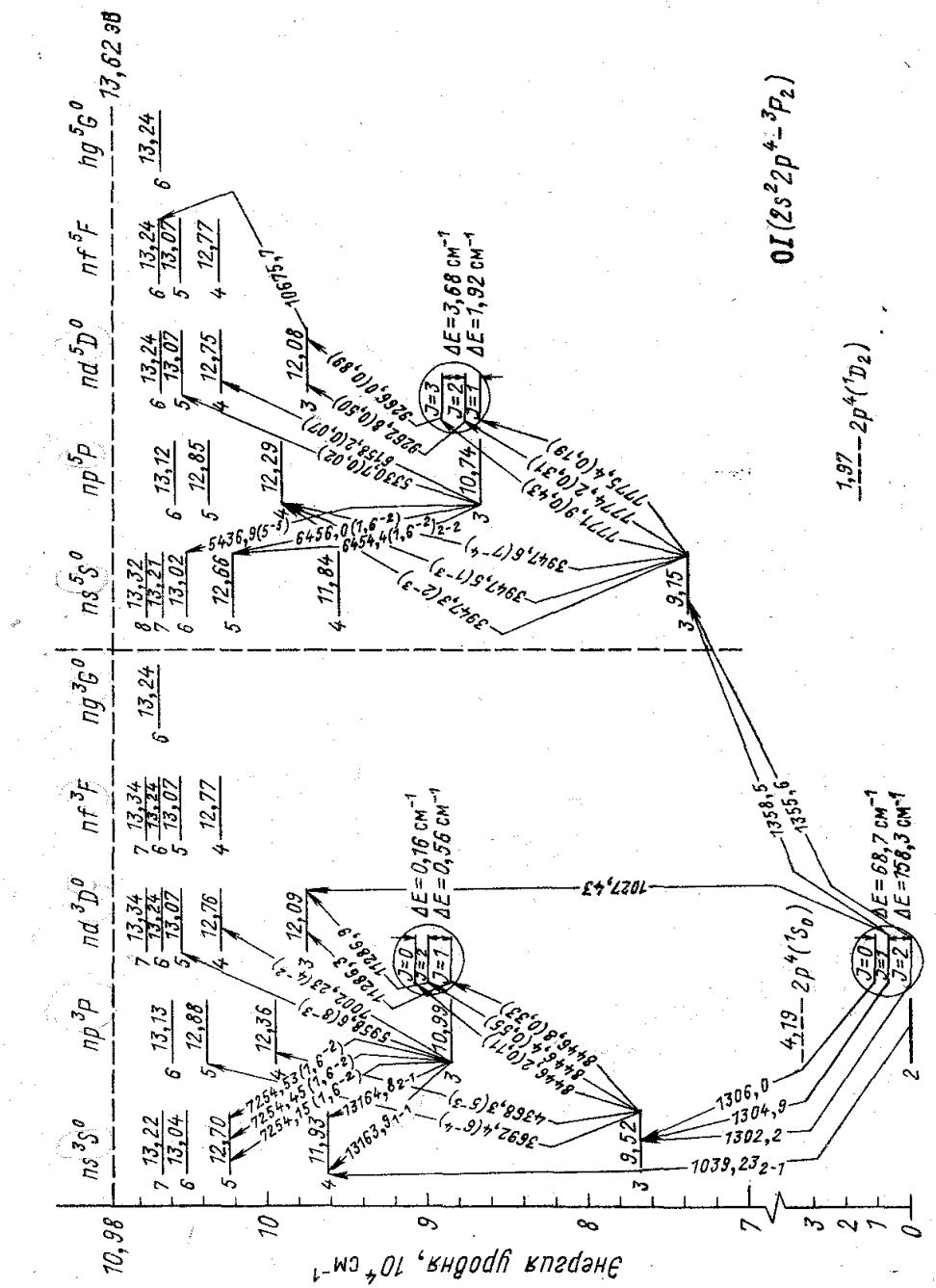


Рис. 5.8. Спектр атома кислорода и силы осцилляторов оптических переходов: $\lambda, \text{Å}$ ($f_{n,m}$)

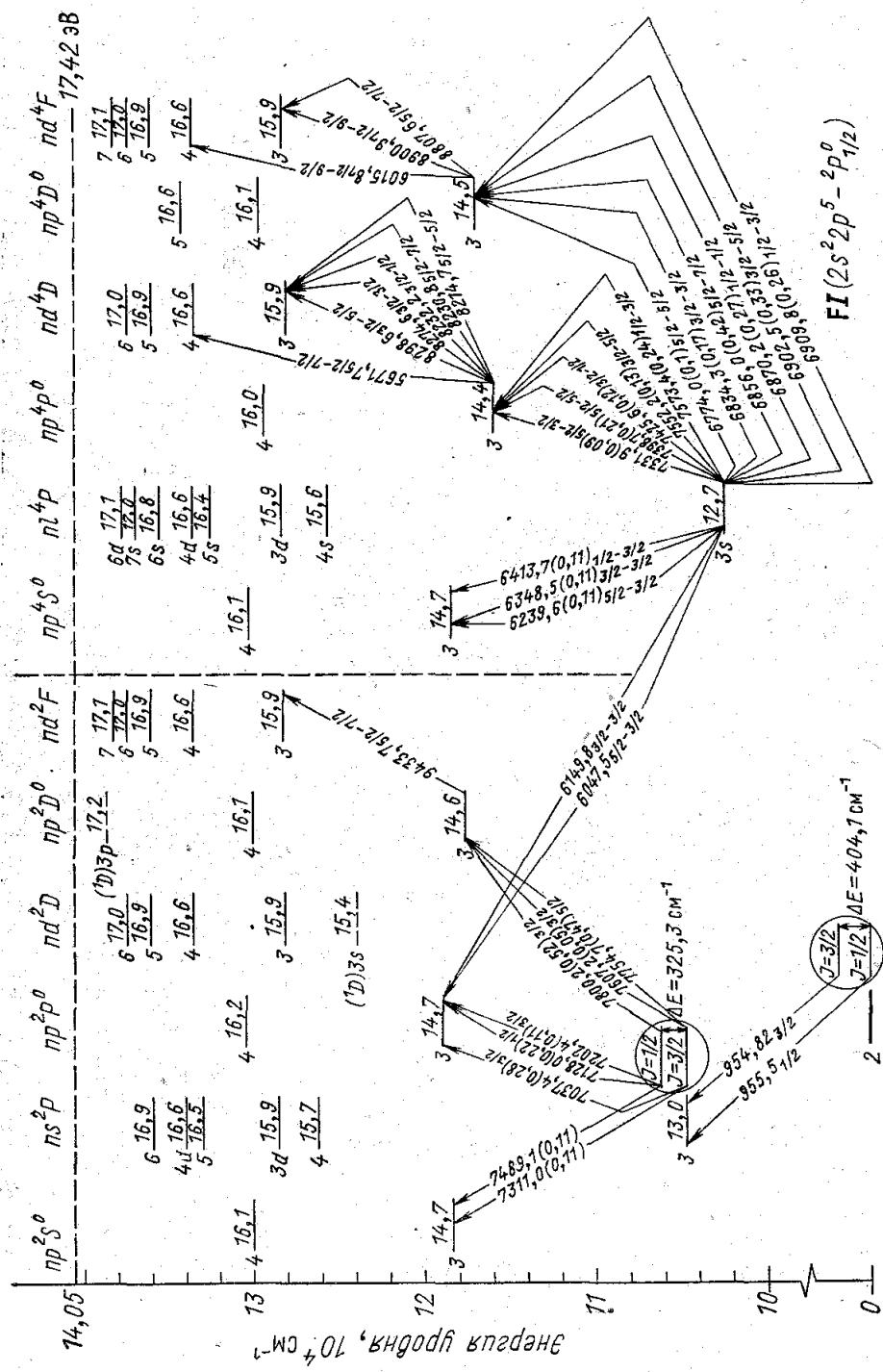
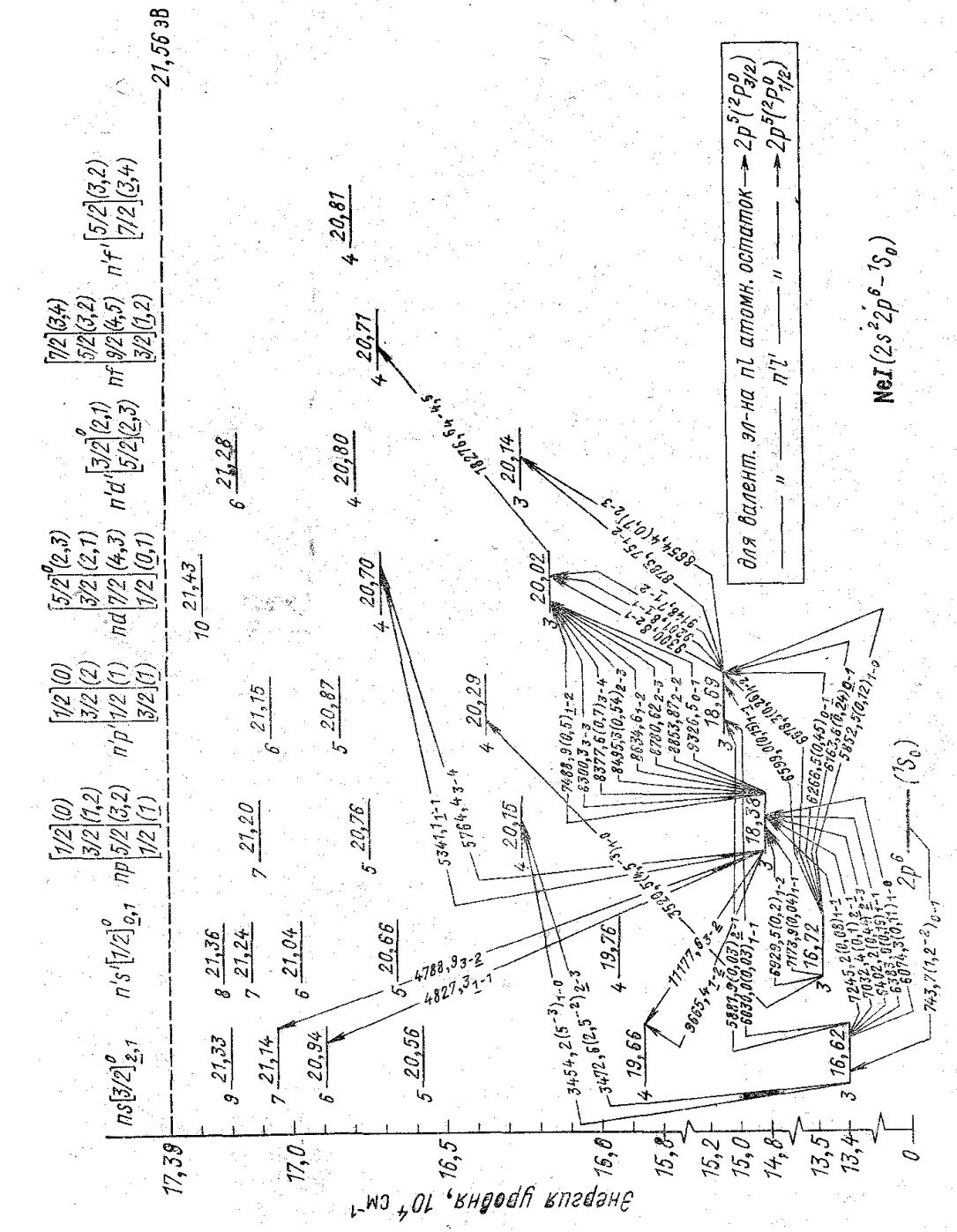


Рис. 5.9. Спектр атома фтора и силы осцилляторов оптических переходов: λ , Å° ($f_{n,m}$)



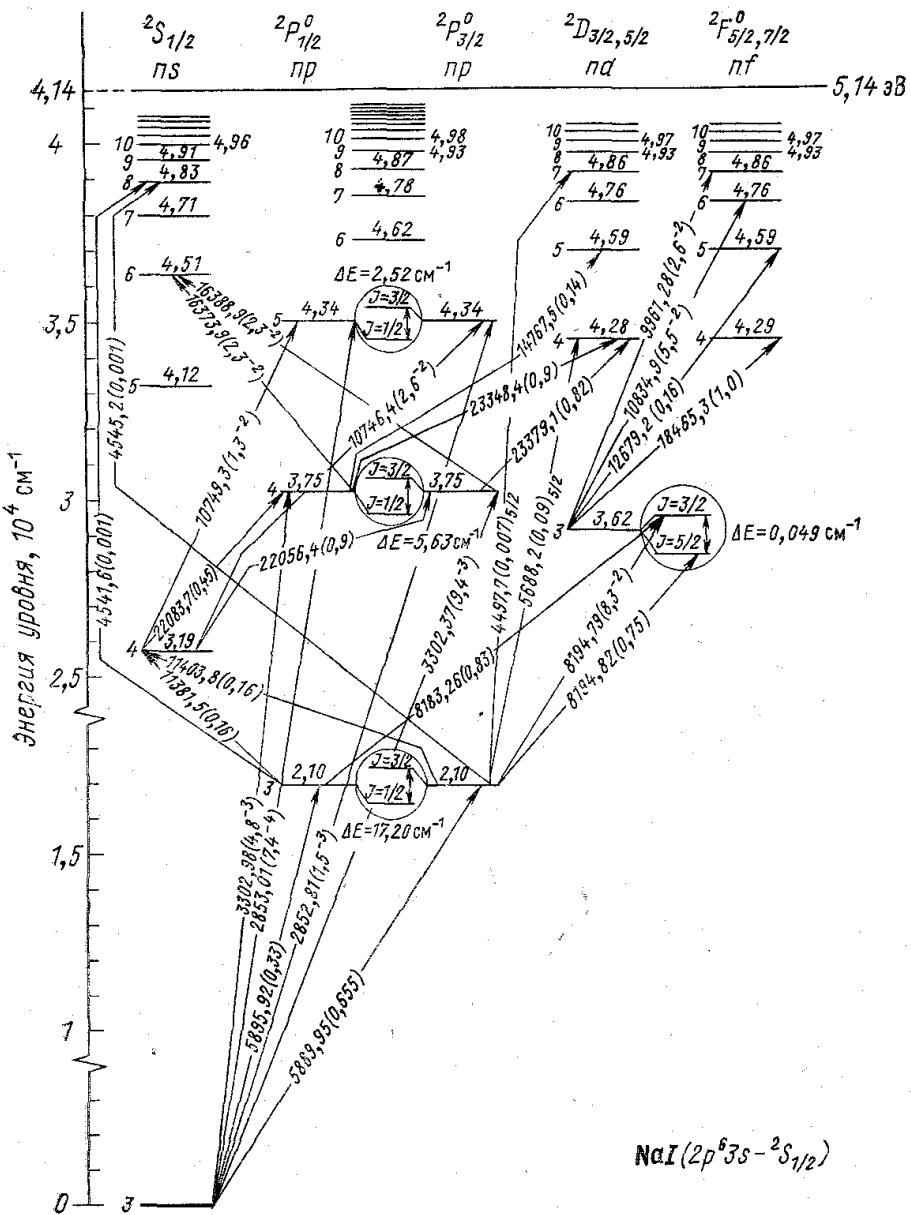


Рис. 5.11. Спектр атома натрия и силы осцилляторов оптических переходов:
 $\lambda, \text{ \AA} (f_{nm})$

Напомним некоторые соотношения, относящиеся к радиационным переходам между состояниями атомных частиц.

1. Законы сохранения момента и четности атома приводят к определенным *правилам отбора*, ограничивающим возможные изменения состояний излучающего атома. Наиболее интенсивные электрические дипольные переходы из состояний $LSJM \rightarrow L'S'J'M'$ разрешены при условии

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1; J + J' \geq 1;$$

четный терм \neq нечетный терм;

в случае состояний, построенных по типу $L\bar{S}$ -связи, выполняются

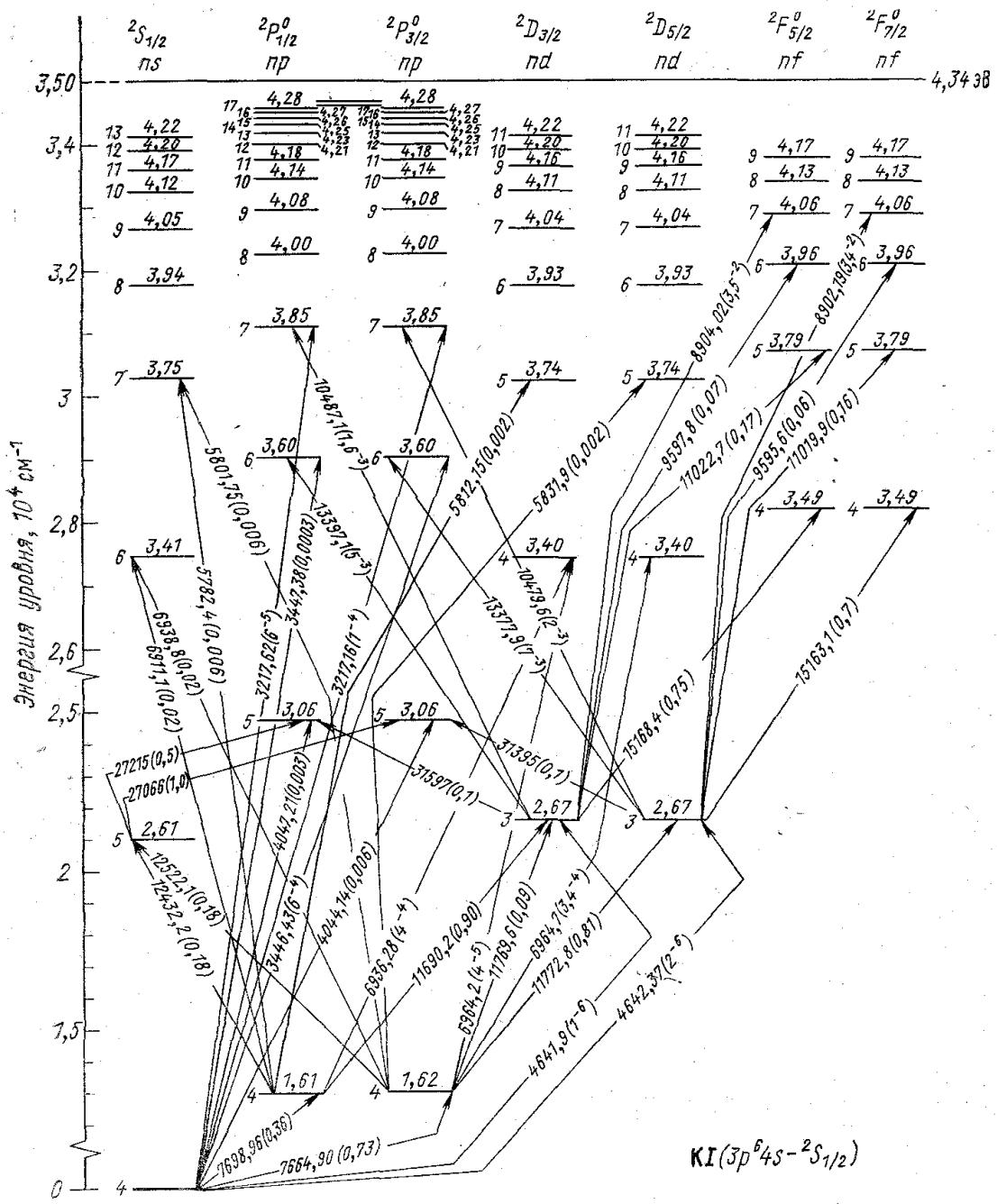


Рис. 5.12. Спектр атома калия и силы осцилляторов оптических переходов: λ , Å (f_{nm})

дополнительные правила отбора:

$$S-S'=0;$$

$$|L' - L| \leq 1 \leq L + L'.$$

2. Сила осциллятора перехода $nJ \rightarrow n'J'$ (где n, n' — совокупность остальных квантовых чисел атома) определяет следующую

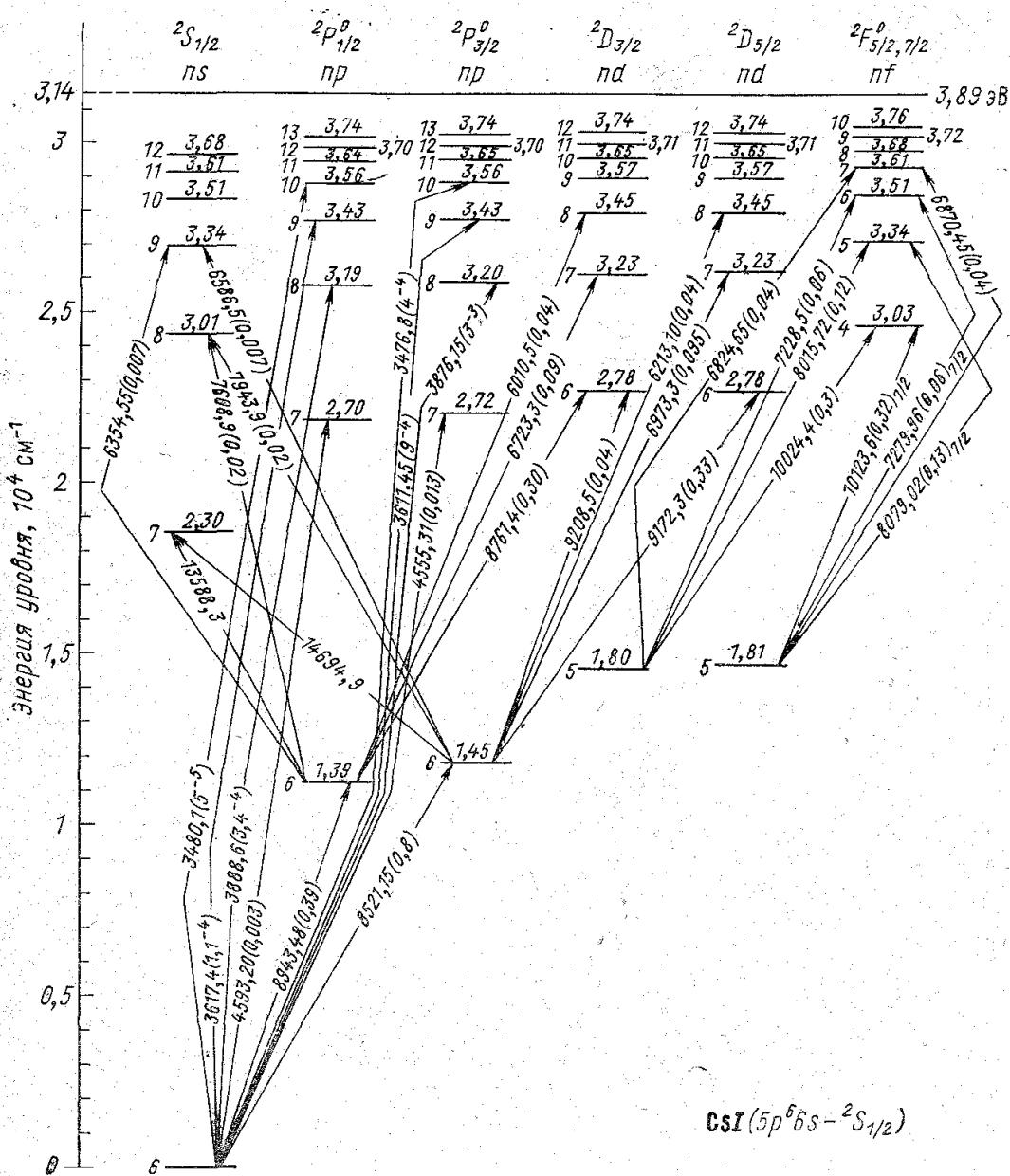


Рис. 5.13. Спектр атома цезия и силы осцилляторов оптических переходов:
 $\lambda, \text{\AA} (f_{nm})$

безразмерную величину:

$$f(nJ, n'J') = -\frac{2m}{3\hbar e^2} \frac{\omega_{nJ, n'J'}}{2J+1} \left| \langle nJ | D | n'J' \rangle \right|^2,$$

где $\omega_{nJ, n'J'} = \frac{E_{nJ} - E_{n'J'}}{\hbar}$, а $\langle nJ | D | n'J' \rangle$ — матричный элемент дипольного момента атома.

Вероятность перехода $W(nJ \rightarrow n'J')$ выражается через силу осциллятора соотношением

$$W(nJ \rightarrow n'J') = \frac{2e^2 \omega_{nJ, n'J'}}{mc^3} |f(nJ, n'J')|.$$

Таблица 5.3

Метастабильные состояния атомов и ионов*

Атом, ион	Метастабильное состояние	Энергия возбуждения, эВ	Время жизни, с	Атом, ион	Метастабильное состояние	Энергия возбуждения, эВ	Время жизни, с
H	2^1S	10,20	0,142	N^+	2^1D_2	1,90	250
He	2^3S	19,82	$6 \cdot 10^{-5}$		2^1S_0	4,05	0,9
	2^1S	20,61	0,038	O	2^1D_2	1,97	110
N	$2^2D^0_{5/2}$	2,384	$6 \cdot 10^{-4}$		2^1S_0	4,19	0,8
	$2^2D^0_{3/2}$	2,385	$1,4 \cdot 10^{-5}$	O^+	$2^2D^0_{5/2}$	3,324	7700
	2^2P^0	3,58	13		$2^2D^0_{3/2}$	3,326	$2,4 \cdot 10^{-4}$
					2^2P^0	5,02	6

* Погрешность приведенных времен жизни такова, что изменения возможны в последних значащих цифрах.

3. Время жизни возбужденного состояния τ_{nJ} равно

$$\tau_{nJ} = \frac{1}{\sum_{n'J'} W(nJ \rightarrow n'J')} = \frac{mc^3}{2e^2} \left(\sum_{n'J'} \frac{|f(nJ, n'J')|}{\omega^2_{nJ, n'J'}} \right)^{-1}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moore C. E. Atomic energy levels. NBS Circular 467. Washington D. C., v. 1, 1949; v. 2, 1952; v. 3, 1958; Selected tables of atomic spectra. NSRDS—NBS 3, Sections 1—8, Washington, June 1965 — January 1979.
2. Bashkin S., Stoner J., Jr. Atomic energy levels and Grotrian diagrams. N. Y. — Lond., J. Wiley. V. 1, 1975; V. 2, 1978.
3. Moore C. E. Ionization potentials and ionization limits derived from optical spectra. US Department of Commerce, NSRDS-NBS 34, Sept. 1970.
4. Стриганов А. Р., Светицкий Н. С. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. М., Атомиздат, 1966.
5. Таблицы спектральных линий. 4-е изд. М., «Наука», 1977. Авт.: А. Н. Зайдель и др.
6. Wiese W. L., Smith M. W., Glennon B. M. Atomic transition probabilities H through Ne. V 1, NSRDS-NBS 4, Washington, 1966; Wiese W. L., Smith M. W., Miles B. M. Atomic transition probabilities Na through Ca. V. 2, NSRDS-NBS 22, Washington, 1969.
7. Касабов Г. А., Елисеев В. В. Спектроскопические таблицы для низкотемпературной плазмы. М., Атомиздат, 1973.

Часть II

МОЛЕКУЛЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИОНЫ

Глава 6

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ

§ 6.1. Постоянные мультипольного взаимодействия атомных частиц

Если расстояние R между центрами атомных частиц i и k превышает их размеры, то оператор электростатического взаимодействия электронов и ядер представляется в виде суммы:

$$\begin{aligned} V(R) &= e^2 \left(-\sum_i \frac{Z_k}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} - \sum_k \frac{Z_i}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_k|} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i, k} \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i|} + \frac{Z_i Z_k}{R} \right) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{e^2}{R^{l+1}} \left\{ - \sum_i Z_k r_i^l P_l(\cos \theta_i) + \sum_k (-1)^{l+1} Z_i r_k^l P_l(\cos \theta_k) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i, k} (-1)^l |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|^l P_l(\cos(\mathbf{r}_i - \widehat{\mathbf{r}_k}, \mathbf{R})) + Z_i Z_k \delta_{l0} \right\} \quad (r_{i, k} < R), \end{aligned} \quad (6.1)$$

где \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_k — координаты электронов в атомных частицах; Z_i , Z_k — заряды ядер; δ_{l0} — символ Кронекера; $\theta_{i(k)}$ — углы между векторами $\mathbf{r}_{i(k)}$ и \mathbf{R} ; $P_l(\cos \theta)$ — полином Лежандра.

В случае взаимодействия иона i с атомом k из (6.1) имеем

$$V(R) = \frac{eZ(D_k n)}{R^2} + \frac{1}{R^3} \left\{ \frac{eZQ_k}{2} - 3(D_i n)(D_k n) + D_i D_k \right\} + O\left(\frac{1}{R^4}\right) + \dots$$

Здесь Z — заряд иона; \mathbf{n} — единичный вектор, направленный по \mathbf{R} ;

$D_{i(k)} = \sum_{i(k)} e \mathbf{r}_{i(k)}$ — оператор дипольного момента атомной частицы $i(k)$;

$Q_k = \sum_k e r_k^2 (1 - 3 \cos^2 \theta_k)$ — оператор квадрупольного момента атома.

Первый член разложения оператора $V(R)$ по степеням $(1/R)$ определяется взаимодействием заряд иона — дипольный мо-

мент атома ($\sim 1/R^2$), далее учитывается взаимодействие заряд иона — квадрупольный момент атома и взаимодействие дипольных моментов частиц ($\sim 1/R^3$) и т. д. Рассматривая взаимодействие атомных частиц в произвольных состояниях по теории возмущений и пользуясь тем, что *усредненные* по всем возможным ориентациям их моментов J_i и J_k значения всех мультипольных моментов обращаются в нуль и соответственно обращаются в нуль в первом приближении теории возмущений все линейные по этим моментам эффекты во взаимодействии этих частиц, получаем для *среднего* потенциала дальнодействующего взаимодействия иона с атомом разложение

$$U(R) = -C_4/R^4 - C_6/R^6 + \dots,$$

где $C_4 = aZe^2/2$; a — поляризуемость атома (см. § 4.3); коэффициент C_6 описывает взаимодействие заряд — квадрупольный момент атома и взаимодействие дипольных моментов во втором порядке теории возмущений и т. п.

При взаимодействии двух атомов из (6.1) имеем

$$\begin{aligned} V(R) &= \frac{1}{R^3} [(\mathbf{D}_i \mathbf{D}_k) - 3(\mathbf{D}_i \mathbf{n})(\mathbf{D}_k \mathbf{n})] + \\ &+ \frac{3e}{2R^4} \left\{ (\mathbf{D}_i \mathbf{n}) \sum_k r_k^2 (5 \cos^2 \theta_k + 1) - (\mathbf{D}_k \mathbf{n}) \sum_i r_i^2 (5 \cos^2 \theta_i - 1) - \right. \\ &\quad \left. - 2 \left[\sum_i (\mathbf{r}_i \mathbf{D}_k) r_i \cos \theta_i + \sum_k (\mathbf{r}_k \mathbf{D}_i) r_k \cos \theta_k \right] \right\} + O(1/R^5) + \dots \end{aligned}$$

Первый член разложения оператора взаимодействия атомов по степеням ($1/R$) определяется взаимодействием дипольных моментов атомов ($\sim 1/R^3$), далее включается взаимодействие дипольных моментов с квадрупольными моментами ($\sim 1/R^4$), потом — дипольных моментов с октупольными моментами плюс взаимодействие квадрупольных моментов ($\sim 1/R^5$) и т. д. Опять же для *усредненного* (по возможным ориентациям моментов J_i и J_k) потенциала дальнодействующего взаимодействия двух атомов в произвольных состояниях получим разложение

$$U(R) = -C_6/R^6 - C_8/R^8 - C_{10}/R^{10} + \dots$$

Здесь *вандерваальсовы коэффициенты* C_{2l+2} описывают соответственно взаимодействие индуцированных дипольных моментов атомов ($C_6 > 0$), дипольных и квадрупольных моментов ($C_8 > 0$), квадрупольных моментов и дипольных моментов с октупольными моментами ($C_{10} > 0$) и т. д.

В табл. 6.1—6.3 приведены значения коэффициентов C_6 , C_8 , C_{10} , характеризующих дальнодействующий потенциал взаимодействия атомных частиц (коэффициент C_6 — также для некоторых

молекулярных частиц). Эти значения распределены по классам точности, определенным в предисловии, и получены в результате численных расчетов в работах [1—5]. Значения коэффициентов C_{2l+2} даны в атомных единицах; для перехода к другим единицам измерения энергии взаимодействия и расстояния R между центрами частиц можно воспользоваться соотношениями:

$$U(R) = 27,212 U(\text{а. е.}) \text{ эВ} = 3,158 \cdot 10^5 U(\text{а. е.}) \text{ К} =$$

$$= -0,5975 [C_6/R^6 (\text{\AA}) + 0,280 C_8/R^8 (\text{\AA}) + 0,0784 C_{10}/R^{10} (\text{\AA})] \text{ эВ} =$$

$$= -6,934 \cdot 10^3 [C_6/R^6 (\text{\AA}) + 0,280 C_8/R^8 (\text{\AA}) + 0,0784 C_{10}/R^{10} (\text{\AA})] \text{ К.}$$

Таблица 6.1
Коэффициент C_6 в мультипольном разложении потенциала взаимодействия атомов, а. е.

АТОМ	H	Li	Na	K	Rb	Cs
H	6,50 (A)	66,5 (A)	72 (B)	105 (B)	119 (C)	146 (C)
Li	—	1390 (A)	1460 (A)	2300 (A)	2550 (B)	3150 (A)
Na	—	—	1540 (B)	2420 (A)	2680 (A)	3310 (B)
K	—	—	—	3880 (A)	4270 (B)	5300 (A)
Rb	—	—	—	—	4700 (B)	5880 (B)
Cs	—	—	—	—	—	7320 (A)
He (1S)	—	—	—	—	—	—
Ne	—	—	—	—	—	—
Ar	—	—	—	—	—	—
Kr	—	—	—	—	—	—
Xe	—	—	—	—	—	—

Продолжение табл. 6.1

АТОМ	He (1S)	Ne	Ar	Kr	Xe
H	2,83 (A)	5,7 (B)	20 (B)	29 (B)	41 (B)
Li	22,3 (B)	43 (B)	178 (B)	260 (B)	407 (B)
Na	24,7 (B)	48 (B)	190 (B)	280 (B)	445 (B)
K	36 (C)	70 (C)	280 (C)	420 (C)	650 (B)
Rb	41 (D)	82 (D)	330 (C)	470 (C)	740 (C)
Cs	50 (D)	99 (D)	380 (D)	570 (C)	890 (C)
He (1S)	1,46 (A)	3,06 (B)	9,7 (B)	13,3 (B)	18,6 (B)
Ne	—	6,6 (C)	20,4 (B)	28 (B)	38 (B)
Ar	—	—	66 (B)	93 (B)	130 (B)
Kr	—	—	—	130 (B)	187 (C)
Xe	—	—	—	—	266 (B)

Продолжение табл. 6.1

Коэффициент C_6 в мультипольном разложении потенциала взаимодействия атомов, а. е.

АТОМ	He	Ne	Ar	Kr	Xe	He* (2^3S)	He* (2^1S)
He* (2^3S)	29,0 (B)	58 (C)	240 (C)	360 (C)	590 (C)	3300 (B)	5800 (B)
He* (2^1S)	41,5 (C)	82 (C)	340 (C)	510 (C)	840 (C)	—	11000 (B)
Be	14,7 (A)	29,4 (B)	111 (B)	165 (B)	259 (B)	—	—
C	7,9 (D)	16 (D)	54 (D)	75 (D)	110 (D)	—	—
N	6,7 (C)	14 (C)	44 (C)	59 (C)	84 (C)	—	—
O	5,6 (C)	12 (C)	35 (C)	47 (C)	65 (C)	—	—
F	4,7 (C)	10 (C)	28 (C)	38 (C)	52 (C)	—	—
Mg	22 (B)	43 (B)	170 (B)	250 (B)	385 (C)	—	—
P	16 (D)	32 (D)	110 (D)	160 (D)	230 (C)	—	—
S	16 (D)	33 (D)	110 (C)	160 (C)	230 (C)	—	—
Cl	14 (D)	28 (C)	90 (C)	120 (C)	180 (C)	—	—
Ca	32 (B)	63 (C)	250 (C)	370 (C)	590 (C)	—	—
Br	18 (D)	37 (D)	120 (D)	170 (D)	240 (D)	—	—
Sr	36,7 (B)	72 (C)	290 (C)	430 (C)	680 (C)	—	—
I	24 (D)	49 (D)	170 (D)	240 (D)	350 (D)	—	—
Ba	39,5 (B)	77 (C)	310 (C)	460 (C)	740 (C)	—	—
Hg	14 (B)	29 (B)	100 (C)	150 (C)	220 (C)	—	—

Коэффициент C_6 в мультипольном разложении потенциала взаимодействия атом-молекула, а. е.

АТОМ	Молекула				
	H ₂	N ₂	O ₂	CO ₂	N ₂ O
H	8,7 (C)	21 (C)	—	33,0 (B)	—
Li	83 (C)	280 (C)	—	278 (C)	—
Na	91 (C)	200 (C)	—	340 (C)	—
K	130 (C)	280 (C)	—	503 (C)	—
Rb	140 (C)	310 (C)	—	574 (C)	—
Cs	170 (C)	370 (C)	—	490 (D)	—
He (1^S)	4,0 (B)	10 (C)	10,8 (B)	16,7 (B)	17 (C)
Ne	8,1 (B)	21 (C)	23 (C)	36 (C)	35 (D)
Ar	28,1 (B)	69 (C)	73 (C)	114 (C)	115 (D)
Kr	40 (B)	96 (C)	101 (B)	162 (C)	160 (C)
Xe	58 (C)	140 (C)	150 (C)	282 (C)	240 (D)

Коэффициент C_6 в мультипольном разложении потенциала взаимодействия молекул, а. е.

Молекула	H ₂	N ₂	O ₂	CO	NO
H ₂	12,1 (B)	31 (B)	30 (C)	34 (C)	32 (C)
N ₂	—	73 (B)	73 (C)	80 (C)	76 (C)
O ₂	—	—	73 (B)	79 (C)	75 (C)
CO	—	—	—	87 (D)	82 (D)
NO	—	—	—	—	77 (D)
CO ₂	46,4 (B)	118 (C)	—	—	—
N ₂ O	48 (C)	—	—	—	—

Таблица 6.2

Коэффициент \tilde{C}_s в мультипольном разложении потенциала взаимодействия атомов, а. е.

Таблица 6.3

Коэффициент C_{10} в мультипольном разложении потенциала взаимодействия атомов, а. е.

§ 6.2. Дальнодействующее обменное взаимодействие атомных частиц

В табл. 6.4 приведены параметры обменного взаимодействия двух одинаковых атомов на далеких расстояниях R . Потенциал взаимодействия двух атомов с замкнутыми электронными оболочками при больших расстояниях между ядрами имеет вид

$$U(R) = U_{\text{дал}}(R) + \Delta(R),$$

где $U_{\text{дал}}(R) = -C_6/R^6 - C_8/R^8 \dots$ — потенциал дальнодействующего взаимодействия атомов; $\Delta(R)$ — потенциал обменного взаимодействия атомов, обусловленный перекрытием их электронных оболочек. В пределе больших расстояний между ядрами потенциал обменного взаимодействия равен

$$\Delta(R) = BR^a \exp(-\beta R),$$

где B , a , β — параметры, представленные в таблице. Потенциал взаимодействия двух атомов со спином $1/2$ следующим образом включает в себя потенциал обменного взаимодействия:

$$U(R) = U_{\text{дал}}(R) \pm (1/2)\Delta(R),$$

где знак минус соответствует нулевому полному спину системы, знак плюс — единичному. В табл. 6.4 даются параметры потенциала обменного взаимодействия двух одинаковых атомов, выраженные в атомных единицах (см. [6]).

Таблица 6.4

Значения параметров потенциала обменного взаимодействия атомов, а. е.

Параметр	Атомы									
	H	He	Li	Be	Ne	Na	Mg	Ag	K	Ca
α	2,5	1,60	4,56	3,22	1,78	4,59	3,63	2,24	5,17	4,16
β	2	2,79	1,26	1,658	2,52	1,252	1,512	2,16	1,134	1,356
B	1,65	7,0	0,044	0,64	5,1	0,024	0,27	7,6	0,0056	0,067

Параметр	Атомы							
	Zn	Kr	Rb	St	Cd	Xe	Cs	Ba
α	3,22	2,30	5,29	4,37	3,30	2,71	5,53	4,64
β	1,66	2,06	1,112	1,304	1,626	1,888	1,072	1,24
B	0,66	6,1	0,0039	0,044	0,60	3,8	0,0016	0,021

§ 6.3. Параметры взаимодействия атомов и молекул в области минимума потенциала взаимодействия

Потенциал взаимодействия атомных частиц при больших расстояниях между ядрами по сравнению с размерами частиц складывается из двух частей: потенциала дальнодействующего элек-

дростатического взаимодействия и потенциала обменного взаимодействия. Дальнодействующее взаимодействие отвечает притяжению частиц (если орбитальный момент одной из них равен нулю), а обменное взаимодействие приводит к отталкиванию, если только частицы не образуют устойчивой химической связи. В итоге результирующий потенциал взаимодействия частиц как функция расстояния между ними имеет минимум, причем энергия взаимодействия в минимуме

$$U(R_m) = -\varepsilon$$

по порядку величины значительно меньше характерных энергий разрыва химических связей, а расстояние между ядрами R_m , отвечающее положению минимума, превышает размеры взаимодействующих частиц.

В табл. 6.5—6.7 приведены параметры ε и R_m потенциалов взаимодействия ряда атомных и молекулярных частиц. Эти данные были получены на основе обработки результатов наблюдений дифференциальных и полных сечений упругого рассеяния частиц, на основе спектроскопических измерений, обработкой данных измерений макроскопических характеристик исследуемых веществ, а также теоретическими расчетами [7—13].

§ 6.4. Короткодействующее взаимодействие атомных и молекулярных частиц

Короткодействующее отталкивательное взаимодействие атомных частиц отвечает расстояниям R между их ядрами, при которых перекрываются их электронные оболочки. Возникающие при этом силы взаимодействия имеют электростатическую и обменную природу, причем потенциал взаимодействия резко изменяется по мере уменьшения расстояния между ними. Это позволяет использовать простые аппроксимационные формулы для потенциала отталкивательного взаимодействия частиц, в частности зависимость экспоненциального вида

$$U(R) = A \exp(-\beta R),$$

так что в рассматриваемой области расстояний ΔR параметры A и β меняются незначительно.

В табл. 6.8 приведены численные значения параметров A и β для взаимодействующих атомных и молекулярных частиц, а также диапазон расстояний между ядрами, в котором используемая аппроксимация справедлива. Представленные данные основаны на измерениях дифференциальных сечений упругого рассеяния при столкновении ионов или атомов с атомами и молекулами, а также на измерениях подвижности ионов в газах [14—19]. Потенциалы взаимодействия частиц, рассчитанные с помощью приведенных параметров, характеризуются в отмеченной области расстояний между частицами погрешностью порядка 20—40%.

Таблица 6.5

Параметры ϵ , 10^{-3} эВ (верхняя цифра) и R_m , Å (нижняя цифра) потенциалов взаимодействия атомов инертного газа в области минимума потенциала

Атом	He	Ne	Ar	Kr	Xe
He	0,92(B) 2,97(B)	1,6(C) 3,2(B)	2,4(C) 3,5(B)	2,5(C) 3,8(C)	2,5(C) 4,1(C)
Ne	1,5(C) 3,1(B)	3,5(C) 3,1(B)	5,8(C) 3,5(C)	6,0(C) 3,7(C)	6,1(C) 3,8(C)
Ar	2,2(C) 3,5(B)	6,2(C) 3,5(B)	12,2(B) 3,76(B)	13(C) 3,9(B)	15(C) 4,1(B)
Kr	2,2(C) 3,7(C)	6,6(C) 3,6(C)	15(C) 3,8(C)	17(C) 4,0(B)	19(C) 4,3(C)
Xe	2,2(C) 4,1(C)	6,5(B) 3,8(C)	16(C) 4,1(C)	—	23(C) 4,4(C)
Li	—	1,0(D) 5,1(C)	5,3(C) 5,0(C)	8,5(C) 4,8(C)	13(C) 4,8(C)
Na	—	1,0(D) 5,3(C)	4,8(C) 5,0(B)	8,6(C) 4,9(C)	13(C) 4,9(C)
K	—	5,6(D) 5,0(D)	5,6(C) 5,0(C)	9,0(C) 5,0(C)	13(D) 5,2(C)
Rb	—	5,4(D) 5,0(D)	5,6(C) 5,2(C)	9,1(D) 5,3(C)	13(D) 5,3(D)
Cs	—	5,0(D) 5,0(D)	5,8(D) 5,2(D)	9,2(D) 5,4(C)	13(D) 5,4(D)
H	0,5(C) 3,7(C)	2,8(D) 3,2(C)	4,4(C) 3,6(B)	6,0(C) 3,7(C)	6,4(C) 3,9(C)
O	2,5(D) 3,1(C)	3,9(D) 3,2(C)	8,2(D) 3,5(C)	9,4(D) 3,6(C)	10(D) 3,7(C)
H ₂	1,3(C) 3,5(C)	3,1(C) 3,3(C)	6,6(C) 3,3(C)	7,8(D) 3,6(C)	8,4(D) 3,9(C)
N ₂	2,4(C) 3,5(C)	5,5(D) 3,6(C)	12(C) 3,8(C)	13(C) 3,9(C)	15(D) 3,9(C)
O ₂	2,6(C) 3,4(B)	5,8(C) 3,4(B)	12(C) 3,7(B)	14(C) 3,9(C)	16(C) 3,9(C)
He*(2 ³ S)	—	1,1(C) 4,8(C)	4,3(C) 5,0(C)	8,0(C) 4,8(C)	—
He*(2 ¹ S)	—	1,3(D) 4,8(C)	3,9(C) 5,1(C)	—	—
Ne*(3P)	—	—	—	8,2(D) 4,9(C)	—

Таблица 6.6

Параметры ϵ , 10^{-3} эВ (верхняя цифра) и R_m , Å (нижняя цифра) потенциалов взаимодействия ионщелочного металла — атом инертного газа в области минимума потенциала

Атом	Ион щелочного металла				
	Li ⁺	Na ⁺	K ⁺	Rb ⁺	Cs ⁺
He	52 (C) 2,1 (C)	40 (D) 2,4 (C)	23 (D) 2,69 (B)	—	—
	120 (C) 2,0 (C)	70 (D) 2,4 (C)	41 (C) 2,8 (B)	—	—
Ar	300 (D) 2,2 (C)	160 (C) 2,7 (C)	123 (C) 2,95 (B)	74 (D) 3,8 (D)	84 (D) 3,6 (C)
	360 (D) 2,3 (C)	200 (D) 2,9 (C)	150 (D) 3,2 (C)	120 (C) 3,34 (B)	120 (C) 3,5 (C)
Xe	—	280 (D) 3,4 (C)	155 (C) 3,4 (C)	130 (D) 4,1 (D)	110 (C) 3,9 (C)

Таблица 6.7

Параметры ϵ , 10^{-3} эВ (верхняя цифра) и R_m , Å (нижняя цифра) потенциалов взаимодействия молекул и атомов щелочного металла с атомами ртути в области минимума потенциала

Молекула	Молекула			Атом	Атом щелочного металла				
	H ₂	N ₂	O ₂		Li	Na	K	Rb	Cs
H ₂	3,0 (B) 3,4 (B)	5,6 (D) 3,5 (C)	5,6 (C) 3,7 (C)	Hg	110 (B) 3,0 (B)	55 (C) 4,7 (C)	52 (C) 4,9 (C)	49 (C) 5,1 (C)	50 (C) 5,1 (C)
	—	3,5 (C) 3,7 (C)	—						
N ₂	—	—	3,8 (D) 3,5 (D)						
	—	—	—						
O ₂	—	—	3,8 (D) 3,5 (D)						
	—	—	—						

Таблица 6.8

Параметры A , β короткодействующего отталкивателяного потенциала взаимодействия $U(R) = A \exp(-\beta R)$

Взаимодействующие частицы	Параметры потенциала		Интервал расстояний ΔR , Å
	A , кэВ	β , Å ⁻¹	
1. Атомы инертного газа			
He — He	0,196	4,21	0,5—2,3
He — Ne	0,318	3,80	1,3—1,65
He — Ar	0,386 0,678	3,38 3,71	1,40—1,81 1,64—2,27
He — Kr	0,373	2,98	1,67—2,04
He — Xe	0,190	2,65	1,73—2,2
Ne — Ne	4,55 44,0 0,103	4,51 6,20 3,94	0,60—1,35 1,35—1,80 1,7—2,18

Продолжение табл. 6.8

Взаимодействующие частицы	Параметры потенциала		Интервал расстояний $\Delta R, \text{ \AA}$
	A, кэВ	$\beta, \text{ \AA}^{-1}$	
Ne — Ar	0,388	2,98	1,93—2,49
Ne — Kr	1,19	3,21	2,25—2,52
Ne — Xe	0,689	2,96	2,0—2,56
Ar — Ar	2,54	3,56	0,8—2,3
	0,180	2,25	2,27—3,12
Ar — Kr	0,789	2,52	2,4—3,1
Ar — Xe	0,210	2,05	2,48—3,27
Kr — Kr	4,8	3,49	1,0—2,25
	0,67	2,6	2,2—3,0
	0,141	1,95	2,42—3,14
Kr — Xe	0,871	2,61	2,44—3,0
Xe — Xe	7,15	3,46	1,2—1,8
	1,64	2,64	2,8—3,3
	1,48	2,41	3,01—3,60

2. Атомы H, O, F — атомы инертного газа

H — He	0,01914	2,29	1,16—1,71
H — Ne	0,0263	2,02	0,78—2,5
H — Ar	0,0176	1,42	1,26—3,0
H — Kr	0,87	4,31	—
H — Xe	3,26	4,63	—
O — He	1,20	5,28	—
O — Ne	0,925	4,25	—
O — Ar	2,94	4,23	—
O — Kr	14,45	5,20	—
O — Xe	0,204	3,6	—
F — He	0,63	4,91	—
F — Ne	2,72	5,18	—
F — Ar	9,78	4,82	—
F — Kr	12,4	5,23	—
F — Xe	27,2	5,38	—

3. Атомные ионы — атомы инертного газа

H ⁺ — He	-0,00636	1,39	0,63—1,59
	-0,0233	2,36	1,59—2,65
H ⁻ — He	0,0181	2,04	0,77—2,0
H ⁻ — Ne	0,0349	2,20	0,73—1,84
H ⁻ — Ar	0,0601	2,23	0,77—2,15
He ⁺ — He	0,0444	2,16	0,9—3,8
Li ⁺ — He	1,208	5,78	1,0—1,2
Li ⁺ — Ne	0,292	3,78	1,25—1,45
Li ⁺ — Ar	0,264	2,80	1,5—1,85
N ⁺ — He	0,0051	1,6	1,9—3,0
O ⁺ — He	0,273	3,8	1,6—1,9
Na ⁺ — He	0,886	4,9	1,4—1,6
Na ⁺ — Ne	0,993	3,74	1,8—2,1
Na ⁺ — Ar	1,861	3,51	1,75—2,0
Ar ⁺ — He	6,159	4,87	2,0—2,15
K ⁺ — He	2,20	4,56	1,18—1,83
	0,651	3,84	1,9—2,1
K ⁺ — Ne	7,85	4,79	1,42—2,02
	0,602	3,21	2,1—2,4
K ⁺ — Ar	8,90	3,96	1,76—2,47
	1,039	2,88	2,1—2,5

Продолжение табл. 6.8

Взаимодействующие частицы	Параметры потенциала		Интервал расстояний $\Delta R, \text{ \AA}$
	$A, \text{ кэВ}$	$B, \text{ \AA}^{-1}$	
Rb ⁺ — He	0,136	2,86	2,1—2,5
Rb ⁺ — Ne	5,697	1,81	4,5—5,2
Rb ⁺ — Ar	0,833	2,60	2,5—2,8
Hg ⁺ — He	0,0018	1,26	2,85—3,4
Hg ⁺ — Ne	0,0027	1,20	3,3—4,0
U ⁺ — He	0,012	1,52	3,9—4,2
O ⁻ — He	1,612	3,00	1,8—2,2
F ⁻ — He	0,094	2,86	1,85—2,4
F ⁻ — Ar	0,704	2,97	1,95—2,15
Cl ⁻ — He	0,438	3,20	2,1—2,3
Cl ⁻ — Ar	0,301	2,25	2,35—2,7
Br ⁻ — He	0,173	2,59	2,4—3,0
Br ⁻ — Ar	0,378	2,25	2,6—3,0
I ⁻ — He	0,150	2,33	2,6—3,2
I ⁻ — Ar	0,343	2,15	2,85—3,2

4. Атомные частицы — молекулярные частицы

H ⁺ — H ₂	0,0246	2,18	0,87—2,0
H — H ₂	1,74	4,52	—
H — O ₂	1,24	4,6	—
He — H ₂	0,21	3,54	—
He — N ₂	0,564	3,46	1,79—2,29
He — N ₂ O	0,55	2,98	—
He — H ₃ ⁺	0,177	3,32	0,89—2,22
He — CO ₂	1,41	3,42	—
N — CO	1,57	3,72	—
N — N ₂	0,62	3,31	—
N — NO	5,33	4,21	—
N — O ₂	3,87	4,13	—
O — H ₂	0,186	3,56	—
O — CO	1,22	3,56	—
O — CO ₂	7,0	3,89	—
O — N ₂	11,35	5,12	—
O — NO	3,14	3,95	—
O — O ₂	10,25	4,85	—
Ne — CO ₂	32,6	4,38	—
Ne — N ₂ O	5,68	3,63	—
Ar — H ₂	0,841	3,01	1,81—2,36
Ar — CO	1,37	2,93	2,09—2,68
Ar — CO ₂	122	4,42	—
Ar — N ₂	1,93	3,09	2,04—2,53
	1,22	3,05	2,28—2,83
Ar — N ₂ O	11,4	3,53	—
Ar — O ₂	6,46	3,70	2,01—2,50
Kr — CO ₂	269	4,55	—
Kr — N ₂ O	22,5	3,63	—
Xe — CO ₂	1058	4,82	—
Xe — N ₂ O	68,3	3,85	—

Продолжение табл. 6.8

Взаимодействующие частицы	Параметры потенциала		Интервал расстояний $\Delta R, \text{ \AA}$
	$A, \text{ кэВ}$	$B, \text{ \AA}^{-1}$	
5. Молекулярные частицы			
$H_2 - H_2$	0,246	3,22	—
$H_2 - H_3^+$	0,0998	2,66	1,48—2,45
$CO - CO$	4,74	3,47	—
$CO - CO_2$	19,2	3,55	—
$CO_2 - CO_2$	44,9	3,43	—
$N_2 - N_2$	2,29	3,16	—
$N_2 - CO$	7,06	3,66	—
$N_2 - CO_2$	30	3,78	—
$N_2 - NO$	5,78	3,64	—
$N_2 - N_2O$	6,77	3,25	—
$N_2 - O_2$	1,43	3,02	—
$NO - CO$	4,28	3,49	—
$NO - NO$	2,16	3,26	—
$O_2 - CO$	2,7	3,15	—
$O_2 - CO_2$	8,72	3,33	—
$O_2 - NO$	7,62	3,78	—
$O_2 - O_2$	0,82	2,85	—
$N_2O - N_2O$	10,8	3,07	—

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Dalgarno A. «Advances Chem. Phys.», 1967, v. 12, p. 143.
- Langhoff P. W., Karplus M. The Padé approximant in theoretical physics. Ch. 2. N. Y., Academic Press, 1970.
- Tang K. T., Norbeck J. M., Certain P. R. «J. Chem. Phys.», 1976, v. 64, p. 3063.
- Ahlberg R., Goscinski O. «J. Phys.», 1974, v. B7, p. 1194.
- Human H. A. «J. Chem. Phys.», 1974, v. 61, p. 4063; Pack R. T. «J. Chem. Phys.», 1974, v. 61, p. 2091.
- Смирнов Б. М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. М., Атомиздат, 1973, гл. 1, 2.
- Buck U. «Advances Chem. Phys.», 1975, v. 30, p. 313; «Rev. Mod. Phys.», 1974, v. 46, p. 369.
- Schlier C. «Ann. Rev. Phys. Chem.», 1969, v. 20, p. 191.
- Weise H. P. «Ber. Bunsenges. Phys. Chem.», 1973, v. 77, p. 578.
- Bernstein R. B., Muckerman J. T. «Advances Chem. Phys.», 1967, v. 12, p. 389.
- Kim Y. S., Gordon R. G. «J. Chem. Phys.», 1974, v. 61, p. 1.
- Koski W. S. «Advances Chem. Phys.», 1975, v. 30, p. 333.
- Fraites J. L., Bentley J., Winicur D. H. «J. Phys.», 1977, v. B10, p. 127.
- Hirschfelder J. O. (ed.) Intermolecular forces. N. Y., J. Wiley, 1967.
- Margenau H., Kestner N. R. Theory of intermolecular forces. 2nd ed. Lond., Pergamon Press, 1971.
- Мэзон Э., Вандерслайс Дж. Упругое рассеяние атомов, молекул и ионов при высоких энергиях. В сб.: Атомные и молекулярные процессы. Под ред. Д. Бейтса, Пер. с англ. М., «Мир», 1964, с. 574.
- Амдур И., Иордан Дж. В сб.: Исследования с молекулярными пучками. Пер. с англ. М., «Мир», 1969, с. 38.
- Леонас В. Б. «Успехи физ. наук», 1972, т. 107, с. 29.
- Бычков В. Л., Радциг А. А., Смирнов Б. М. «Теплофизика высоких температур», 1978, т. 16, с. 713.

Глава 7

ДВУХАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ И ИОНЫ

§ 7.1. Квантовые числа двухатомной молекулы. Электронные конфигурации двухатомных молекул

Состояние отдельного электрона в двухатомной молекуле можно задать четырьмя квантовыми числами: проекцией $\pm\lambda$ орбитального момента электрона на ось молекулы, совпадающую с направлением между центрами ядер (при $\lambda=0, 1, 2, \dots$ говорят о σ -, π -, δ -... электронах, энергия электрона существенно зависит от абсолютного значения проекции момента λ , поскольку в электрическом поле направления вращения электрона эквивалентны); проекцией спина $m_s=\pm 1/2$ на это направление, а также главным (n) и орбитальным (l) квантовыми числами, соответствующими состоянию электрона либо в одном из атомов при стремлении расстояния между продуктами диссоциации молекулы R к ∞ [обозначают такие состояния (λnl) , например $\sigma 2s$, $\pi 3p$ и т. д.], либо в объединенном атоме при $R \rightarrow 0$ [эти состояния электрона обозначают $(nl\lambda)$, например $1s\sigma$, $2p\pi$ и т. д.]. При совпадающих значениях nl электроны называют эквивалентными и в силу принципа Паули число таких σ -электронов ≤ 2 , а при $\lambda \neq 0$ — не превышает четырех. В случае гомоядерной молекулы (построенной из одинаковых атомов) состояния отдельного электрона отличают еще по симметрии его волновой функции относительно операции инверсии в центре симметрии молекулы: четные g -состояния (σ_g , π_g , ...) и нечетные u -состояния (σ_u , π_u , ...), причем первым отвечают четные l , а вторым — нечетные l ($s\sigma$, $d\sigma \rightarrow \sigma_g$; $p\sigma \rightarrow \sigma_u$, $p\pi \rightarrow \pi_u$). Отметим, что проведенная классификация состояний электрона является точной только для двухатомной частицы с одним электроном, поскольку в противном случае лишь приближенно можно считать, что отдельный электрон в молекуле движется в аксиально-симметричном поле ядер и остальных электронов.

Состояния электронной подсистемы в двухатомной молекуле (без учета пока вращения молекулы) классифицируются: по значению сохраняющейся в аксиальном поле ядер проекции полного орбитального момента электронов M_L^* на ось молекулы (при $M_L=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ говорят о Σ -, Π -, Δ -термах, причем энергия электронов в электрическом поле ядер зависит только от абсолютного значения проекции $\Lambda=|M_L|$ и, значит, Σ -термы не вырождены, а Π -, Δ -термы дважды вырождены по $M_L=\pm\Lambda$). По проекции M_S результирующего спина электронов S , который равен целому или полуцелому числу в зависимости от того, четно или нечетно полное число электронов в молекуле, причем несохранение полного спинового момента S обусловлено наличием магнит-

* Как и в случае атомных частиц, моменты измеряются в единицах \hbar — постоянной Планка.

ного поля (при $\Lambda \neq 0$) в направлении оси молекулы от орбитального движения электронов; это поле вызывает прецессию вектора S с постоянной компонентой $M_S = \Sigma$ вдоль оси (значения проекции $\Sigma = S, S-1, \dots, -S$ могут быть как положительными, так и отрицательными, для состояний с $\Lambda = 0$ значение Σ не определено). По проекции полного углового момента электронов Ω относительно оси молекулы, которая получается алгебраическим суммированием проекций Λ и Σ на ось ($\Omega = \Lambda + \Sigma$). При $\Lambda \neq 0$ проекция Ω принимает $2S+1$ различное значение (число $2S+1$ -мультиплетность, указывают вверху перед символом состояния, а значение Ω — в виде нижнего индекса: $^{2S+1}\Lambda_{\Sigma}$, для синглетного терма $S=0$ и $\Omega=\Lambda$, например $^1\Pi_1, ^1\Delta_2$) и в соответствии с тем, что имеется взаимодействие спина S с внутренним магнитным полем, каждой компоненте мультиплета отвечает несколько отличное от других значение электронной энергии. В первом приближении значение электронной энергии мультиплетного терма дается зависимостью: $E^{el} = E^{el}_0 + A\Lambda\Sigma$, где E^{el}_0 — энергия нерасщепленного терма, A — константа, которая быстро растет по мере увеличения числа электронов в молекуле (так, мультиплетное расщепление первого возбужденного $^2\Pi$ -терма для молекулы BeH равно 2 см^{-1} , а для HgH — уже 3678 см^{-1}). При положительном A говорят о «нормальном» терме, при отрицательном A — об «обращенном» и снабжают в этом случае символ терма дополнительным индексом (i). При $\Lambda = 0$ внутреннего магнитного поля в молекуле нет и, значит, Σ -термы не расщеплены, хотя термин «мультиплетность» сохраняется и здесь.

Наличие спина электронов не снимает двойное вырождение состояний с $\Lambda \neq 0$: каждая компонента мультиплета остается дважды вырожденной в любом приближении без учета вращения молекулы; только в случае $\Omega = 0$ вырождение существует в первом приближении, в последующих приближениях тонкое взаимодействие электронов приводит к небольшому расщеплению уровня с $\Omega = 0$ (поэтому $^3\Pi_0$ -состояния, например у галогенов Br₂, I₂ и др., имеют два подуровня с несколько различающимися энергиями, которые для удобства обозначают как $^3\Pi_{0+}$ и $^3\Pi_{0-}$).

Для тяжелых молекул взаимодействие орбитального и спинового моментов становится настолько большим, что независимое квантование векторов орбитального момента электронов L и спина S не имеет места; в этом случае сохраняется проекция Ω полного прецессирующего момента электронов на ось, а сами значения Λ и Σ не определены. Такие состояния классифицируют только по величине проекции Ω и отмечают ее значениями 0, 1/2, 1, ...

Электронные состояния в молекуле классифицируют также по симметрии: а) относительно отражения в плоскости, в которой лежит ось молекулы (дважды вырожденные состояния с $\Lambda \neq 0$ и Σ^+, Σ^- -термы соответственно для состояний, электронная волновая функция которых не меняет и меняет знак при данной операции симметрии); б) относительно инверсии электронов в гомо-

ядерной молекуле через точку на середине оси молекулы (*g*-термы отмечают состояния, электронная волновая функция которых остается при этом преобразовании координат неизменной, *u*-термы соответствуют состояниям, волновая функция которых меняет знак). Напомним также, что нормальное электронное состояние принято обозначать буквой *X* перед символом терма, возбужденные состояния той же мультиплетности нумеруются обычно по порядку заглавными буквами *A*, *B*, *C*... латинского алфавита, а строчные буквы *a*, *b*, *c*... перечисляют возбужденные состояния с мультиплетностью, отличной от основного уровня (например, $X^1\Sigma_g^+$, $b^3\Pi_{1u}$).

Подробное изложение затронутых выше вопросов можно найти в монографиях [1—3].

В табл. 7.1 собрана информация о структуре электронных конфигураций, отвечающих наиболее хорошо изученным термам двухатомных молекул и ионов. Чтобы не загромождать графы таблицы повторяющимися символами молекулярных орбиталей, использовалась запись МО-конфигураций с помощью «чисел заполнения» орбиталей. В отдельной графе указаны состояния продуктов диссоциации молекулярных частиц.

Таблица 7.1
Термы и строение электронных оболочек двухатомных частиц

Молекула	Электронный терм	Конфигурация молекулярных орбиталей	Состояния продуктов диссоциации
B_2	$X^3\Sigma_g^-$	$1\sigma^2_g \ 1\sigma^2_u \ 2\sigma^2_g \ 2\sigma^2_u \ 1\pi^2_u$	${}^2P + {}^2P$
BF	$X^1\Sigma^+$	$1\sigma^2 \ 2\sigma^2 \ 3\sigma^2 \ 4\sigma^2 \ 1\pi^4 \ 5\sigma^2$	$\text{B}({}^2P) + \text{F}({}^2P)$
BH	$X^1\Sigma^+$	$1\sigma^2 \ 2\sigma^2 \ 3\sigma^2$	$\text{B}({}^2P) + \text{H}({}^2S)$
BO	$X^2\Sigma^+$	$1\sigma^2 \ 2\sigma^2 \ 3\sigma^2 \ 4\sigma^2 \ 1\pi^4 \ 5\sigma$	$\text{B}({}^2P) + \text{O}({}^3P)$
C_2	$A^1\Pi_u$	$2 \ 2 \ 2 \ 2 \ (\pi_u 2p)^3 (\sigma_g 2p)$	${}^3P + {}^3P$
	$b^3\Sigma_g^-$	$2 \ 2 \ 2 \ 2 \ (\pi_u 2p)^2 (\sigma_g 2p)^2$	${}^3P + {}^3P$
	$a^3\Pi_u$	$2 \ 2 \ 2 \ 2 \ (\pi_u 2p)^3 (\sigma_g 2p)$	${}^3P + {}^3P$
	$X^1\Sigma_g^+$	$(\sigma_g \ 1s)^2 (\sigma_u \ 1s)^2 (\sigma_g \ 2s)^2 (\sigma_u \ 2s)^2 (\pi_u \ 2p)^4$	${}^3P + {}^3P$
C_2^-	${}^2\Sigma_g^+$	$(\sigma_g \ 1s)^2 (\sigma_u \ 1s)^2 (\sigma_g \ 2s)^2 (\sigma_u \ 2s)^2 (\pi_u \ 2p)^4 (\sigma_g \ 2p)$	$\text{C}({}^3P) + \text{C}^-({}^4S)$
CF	$X^2\Pi_r$	$1\sigma^2 \ 2\sigma^2 \ 3\sigma^2 \ 4\sigma^2 \ 1\pi^4 \ 5\sigma^2 \ 2\pi$	$\text{C}({}^3P) + \text{F}({}^2P)$
CH	$X^2\Pi$	$1\sigma^2 \ 2\sigma^2 \ 3\sigma^2 \ 1\pi$	$\text{C}({}^3P) + \text{H}({}^2S)$
CN	$A^2\Pi_i$	$2 \ 2 \ 2 \ 2 \ 1\pi^3 \ 5\sigma^2$	$\text{C}({}^3P) + \text{N}({}^4S)$
	$X^2\Sigma^+$	$1\sigma^2 \ 2\sigma^2 \ 3\sigma^2 \ 4\sigma^2 \ 1\pi^4 \ 5\sigma$	$\text{C}({}^3P) + \text{N}({}^4S)$

Продолжение табл. 7.1

Молекула	Электронный терм	Конфигурация молекулярных орбиталей	Состояния продуктов диссоциации
CO	$A^1\Pi$	2 2 2 2 1 π^4 5 σ 2 π	C (3P) + O (3P)
	$I^1\Sigma^-$	2 2 2 2 1 π^3 5 σ^2 2 π	C (3P) + O (3P)
	$e^3\Sigma^-$	2 2 2 2 1 π^3 5 σ^2 2 π	C (3P) + O (1P)
	$d^3\Delta_i$	2 2 2 2 1 π^3 5 σ^2 2 π	C (3P) + O (3P)
	$a' {}^3\Sigma^+$	2 2 2 2 1 π^3 5 σ^2 2 π	C (3P) + O (3P)
	$a^3\Pi_r$	2 2 2 2 4 5 σ 2 π	C (3P) + O (3P)
CO ⁺	$X^1\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2 3 σ^2 4 σ^2 1 π^4 5 σ^2	C (3P) + O (3P)
	$X^2\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2 3 σ^2 4 σ^2 1 π^4 5 σ	C+ (2P) + O (3P)
F ₂	$X^1\Sigma_g^+$	1 σ^2_g 1 σ^2_u 2 σ^2_g 2 σ^2_u 3 σ^2_g 1 π^4_u 1 π^4_g	2P + 2P
H ₂	$E^1\Sigma_g^+$	(1s σ) (2s σ)	2S + 2P
C ₂	$C^1\Pi_u^-$	(1s σ) (2p π)	2S + 2P
	$a^3\Sigma_g^+$	(1s σ) (2s σ)	2S + 2P
	$c^3\Pi_u$	(1s σ) (2p π)	2S + 2P
	$B^1\Sigma_u^+$	(1s σ) (2p σ)	2S + 2P
	$X^1\Sigma_g^+$	(1s σ) ²	2S + 2S
H ₂ ⁺	$X^2\Sigma_g^+$	1s σ_g	H (2S) + H ⁺
HCl	$X^1\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2 3 σ^2 1 π^4 4 σ^2 5 σ^2 2 π^4	H (2S) + Cl (2P)
HF	$X^1\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2 3 σ^2 1 π^4	H (2S) + F (2P)
He ₂	$B^1\Pi_g$	(1s σ) ³ (2p π)	1S + 21P
	$b^3\Pi_g$	(1s σ) ³ (2p π)	1S + 23P
	$A^1\Sigma_u^+$	(1s σ) ³ (2s σ)	1S + 21S
	$a^3\Sigma_u^+$	(1s σ) ³ (2s σ)	1S + 23S
HeH ⁺	$X^1\Sigma^+$	(1 σ) ²	He (1S) + H ⁺
Li ₂	$X^1\Sigma_g^+$	1 σ^2_g 1 σ^2_u 2 σ^2_g	2S + 2S
LiF	$X^1\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2 3 σ^2 4 σ^2 1 π^4	Li (2P) + F (2P)
LiH	$X^1\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2	Li (2S) + H (2S)
MgH	$X^2\Sigma^+$	1 σ^2 2 σ^2 1 π^4 3 σ^2 4 σ^2 5 σ	Mg (1S) + H (2S)

Продолжение табл. 7.1

Молекула	Электронный терм	Конфигурация молекулярных орбиталей	Состояния продуктов диссоциации
N ₂	w ¹ Δ _u	2 2 2 2 1π ³ _u 3σ ² _g 1π _g	² D ⁰ + ² D ⁰
	a ¹ Π _g	2 2 2 2 1π ⁴ _u 3σ _g 1π _g	² D ⁰ + ² D ⁰
	a' ⁻¹ Σ _u	2 2 2 2 1π ³ _u 3σ ² _g 1π _g	² D ⁰ + ² D ⁰
	B' ⁻³ Σ _u	2 2 2 2 1π ³ _u 3σ ² _g 1π _g	⁴ S ⁰ + ² P ⁰
	W ³ Δ _u	2 2 2 2 1π ³ _u 3σ ² _g 1π _g	⁴ S ⁰ + ² D ⁰
	B ³ Π _g	2 2 2 2 1π ⁴ _u 3σ _g 1π _g	⁴ S ⁰ + ² D ⁰
	A ³ Σ _u ⁺	2 2 2 2 1π ³ _u 3σ ² _g 1π _g	⁴ S ⁰ + ⁴ S ⁰
	X ¹ Σ _g ⁺	1σ ² _g 1σ ² _u 2σ ² _g 2σ ² _u 1π ⁴ _u 3σ ² _g	⁴ S ⁰ + ⁴ S ⁰
N ₂ ⁺	X ² Σ _g ⁺	1σ ² _g 1σ ² _u 2σ ² _g 2σ ² _u 1π ⁴ _u 3σ _g	N(⁴ S ⁰) + N ⁺ (³ P)
NF	X ³ Σ ⁻	1σ ² 2σ ² 3σ ² 4σ ² 1π ⁴ 5σ ² 2π ²	N(⁴ S ⁰) + F(² P)
NH	X ³ Σ ⁻	1σ ² 2σ ² 3σ ² 1π ²	N(⁴ S ⁰) + H(² S)
NO	X ² Π _r	(1sσ) ² (2sσ) ² (2pσ) ² (2pπ) ⁴ (3sσ) ² (3pσ) ² (3pπ)	N(⁴ S ⁰) + O(³ P)
NO ⁺	X ¹ Σ ⁺	(1sσ) ² (2sσ) ² (2pσ) ² (2pπ) ⁴ (3sσ) ² (3pσ) ²	N(⁴ S ⁰) + O ⁺ (⁴ S)
NO ⁻	X ³ Σ ⁻	(1sσ) ² (2sσ) ² (2pσ) ² (2pπ) ⁴ (3sσ) ² (3pσ) ² (3pπ) ²	N(⁴ S ⁰) + O ⁻ (² P)
NaH	X ¹ Σ ⁺	1σ ² 2σ ² 1π ⁴ 3σ ² 4σ ²	Na(² S) + H(² S)
O ₂	B ³ Σ _u ⁻	2 2 2 2 2 1π ³ _u 1π ³ _g	(³ P + ¹ D) _{pr}
	A ³ Σ _u ⁺	2 2 2 2 2 1π ³ _u 1π ³ _g	³ P + P ³
	c ¹ Σ _u ⁻	2 2 2 2 2 1π ³ _u 1π ³ _g	³ P + P ³
	b ¹ Σ _g ⁺	2 2 2 2 2 4 2	³ P + P ³
	a ¹ Δ _g	2 2 2 2 2 4 2	³ P + P ³
	X ³ Σ _g ⁻	1σ ² _g 1σ ² _u 2σ ² _g 2σ ² _u 3σ ² _g 1π ⁴ _u 1π ² _g	³ P + P ³
O ₂ ⁺	X ² Π _{g, i}	1σ ² _g 1σ ² _u 2σ ² _g 2σ ² _u 3σ ² _g 1π ⁴ _u 1π _g	O(³ P) + O ⁺ (⁴ S)
O ₂ ⁻	X ² Π _{1/2, g}	1σ ² _g 1σ ² _u 2σ ² _g 2σ ² _u 3σ ² _g 1π ⁴ _u 1π ³ _g	O(³ P) + O ⁻ (² P)
OH	A ² Σ ⁺	1σ ² 2σ ² 3σ 1π ⁴	O(³ P) + H(² S)
	X ² Π _i	1σ ² 2σ ² 3σ ² 1π ³	O(³ P) + H(² S)
OH ⁺	X ³ Σ ⁻	1σ ² 2σ ² 3σ ² 1π ²	O ⁺ (⁴ S) + H(² S)
SO	X ³ Σ ⁻	(1sσ) ² (2sσ) ² (2pσ) ² (2pπ) ⁴ (3sσ) ² (3pσ) ² (3pπ) ⁴ × (4sσ) ² (4pσ) ² (4pπ) ⁴	S(³ P) + O(³ P)

§ 7.2. Параметры состояний двухатомных молекул и молекулярных ионов

Пояснение обозначений и единиц измерения.

1. Полная энергия молекулы в данном состоянии: $T = T_e + G(v) + F_v(J)$, где T_e — электронная, $G(v)$ — колебательная, $F_v(J)$ — вращательная энергии.
2. $G(v) \approx \omega_e(v+1/2) - x_e\omega_e(v+1/2)^2$, где v — колебательное квантовое число, ω_e — энергия колебательного квантца, $x_e\omega_e$ — постоянная ангармонизма.
3. $F_v(J) \approx B_v J(J+1)$, где J — вращательное квантовое число, $B_v \approx B_e - \alpha_e(v+1/2)$, B_e — вращательная постоянная.
4. Индексы e и 0 относятся соответственно к положению минимума энергии и нулевому колебательному уровню.
5. Волновое число для перехода между двумя состояниями равно $\nu = T' - T'' = T'_e + G' + F' - (T''_e + G'' + F'')$; для данной системы полос $\nu_e = T'_e - T''_e = \text{const}$ — энергия электронного перехода; для перехода между двумя колебательными состояниями v' и v'' : $\nu_{v', v''} = \nu_e + \omega'_e(v'+1/2) - x'_e\omega'_e(v'+1/2)^2 + \dots - [\omega''_e(v''+1/2) - x''_e\omega''_e(v''+1/2)^2 + \dots]$ и если $v' = v'' = 0$, то $\nu_{00} = \nu_e + 1/2(\omega'_e - \omega''_e) - \frac{1}{4}(x'_e\omega'_e - x''_e\omega''_e) + \dots$, так что $\nu_{v', v''} \approx \nu_{00} + \omega'_e v' - x'_e \omega'_e v'^2 - (\omega''_e v'' - x''_e \omega''_e v''^2)$, где $\omega_0 \approx \omega_e - x_e\omega_e$, $x_0\omega_0 \approx x_e\omega_e$; для перехода в пределах одного электронного состояния между двумя соседними колебательными состояниями $v+1$ и v при неизменном вращательном состоянии: $\Delta G_{v+1/2} = G(v+1) + F_{v+1}(J) - G(v) - F_v(J) \approx \omega_e - 2x_e\omega_e(v+1)$ и если $v = 0$, то $\Delta G_{1/2} \approx \omega_e - 2x_e\omega_e \approx \omega_0 - x_0\omega_0$.
6. Наблюдаемый электронный переход в излучении обозначают стрелкой \rightarrow , в поглощении \leftarrow , в излучении и поглощении \rightleftharpoons .
7. Силовая постоянная двухатомной молекулы $k_e = \mu\omega_e^2 \approx 5,892 \cdot 10^{-2} \mu\text{a}\omega_e^2$ дин, где ω_e измеряется в см^{-1} , а приведенная масса молекулы μ в а.е.м.
8. В тех случаях, когда в таблицу включались значения величин, отличавшихся от обозначенных в заголовке, мы пользовались дополнительными метками (* или **): одна звездочка в графах для T_e , r_e , ω_e , $x_e\omega_e$ и B_e обозначает соответственно величины T_0 , r_0 , ω_0 , $x_0\omega_0$ и B_0 ; две звездочки в графах для T_e и ω_e обозначают соответственно величины ν_{00} и $\Delta G_{1/2}$.

Табл. 7.2 параметров двухатомных частиц составлена по данным справочных изданий [4—7]. В табл. 7.3 представлены параметры ряда возбужденных состояний молекул инертных газов.

Параметры состояний двухатомных молекул и молекулярных ионов

Таблица 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума $T_e, \text{ см}^{-1}$	Равновесное расстояние $r_e, \text{ \AA}$	Кольцевой квантовый квант $\Phi_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная ангармонизма $x_e \omega_e, \text{ см}^{-1}$	Вращательная постоянная постоянна $B_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная связи $\alpha_e, 10^{-3} \text{ см}^{-1}$	Силовая постоянная $k_e, 10^5 \frac{\text{дин}}{\text{см}}$	Наблюдаемый электронный переход μ_A' а. е. м.	Приведенная масса μ_A'
Ag ₂	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,5	207,0	0,64	0,496	0,19	1,36	—	53,93
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,281	343,4	1,15	0,123	0,6	1,85	—	26,68
	$X^1\Sigma_g^+$	0	1,986*	508,3**	2,59	0,265*	1,9	2,46	—	16,15
	$C^1\Pi$	41261	1,587	1589	42	6,70	310	1,49	$C \leftarrow X$	—
	$A^1\Sigma^+$	29959	1,641	1663	87,0	6,265	348	1,63	$A \rightleftharpoons X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	1,618	1759	34,1	6,449	201	1,82	—	0,999
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,544	206,5	0,44	0,0449	0,15	1,46	—	58,31
	$X^2\Pi_{1/2}$	0	2,003	490,2	3,1	0,3020	2,5	1,97	—	13,93
Al ₂	$A^3\Sigma_u^-$	17269,3	2,467	278,8	0,83	0,1907	1,3	0,62	$A \rightarrow X$	—
	$X^3\Sigma_g^-$	0	2,560	350,0	2,02	0,2054	1,2	0,97	—	13,49
AlBr	$A^1\Pi$	35879,5	2,32	297,2	6,40	0,1555	2,13	1,05	$A \rightleftharpoons X$	—
	$a^3\Pi_1$	23792,4	2,257	410,3	1,75	0,1646	1	2,00	$a_2 \rightarrow X$	—
	$a^3\Pi_0$	23662,7	2,259	411,2	1,75	0,1643	—	2,01	$a_1 \rightarrow X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,295	378,2	1,33	0,1591	—	1,70	$b \rightarrow a$	20,17
	$b^3\Sigma$	~43590	2,21*	~350	—	0,226*	6	1,11	$A \rightleftharpoons X$	—
	$A^1\Pi$	38254,0	2,07	450,0	4,37	0,259	1,83	—	$x \rightarrow w$	—
	$a^3\Pi$	{ 24658 24594 24528 } 0	2,10 2,17 2,17	524,4 0,250	2,17 0,250	2	2,48	—	$a \rightarrow X$	—
AlF	$X^1\Sigma_g^+$	66981,1	—	481,3	1,95	0,2477	1,60	2,09	—	15,32
	$Z^3\Sigma_g^+$	65876,2	—	—	—	0,5955*	—	—	—	—
	$d^3\Pi$	65087,6	—	938,9**	—	0,5912*	4,7	5,79	—	—
	$x^3\Sigma_g^+$	63271,7	—	—	—	0,5948*	—	—	—	—
	C							5,68		

	$b \rightarrow a$	$w \rightarrow a$	
$\beta^3\Sigma^+$	5,76	4,06	
$w^3\Sigma^+$	4,54	4,50	
$a^3\Pi_g$	6,7	—	
$H^1\Sigma^+$	0,5865*	0,5594*	$H \leftarrow X, H \rightarrow A, B$
$G^1\Sigma^+$	0,5563*	0,55921*	$G \leftarrow X, G \rightarrow A, B$
$F^1\Pi$	—	—	$F \leftarrow X, F \rightarrow A, B$
$E^1\Pi$	—	—	$E \leftarrow X, E \rightarrow A$
$D^1\Pi$	—	—	$D \leftarrow X, D \rightarrow A$
$C^1\Sigma^+$	—	—	$C \leftarrow X, A$
$B^1\Sigma^+$	—	—	$B \rightarrow X$
$A^1\Pi$	—	—	$A \rightarrow X$
$X^1\Sigma^+$	—	—	$E \rightleftarrows X, E \rightarrow A$
$E^1\Pi$	—	—	$D \rightleftarrows X, C \rightarrow X, A$
$D^1\Sigma^+$	—	—	$A \rightleftarrows X$
$C^1\Sigma^+$	—	—	$a_2 \rightleftarrows X$
$A^1\Pi$	—	—	$a_1 \rightleftarrows X$
$X^1\Sigma^+$	—	—	$E \rightarrow A$
$E^1\Pi$	—	—	$D \rightleftarrows X, D \rightarrow B, A$
$D^1\Sigma^+$	—	—	$C \rightleftarrows X, D \rightarrow B, C \rightarrow B$
$C^1\Sigma^+$	—	—	$B \rightleftarrows X$
$A^1\Pi$	—	—	$C \leftarrow X$
$X^1\Sigma^+$	—	—	$A \rightarrow X$
$a_2^3\Pi_u$	—	—	$A \rightarrow X$
$a_1^3\Pi_u$	—	—	$A \rightarrow X$
$X^1\Sigma^+$	—	—	$E \rightarrow A$
$E(^2\Sigma)$	—	—	$D \rightleftarrows X, D \rightarrow B, A$
$D^2\Sigma^+$	—	—	$C \rightleftarrows X, D \rightarrow B, C \rightarrow B$
$C^2\Pi_g$	—	—	$B \rightleftarrows X$
$B^2\Sigma^+$	—	—	$C \leftarrow X$
$A^2\Pi_l$	—	—	$A \rightarrow X$
$X^2\Sigma^+$	—	—	$A \rightarrow X$
$C^2\Sigma$	—	—	$C \leftarrow X$
$A^2\Sigma$	—	—	$A \rightarrow X$
$X^2\Sigma$	—	—	$A \rightarrow X$
$A^2\Sigma$	—	—	$A \rightarrow X$
$X^2\Sigma$	—	—	$A \rightarrow X$
$X^1\Sigma_g$	—	—	$A \rightarrow X$
$A^1\Sigma_u$	—	—	$A \rightleftarrows X$
$d(^3\Pi_g)$	—	—	$d \rightarrow X, c$

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума T_e , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант ω_e , см $^{-1}$	Постоянная ангармонизма $x_{e\omega_e}$, см $^{-1}$	Постоянная азотной монизмы $x_{e\omega_e}$, см $^{-1}$	Вращательная постоянная B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$		Силовая постоянная k_e , 10 6 дин/см	Наблюдаемый переход	Приведенная масса μ_A , э. с. м.
								Постоянная связь α_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$			
AsF	$a^3\Sigma_u^+$	24641	2,279	337,0	0,83	0,0867	0,30	2,51	—	—	$a \rightarrow X$, c	—
	$e^3\Sigma_u^+ (0^-)$	14643	2,302	314,3	1,09	0,0849	0,35	2,18	—	—	$c \rightarrow X$	—
	$e^3\Sigma_u^+ (1_u)$	14479	2,305	314,3	1,09	0,0847	0,35	2,18	—	—	$c \rightarrow X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,104	429,6	1,12	0,1018	0,333	4,07	—	—	37,46	—
	$d^1\Pi$	50686,43*	1,667	~819	—	~0,4	—	—	—	—	$d \rightleftharpoons X_2$, $d \rightarrow a$, b	—
	$C^3\Sigma^-$	49888*	—	—	—	—	—	—	—	—	$C \rightleftharpoons X$, $c \rightarrow a$, b	—
	$c^1\Pi$	48737,92*	1,667	817,3	4,89	0,4004	2,7	—	—	—	$B \rightarrow X$	—
	$B^3\Pi$	48275,92*	—	815,5	3,96	—	—	—	—	—	$c' \rightarrow a$, b	—
	$c'^1\Pi$	33129*	1,947	399,0	1,4	$B_1 = 0,2905$	—	—	—	—	$b \rightarrow X_1$, X_2	—
	$b^1\Sigma^+$	13654,36*	1,729	679,3	3,08	0,3719	1,8	—	—	—	—	—
AsN	$a^1\Delta$	7057,83*	1,732	694,4	3,06	0,3707	2,8	4,12	—	—	—	—
	$X_1^3\Sigma^-(1)$	138,58*	1,736	685,5	2,95	0,3691	2,5	4,31	—	—	—	—
	$X_2^3\Sigma^-(0^+)$	0	1,746	685,8	3,12	0,3682	2,8	4,20	—	—	—	—
	$A^1\Pi$	35900,8*	1,709*	871,3	8,24	~0,4891*	2,4	4,20	—	—	15,155	—
	$^1\Sigma^+$	29124,9*	1,688*	—	—	0,5011*	—	—	—	—	$A \rightarrow X$	—
AsO	$X^1\Sigma^+$	0	1,620*	1068	5,36	0,5447*	—	—	—	—	$^1\Sigma^+ \rightarrow X$	—
	$B^2\Sigma^+$	39866,2	1,576	1098	6,0	0,5146	3,6	7,93	—	—	$B \rightleftharpoons X$	—
	$C^2\Delta_{5/2}$	38687	1,755	(656,3)	4,8	0,4151	5,4	9,36	—	—	$C \rightarrow X$	—
	$C^2\Delta_{3/2}$	38637	{ 1,768	—	—	0,4090	3,35	—	—	—	$D \rightarrow X$	—
	$D^2\Sigma^-$	37555,4	1,795	629,9	3,79	0,3971	3,37	3,08	—	—	$H \rightarrow X$	—
$H^2\Pi_{3/2}$	37053	1,871	—	—	5	0,3654	2,7	≥2,86	—	—	—	—
	$G^2\Pi$	—	(1,928)	—	—	>573	1,5	>2,55	—	—	—	—

		$A' \rightarrow X$			
$A^{2\Sigma+}$	31652,45	1,663	686,7	10,8	0,4624
$A'^2\Pi_{1/2}$	26484,7	1,855	633,0	3,5	0,3715
$A'^2\Pi_{3/2}$	26168,6	—	—	—	2,6
$X^2\Pi_{3/2}$	1025,97	1,624	966,2	4,98	0,4851
$X^2\Pi_{1/2}$	0	1,623	966,9	4,78	0,4853
$A'^2\Pi_{1/2}$	18621,0*	2,250	405,6	1,11	0,1486
$X^2\Pi_{3/2}$	0	2,022	562,3	2,01	0,1841
B^+_u	25679,87*	2,517	179,8	0,680	0,027
A^+_u	19668,1	2,568	142,3	0,445	0,026
$X^1\Sigma_g^+$	0	2,472	190,9	0,420	0,028
$B^+(0^+)$	38546	1,695	1693	74,3	5,849
$A^+(0^+)$	27665,7	1,673	1670	55,1	6,007
$X^1\Sigma^+$	0	1,524	2305	43,1	7,240
$^3\Sigma_u^-$	30573,4	1,625	937,4	2,6	1,160
$X^3\Sigma_g^-$	0	1,589	1051	9,4	1,212
A^{Π}	33935,3	1,87	637,6	17,6	0,501
$a^3\Pi_{0,1}$	18851	—	757,2	4,8	0,50*
$X^1\Sigma^+$	0	1,89	684,3	3,52	0,490
A^{Π}	36754,1	1,689	849,0	11,4	0,7054
$a^3\Pi_1$	20200	—	911	5,8	0,699
$X^1\Sigma$	0	1,716	839,1	5,11	0,6838
$(5p\pi)^1\Pi$	84217*	(1,210*)	(1675**)	(1,651*)	—
$(5p\sigma)^1\Sigma^+$	83817,71*	(1,219*)	(1675**)	(1,628*)	—
$(5s\sigma)^1\Sigma^+$	82650,21*	(1,246*)	—	(1,557*)	—
$(4p\pi)^1\Pi$	80681,98*	1,210*	(1673**)	—	—
$(4p\sigma)^1\Sigma^+$	79763,28*	1,215	1667**	12,7	1,638*
$(3d\sigma)^1\Sigma^+$	78691,21*	(1,210*)	—	(1,651*)	0,016
$(3d\pi)^1\Pi$	77542,79*	(1,202*)	—	(1,672*)	0,017
AsS					
Au₂					
AuH					
B₂					
BBr					
BCI					
BF					

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума $T_e, \text{ см}^{-1}$	Равновесное расстояние $r_e, \text{ \AA}$	Колебательный квант Φ_e , см^{-1}	Постоянная ангар- монизма $x_e \omega_e$, см^{-1}	Вращательная постоянная $B_e, \text{ см}^{-1}$	Постоян- ная связи $\alpha_e, 10^{-3}$ см^{-1}	Силовая по- стоянная k_e , 10^5 дин см	Изображаемый электронный переход	Приведен- ная масса μ_A , а. е. м.
BH	$(4s\sigma)^1\Sigma^+$	77096,41*	1,227*	(1686**)	—	—	1,605*	0,015	11,5	—
	$(3d\delta)^1\Delta$	76384,43*	(1,222*)	—	—	—	(1,621*)	—	—	—
	$(3p\pi)^1\Pi$	72286,05*	1,218*	(1,673**)	14	1,628*	0,017	—	11,4	—
	$(3p\sigma)^1\Sigma^+$	69135,19*	1,221*	1613**	14,5	1,624*	0,019	—	10,6	—
	$(3s\sigma)^1\Sigma^+$	65499,42*	1,208*	1693**	12,4	1,659*	0,018	—	11,6	—
	$A^1\Pi$	51088,66*	1,304*	1265**	12,5	1,423*	0,018	—	6,50	—
	$X^1\Sigma^+$	0	1,263*	1402**	11,8	1,517*	0,020	—	6,89	—
	$C^1\Sigma^+$	55333,69	1,224*	2475	54,4	12,41	432	3,33	$C \leftarrow X, C \rightarrow A$	—
	$B^1\Sigma^+$	52346,64	1,216	2400	69,5	12,34	485	3,13	$B \rightleftharpoons X, B \rightarrow A$	—
	$C^1\Lambda$	46103,2	—	2610	46,6	12,76	390	3,70	$C' \leftarrow A$	—
BN	$A^1\Pi$	23073,96	1,223	2251	56,7	12,30	834	2,75	$A \rightarrow X$	0,922
	$X^1\Sigma^+$	0	1,236	2367	42,4	12,02	412	3,04	$C \rightarrow X$	—
	$A^3\Pi$	27850	1,326	1318	14,9	1,555	10	6,24	$A \rightarrow X$	—
	$X^3\Pi$	0	1,281	1515	12,3	1,666	25	8,25	$C \rightarrow X$	6,10
	$C^3\Pi$	55346,1	1,320	1315	11,1	1,484	17,0	6,58	$B \rightleftharpoons X, A$	—
BC	$B^2\Sigma^+$	43174,0	1,305	1282	10,7	1,517	21,0	6,24	$A \rightarrow X$	—
	$A^2\Pi$	23958,85	{ } 1,352	1261	11,2	1,413	19,6	6,04	$D \rightarrow A$	—
	$X^2\Sigma^+$	23836,49	{ } 1,204	1886	11,8	1,782	16,6	13,5	$C \rightarrow X$	—
	$D^2\Delta_l$	47481*	—	676	—	0,60*	—	2,18	$D \rightarrow A$	—
	$C^2\Pi_l$	38897,28***	{ } 1,712*	892,6	6,74	0,7025*	—	3,80	$C \rightarrow X$	—
BS	$B^2\Sigma^+$	38781,93***	{ } 35849*	—	763	—	0,6311*	—	2,77	$B \rightarrow A$
	$A^2\Pi_l$	15996,34***	{ } 1,818	753,4	4,62	0,6229	5,9	2,70	$A \rightarrow X$	—
	$X^2\Sigma^+$	15662,73***	{ } 1,609	1180	6,31	0,7948	6,0	6,63	$E \rightleftharpoons X$	8,085
	$E^2\Sigma^+$	28174,45*	2,10*	538,4	1,90	0,2290*	—	2,85	$D \rightleftharpoons X$	—
	$D^2\Sigma^+$	26222,3	$r_{v=1}=$	504,9	1,54	$B_1=0,2269$	—	2,51	$D \rightleftharpoons X$	—
BaF	$D^2\Sigma^+$	24176,54*	2,108*	508,4	1,88	0,2273*	—	2,54	$D \rightleftharpoons X$	—

$C^2\Pi$	$20197,2$	$0,2136$	$C \leftrightarrow X$
$B^2\Sigma^+$	$19993,5$	$-$	$B \leftrightarrow X$
$A^2\Pi_{3/2}$	$14040,21^*$	$2,206^*$	$A \leftrightarrow X$
$A^2\Pi_{1/2}$	$12262,09^*$	$-$	$-$
$X^2\Sigma^+$	$1,65$	$1,65$	$-$
$F_2\Sigma$	$424,4$	$1,88$	$F \leftrightarrow X$
$C^2\Sigma$	$436,7$	$1,82$	$C \leftrightarrow X$
$D^2\Sigma$	$23712,4^*$	$2,165$	$D \leftrightarrow X$
$E^2\Pi_{3/2}$	$T_1 = 21955,5$	$3,22$	$E \leftrightarrow X$
$E^2\Pi_{1/2}$	15085^*	$2,176$	$B \leftrightarrow X$
$B^2\Sigma$	$1,68$	$1,68$	$A \leftrightarrow X$
$A^2\Pi_{3/2}$	$435,5$	$1,68$	$-$
$A^2\Pi_{1/2}$	$2,182^*$	$-$	$-$
$X^2\Sigma^+$	$2,163^*$	$2,163^*$	$2,07$
$F_2\Sigma$	$30747,91^*$	$-$	$1,77$
$C^2\Sigma$	$—$	$—$	$1,88$
$D^2\Sigma$	$—$	$—$	$1,87$
$E^2\Pi_{3/2}$	$1,68$	$0,2118^*$	$16,69$
$E^2\Pi_{1/2}$	0	$0,2118^*$	$—$
$X^2\Sigma^+$	$468,9$	$1,79$	$0,2164^*$
$F_2\Sigma$	$—$	$—$	$0,97$
$C^2\Sigma$	1282	15	$3,626^*$
$D^2\Sigma$	428	$4,5$	$3,519^*$
$E^2\Pi_{3/2}$	231	$17,5$	$B_1 = 1,576$
$E^2\Pi_{1/2}$	$1,98$	231	$3,522^*$
$B^2\Sigma$	$1,68$	$17,5$	74
$A^2\Pi_{3/2}$	11055^*	$2,271$	74
$A^2\Pi_{1/2}$	$9910,88^*$	$2,251$	74
$X^2\Sigma^+$	$2,230$	$—$	$—$
$B(\Pi)$	$32866,4$	488	$2,16$
(Σ)	17627	450	$0,97$
$A^1\Sigma$	$16807,1$	$2,133$	$0,03$
$X^1\Sigma$	0	$1,940$	$0,03$
$B^1\Sigma^+$	$26997,74^*$	$2,747$	$0,03$
$A^1\Sigma^+$	14450^*	$2,633$	$0,03$
$X^1\Sigma^+$	0	$2,507$	$0,03$
$A^2\Pi$	$27992,90$	$1,821$	$0,03$
$X^2\Sigma^+$	0	$1,797$	$0,03$
$C^2\Sigma^+$	50419^*	$1,325$	$0,03$
$B^2\Sigma^+$	$49572,8^*$	$(1,335)$	$0,03$
$A^2\Pi_i$	33187^*	$1,394$	$0,03$
$X^2\Sigma^+$	0	$1,361$	$0,03$
$C^2\Sigma^+$	0	$1,287$	$0,03$
$B^2\Sigma^+$	20032^*	$1,297$	$0,03$
$X^2\Sigma$	0	$1,297$	$0,03$
$^1\Sigma^*$	39417	$1,554^*$	$0,4569^*$
$^1\Sigma^*$	0	$1,267^*$	$0,4569^*$
$A^2\Pi_{1/2}$	23545	$2,094^*$	$0,4577^*$
$X^2\Sigma^+$	0	$2,092^*$	$1,6$
BaH	$—$	$—$	$—$
BaO	$—$	$—$	$—$
BaS	$—$	$—$	$—$
BeCl	$—$	$—$	$—$
BeF	$—$	$—$	$—$
BeH	$—$	$—$	$—$
BeH	$—$	$—$	$—$
El	$—$	$—$	$—$

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума T_e , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант Φ_e , см $^{-1}$	Постоянная ангармонизмы $x_{e\Phi_e}$, см $^{-1}$	Постоянная ядра B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10^{-3} см $^{-1}$	Силовая постоянная k_e , 10^6 дин/см	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса μ_A , а. е. м.
BeO	$C^1\Sigma$	39120,1	1,49	1082	9,1	1,31	10	3,97	$C \rightarrow X$	—
	$B^1\Sigma$	21253,95	1,362	1371	7,75	1,576	15,4	6,38	$B \rightarrow X$	—
	$A^1\Pi$	9405,5	1,463	1144	8,42	1,366	16,3	4,45	$A \rightarrow X$	5,765
	$X^1\Sigma$	0	1,331	1487	1,18	1,651	19,0	7,51	$A \rightarrow X$	—
	$A^1\Pi$	7842,9*	—	762,5	4,12	0,659	6,05	2,41	$A \rightarrow X$	7,035
	$X^1\Sigma+$	0	1,742	998,0	6,14	0,7906	6,64	4,13	—	—
BeS	$A^1\Pi_u$	17742,3	2,863	132,5	0,302	0,0197	0,053	1,08	$A \rightleftarrows X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,659	172,7	0,341	0,0228	0,050	1,84	$B \rightleftarrows X$	104,5
Bi ₂	$X^1\Sigma_g^+$	15840	2,686	166,1*	1,84*	0,0585	0,41	0,65	$A \rightleftarrows X$	—
	$B^3\Pi_u$ (0^+_u)	13815*	—	150*	2,7*	—	—	0,53	$B \rightleftarrows X$	—
Br ₂	$A^3\Pi_u$ (1^+_u)	0	2,281	323,1*	1,17*	0,0811	0,321	2,46	$A \rightleftarrows X$	39,95
	$X^3\Sigma_g^+$ (0^+_g)	—	—	504**	—	—	—	3,68	$D \leftarrow X$	—
	D	61163	—	519	2,9	—	—	3,90	$C \leftarrow X$	—
	C	59318	—	243	6,7	—	—	0,85	$A \rightleftarrows X$	—
	$A^3\Pi_0^+$	16795	—	—	—	—	—	—	—	—
BrCl	$X^1\Sigma^+$	0	2,138	440	1,6	—	—	2,80	$D \leftarrow X$	24,56
	Π	611615	—	573,2	3,35	—	—	2,97	$C \leftarrow X$	—
	Π	57900	—	566,7	3,2	—	—	2,90	$A \rightleftarrows X$	—
	$^3\Pi_0^+$	18281,2	—	377,6	4,71	—	—	1,29	$^3\Pi_0^+ \rightleftarrows X$	—
	$^3\Pi_1^+$	17385	—	378	16	—	—	1,29	$^3\Pi_1^- \leftarrow X$	—
	$X^1\Sigma^+$	0	1,756	672,6	4,5	0,3572	5,21	4,09	$E \rightarrow A$	15,35
	$X^2\Pi$	0	1,669*	771	6,8	0,45*	—	4,67	$D \rightleftarrows X$	13,33
BrO	$E^1\Sigma_g^+$	55034,6	1,252	1672	40,0	1,793	42,1	9,89	$e \rightarrow a$	—
	$D^1\Sigma_u^+$	43240,23	1,238	1830	14,0	1,833	20,4	11,8	—	—
	$e^3\Pi_g$	40797,65	1,535	1106	39,3	1,192	24,2	4,33	$e \rightarrow a$	—

$C \rightarrow A$	$d \xrightarrow{\leftarrow} a$	$A \xrightarrow{\leftarrow} X$	$b \rightarrow a$	$\Sigma_u^+ \xrightarrow{\leftarrow} \Sigma_g^+$	$A \rightarrow X$	$B \rightarrow X$	$E \rightarrow A$	$D \rightarrow X$	$B \rightarrow A$	$E \rightarrow A$	$D \rightarrow X$	$B \rightarrow X$	$A \rightarrow X$
34261,9	1,255	1809	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
20022,50	1,266	1788	15,8	1,783	18,0	11,6	11,3	16,1	16,1	11,3	10,44	10,44	—
8391,0	1,318	1608	16,4	1,753	1,753	9,15	9,15	16,9	16,9	9,15	—	—	—
6434,27	1,369	1470	11,2	1,616	1,616	—	—	16,3	16,3	7,65	—	—	—
$a^3\Pi_u$	714,24	1,312	1641	11,7	1,498	—	—	1,498	1,498	16,6	9,53	—	—
$X^1\Sigma_g^+$	0	1,242	1855	13,3	1,820	—	—	1,820	1,820	17,6	12,2	6,006	6,006
Σ_u^+	18390,88	1,223	1969	14,4	1,877	—	—	1,877	1,877	17,7	13,7	—	—
Σ_g^+	0	1,263	1781	11,6	1,747	—	—	1,747	1,747	11,2	—	—	—
CB	$A^2\Delta_7$	33163,5*	1,813*	—	—	0,4912*	—	—	0,4912*	—	—	—	—
	$X^2\Pi_7$	32753,1*	0	1,821*	—	0,4872*	—	—	0,4872*	—	—	—	—
CF	$B^2\Delta$	49314,4*	1,317	1,153**	19,4	1,32	—	22,0	22,0	—	—	—	—
	$A^2\Sigma^+$	42924,17*	0	1,153	29	1,725	—	24,5	24,5	—	—	—	—
CH	$X^2\Pi_7$	64531,5	1,272	1308	11,1	1,417	—	18,4	18,4	—	—	7,36	—
	$F^2\Sigma^+$	64211,7	1,2	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	$E^2\Pi_7$	58981,0	1,1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	$D^2\Pi_l$	31778,1	1,113	2824	10,6	14,25	—	0,744	0,744	—	—	—	—
	$C^2\Sigma^+$	25698,2	1,186	2246	22,6	12,64	—	0,485	0,485	—	—	—	—
	$B^2\Sigma^-$	23217,5	1,102	2931	97,0	14,58	—	0,696	0,696	—	—	—	—
	$A^2\Lambda$	0	1,120	2859	63,3	14,19	—	0,530	0,530	—	—	0,93	—
CH+	$X^2\Pi$	28537,9*	1,232	2076	76,3	11,97	—	2,36	2,36	—	—	—	—
	$^1\Lambda$	23596,94*	1,234	1865	11,6	11,90	—	1,91	1,91	—	—	—	—
	$^1\Pi$	60938,72*	0	1,131	2740**	73	14,18	492	4,11	—	—	—	—
	$X^1\Sigma$	60623,99	—	—	—	1,520*	—	—	—	—	—	—	—
CN	$H^2\Pi_7$	60095,64	—	—	—	1,085	—	—	—	—	—	—	—
	$F^2\Delta_7$	59151,18	—	—	—	1,240	12,8	—	5,85	5,85	—	—	—
	$E^2\Sigma^+$	53954,99*	—	—	—	1,681	3,60	—	10,8	10,8	—	—	—
	$D^2\Pi_l$	25797,84*	—	—	—	1,005	8,88	—	1,487	1,487	—	—	—
	$B^2\Sigma^+$	9118,02*	—	—	—	1,149	2164	20,2	1,155*	1,155*	—	—	—
	$A^2\Pi_l$	0	1,233	1,812	1,233	1,233	—	1,970	1,970	22,2	17,8	12,5	6,47
	$X^2\Sigma^+$	45533,6	1,171	2069	13,1	1,899	—	1,3	1,3	16,3	16,3	—	—
CN+	$f^1\Sigma$	31771	1,363	2670	46,9	1,903	—	32	32	27,2	27,2	—	6,10

Продолжение табл. 7.2

			<i>a</i> → <i>X</i>		<i>a</i> → <i>X</i>
	<i>a</i> ³ Π	—	—	6,68	—
	27607^*	—	—	—	—
	27590^*	—	—	—	—
	27509^*	—	—	—	—
CaSe	$X_1\Sigma^+$	0	1,535	1285	8,46
	$X_1\Sigma^+$	0	1,676	1036	4,8
	$X_1\Sigma^+$	0	4,28	65,0	1,11
	$X_1\Sigma^g$	0	2,516	336,0	1,4
	$C_2^2\Pi_{3/2}$	26574,7	—	—	—
	$C_1^2\Pi_{1/2}$	26498,9	—	—	—
CaF	$X^2\Sigma^+$	0	2,439	369,3	1,4
	$F_2\Pi$	37549,7	—	682,2	3,68
	$E^2\Sigma^+$	34136,2	—	645,5	3,12
	$D^2\Sigma^+$	30772,3	—	650,7	2,89
	$C^2\Pi$	30285,2	—	481,7	2,02
	$C^2\Pi$	30255,9	—	—	—
	$B^2\Sigma^+$	18857,51	1,937	566,7	2,82
	$A_2^2\Pi_{3/2}$	16558,0	—	593,4	3,11
	$A_1^2\Pi_{1/2}$	16483,0	1,90*	591,9	3,43
	$X^2\Sigma^+$	0	1,927	587,9	2,94
	$B^2\Sigma$	15753,8*	1,954	1285	20
	$A^2\Pi_r$	14472,2*	1,99	1333	20
	$A^2\Pi_r$	14392,2*	—	—	—
CaO	$X^2\Sigma$	0	2,002	1299	19,5
	$C^1\Sigma$	28858	1,989	560,9	4,0
	$B^1\Pi$	25992	1,950	574**	—
	$A^1\Sigma$	11557	1,906	718,9	2,11
	$X^1\Sigma$	0	1,822	733,4	5,28
	$A^1\Sigma^+$	15194,4*	2,386	409,0	0,82
	$X^1\Sigma^+$	0	2,318	462,2	1,78
	$X^2\Sigma$	0	1,762	1431	46,3

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм.	Энергия терма от уровня минимума $T_e, \text{ см}^{-1}$	Равновесное расстояние $r_e, \text{ \AA}$	Коэффициент анигармонизма $x_e \omega_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная ангармонизма $\alpha_e, \text{ см}^{-1}$	Вращательная постоянная $B_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная связи $\alpha_e, 10^{-3} \text{ см}^{-1}$	Силовая постоянная $k_e, 10^6 \frac{\text{дин}}{\text{см}}$	Приведенная масса μA , а. е. м.	
									Наблюдаемый электронный переход	$A \xrightarrow{\leftrightarrow} X$
Cl_2	$A^3\Pi(0_u^+)$	17801,2	2,396	261,9	5,45	0,1680	3,7	0,72	$A \xrightarrow{\leftrightarrow} X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	1,983	559,7	2,70	0,2441	1,53	3,27		
	$X^2\Pi_{1/2}$	—	1,891	644,8	2,99	0,2697	1,67	4,34		
	$X^2\Pi_{3/2}$	0	1,892	645,6	3,02	0,2695	1,64	4,35		
ClF	$A^3\Pi(0_u^+)$	18956	1,92	313,5	2,22	0,372	14	0,72	$A \xrightarrow{\leftrightarrow} X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	1,628	786,3	6,23	0,5165	43,6	4,51		
	$B^5\Pi$	16584,5	1,716	753,7	10,5	0,4750	5,7	4,09		
	$X^5\Pi$	0	1,627	898,8	6,50	0,5286	5,0	5,82		
CrO	$X^1\Sigma_g^+$	0	—	42,03	0,0835	—	—	0,07	$B \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	3,072	149,5	0,360	0,036	0,12	0,66		
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,906	214,2	0,740	0,072	0,34	0,76		
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,345	352,6	—1,62	0,1844	1,18	1,22		
Cs_2	$A^1\Sigma^+$	17845,8	3,96	165,7	—7,77	4,075	—21,9	0,02	$A \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,494	890,7	12,6	2,709	56,7	0,47		
	$X^1\Sigma_g^+$	0	3,315	119,2	0,254	0,0236	0,068	0,54		
	$A^1\Pi_u$	20434,2	2,559	191,9	0,348	0,0818	0,62	0,69		
CsBr	$X^1\Sigma_g^+$	0	2,22	268,9	1,63	0,1087	0,56	1,35	$C \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$C^1\Sigma^+$	23461,1	2,259	293,0	1,02	0,0932	0,4	1,79		
	$X^1\Sigma^+$	0	2,173	313,4	1,05	0,1008	0,4	2,05		
	$F\Pi$	25285,30	2,148	384,9	1,65	0,1608	0,91	1,99		
CuCl	$E^1\Sigma^+$	23074,34	2,112	403,0	1,47	0,1663	1,08	2,18	$E \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$D^1\Pi$	22969,82	2,103	392,8	1,70	0,1667	0,85	2,07		

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма ст уровня минимума T_{e^*} , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант ω_e , см $^{-1}$	Постоянная аянгармоизменения $x_e \omega_e$, см $^{-1}$	Вращательная постоянная B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$	Силовая постоянная k_e , дин/см	Насыщаемый электронный переход	Приведенная масса μ_A' , а. е. м.
H ₂	$X^1\Sigma^+$	0	2,135	408,7	1,36	0,0936	0,289	3,72	—	37,82
	$X^1\Sigma^+$	0	2,340	323,9	0,75	0,0653	0,172	2,86	—	46,27
	Триплеты									
	$u^3\Pi_u$	6pπ	121316,7*	1,07*	—	~29,3*	—	—	$u \rightarrow a$	—
	$t^3\Sigma_u$	5fσ	120427*	1,03*	~2661	~122	~31,5*	—	$t \rightarrow a$	—
	q	—	120017*	~1,06*	2173**	—	~30*	—	$q \rightarrow c$	—
	$n^3\Pi_u$	5pπ	119931,7*	1,057	2322	62,9	29,03	1300	$n \rightarrow a$	—
	$m^3\Sigma_u^+$	4fσ	118379,3*	~0,96*	2457**	—	~36*	—	$m \rightarrow a$	—
	$k^3\Pi_u$	4pπ	117356*	1,067	2336	60	29,40	1580	$k \rightarrow a$	—
	v	—	117280*	1,07*	~2339	~57	~29,1*	—	$v \rightarrow c$	—
	$f^3\Sigma_u^+$	4pσ	115610*	1,063	2140**	—	29,61	2180	$f \rightarrow a$	—
	$h^3\Sigma_g^+$	3sσ	111783*	1,04	2395	64,2	30,6	1260	$h \quad c$	—
	$d^3\Pi_u$	3pπ	111703*	1,050	2372	66,3	30,36	1545	$d \rightarrow a$	—
	$e^3\Sigma_u^+$	3pσ	106690*	1,107	2196	65,8	27,30	1515	$e \rightarrow a$	—
	$a^3\Sigma_g^+$	2sσ	95084*	0,9887	2665	71,6	34,22	1671	$a \rightarrow b$	—
	$c^3\Pi_u$	2pπ	94793*	1,038	2465	61,4	31,07	1425	—	—
	Синглеты									
	$D^1\Pi_u^-$	2pπ	120172,21*	1,043	2324	62,2	30,76	1450	$D'' \leftarrow X$	—

$D' \Pi_u^-$	$2p\pi$	$\{17834, 65^*\}$	1,058	2330	63,3	29,89	1110	1,61	$D' \leftarrow X$
$B'' \Sigma_u^+$	$2p\sigma$	$116882, 00^*$	1,111	2198	68,1	27,13	1300	1,43	$B'' \leftarrow X$
$D \Pi_u^-$	$2p\pi$	$112871, 74^*$	1,042	2362	69,2	30,81	1960	1,66	$D \leftarrow X, D \rightarrow E$
$H\Pi_g$	$3d\pi$	112007	1,060	2265	78,5	29,79	1515	1,52	$I \rightarrow B, C$
$B' \Sigma_u^+$	$2p\sigma$	$110478, 54^*$	1,118	2075	113,4	26,78	3080	1,28	$B' \leftarrow X$
$E^1 \Sigma_g^+$	$2s\sigma$	$99157, 3^*$	1,012	2589	—	32,68	1820	1,99	$E \rightarrow B$
$C^1 \Pi_u^-$	$2p\pi$	$99081, 72^*$	1,031	2431	60,9	31,50	1830	1,76	$C \rightleftarrows X$
$B^1 \Sigma_u^+$	$1s\sigma 2p\sigma$	$90203, 55^*$	1,292	1357	20,4	20,04	1231	0,55	$B \rightleftarrows X$
$X^1 \Sigma_g^+$	$(1s\sigma)^2$	0	0,7412	4401	121	60,85	3062	5,75	—
$X^2 \Sigma_g^+$		124429	1,06	2297	62	29,8	1400	1,57	—
$X^1 \Sigma^+$	0	1,414	2649	45,2	8,351*	232	4,12	—	0,995
H_2^+		27905*	1,684	1329**	—	5,970	248	1,04	$A \rightarrow X$
HB_{Br}^+	$A^2 \Sigma^+$	0	1,448	2348**	—	8,072	236	3,23	—
$X^2 \Pi_t$	0	1,275	2991	52,8	10,44	307	5,17	—	0,995
HCl	$X^1 \Sigma^+$	0	1,514	1606	39,6	7,508	342	1,49	$A \rightarrow X$
$HCl+$	$A^2 \Sigma^+$	28416*	643	2675	53,5	9,946	318	4,13	—
	$X^2 \Pi_t$	0	1,315	—	—	—	—	—	0,98
	$V^1 \Sigma^+$	84747	2,091	1158	17,7	4,026	17,3	0,76	$V \rightarrow X$
HF	$X^1 \Sigma^+$	0	0,9168	4139	90,0	20,96	796	9,66	—
	$X^2 \Pi_{3/2}^+$	0	1,05	2950**	—	—	—	4,91	—
HF+	$X^1 \Sigma^+$	0	1,609	2308	39,0	6,427	169	3,14	—
HI	$X^2 \Pi_{3/2}^+$	0	(1,62)	(2170**)	—	—	—	2,77	—
HI+									1,00

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума T_e , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , см	Колебательный квант ω_e , см $^{-1}$	Постоянная аянгармонизма $x_e \frac{\omega_e}{\omega_e - 1}$	Вращательная постоянная B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10^{-3} см $^{-1}$	Силовая постоянная k_e , 10^5 дин/см	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса μA , а. е. м.
									Синглеты	Триплеты
HS	$B^2\Sigma$	59621,71**	1,428	2671	56,8	8,785	259	4,11	$B \leftarrow X$	—
	$A^2\Sigma^+$	30663**	1,423	1980	97,6	8,521	460	2,26	$A \rightleftharpoons X$	—
	$X^2\Pi_u$	0	1,345	2690	45,5	9,601	285	4,17	—	0,977
	$A^3\Pi_u$	29911,71*	1,530*	—	—	7,475*	—	—	$A \rightarrow X$	—
HS ⁺	$X^3\Sigma^-$	0	1,384*	2558	54	9,132*	284	3,77	—	0,977
	$F^1\Delta_u$	19862,4*	1,079	1706	35,1	7,230	225	3,43	$F \rightarrow B$	—
	$F^1\Pi_u$	19509,8*	1,085	1670	40,0	7,156	235	3,29	$F \rightarrow B$	—
	$P^1\Sigma_u^+$	19339,0*	1,089	(1664)	(40)	7,098	246	3,19	$F \rightarrow B$	—
He ₂	$E^1\Pi_g$	19476,4*	1,076	1721	34,9	7,270	215	3,49	$E \rightarrow A$	—
	$D^1\Sigma_u^+$	18663,3*	1,069	1746	35,5	7,365	218	3,60	$D \rightarrow X, B$	—
	$C^1\Sigma_g^+$	10945,5*	1,093	1653	41,0	7,052	215	3,22	$C \rightarrow A$	—
	$B^3\Pi_g$	3501,5*	1,068	1766	34,4	7,403	216	3,68	—	—
	$A^1\Sigma_u^+$	0	1,040	1861	35,0	7,787	228	4,08	$A \rightleftharpoons X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	—A (здесь A = $T_0(A^1\Sigma_u^+) - T_0(x^3\Sigma_u^+) = 2344,1$ см $^{-1}$; терм $X^1\Sigma_g^+$ — нестабильный)		—		—		—		2,001
	Триплеты									
	$v^3\Pi_g$	33383,51*	1,080	(1699)	(35)	7,21	220	3,40	$v \rightarrow a$	—
	$w^3\Pi_g$	33189,16*	1,080	(1699)	(35,2)	7,21	220	3,40	$w \rightarrow a$	—
	$t^3\Pi_g$	32925,96*	1,080	(1700)	(35,2)	7,21	230	3,41	$t \rightarrow a$	—

		<i>s</i> → <i>a</i>	<i>r</i> → <i>a</i> , <i>d</i>	<i>p</i> → <i>a</i> , <i>d</i>	<i>l</i> → <i>a</i> , <i>d</i>	<i>k</i> → <i>b</i> , <i>c</i>	<i>i</i> → <i>a</i>	<i>h</i> → <i>c</i> , <i>b</i>	<i>f</i> → <i>c</i> , <i>b</i>	<i>f</i> → <i>c</i> , <i>b</i>	<i>f</i> → <i>c</i> , <i>b</i>	<i>e</i> → <i>a</i>	<i>d</i> → <i>c</i> , <i>b</i>	<i>c</i> → <i>a</i>	<i>b</i> → <i>a</i>	<i>A</i> → <i>X</i>	<i>A</i> → <i>X</i>	<i>D</i> → <i>X</i> , <i>D</i> → <i>B</i>	<i>B</i> → <i>X</i>	<i>F</i> → <i>X</i> , <i>F</i> → <i>B</i>	
<i>s</i> ³ Π_g^s	325556,60*	1,080 (1700)	7,213 (7,216)	224 (224)	3,41 3,41																
<i>r</i> ³ Π_g^s	32016,56*	1,080 (1700)	7,220 (7,226)	224 222	3,41 3,43																
<i>p</i> ³ Π_g^s	31179,9*	1,079 (1704)	7,226	220																	
<i>p</i> ³ Π_g^s	29785,3**	1,079 29573*	1,079 1635	—	7,23 230	3,45 3,15															
<i>k</i> ³ Σ_u^+	5σ																				
<i>i</i> ³ Π_g^s																					
<i>h</i> ³ Σ_u^+																					
<i>f</i> ³ Δ_u																					
<i>f</i> ³ Π_u																					
<i>f</i> ³ Σ_u^+																					
<i>e</i> ³ Π_g^s																					
<i>d</i> ³ Σ_u^+																					
<i>c</i> ³ Σ_g^+																					
<i>b</i> ³ Π_g^s																					
<i>a</i> ³ Σ_u^+																					
<i>X</i> ² Σ_u^+																					
<i>X</i> ¹ Σ																					
<i>A</i> ² $\Pi_{3/2}$	0	1,723 1,580	974,1 2067	3,23 41,8	0,3865 6,730	1,7 214															
<i>A</i> ² $\Pi_{1/2}$	28256,2 24578,1	1,586 1,586	2066 1,387	63,5 83,0	6,683 5,549	242 312	2,52 2,52														
<i>X</i> ² Σ	0	1,740	1,808	38,2	7,703	228	3,86														
<i>He</i> ₂ ⁺																					
HgO																					
HgH																					
I ₂																					
<i>E</i> ¹ $\Sigma_g^+(0_g^+)$	46009*	3,6	103,6*	0,095*	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<i>E</i> ³ Σ_u^- (1 _u)	45230*	3,7	93,4*	0,6*	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<i>D</i> ³ Σ_g^- (1 _g , 0 _g ⁺)	41483*	4,1	101,9*	0,3*	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<i>B</i> ³ Π_u (0 _u ⁺)	15770,45	3,031	125,0*	0,693*	0,0290	290	0,58	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<i>X</i> ¹ $\Sigma_g^+(0_g^+)$	0	2,666	214,5*	0,615	0,0374	11,3	1,72	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума T_e , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант ω_e , см $^{-1}$	Постоянная азартомагнитного взаимодействия $\chi_e \omega_e$, см $^{-1}$	Вращательная постоянная B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи a_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$	Силовая постоянная k_e , дин/см	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса μ_A , а.е.м.
									—	—
Br	$B^3\Pi_0^+$	16165	2,83	142	2,6	0,432	—	0,58	$B \leftarrow X$	—
	$A^3\Pi_1^-$	12213	—	137,8	0,57	—	0,55	—	$A \leftarrow X$	49,03
	$X^1\Sigma^+$	0	2,485	268,7 (228)	0,83	0,0561	2,09	—	$B \leftarrow X$	—
	$B^3\Pi_0^+$	(17344)	2,61	13	0,09	—	0,85	—	$A \leftarrow X$	—
Cl	$A^3\Pi_1^-$	13742	2,707	212,3	2,39	0,0839	0,383	0,74	$A \leftarrow X$	27,71
	$X^1\Sigma^+$	0	2,321	384,3	1,50	0,1141	0,536	2,41	$A \leftarrow X$	—
	$A^3\Pi_0^+$	19053,7	2,118	406,5	1,3	0,2272	1,4	1,61	$A \leftarrow X$	—
IF	$A^3\Pi_0^+$	0	1,908	608,1	2,4	0,2799	1,9	3,60	$A \rightarrow X$	16,525
	$X^1\Sigma^+$	21557,8	2,072	514,5	5,5	0,2764	2,7	2,22	—	—
	$A^2\Pi_{3/2}^-$	0	1,868	681,4	4,2	0,3403	2,7	3,89	—	14,21
	$X^2\Pi_{3/2}^-$	0	2,401	317,4	1,01	0,1091	0,512	1,61	—	27,09
	$X^1\Sigma^+$	0	1,985	535,3	2,6	0,2624	1,8	2,75	$a_2 \rightarrow X$	16,30
	$a_2^3\Pi_0^+$	16287,15	1,779	1459	61,0	5,329	247	1,25	—	—
	$a_1^3\Pi_0^-$	16211,5*	—	—	—	5,186*	—	—	$a_1 \rightarrow X$	—
InCl	$X^1\Sigma^+$	0	1,891	1476	25,6	4,994	143	1,28	—	0,999
	$X^1\Sigma^+$	0	2,754	177,1	0,4	0,0369	0,104	1,11	$C \rightarrow X$	60,28
	$C^3\Pi_u$	22969,7	4,43	61,48	0,14	0,0440	0,110	0,04	$B \rightarrow X$	—
	$B^3\Pi_u$	15376,4	4,23	92,02	0,283	0,0567	0,165	0,10	—	—
InF	$X^1\Sigma^+$	0	3,92	92,64	0,354	0,0562	0,219	0,10	—	19,55
InH	$X^1\Sigma^+$	0	2,821	219,2	0,758	0,081	0,4	0,74	—	26,25
	$X^1\Sigma^+$	0	2,667	279,8	1,17	0,1286	0,79	0,86	—	18,59
	$X^1\Sigma^+$	0	2,178	426,0	—2,43	0,280	2,33	1,37	$A \rightarrow X$	12,79
	$A^3\Sigma^+$	19052,8	3,6	228,2	—5,75	1,269	—37,5	0,03	—	—
	$X^1\Sigma^+$	0	2,242	983,6	14,3	3,412	81,7	0,56	—	0,983
	$X^1\Sigma^+$	0	3,048	186,5	0,574	0,0609	0,268	0,61	—	29,89

$X^1\Sigma_g^+ (0_g^+)$	κ_2^*	Kr_2	—	41,90
$X^1\Sigma^+$	LaF	—	—	16,71
$X^2\Sigma^+$	LaO	—	—	14,35
$C^1\Pi_u$	Li ₂	—	—	—
$B^1\Pi_u$	LiBr	—	—	—
$A^1\Sigma^+$	LiCl	—	—	—
$X^1\Sigma^+_g$	LiF	—	—	—
$X^1\Sigma^+_g$	LiH	—	—	—
$X^1\Sigma^+$	LiI	—	—	—
$X^1\Sigma^+$	LuH	—	—	—
Mg_2	MgBr	—	—	—
$X^1\Sigma^+_u$	MgCl	—	—	—
$X^1\Sigma^+_g$	MgF	—	—	—
$A^2\Pi$	MgH	—	—	—
$X^2\Sigma^+$	MgO	—	—	—
$A^2\Pi_{1/2}$	—	—	—	—
$A^2\Pi_{3/2}$	—	—	—	—
$X^2\Sigma^+$	—	—	—	—
$C^2\Sigma^+$	—	—	—	—
$B^2\Sigma^+$	—	—	—	—
$A^2\Pi$	—	—	—	—
$X^2\Sigma^+$	—	—	—	—
$A^2\Pi_g$	—	—	—	—
$X^2\Sigma^+$	—	—	—	—
$E^1\Sigma^+$	—	—	—	—
$C^1\Sigma^-$	—	—	—	—
$D^1\Delta$	—	—	—	—
$B^1\Sigma^+$	—	—	—	—
$A^1\Pi$	—	—	—	—
$X^1\Sigma^+$	—	—	—	—
$X^1\Sigma_g^+ (0_g^+)$	0	23,99	0,01	1,0
$X^1\Sigma^+$	0	570**	0,2456*	—
$X^2\Sigma^+$	0	817,3	0,3519*	3,20
$C^1\Pi_u$	(v_e)	3,08	0,5068	5,65
$B^1\Pi_u$	(v_e)	2,93	0,5577	0,12
$A^1\Sigma^+$	(v_e)	14069,9	0,15	0,15
$X^1\Sigma^+_g$	0	2,67	0,4975	5,22
$X^1\Sigma^+_g$	0	2,170	0,6729	7,19
$X^1\Sigma^+$	0	2,021	0,555	5,64
$X^1\Sigma^+$	0	1,564	0,7065	1,19
$B^1\Pi$	0	34912	8,10	1,42
$A^1\Sigma^+$	0	2,378	1,345	2,48
$X^1\Sigma^+$	0	2,596	3,383	0,02
$X^1\Sigma^+$	0	1,595	2,82	—
$X^1\Sigma^+$	0	2,392	7,51	—
$X^1\Sigma^+$	0	1,911	23,2	—
$A^1\Sigma^+_u$	0	1520	3,39	—
$X^1\Sigma^+_g$	0	3,082	0,4432	—
$X^1\Sigma^+_g$	0	190,6	4,1	—
$A^2\Pi$	0	1,15	0,602	—
$X^2\Sigma^+$	0	3,890	99	—
$X^2\Sigma^+$	0	51,12	1,32	—
$A^2\Pi$	0	1,64	0,1480	—
$X^2\Sigma^+$	{	393,8	0,0929	—
$A^2\Pi$	{	2,05	0,168*	—
$X^2\Sigma^+$	0	2,33	3,78	0,02
$A^2\Pi$	0	2,36	—	—
$X^2\Sigma^+$	0	373,2	1,34	1,53
$A^2\Pi_{1/2}$	0	491,8	2,55	2,05
$A^2\Pi_{3/2}$	0	491,2	2,49	2,05
$X^2\Sigma^+$	0	—	2,05	—
$C^2\Sigma^+$	0	1,699	5,04	4,26
$B^2\Sigma^+$	0	823,1	5,04	3,65
$A^2\Pi$	0	762,1	5,60	3,50
$X^2\Sigma^+$	0	746,0	3,97	3,27
$A^2\Pi_g$	0	721,6	4,94	4,70
$X^2\Sigma^+$	0	1,750	0,5192	—
$A^2\Pi_g$	0	1,679	4,70	—
$X^2\Sigma^+$	0	1,730	1,598	1,46
$E^1\Sigma^+$	0	1,497	31,9	1,28
$C^1\Sigma^-$	0	406,3	32,4	1,28
$D^1\Delta$	0	632,4	3,25	1,40
$B^1\Sigma^+$	0	632,5	5,2	3,40
$A^1\Pi$	0	1,872	0,524*	4,8
$X^1\Sigma^+$	0	29851,7	0,4984*	0,5014
$X^1\Sigma_g^+ (0_g^+)$	—	1,876*	—	0,5822
$X^1\Sigma^+$	—	31080,6	—	4,5
$X^1\Sigma^+$	—	19984,0	4,7	5,77
$X^1\Sigma^+$	—	35633,3	664,4	4,0
$X^1\Sigma^+$	—	0	1,749	3,75
$X^1\Sigma^+$	—	0	1,864	5,1
$X^1\Sigma^+$	—	0	1,749	5,74
$X^1\Sigma^+$	—	0	1,749	14,42

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума $T_e, \text{ см}^{-1}$	Равновесное расстояние $r_e, \text{ \AA}$	Когебатильный квант $\omega_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная аниармо-негамма $x_e \omega_e, \text{ см}^{-1}$	Вращательная постоянная $B_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная связи $\alpha_e, 10^{-3} \text{ см}^{-1}$	Силовая постоянная $k_e, 10^6 \text{ дин/см}$	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса $m_A, \text{ а. е. м.}$
MnH	$X^2\Sigma$	0	1,722	1548	28,8	5,684	157	1,40	—	0,99
N ₂	$z^1\Delta_g(R)$	115365,4*	1,17	(~1700)	—	1,76	15,3	11,92	$z \rightarrow w$	—
	$y^1\Pi_g(R)$	114073,3*	1,18	1906	37,5	1,74	17	12,04	$y \rightarrow a'$, w	—
	$x^1\Sigma_g^-(R)$	113211,2*	1,173	1910	20,9	1,751	22,8	15,05	$x \rightarrow a'$	—
	$o_3^1\Pi_u(R)$	105710,4*	1,178	1987	16,3	1,734	8,8	16,84	$o \rightleftarrows X, o \rightarrow a$	—
	$c'_4^1\Sigma_u^+(R)$	104323,3*	1,10	2202	25,2	1,961	43,6	17,27	$c \rightleftarrows X, c' \rightarrow a$	—
	$c_3^1\Pi_u(R)$	104138,2*	1,11	2192	14,7	1,932	39,5	23,97	$c \rightleftarrows X, c \rightarrow a$	—
	$b'^1\Sigma_u^+$	103670,8*	1,14	760,1	4,42	1,155	7,39	2,30	$b' \rightleftarrows X, b' \rightarrow a$	—
	$D^3\Sigma_u^+(R)$	(103573)*	1,108*	—	—	1,961*	—	—	$D \rightarrow B$	—
	$b^1\Pi_u$	100817,5*	1,28	—	—	1,460	26,2	1,66	$b \rightleftarrows X, b \rightarrow a$	—
	$C^3\Pi_u$	97603,6*	1,508*	—	—	1,050*	—	—	$C' \rightarrow B$	—
	$E^3\Sigma_g^+(R)$	(95774,5)*	1,118*	2185**	—	1,927*	—	19,70	$E \rightarrow A$	—
	$C^3\Pi_u$	88977,8*	1,149	2047	28,4	1,825	18,7	17,29	$C \leftarrow X, B$	—
	$w^1\Delta_u$	71698,5*	1,269	1560	12,0	1,495	16,2	10,03	$w \leftarrow X, w \rightarrow a$	—
	$a^1\Pi_g$	68951,2*	1,220	1694	14,0	1,617	18,0	11,84	$a \rightleftarrows X, a \rightarrow a'$	—
	$a'^1\Sigma_u^-$	67739,3*	1,275	1530	12,1	1,480	16,6	9,66	$a' \rightleftarrows X$	—
	$B'^3\Sigma_u^-$	65852,4*	1,278	1517	12,2	1,473	16,6	9,49	$B' \leftarrow X, B' \rightarrow B$	—
	$W^3\Delta_u$	59306,8*	—	1501	11,6	—	—	9,77	$W \rightleftarrows B$	—
	$B^3\Pi_g$	59306,8*	1,213	1733	14,1	1,637	17,9	12,40	$B \leftarrow X, B \rightarrow A$	—
	$A^3\Sigma_u^+$	49754,8*	1,287	1461	13,9	1,455	18	8,80	$A \rightleftarrows X$	—
	$X^1\Sigma_g^+$	0	1,098	2359	14,3	1,998	17,3	22,94	—	7,003

		$C \rightarrow X$	$D \rightarrow A$	$B \rightarrow X$	$A \rightarrow X$	
N ₂ ⁺	$C^2\Sigma_u^+$	64549,4*	1,262	2,00	14,7	1,510
	$D^2\Pi_g$	51663,2*	1,471	907,7	11,9	1,113
	$B^2\Sigma_u^+$	25566,1*	1,075	2420	23,2	2,085
	$A^2\Pi_u$	9016,4*	1,174	1903	14,9	1,740
	$X^2\Sigma_g^+$	0	1,116	2207	16,1	1,932
NBr	$b_1\Sigma^+$	14787,3	1,729	785,5	4,36	0,4733
	$X^3\Sigma^-$	0	1,79	691,8	4,72	$\sim 0,4$
NCI	$b_1\Sigma^+$	14984,6	1,565*	935,6	5,4	0,6828*
	$X^3\Sigma^-$	0	1,608*	827,0	5,1	0,6468*
NF	$b_1\Sigma^+$	18877,05	1,300	1198	8,64	1,238
	$a^1\Delta$	11435,16*	1,308*	—	—	1,222*
	$X^3\Sigma^-$	0	1,317	1141	8,99	1,206
NH	$d^1\Sigma^+$	~83413	1,116	2673	71,2	14,39
	$c^1\Pi$	~43902	1,111	2551	214	14,54
	$A^3\Pi_t$	29776,8*	1,046*	—	—	16,32*
	$b^1\Sigma^+$	~21797	1,036	3352	74,2	16,70
	$a^1\Lambda$	~13147	1,041*	3231	98,5	16,44*
	$X^3\Sigma^-$	0	1,045*	3203	78,3	16,67
NO	$G^2\Sigma^-$	62911,7	1,343	1086	11	1,252
	$B^2\Delta$	60364,2	1,302	1217	15,6	1,332
	$B^2\Pi_{3/2}$	45947,3	1,383	1038	7,46	1,178
	$B^2\Pi_{1/2}$	45919,5	1,449	1037	7,46	1,076
	Ридберговское состояние (<i>R</i>)	—	1,106	2377	16,4	2,002
	$X^2\Pi_{3/2}$	121	{ 1,151	1904	14,0	1,705
	$X^2\Pi_{1/2}$	0	0 }	1904	—	—
						7,47
						15,9
						15,9

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума $T_e, \text{ см}^{-1}$	Равновесное расстояние $r_e, \text{ \AA}$	Колебательный квант $\Phi_e, \text{ cm}^{-1}$	Постоянная ангармонизма $x_e \omega_e, \text{ cm}^{-1}$	Вращательная постоянная $B_e, \text{ см}^{-1}$	Постоянная связи $\alpha_e, 10^{-3} \text{ см}^{-1}$	Силовая постоянная $k_e, 10^5 \text{ дин/см}$	Наблюдаемый электронный переход		Приведенная масса $\mu_A, \text{ а.е.м.}$
									А→Х	—	
NO+	X ₁ Σ+	73471,8	1,194	1602	20,2	1,584	22	11,3	—	—	7,47
NO-	X ₃ Σ-	0	1,063	2377	16,3	1,997	19	24,9	—	—	7,47
NS	C ₂ Σ	$\epsilon_{af} = -24 \pm 10 \text{ мэВ}$	1,26	1500	—	1,43	—	9,51	—	—	—
	A ₂ Δ _{5/2}	43387,3*	1,447*	1403	8	0,6267*	—	11,3	C ₂ →X	—	—
	A ₂ Δ _{3/2}	39911,08	1,576	940,4	4,8	0,6960	6,9	5,08	A→X	—	—
	B ₃ Π _{3/2}	39875,70	970,6	8,6	—	—	—	—	—	—	—
	B ₃ Π _{1/2}	30363,3	803,3	3,82	0,595	4	3,71	3,64	B→X	—	—
	X ₂ Π	30297,9	796,3	3,63	0,596	—	—	—	—	—	—
	A ₂ Π _{1/2}	0	1,495	1219	7,5	0,7736	6,1	8,54	—	—	9,75
	A ₂ Π _{3/2}	24357,50	1,854*	657,2**	—	0,4117*	—	3,03	A→X	—	—
	X ₂ Π _{1/2}	23765,47	1,848	612,6**	—	0,4141	—7,4	2,63	—	—	—
	X ₂ Π _{3/2}	890,84	1,651	949,7	5,73	0,5192	3,9	6,32	—	—	—
	X ₂ Π _{1/2}	0	1,652	957,5	5,69	0,5182	4,0	6,43	—	—	—
Na ₂	B ₁ Π _u	20319,60	3,414	124,1	0,686	0,1258	0,868	0,10	B ₂ →X	—	11,896
	A ₁ Σ _u ⁺	14680,4	3,64	117,6	0,38	0,1107	0,54	0,09	A ₂ →X	—	—
	X ₁ Σ _g ⁺	0	3,077	159,1	0,726	0,1549	0,856	0,17	—	—	11,495
	X ₁ Σ ₊	0	2,502	298,5	1,16	0,1513	0,94	0,94	—	—	17,85
	X ₁ Σ ₊	0	2,361	364,6	1,78	0,2181	1,62	1,09	—	—	13,95
	X ₁ Σ ₊	0	1,926	536,1	-3,83	0,4369	4,56	1,76	—	—	10,40
	A ₁ Σ ₊	22719,1	3,208	310,6	-5,41	1,696	-17,5	0,05	A ₂ →X	—	—

X ¹ Σ^+	0	1,887	1172	19,7	4,901	135	0,78	—
X ¹ Σ^+	0	2,712	259,2	0,964	0,1178	0,65	0,77	0,966
NaI		21316,2*	1,75	840,5	3,3	0,3992*	1,9	19,46
NbO	A ⁴ Σ^-	0	1,691	989,0	3,8	0,4310*	2,1	—
	X ⁴ Σ^-	0	2,91	31,3	6,84	0,20	60	13,65
	X ¹ Σ_g^+	0	1,604	709,1	10,6	0,819	11,9	—
Ne ₂	B ³ Σ^-		1,522	799,1	12,2	0,9105	14,2	—
O ₂	A ³ Σ_u^+		1,517	794,3	12,7	0,9155	13,9	10,09
	c ¹ Σ_u^-		33058,4	1,227	1433	13,9	2,97	—
	b ¹ Σ_g^+		13195,314	(1509)	(12,9)	1,400	18,2	—
	a ¹ Δ_g		7918,11	1,216	(1509)	1,426	17,1	—
	X ³ Σ_g^-	0	1,207	1580	12,0	1,446	15,9	—
	b ² Σ_g^-	1,34	1166	22	—	—	6,41	—
	b ⁴ Σ_g^-	—	1197	17,1	1,287	0,22	6,75	—
	A ² Π_u	49191	—	—	—	—	—	—
	A ² Π_u	40070	—	898,2	13,6	1,063	0,206	—
	a ⁴ Π_u	32524	—	1035	10,3	1,105	0,155	—
	X ² Π_g, i	0	—	1905	16,3	1,689	0,196	—
	X ² $\Pi_{3/2}, g$	161	—	—	—	—	—	—
	X ² $\Pi_{1/2}, g$	0	1,34	1089	12,1	1,17	—	8,00
O ₂ ⁻	C ² Σ^+	89500	2,16	1233	19,1	4,247	78	—
	B ² Σ^+	69775	1,80	940	105	5,54	650	—
	A ² Σ^+		1,012	3184	97,8	17,35	807	—
	X ² Π_l	32682,5	0,9706	3735	82,8	18,87	714	—
OH ⁺	A ³ Π_l	0	1,135	2150	82	13,79	854	0,948
	X ³ Σ^-	28937	1,029	3124	85	16,78	274	—
	N ¹ Σ_u^+	0	1,910	701,2	(29,7)	0,298	5,11	0,948
P ₂	77286,8							—

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант ω_e , см ⁻¹	Постоянная апартаментарности $x_e \text{ ф} \cdot \text{см}^{-1}$	Вращательная постоянная связи B_e , см ⁻¹	Постоянная связи α_e , см ⁻³	Силовая постоянная k_e , 10 ⁶ дин/см	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса μ_A , а. е. м.
$M^1\Sigma_u^+$		73845,7	1,977	678,5	3,0	0,2786	1,6	4,20	$M \leftarrow X$	—
$K^1\Pi_u$		72288,5	2,006*	713	5,5	0,2704*	—	4,64	$K \leftarrow X$	—
$G^1\Sigma_u^+$		66313,43	1,913	694,1	4,18	0,2973	1,95	4,40	$G \rightleftharpoons X$	—
$E^1\Pi_u$		59446,28	1,969*	700,7	2,92	0,2807*	—	4,48	$E \rightleftharpoons X$	—
$B^1\Pi_g$		50223,30	2,176	391,3	16,2	0,2300	6,0	1,40	$B \rightarrow A$	—
$C^1\Sigma_u^+$		46941,33	2,120	473,9	2,34	0,2421	1,75	2,05	$C \rightleftharpoons X$	—
$A^1\Pi_g$		34515,34	1,989	618,9	2,97	0,2752	1,69	3,49	$A \rightarrow X$	—
$X^1\Sigma_g^+$	0	1,894	780,9	2,82	0,3036	1,43	5,56	—		15,49
$X^3\Pi_{3/2}$	0	1,990	666,4	2,63	0,2748	1,9	4,05	—		15,49
$b^1\Sigma+$	13353,91	1,581	866,1	4,51	0,5725	4,5	5,20	$b \rightarrow X$		—
P_2^+	7090,41	1,585	858,8	4,44	0,5699	4,67	5,12	—		—
$a^1\Delta$	0	1,590	846,8	4,49	0,5665	4,56	4,97	—		11,78
$X^3\Sigma^-$		39805,66	1,542	1103	7,22	0,7307	6,6	6,91	$A \rightleftharpoons X$	—
$A^1\Pi$		55458,90	1,487 (1,431)	1337	6,98	0,7862	5,6	10,2	$I \rightarrow A, B$	9,645
$X^1\Sigma^+$		53092,4	1,451	1480	12,0	0,758	7,4	13,6	$E \rightarrow X$	—
$E^2\Delta$		52651 (1,45)	1260	5,40	0,770	12,7	9,87	$G \rightarrow A, B$	—	—
$G^2\Sigma^+$		49899,65 (1,670)	835,8	5,77	0,616	5,1	4,34	$F \rightarrow A, B$	—	—
$F^2\Sigma^+$		45717,25	1,653	768,9	5,14	0,584	5,6	3,68	$C \rightarrow X_1$	—
$C^2\Sigma^-$		40407,6	1,431	1390	7,19	0,7801	5,4	12,0	$B \rightarrow X$	—

		$A \rightarrow X, B$						
$A^{\Sigma+}$	30731,1	1,466	1165	13,7	0,7473	8,8	8,43	—
$X^2\Pi_r$	0	1,473	1233	6,56	0,7337	5,5	9,46	10,55
$A^2\Sigma$	21863,1	2,293	228,8	0,795	0,1072	0,52	0,93	—
$X^2\Pi_{3/2}$	8274	—	321,6	0,30	—	—	1,84	—
$X^2\Pi_{1/2}$	0	2,179*	304,2	0,89	0,1186*	—	1,65	30,27
$B^2\Sigma+$	35643	1,962	612,8	3,42	0,2510	1,5	3,85	$B \rightarrow X_2, B \not\rightarrow X_1$
$A(\Omega = 1/2)$	22566,6	2,163*	397,8	1,77	0,2070*	—	1,62	$A \rightarrow X_2, X_1$
$X^2\Pi_{3/2}$	8264,7	2,035	531,1	1,50	0,2338	2,0	2,89	—
$X^2\Pi_{1/2}$	0	2,061*	507,2	2,30	0,2281*	—	2,64	17,40
$X^2\Pi_{1/2}$	0	1,839	1564	29,8	4,971	144	1,45	1,003
$A(0^+)$	19862,3	2,095	444,2	0,46	0,2588	1,4	1,73	$A \not\rightarrow X$
$X_1\Sigma^+$	0	1,922	721,3	3,53	0,3075	1,92	4,55	—
$B1$	21774,5	2,467	282,1	0,85	0,0999	0,6	1,30	$B \leftarrow X$
$A(0^+)$	18768,9	2,513	260,8	0,36	0,0963	0,26	1,11	$A \leftarrow X$
$a1$	14821,9	2,562	285,9	(0,88)	0,0926	0,37	1,34	$a \leftarrow X$
$X_1\Sigma^+$	0	2,287	429,4	1,30	0,1163	0,42	3,02	—
$X_1\Sigma^+$	0	2,402	277,6	0,51	0,0506	1,29	2,60	—
$A^1\Pi$	18510*	1,762	818,8	5,5	0,4802	4,0	4,47	$A \leftarrow X$
$X^1\Sigma$	0	1,677	1051	4,87	0,5303	3,2	7,37	—
$X^2\Delta_{5/2}$	0	1,528	2294**	—	7,198	198	3,11	11,315
$A^1\Sigma$	16932,99*	—	727,1	5,42	0,3538	2,91	4,61	$A \leftarrow X$
$X^1\Sigma$	0	1,727	851,1	4,97	0,3822	2,83	6,31	14,79
$X_1\Sigma^+$	0	2,945	169,5	0,463	0,0475	0,486	0,70	41,30
$RbCl$	$X^1\Sigma^+$	0	2,787	233,3	0,856	0,0876	0,454	25,06
RbF	$X_1\Sigma^+$	0	2,270	373,3	-1,80	0,2107	1,52	15,54

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия от уровня минимума T_e , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , Å	Коэффициент кванта Φ_e , см $^{-1}$	Постоянная аянгардоманнизма $x_e \Phi_e$, см $^{-1}$	Постоянная вращательная постоянная B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$	Саловая постоянная k_e , 10 5 дин/см	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса μ_A , а. е. м.
									А \rightleftharpoons X	
RbI	$A^1\Sigma^+$	18219,8	3,90	211,7	-6,47	1,112	-54	0,03	-	—
	$X^1\Sigma^+$	0	2,362	936,8	-14,2	3,019	73,4	0,52	—	0,996
RbI	$X^1\Sigma^+$	0	3,177	138,5	0,335	0,0328	0,109	0,58	—	51,07
RhC	$A^2\Pi_{1/2}$	9412,60*	—	949,4	5,36	0,5733	4,26	5,71	$A \leftarrow X$	—
	$X^2\Sigma^+$	0	1,614	1050	4,94	0,6027	3,96	6,98	—	10,76
S ₂	$D^3\Pi_u$	58750*	(1,854)	793,9	4,0	0,3066	—	5,95	$D \leftarrow X$	—
	$C^3\Sigma_u^-$	55633,3*	1,810	829,2	3,34	0,3220	1,4	6,49	$C \leftarrow X$	—
	$B^3\Sigma_u^-$	31689	2,168	434	2,75	0,2244	1,8	1,78	$B \rightleftharpoons X$	—
	$X^3\Sigma_g^-$	0	1,889	725,7	2,84	0,2954	1,58	4,96	—	15,99
	3S_2	0	1,889	704,0	2,68	0,2781	1,45	4,96	—	16,98
SF	$A^2\Pi_{1/2}$	25351*	—	483	2,6	—	—	1,64	$A \leftarrow X$	—
	$A^2\Pi_{3/2}$	24752,0*	—	488	3,1	—	—	1,67	$A \leftarrow X$	—
	$X^2\Pi$	0	1,599*	—	—	0,5527*	—	—	—	11,93
SO	$C^3\Pi_l$	~42200	~2,2	~170	—	0,501	—	~0,18	—	—
	$B^3\Sigma^-$	41628,7	1,775	~630	~4,8	0,502	6,2	~2,50	$B \rightleftharpoons X$	—
	$A^3\Pi_2$	38616,5	—	412,7	1,7	0,6164	20,4	1,07	—	—
	$A^3\Pi_1$	38455,2	1,609	413,3	1,6	0,6107	19,4	1,07	$A \rightleftharpoons X$	—
	$A^3\Pi_0$	38292,5	—	415,2	1,6	0,6067	19,4	1,08	$b \rightarrow X$	—
	$b^1\Sigma^+$	10509,97	1,500	1069	7,25	0,7026	6,35	7,18	—	—
	$a^1\Delta$	~6350	1,494	—	—	0,7098	—	—	—	—

S	F							
$X^3\Sigma^-$								
$X_1^1\Sigma^+$	0	1,492	1,149	5,63	0,7208	5,74	8,31	10,67
$X_2^1\Delta$	6820	1,83	612,6	2,58	0,3047*	2	3,63	—
$X_3^3\Sigma^-$	1244	—	615,6	2,57	0,2746	—	3,67	—
$D^2\Pi$	0	1,8	608,8	2,59	0,3082	1,5	3,59	—
$C^2\Pi_r$	35049,8	2,06	499,9	3,0	0,268	—	2,08	$D \rightarrow X$
$B^2\Sigma$	30316,8	2,018	570,6	3,4	0,292	—	2,71	$C \rightleftarrows X$
$C^2\Sigma_r$	29754,6	1,927*	582	6,5	0,321*	—	2,82	$B \rightleftarrows X$
$X^2\Pi_r$	2274,3	1,841	817,4	4,9	0,351*	1,0	5,57	—
$X^1\Sigma^+$	0	2,232*	447,4	1,8	0,1720*	~1	2,34	—
$X^1\Sigma^+$	0	1,791*	728,0**	3,8	0,3937*	2,66	4,17	—
$B^2\Sigma^+$	20570,79*	1,720	825,5	4,21	0,4829*	3,2	4,74	$B \rightleftarrows X$
$A^2\Pi_{3/2}$	16554,8*	1,687	874,6	4,99	0,5023*	3,8	5,32	$A \rightleftarrows X$
$A^2\Pi_{1/2}$	16440,6*	1,687	875,0	4,98	0,5023*	3,8	5,32	—
$X^2\Sigma^+$	0	1,668	965,0**	3,95	0,5134*	3,3	6,47	—
$C(1_u)$	54752,48	2,133*	403,9	1,3	0,0924*	0,33	3,79	—
$C(1_u)$	52709,61	2,089	428,0	1,22	0,0965*	0,33	4,26	$C \leftarrow X(1_g),$ $X(0_g^+)$
$B(0_u^+)$	25980,36	2,446	246,3	1,02	0,0705	0,345	1,41	$B \rightleftarrows X$
$B(1_u)$	25912,45	2,440	246,4	1,22	0,0709	0,553	1,41	$B \rightleftarrows X$
$X(1_g)$	366,7	2,163	387,2	0,964	0,0902	0,298	3,49	—
$X(0_g^+)$	0	2,166	385,3	0,964	0,0899	0,288,	3,45	—
$X^3\Sigma^-$	0	1,640	914,7	4,52	0,4655	3,2	6,56	—
$K^3\Sigma_u^-$	30768,77	2,349	462,6	5,95	0,2185	3,16	1,77	$K - X$

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума T_e , см ⁻¹	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант ω_e , см ⁻¹	Постоянная атакармонизма $x_e \cdot \omega_e$, см ⁻¹	Вращательная постоянная B_e , см ⁻¹	$\alpha_e \cdot 10^{-3}$, см ⁻¹	Справовая постоянная связей k_e , дин/см	10^5 , см	Наблюдаемый электронный переход	Приведенная масса μ_A , а. е. м.
SiBr	$X^3\Sigma_g^-$	0	2,246	511,0	2,02	0,2390	1,3	2,16	—	—	14,04
SiCl	$X^2\Pi_{3/2}$	0	2,26*	424,2	1,5	0,1598*	—	2,20	—	—	20,78
	$C^2\Pi$	41165	1,94	674,2	2,20	0,2861*	—	4,20	$C \rightleftharpoons X$	—	—
	$B' ^2\Delta$	35617,1	2,035	511,1	5,6	0,2600*	2,5	2,41	$B' \rightleftharpoons X$	—	—
	$B^2\Sigma^+$	34107	1,971	706,6	3,9	0,2794	2,5	4,61	$B \rightleftharpoons X$	—	—
	$A^2\Sigma^+$	23010,4	2,1*	296,4	(0,73)	0,1986	0,7	0,81	$A \rightarrow X$	—	—
	$X^2\Pi_r$	0	2,058	535,9	2,16	0,2559	1,56	2,65	—	—	15,67
SiF	$C^2\Delta$	39438,4	1,571	892,4	7,01	0,6034	5,39	5,32	$C \rightarrow X$	—	—
	$B^2\Sigma^+ (R)$	34561,5	1,541	1011	4,82	0,6271	4,62	6,83	$B - X, A$	—	—
	$d^4\Sigma^-$	29805,06	1,604	863,2	5,73	0,5786	5,02	4,97	$a - X$	—	—
	$A^2\Sigma^+$	22858,4	1,605	718,5	10,2	0,5784	9,41	3,45	$A - X$	—	—
	$X^2\Pi$	0	1,601	857,2	4,74	0,5814	4,94	4,91	—	—	11,33
	$A^2\Delta$	24193,04*	1,524	1859	99,2	7,466	344	1,98	$A \rightarrow X$	—	—
	$X^2\Pi$	0	1,520	2042	35,5	7,450	219	2,39	—	—	0,973
SiH ⁺	$A^1\Pi$	25025,20*	1,871	468,6	39,2	4,912	767	0,13	$A \rightarrow X$	—	—
	$X^1\Sigma^+$	0	1,499	2157	34,2	7,660	210	2,67	—	—	0,973
	$X^2\Sigma^+$	0	1,575*	1152	6,56	0,7282*	6,3	7,30	—	—	9,35
SiN	$A(D)^1\Pi$	42640,4*	1,619	852,7	6,44	0,6305	6,95	4,37	$A \rightleftharpoons X$	—	—
SiO	$X^1\Sigma^+$	0	1,510	1241	5,92	0,7268	5,04	9,26	—	—	10,19

SiS	$X^1\Sigma^+$	0	1,929	749,6	2,58	0,3035	1,47	4,96	14,97
SiSe	$X^1\Sigma^+$	0	2,098	580,0	1,78	0,1916*	0,777	4,11	20,72
SnF	$A^2\Sigma^+$	20137,8	2,042	420,0	2,20	0,2471	2,6	1,70	—
	$X^2\Pi_{3/2}$	2316,9	1,939	588,8	2,82	0,2738	1,1	3,35	—
	$X^2\Pi_{1/2}$	0	1,943	583,3	2,69	0,2727	1,1	3,28	16,38
	$X^1\Sigma^+$	0	1,832	822,4	3,73	0,3557	2,14	5,62	14,10
	$X^1\Sigma^+$	0	2,209	487,7	1,34	0,1366*	0,5	3,54	25,24
	$X^1\Sigma^+$	0	2,326	331,2	0,74	0,0650	0,170	3,06	47,42
	$X^1\Sigma^+$	0	2,523	259,5	0,50	—	—	2,44	61,49
	$X^2\Sigma^+$	0	2,076	498,0	2,15	0,2497*	—	2,28	—
	$X^2\Sigma^+$	0	2,146	1206	17,0	3,634*	—	0,85	—
	$X^2\Sigma^+$	10885,0	2,027	619,6	~0,9	0,3047	1,1	3,06	0,997
	$A^1\Sigma$	0	1,920	653,3	4,0	0,3380	2,1	3,40	—
	$B^1\Sigma^+$	39281,4*	2,609	286,8	0,84	0,1057	0,32	1,14	13,53
	$X^1\Sigma^+$	0	2,440	388,4	1,31	0,1207	0,44	2,09	—
	$X^1\Sigma^+$	0	1,687	1029	3,51	0,4019*	1,82	9,16	23,47
	$X_1\Delta_{3/2}$	0	1,840	895,8	2,39	0,3326	1,30	7,08	—
	$X^1\Sigma$	0	1,825	797,1	4,0	0,3554	2,37	5,33	14,70
	$X(0+)$	0	1,620	1008	4,13	0,5339*	3,0	7,18	14,97
	$X^3\Delta_1$	0	2,082	562,3	—	0,2014*	0,9	3,58	14,245
	TiO	0	31054,2	216,9	6,80	0,0923	1,31	0,84	—
	$X^1\Sigma^+$	0	2,485	287,5	1,24	0,0914	0,397	1,47	—
	$B^3\Pi_1$	36805,6*	2,076	366,6	10,2	0,2249	3,0	1,38	30,21
	$A^3\Pi_0^+$	35164,3*	2,049	463,3	7,1	0,2309	2,7	2,20	—
	$X^1\Sigma^+$	0	2,084	477,3	2,3	0,2232	1,50	2,33	17,38

Продолжение табл. 7.2

Молекула	Электронный терм	Энергия терма от уровня минимума T_e , см $^{-1}$	Равновесное расстояние r_e , Å	Колебательный квант ω_e , см $^{-1}$	Постоянная амп гармонизма $x_e \omega_e$, см $^{-1}$	Вращательная постоянная B_e , см $^{-1}$	Постоянная связи α_e , 10 $^{-3}$ см $^{-1}$	Силовая постоянная k_e , 10 16 дин/см	Приведенная масса μ_A , а. е. м.	
									Наблюдаемый переход	—
TlH	$X^1\Sigma^+$	0	1,866	1391	22,7	4,806	154	1,14	$C \xrightarrow{\leftarrow} X$	1,003
VO	$C^4\Sigma^-$	17420,3*	1,672	865,3	6,35	0,4953	3,1	5,37	$B \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$B^4\Pi_{5/2}$	12706,8*	1,625	910,9	5,0	0,5246	4	5,95	$B \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$X^4\Sigma^-$	0	1,589	1012	5,26	0,5482	3,52	7,35	—	12,175
	$X^1\Sigma_g^+(0_g^+)$	0	~4,45	~21,26	~0,75	~0,013	~0,4	~0,02	—	65,65
Xe ₂	$X^1\Sigma_g^+(0_g^+)$	14877,60*	2,48	324,5	1,14	0,1089	0,7	1,57	$^1\Sigma^+ - X$	—
YCl	$X^1\Sigma^+$	0	2,404	380,7	1,3	0,1161	0,3	2,16	—	25,35
	$X^1\Sigma^+$	0	1,928*	631,3**	2,5	0,2896*	1,63	3,68	—	15,65
YF	$B^2\Sigma^+$	20741,92	1,828*	765,0	7,75	0,3722*	—	4,68	$B \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
YO	$A^2\Pi_{3/2}$	16722,75*	1,795*	808,9	2,96	0,3857*	—	5,23	$A \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$A^2\Pi_{1/2}$	16294,72*	1,795*	812,7	2,80	—	—	5,28	—	—
ZnH	$X^2\Sigma^+$	0	1,790*	852,5	2,45	0,3881*	—	5,81	$A - X$	13,56
	$A^2\Pi_r$	23269,6	1,511	1910	40,7	7,4397	242	2,13	$b \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$X^2\Sigma$	0	1,594	1608	55,1	6,679	250	1,51	—	0,993
ZnH ⁺	$X^1\Sigma^+$	0	1,51	1916	39	7,41	250	2,15	—	0,993
ZrO	$b^1\Sigma^+$	27144,7**	1,772	843,3	3,0	0,3922*	1,9	5,70	$b \xrightarrow{\leftarrow} X$	—
	$X^1\Sigma^+$	0	1,711	969,8**	5,04	0,4229*	2,3	7,54	—	13,61

Таблица 7.3

Параметры возбужденных молекул и молекулярных ионов инертных газов

Молекула и терм	Энергия возбуждения из основного состояния атомов, эВ	Энергия колебательного кванта ω_e , мэВ	Расстояние между ядрами, Å	Вращательная постоянная B_e , см ⁻¹
$\text{He}_2 (^3\Sigma_u^+)$	17,97	214	1,05	7,68
$\text{He}_2^+ (^2\Sigma_g^+)$	22,22	211	1,08	7,24
$\text{Ne}_2 (^3\Sigma_u^+)$	15,5	77	2,0	0,44
$\text{Ne}_2 (^2\Sigma_g^+)$	20,2	77	1,7	0,59
$\text{Ar}_2 (^3\Sigma_u^+)$	10,4	38	2,3	0,16
$\text{Ar}_2^+ (^2\Sigma_g^+)$	14,5	54	2,5	0,14
$\text{Kr}_2 (^3\Sigma_u^+)$	8,7	31	2,9	0,048
$\text{Kr}_2^+ (^2\Sigma_g^+)$	12,8	31	2,8	0,052
$\text{Xe}_2 (^3\Sigma_u^+)$	7,3	17	3,4	0,023
$\text{Xe}_2^+ (^2\Sigma_g^+)$	11,2	20	3,3	0,024

§ 7.3. Потенциальные кривые двухатомных молекул и ионов

На рис. 7.1—7.13 приведены кривые электронных термов для ряда двухатомных молекул и молекулярных ионов. Выбор тех или иных частиц диктовался наличием достаточно полной информации об их термах; по этой причине мы старались не приводить многие картины качественного положения электронных термов, хотя это во многих случаях полезно. Представленные схемы электронных термов в основном содержатся в справочных изданиях [5, 7]. Способы получения кривых указаны в подписях к рисункам.

§ 7.4. Времена жизни электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул и ионов

Время жизни возбужденного состояния молекулы τ_n связано с коэффициентами Эйнштейна A_{nm} для спонтанного излучения с уровня n на уровень m соотношением

$$\tau_n = 1 / \sum_m A_{nm},$$

где суммирование ведется по всем разрешенным переходам. Для электронного спектра молекулы наиболее существенны электрические дипольные переходы, подчиняющиеся правилам отбора, которые применительно к наиболее распространенным случаям взаимодействий в молекуле (типы связи a и b по Хунду, когда

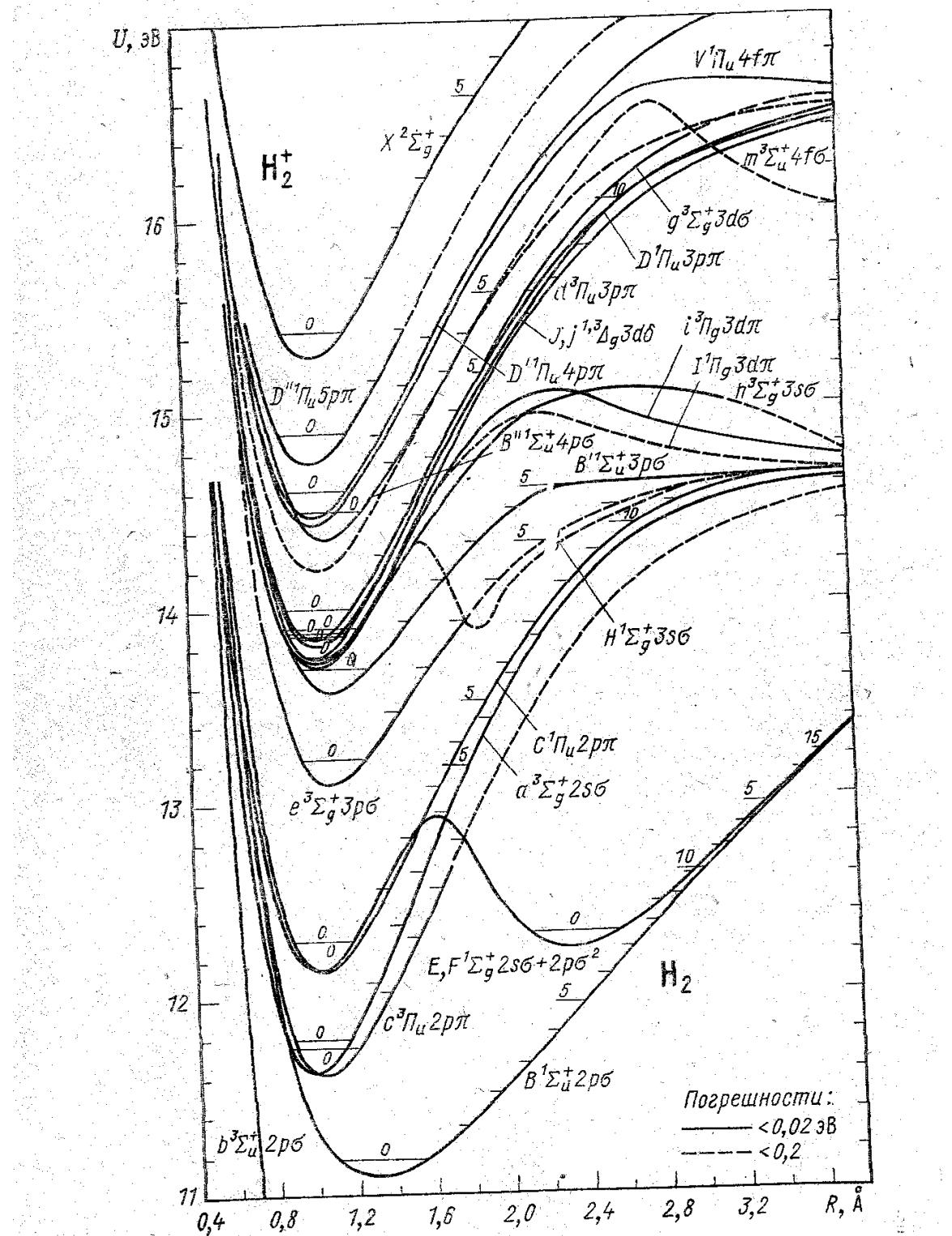


Рис. 7.1. Теоретические кривые электронных термов молекул H_2 и H_2^+

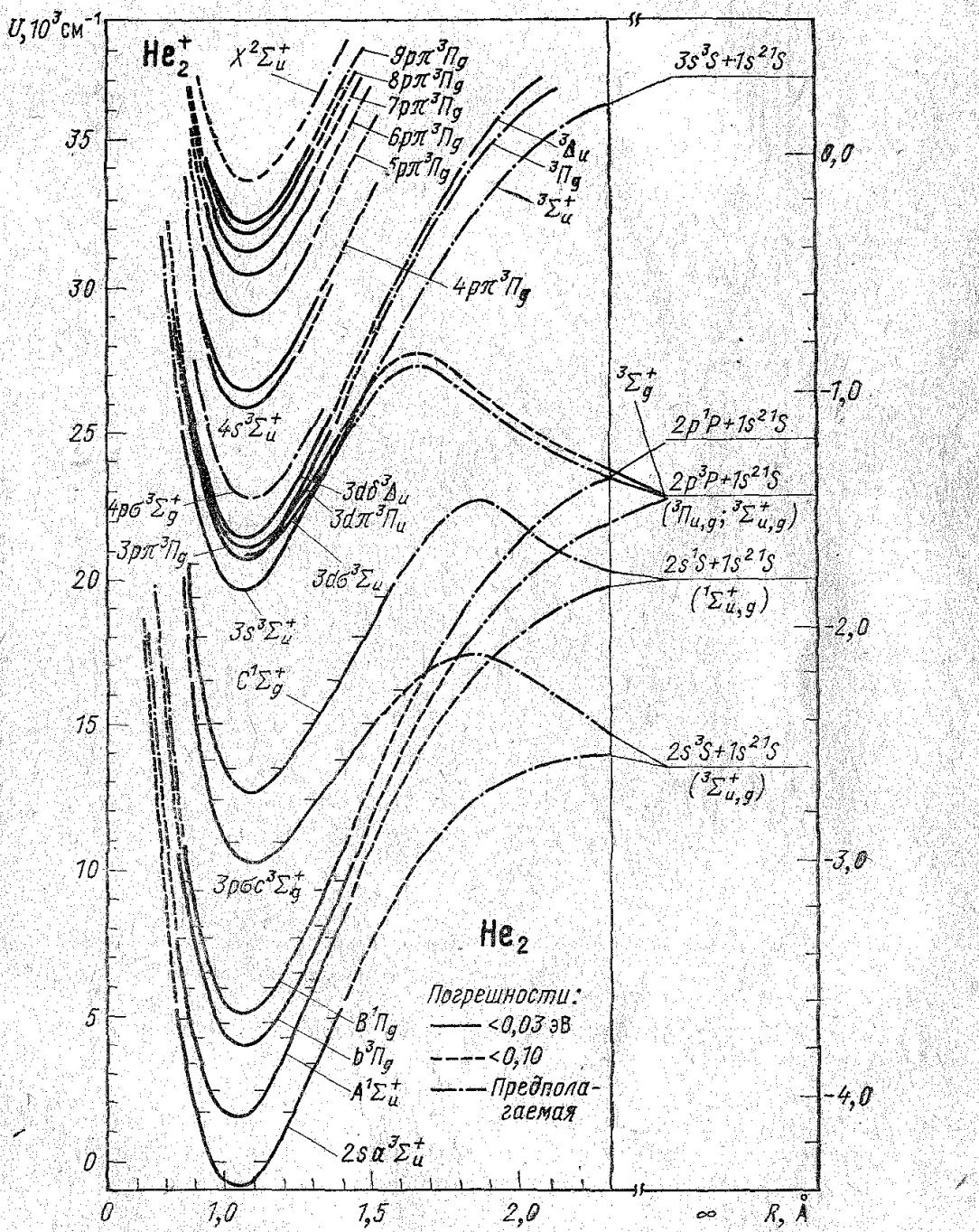


Рис. 7.2. Теоретические кривые электронных термов молекул He_2 и He_2^+

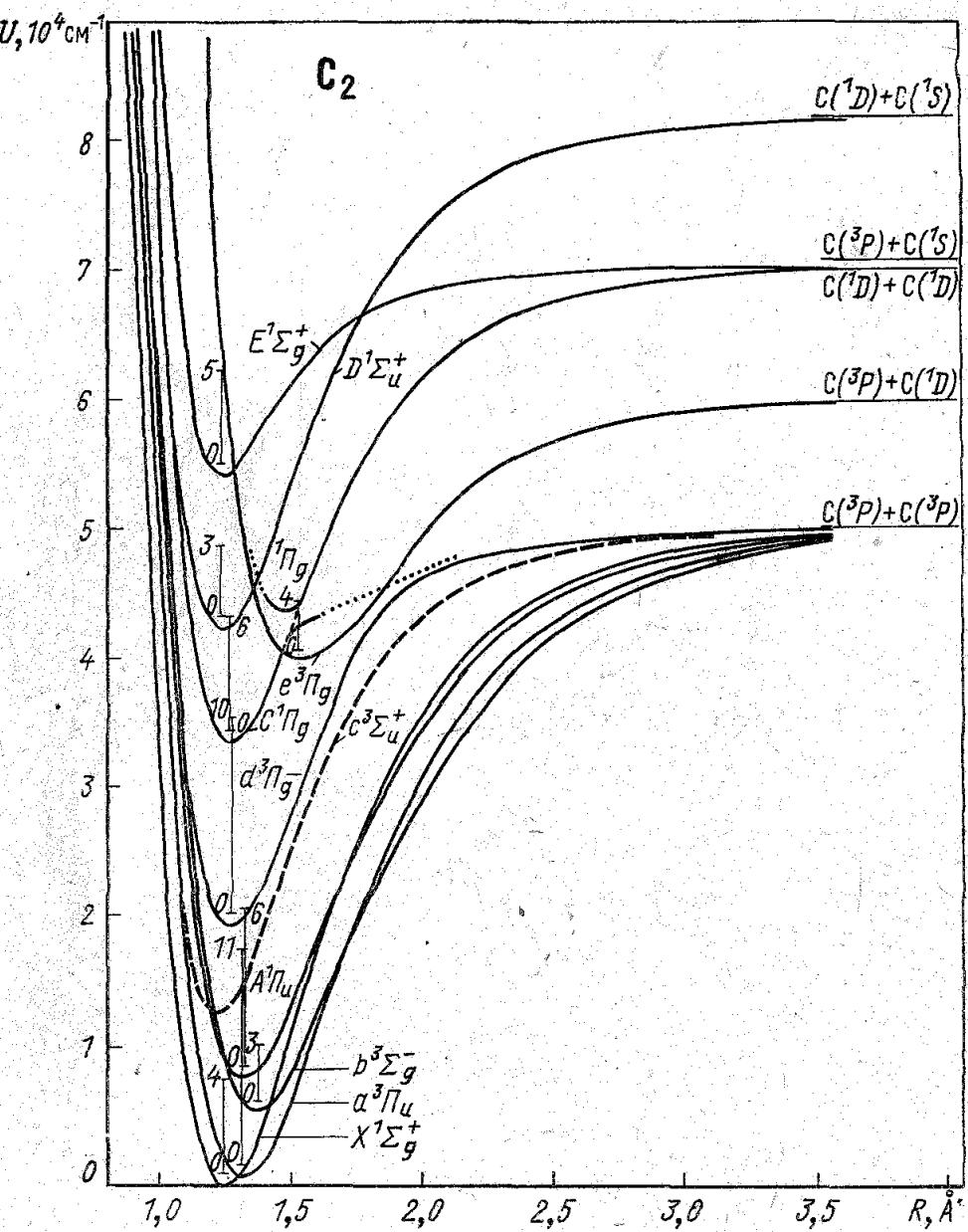


Рис. 7.3. Электронные термы молекулы C_2 , аппроксимированные эмпирическим потенциалом Морзе

электронные состояния характеризуются квантовыми числами: Λ — проекцией орбитального момента электронов на ось молекулы и S — полным спином электронов) имеют вид:

$$S' - S = 0; \quad \Lambda' - \Lambda = 0, \pm 1,$$

причем для двух Σ -термов: $\Sigma^+ \rightarrow \Sigma^+$ и $\Sigma^- \rightarrow \Sigma^-$. Кроме того, для гомоядерных молекул выполняется строгое правило отбора:

$$g \rightarrow u, \quad u \rightarrow g,$$

где g, u — индексы четности волновых функций электронов.

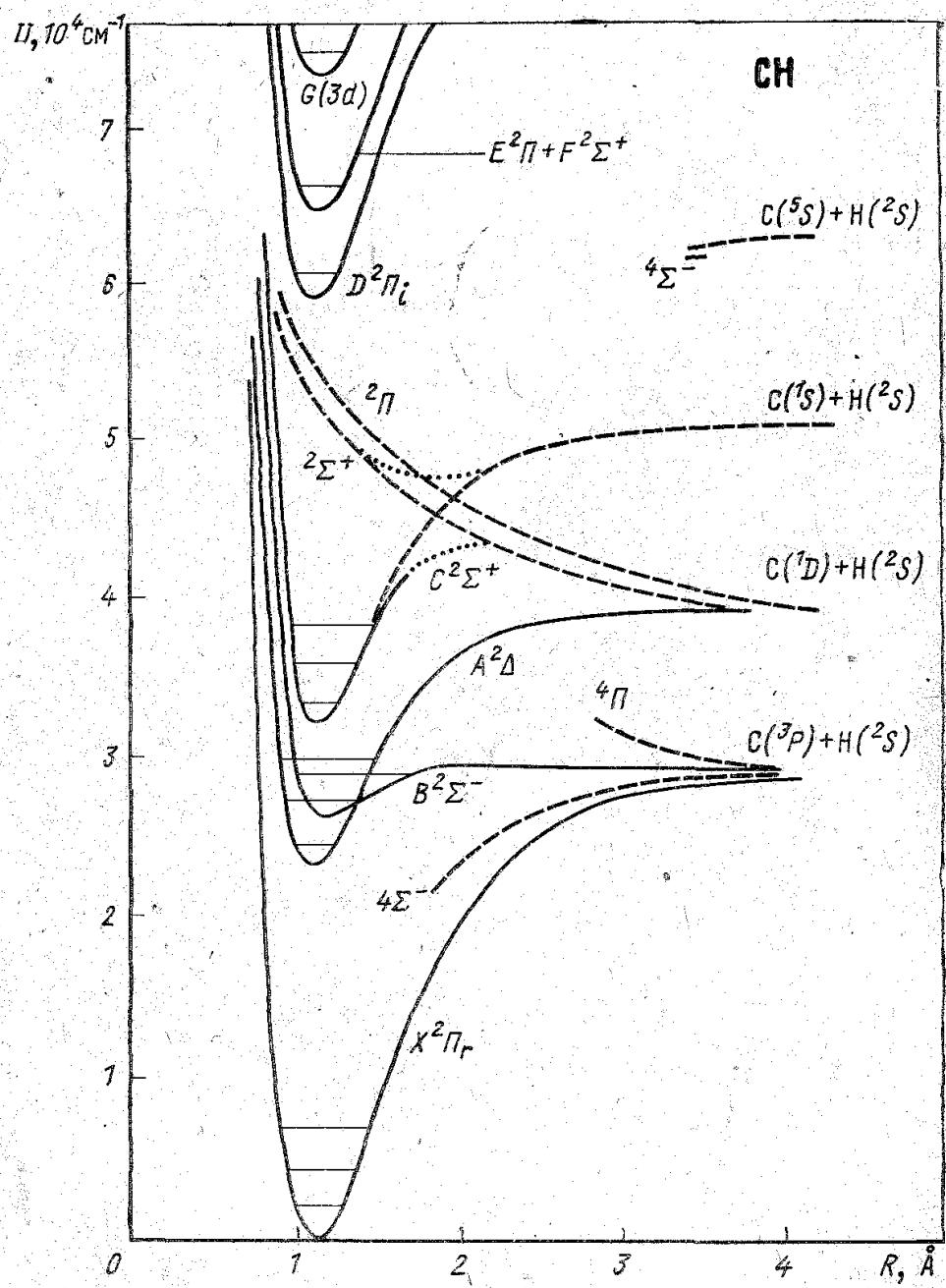


Рис. 7.4. Качественная схема электронных термов молекулы CH, полученная на основе теоретических представлений

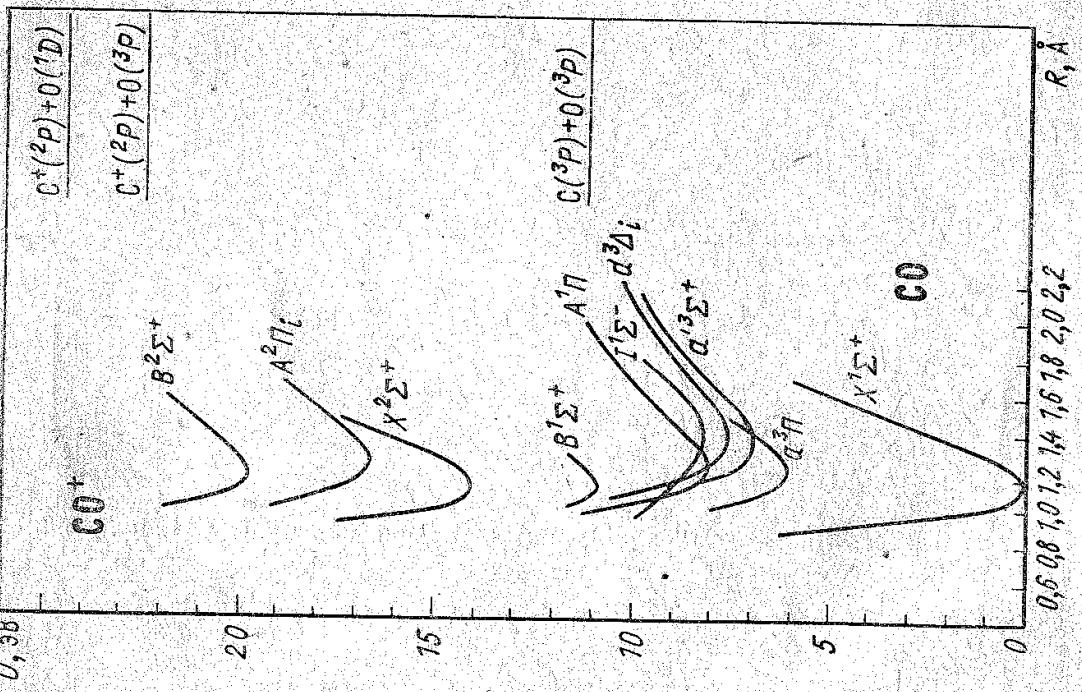


Рис. 7.5. Термы молекул CO и CO+, восстановленные на основе электронно-колебательно-вращательного спектра молекул

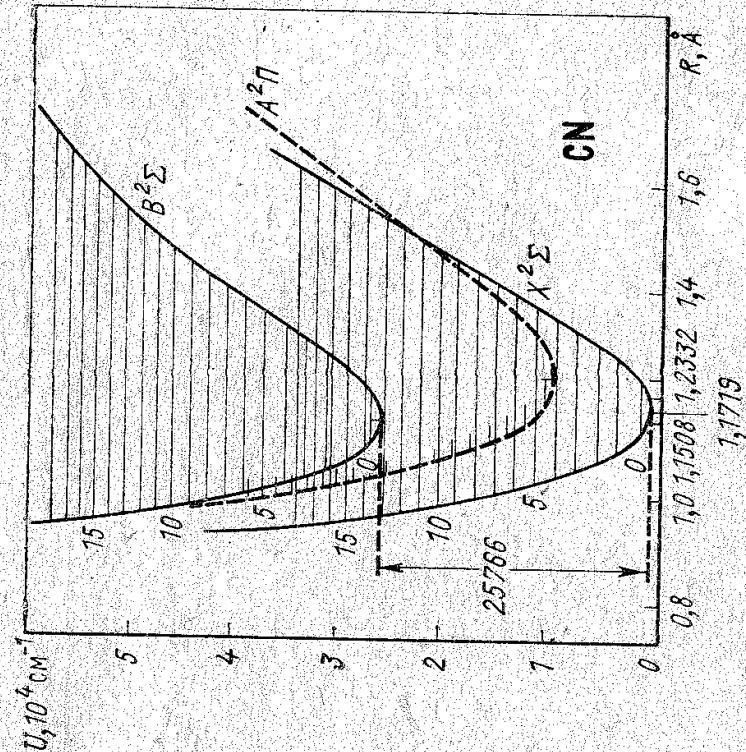


Рис. 7.6. Термы молекулы CN, восстановленные на основе электронно-колебательно-вращательного спектра молекул

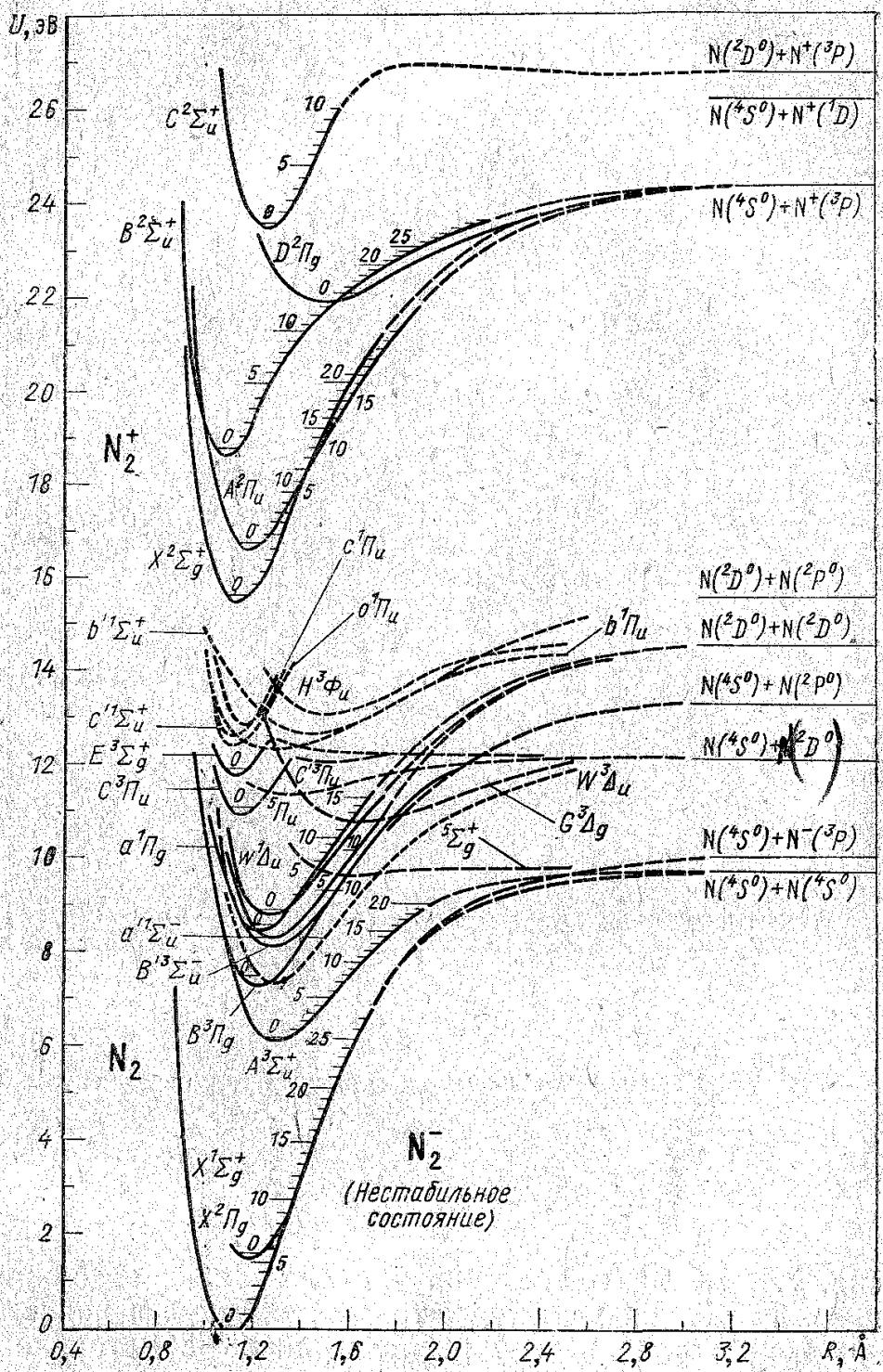


Рис. 7.7. Схема электронных молекул N_2 , N_2^+ и N_2^-

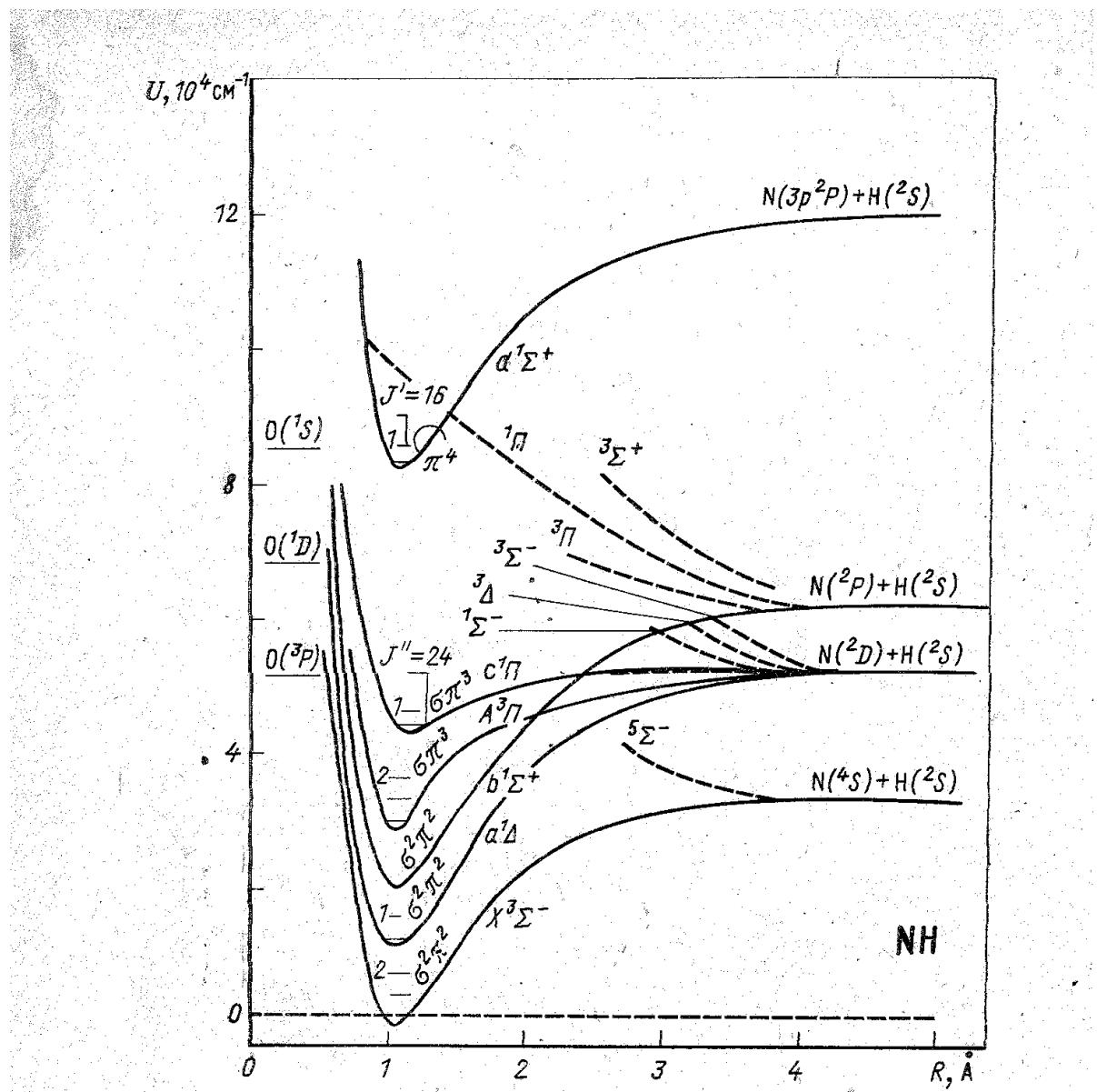


Рис. 7.8. Качественная схема электронных термов молекулы NH

В табл. 7.4, 7.5 даны значения времени жизни возбужденных электронных состояний ряда двухатомных молекул и ионов с указанием их точности. Наиболее распространенные методики определения времени жизни состояний сводятся к измерениям длительности послесвечения возбужденных молекул и фазового сдвига излучения [7—9]. В отдельных графах таблицы также приведены символы излучающих электронных состояний молекул и значения энергии кванта для перехода с нулевого колебательного уровня верхнего электронного состояния в основное.

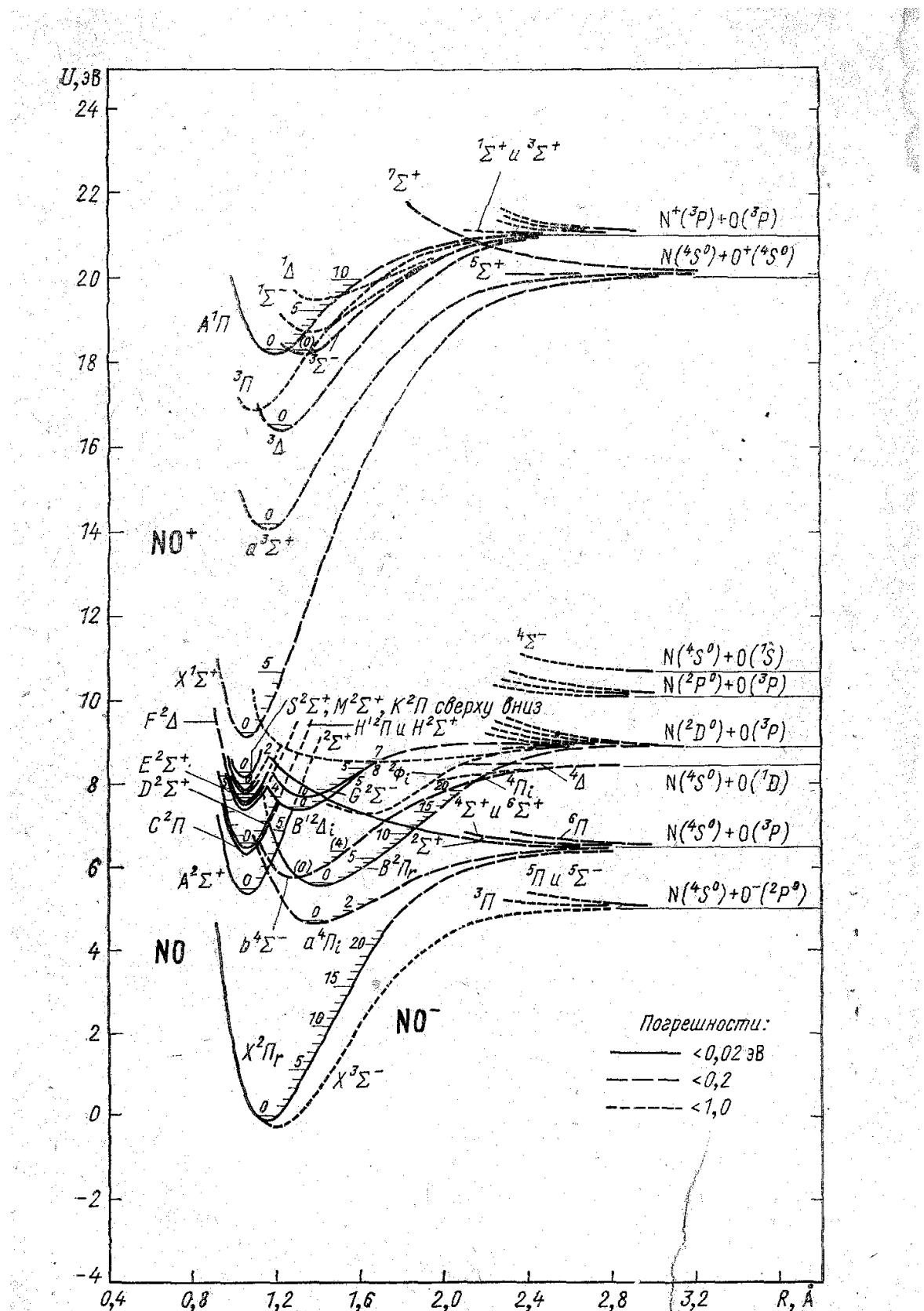


Рис. 7.9. Схема электронных термов молекул NO^+ и NO^-

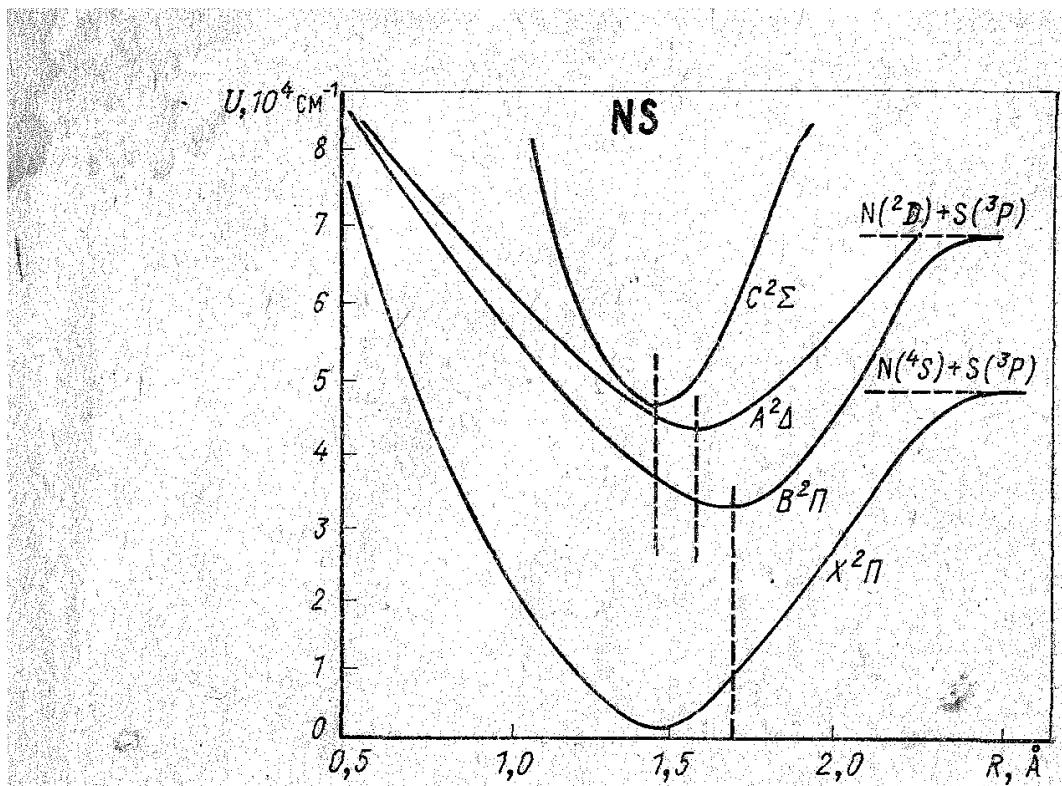


Рис. 7.10. Качественная схема электронных термов молекулы NS

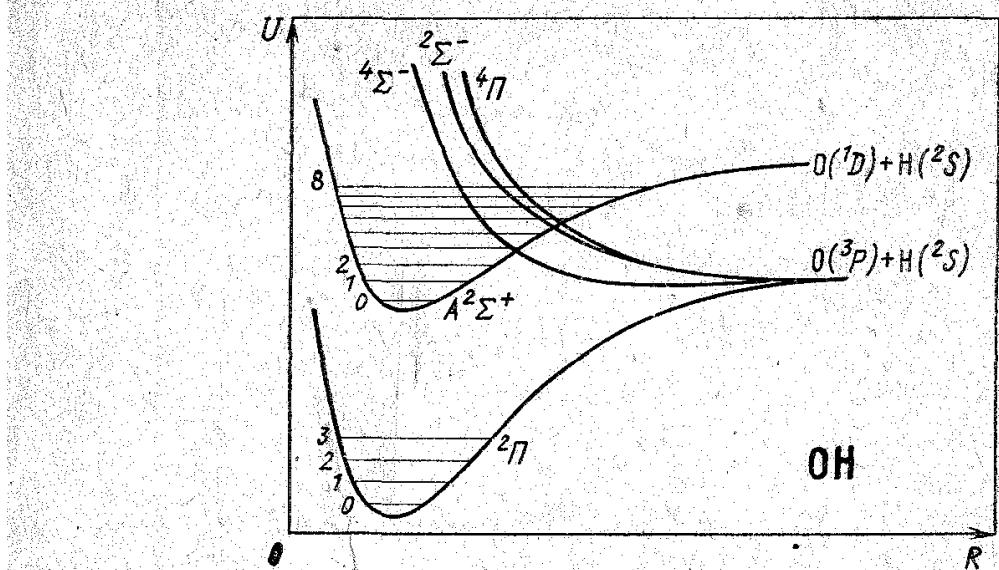


Рис. 7.11. Качественная схема электронных термов молекулы OH

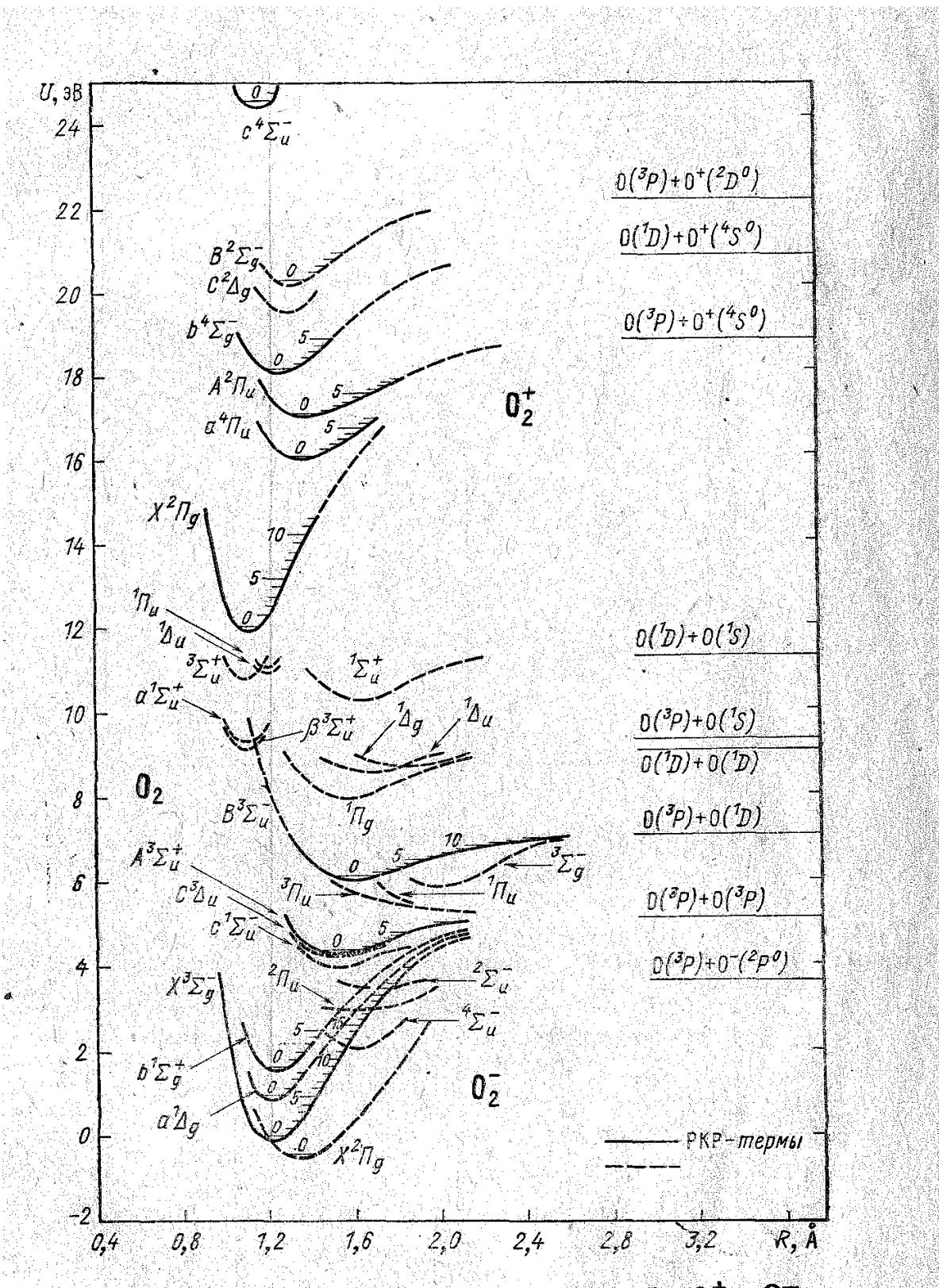


Рис. 7.12. Схема электронных термов молекул O_2 , O_2^+ и O_2^-

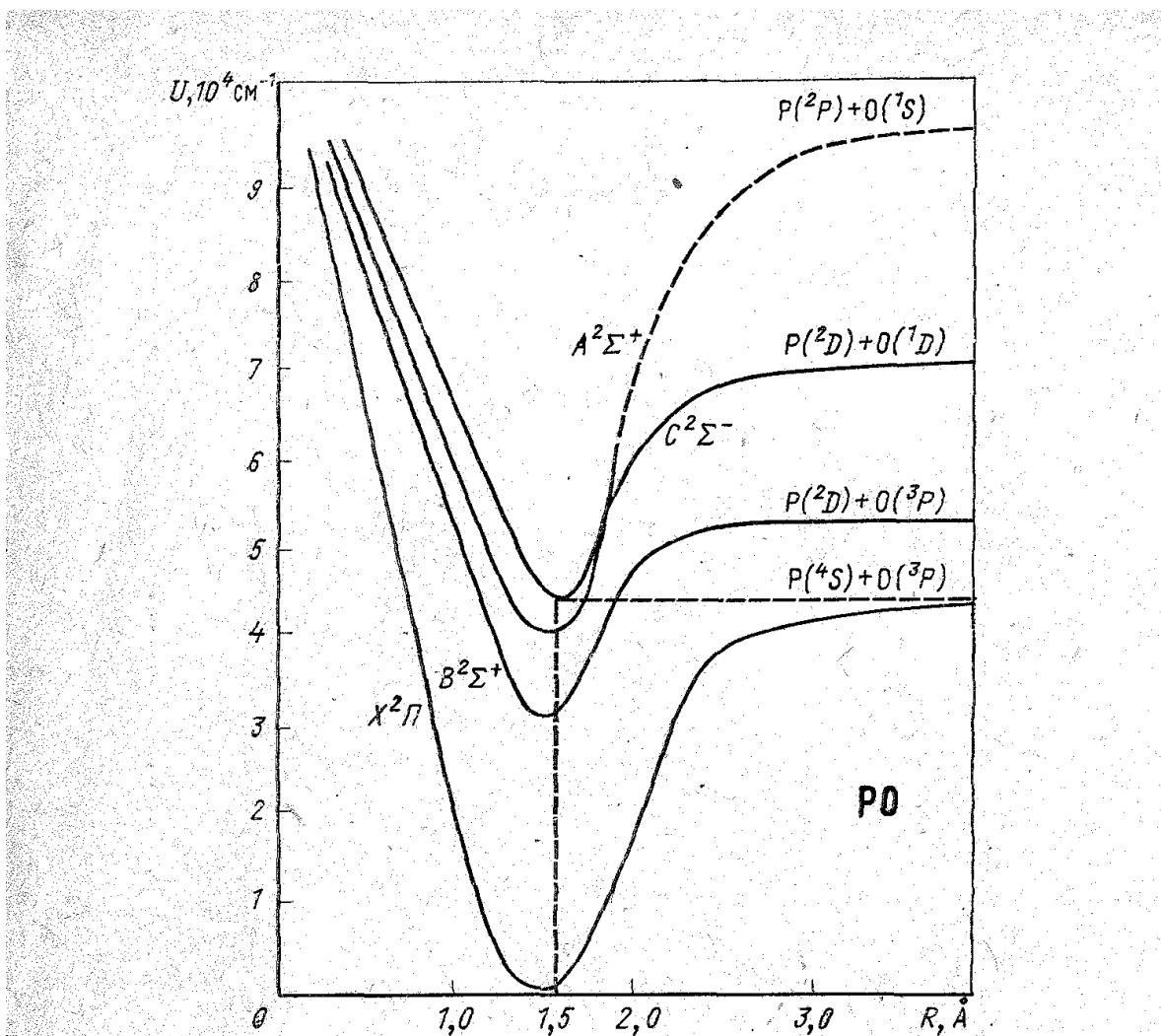


Рис. 7.13. Качественная схема электронных термов молекулы РО

Таблица 7.4

Времена жизни электронно-возбужденных состояний двухатомных молекулярных частиц, находящихся в нижних колебательных состояниях

Молекула	Электронно-возбужденное состояние	Энергия возбуждения состояния (переход между основными колебательными состояниями), эВ	Время жизни, мкс, и класс точности
Br ₂	B ³ Π _u (0 ⁺ _u)	1,95	0,28 (B)
BrCl	A ³ Π ₀₊	2,07	18 (C)
C ₂	C ¹ Π _g	4,245	0,031 (C)
	d ³ Π _g	2,48	0,12 (C)
CH	B ² Σ ⁻	3,14	0,36 (C)
	A ² Δ	2,88	0,5 (C)
CH ⁺	B ¹ Δ	3,36	0,23 (D)
	A ¹ Π	2,75	0,36 (D)

Продолжение табл. 7.4

Молекула	Электронно-возбужденное состояние	Энергия возбуждения состояния (переход между основными колебательными состояниями), эВ	Время жизни, мкс, и класс точности
CN	$B^2\Sigma^+$	3,07	0,05 (D)
	$A^2\Pi_i$	1,0	8 (D)
CO	$C^1\Sigma^+$	11,3	0,025 (D)
	$B^1\Sigma^+$	10,6	0,025 (D)
CO ⁺	$A^1\Pi$	7,89	0,0095 (C)
	$B^2\Sigma^+$	5,63	0,052 (C)
	$A^2\Pi_i$	2,49	3,80 (B)
Cl ₂	$A^3\Pi(0_u^+)$	2,19	10 (D)
H ₂	$C^1\Pi_u^-$	12,0	0,0006 (D)
	$a^3\Sigma_g^+$	11,5	0,011 (C)
	$B^1\Sigma_u^+$	10,9	0,0008 (D)
N ₂	$C^3\Pi_u$	10,9	0,037 (B)
	$a^1\Pi_g$	8,40	100 (D)
	$B^3\Pi_g$	7,21	6,5 (D)
N ₂ ⁺	$B^2\Sigma_u^+$	3,03	0,063 (B)
	$A^2\Pi_{uu}$	0,98	14 (C)
NH	$c^1\Pi$	5,4	0,44 (D)
	$A^3\Pi_i$	3,50	0,43 (C)
	$b^1\Sigma^+$	2,71	$1,8 \cdot 10^4$ (D)
NH ⁺	$C^2\Sigma^+$	—	0,4 (D)
	$B^2\Delta$	—	0,9 (D)
NO	$A^2\Sigma^-$	—	1,1 (D)
	$C^2\Pi$	—	0,03 (D)
	$B^2\Pi$	5,64	3,1 (D)
NO ⁺	$A^2\Sigma^+$	—	0,17 (D)
	$A^1\Pi$	9,06	0,05 (D)
Na ₂	$B^1\Pi_u$	2,52	0,007 (C)
	$A^1\Sigma_u^+$	1,82	0,012 (B)
O ₂	$A^3\Sigma_u^+$	4,34	20 (D)
O ₂ ⁺	$b^4\Sigma_g^-$	6,06	1,1 (C)
	$A^2\Pi_u$	4,91	0,7 (D)
OH	$C^2\Sigma^+$	10,9	6,1 (C)
	$A^2\Sigma^+$	4,02	0,77 (C)
S ₂	$B^3\Sigma_u^-$	3,91	0,02 (D)
SH	$A^2\Sigma^+$	—	0,3 (D)
SO	$B^3\Sigma^-$	5,13	0,017 (C)
	$A^3\Pi$	4,73	0,013 (C)

Таблица 7.5

Метастабильные состояния молекул и молекулярных ионов*

Молекула (ион) и терм	Энергия возбуждения, отсчитанная от основного состояния, эВ	Время жизни, с	Молекула (ион) и терм	Энергия возбуждения, отсчитанная от основного состояния, эВ	Время жизни, с
$N_2 (A^3\Sigma_u^+)$	6,17	13	$NO (a^4\Pi)$	4,7	0,2
$N_2 (a'^1\Sigma_u^-)$	8,40	0,7	$O_2 (a^1\Delta_g)$	0,98	$2,7 \cdot 10^8$
$N_2 (a^1\Pi_g)$	8,55	$1,7 \cdot 10^{-4}$	$O_2 (b^1\Sigma_g^+)$	1,63	7
$N_2 (E^3\Sigma_g^+)$	11,87	270			

* Погрешность определяется последней значащей цифрой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1949.
- Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
- Слэтер Дж. Электронная структура молекул. Пер. с англ. М., «Мир», 1965.
- Herzberg G. Molecular spectra and molecular structure, 2nd ed., vol. 1. Spectra of diatomic molecules, Van Nostrand, Princeton, New Jersey, 1950; Huber K. P., Herzberg G. Molecular spectra and molecular structure IV: Constants of diatomic molecules, Van Nostrand Reinhold, Princeton, New Jersey, 1979.
- Rosen B. (ed.). Spectroscopic data relative to diatomic molecules. — N. Y. — Lond., Pergamon Press, 1970.
- Barrow R. F. (ed.). Diatomic molecules: a critical bibliography of spectroscopic data. National Center for Scientific Research, Paris, 1973, v. I; 1975, v. II; 1979, v. III.
- Suchard S. N. (ed.). Spectroscopic data. Vol. 1. «Heteronuclear diatomic molecules», pt. A, B. IFI/Plenum, N. Y. — Washington — Lond., 1975; Suchard S. N., Melzer J. E. (eds.). Spectroscopic data. Vol. 2. «Homonuclear diatomic molecules». IFI/Plenum. N. Y. — Washington — Lond., 1976.
- Anderson R. «Atomic Data», 1971, v. 3, p. 227.
- «Успехи физ. наук», 1974, т. 113, с. 285. Авт.: Л. А. Кузнецова, Н. Е. Кузьменко, Ю. Я. Кузяков, Ю. А. Пластиинин.

Глава 8

ЭНЕРГИЯ РАЗРЫВА СВЯЗЕЙ В ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛАХ И ИОНАХ

§ 8.1. Потенциалы ионизации двухатомных молекул

В табл. 8.1 приводятся потенциалы ионизации I двухатомных молекул, взятые главным образом из справочника Л. В. Гурвица и др. [1] и дополненные в ряде случаев более современными значениями. Искомая энергия соответствует переходу между нулевыми колебательными уровнями основных электронных состояний иона и молекулы. Основными методами определения потенциала ионизации молекул являются спектроскопический метод, методы фотоионизации и электронного удара [1]. Представленные в таблице данные распределены по четырем классам точности (см. предисловие). Порядок следования химических символов молекул соответствует латинскому алфавиту.

Таблица 8.1

Потенциалы ионизации двухатомных молекул

Молекула или радикал	I , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	I , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	I , эВ, и класс точности
AgF	11,4 (B)	CN	14,20 (A)	GaS	8,9 (C)
AlCl	9,4 (C)	CO	14,014 (A)	GaSe	8,8 (C)
AlF	9,5 (C)	CS	11,1 (B)	GaTe	8,4 (C)
AlO	9,5 (C)	CaF	6,0 (C)	Ge ₂	7,9 (C)
AlS	9,5 (C)	CaCl	6,0 (B)	GeBr	7,3 (C)
AlTe	9,0 (C)	CaO	6,5 (C)	GeC	10,3 (C)
As ₂	12 (C)	CeO	5,2 (C)	GeCl	7,2 (C)
At ₂	8,3 (C)	Cl ₂	11,48 (A)	GeF	7,3 (C)
AuBr	9,2 (C)	ClF	12,7 (B)	GeO	11 (C)
AuSi	8,3 (C)	ClO	10,4 (C)	GeSi	8,2 (C)
BC	10,5 (C)	CoO	9,0 (C)	GeTe	10,1 (C)
BF	11,5 (B)	CrF	8,4 (C)	H ₂	15,4261 (A)
BO	13,5 (C)	CrO	8,4 (C)	HBr	11,62 (A)
BSi	7,8 (C)	Cs ₂	3,64 (B)	HCl	12,74 (A)
BaCl	5,0 (B)	CsBr	7,72 (A)	HD	15,443 (A)
BaF	4,9 (C)	CsI	7,25 (A)	HI	10,38 (A)
BaO	6,7 (C)	D ₂	15,468 (A)	HT	15,448 (A)
BeF	9,1 (C)	DF	16,04 (A)	HoF	6,2 (C)
BeO	10,1 (C)	DT	15,477 (A)	I ₂	9,4 (B)
Br ₂	10,56 (A)	DyF	6,0 (C)	IBr	9,98 (A)
BrCl	11,1 (B)	ErF	6,3 (C)	ICl	10,31 (A)
BrF	11,62 (A)	F ₂	15,686 (A)	IF	10,5 (B)
C ₂	11,9 (C)	GaF	10,6 (C)	InF	9,6 (C)
CH	10,9 (B)	GaO	9,4 (C)	InS	7,0 (C)

Продолжение табл. 8.1

Молекула или радикал	I , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	I , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	I , эВ, и класс точности
InSe	7,1 (C)	OD	13,19 (A)	SiF	7,26 (A)
InTe	7,6 (C)	OH	13,18 (A)	SiO	10,51 (A)
IrC	9,5 (D)	OT	13,19 (A)	SnBr	7,4 (C)
K ₂	3,8 (C)	P ₂	11,1 (C)	SnCl	6,6 (C)
KI	8,2 (C)	PC	10,5 (C)	SnF	7,4 (C)
KNa	4,5 (B)	PH	10,6 (B)	SnO	10,5 (C)
Li ₂	5,15 (B)	PbBr	7,8 (C)	SnS	9,7 (C)
LiBr	9,4 (C)	PbCl	7,5 (C)	SnSe	9,7 (C)
LiCl	10,1 (C)	PbF	7,5 (C)	SnTe	9,1 (C)
LiF	11,3 (C)	PbO	9,0 (C)	SrCl	5,6 (B)
LiH	7,85 (B)	PbS	8,6 (C)	SrF	4,9 (C)
LiI	8,6 (C)	PbTe	8,2 (C)	SrO	6,1 (C)
MgCl	7,5 (B)	Pd ₂	7,7 (C)	T ₂	15,486 (A)
MgF	7,8 (C)	PdO	9,1 (C)	TaO	6,0 (C)
Mn ₂	7,4 (C)	PdSi	8,4 (C)	Te ₂	8,29 (A)
MnF	8,7 (C)	PrO	4,9 (D)	TeO	9,5 (C)
MoO	8,0 (C)	PtB	10 (D)	Ti ₂	6,3 (C)
N ₂	15,580 (A)	PtSi	7,9 (C)	TiO	6,8 (C)
NF	12,3 (B)	Rb ₂	3,45 (B)	TiS	7,1 (C)
NH	13,1 (A)	RbI	8,0 (C)	TlBr	9,14 (A)
NO	9,264 (A)	RhO	9,3 (C)	TlCl	9,70 (A)
NS	9,8 (B)	RuO	8,7 (C)	TlF	10,5 (B)
Na ₂	4,90 (A)	S ₂	9,4 (B)	TlI	8,47 (A)
NaCl	8,92 (A)	SH	10,4 (A)	V ₂	6,4 (C)
NaI	7,64 (A)	SO	12,1 (B)	VO	5,0 (D)
NdO	5,0 (D)	Sb ₂	9,0 (C)	WO	9,1 (D)
NiCl	11,4 (B)	Se ₂	8,88 (A)	UO	5,7 (B)
NiO	9,5 (C)	Si ₂	7,4 (C)	ZrN	7,9 (C)
O ₂	12,077 (A)	SiC	10,2 (B)	ZrO	6,6 (C)

§ 8.2. Энергии диссоциации двухатомных молекул и молекулярных ионов

В табл. 8.2—8.4 даны энергии диссоциации двухатомных молекул и молекулярных ионов D_0 , соответствующие переходу с нулевого колебательного уровня основного электронного состояния молекул [1—4]. Энергии диссоциации молекулярных ионов рассчитывались на основе термохимических соотношений, связывающих отдельные звенья круговых процессов:

$$D_0(A-B^+) = D_0(A-B) + I(B) - I(AB);$$

$$D_0(A-B^-) = D_0(A-B) + EA(AB) - EA(B),$$

где I — потенциал ионизации частицы, EA — энергия сродства к электрону.

Значения энергии диссоциации молекулярных частиц распределены по четырем классам точности (см. предисловие). Порядок следования химических символов молекул соответствует латинскому алфавиту.

Таблица 8.2
Энергия диссоциации D_0 двухатомных молекул

Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности	Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности
Ag_2 ($^1\Sigma^+$)	1,7 (C)	BeS ($^1\Sigma^+$)	3,8 (D)
Al_2 ($^3\Sigma_g^-$)	2,0 (C)	Bi_2 ($^1\Sigma_g^+$)	1,8 (C)
AlBr ($^1\Sigma^+$)	4,5 (C)	BiBr (0^+)	2,74 (A)
AlCl ($^1\Sigma^+$)	5,1 (C)	BiCl (0^+)	3,1 (C)
AlF ($^1\Sigma^+$)	6,85 (B)	BiO ($^2\Pi_{1/2}$)	3,1 (D)
AlI ($^1\Sigma^+$)	3,8 (C)	Br_2 ($^1\Sigma_g^+$)	1,970 (A)
AlO ($^2\Sigma^+$)	5,14 (B)	BrCl ($^1\Sigma^+$)	2,23 (A)
AlP ($^1\Sigma^+$)	2,2 (C)	C_2 ($^1\Sigma_g^+$)	6,2 (C)
AlS ($^2\Sigma$)	3,5 (D)	CBr ($^2\Pi_r$)	2,8 (C)
AlSe ($^2\Sigma$)	3,5 (C)	CCl ($^2\Pi$)	3,8 (D)
Ar_2 ($^1\Sigma_g^+$)	0,00953 (A)	CF ($^2\Pi_r$)	5,5 (C)
AsN ($^1\Sigma^+$)	5,0 (D)	CH ($^2\Pi$)	3,45 (A)
AsO ($^2\Pi_{1/2}$)	4,9 (B)	CN ($^2\Sigma^+$)	7,75 (B)
Au_2 ($^1\Sigma_g^+$)	2,3 (C)	CO ($^1\Sigma^+$)	11,09 (A)
B_2 ($^3\Sigma_g^-$)	2,9 (D)	CP ($^2\Sigma^+$)	5,3 (C)
BBr ($^1\Sigma_0^+$)	4,3 (C)	CS ($^1\Sigma^+$)	7,35 (A)
BC ($^4\Sigma^-$)	4,6 (C)	CaBr ($^2\Sigma^+$)	3,9 (D)
BCl ($^1\Sigma$)	5,1 (C)	CaCl ($^2\Sigma^+$)	4,6 (C)
BF ($^1\Sigma^+$)	7,85 (B)	CaF ($^2\Sigma^+$)	5,53 (B)
BH ($^1\Sigma^+$)	3,39 (B)	CaI ($^2\Sigma^+$)	3,0 (D)
BN ($^2\Pi$)	4,0 (D)	CaO ($^1\Sigma$)	4,3 (D)
BO ($^2\Sigma^+$)	8,3 (B)	CaS ($^1\Sigma^+$)	3,2 (C)
BS ($^2\Sigma$)	5,1 (D)	Ce_2 —	2,83 (A)
BaBr ($^2\Sigma^+$)	3,7 (B)	CeB —	3,1 (C)
BaF ($^2\Sigma^+$)	5,8 (B)	CeN —	5,3 (C)
BaH ($^2\Sigma$)	1,8 (C)	CeO ($^3\Phi_3$)	8,37 (B)
BaI ($^2\Sigma^+$)	3,16 (B)	CeS —	5,90 (B)
BaS ($^1\Sigma^+$)	4,1 (C)	Cl_2 ($^1\Sigma_g^+$)	2,4975 (A)
BeBr ($^2\Sigma^+$)	4,3 (D)	ClF ($^1\Sigma^+$)	2,558 (A)
BeCl ($^2\Sigma^+$)	4,0 (C)	Co_2 —	1,7 (D)
BeF ($^2\Sigma^+$)	5,9 (C)	CoO —	3,7 (C)
BeO ($^1\Sigma$)	4,6 (C)	CoS —	3,4 (C)
BeP ($^2\Sigma$)	3,6 (C)	CoSi ($^2\Sigma$)	2,8 (C)

Продолжение табл. 8.2

Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности	Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности
Cr_2 —	1,6 (D)	HBr (${}^1\Sigma^+$)	3,75 (B)
CrBr —	3,3 (C)	HCl (${}^1\Sigma^+$)	4,431 (A)
CrCl (${}^6\Sigma^+$)	3,8 (C)	HF (${}^1\Sigma^+$)	5,8 (B)
CrF (${}^6\Sigma^+$)	4,0 (D)	HI (${}^1\Sigma^+$)	3,06 (B)
CrH (${}^6\Sigma^+$)	2,8 (D)	HS (${}^2\Pi_t$)	3,5 (B)
CrI —	2,9 (C)	HfO (${}^1\Sigma$)	7,6 (D)
CrO (${}^5\Pi$)	4,3 (C)	Hg_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	0,14 (D)
CrS —	3,0 (C)	HgH (${}^2\Sigma$)	0,4 (D)
Cs_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	0,45 (B)	Ho_2 —	2,0 (D)
CsBr (${}^1\Sigma^+$)	4,17 (B)	HoO —	6,6 (B)
CsCl (${}^1\Sigma^+$)	4,58 (B)	HoS —	4,4 (C)
CsF (${}^1\Sigma^+$)	5,29 (A)	HoSe —	3,4 (C)
CsH (${}^1\Sigma^+$)	1,9 (D)	I_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	1,54 (A)
CsI (${}^1\Sigma^+$)	3,57 (B)	IBr (${}^1\Sigma^+$)	1,817 (A)
Cu_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	2,05 (B)	ICl (${}^1\Sigma^+$)	2,152 (A)
D_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	4,56 (A)	IF (${}^1\Sigma^+$)	2,0 (C)
Dy_2 —	0,8 (D)	InBr (${}^1\Sigma^+$)	4,0 (C)
Er_2 —	0,8 (D)	InCl (${}^1\Sigma^+$)	4,5 (C)
F_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	1,38 (B)	InF (${}^1\Sigma^+$)	5,4 (C)
FO (${}^2\Pi$)	2,39 (B)	InH (${}^1\Sigma^+$)	2,5 (C)
Fe_2 —	1,3 (D)	InI (${}^1\Sigma^+$)	3,4 (C)
FeO (${}^5\Sigma^+$)	4,2 (C)	InO (${}^2\Sigma$)	3,3 (D)
FeS —	3,3 (C)	InS (${}^2\Sigma$)	2,9 (C)
Ga_2 —	1,4 (D)	IrC (${}^2\Delta_{5/2}$)	7,7 (C)
GaBr (${}^1\Sigma^+$)	4,3 (C)	K_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	0,5 (C)
GaCl (${}^1\Sigma^+$)	4,9 (C)	KBr (${}^1\Sigma^+$)	3,96 (B)
GaF (${}^1\Sigma^+$)	6,1 (B)	KCl (${}^1\Sigma^+$)	4,37 (B)
GaH (${}^1\Sigma^+$)	2,8 (C)	KCs (${}^1\Sigma_g^+$)	0,49 (C)
GaI (${}^1\Sigma^+$)	3,4 (B)	KF (${}^1\Sigma^+$)	5,16 (B)
GaP (${}^3\Sigma^-$)	2,3 (C)	KRb (${}^1\Sigma_g^+$)	0,49 (C)
Gd_2 —	1,8 (D)	La_2 —	2,5 (C)
Ge_2 (${}^3\Sigma$)	2,8 (C)	LaO (${}^2\Sigma^+$)	8,2 (B)
GeBr (${}^2\Pi_{1/2}$)	2,6 (D)	LaS (${}^2\Sigma^+$)	5,9 (B)
GeC (${}^3\Sigma$)	4,7 (C)	Li_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	1,03 (B)
GeCl (${}^2\Pi_{1/2}$)	3,5 (C)	LiBr (${}^1\Sigma^+$)	4,3 (B)
GeF (${}^2\Pi_{1/2}$)	5,0 (C)	LiCl (${}^1\Sigma^+$)	4,91 (A)
GeO (${}^1\Sigma^+$)	6,78 (B)	LiCs (${}^1\Sigma^+$)	0,9 (D)
GeS (${}^1\Sigma^+$)	5,68 (A)	LiF (${}^1\Sigma^+$)	5,89 (A)
GeSe (${}^1\Sigma^+$)	5,7 (B)	LiH (${}^1\Sigma^+$)	2,429 (A)
GeTe (${}^1\Sigma^+$)	4,0 (B)	LiI (${}^1\Sigma^+$)	1,92 (B)
H_2 (${}^1\Sigma_g^+$)	4,478 (A)	LiK (${}^1\Sigma^+$)	0,85 (C)
		LiNa (${}^1\Sigma^+$)	0,90 (C)

Продолжение табл. 8.2

Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности	Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности
LiRb (${}^1\Sigma^+$)	0,83 (C)	OH (${}^2\Pi_i$)	4,40 (A)
LuO (${}^2\Sigma$)	7,2 (B)	P ₂ (${}^1\Sigma_g^+$)	5,0 (B)
LuS —	5,2 (B)	PF (${}^3\Sigma^-$)	4,5 (D)
MgBr (${}^2\Sigma^+$)	3,2 (D)	PH (${}^3\Sigma^-$)	3,5 (C)
MgCl (${}^2\Sigma^+$)	3,9 (D)	PN (${}^1\Sigma^+$)	7,57 (A)
MgF (${}^2\Sigma^+$)	4,5 (B)	PO (${}^2\Pi_r$)	6,14 (B)
MgH (${}^2\Sigma^+$)	2,2 (C)	PS (${}^2\Pi$)	5,2 (B)
MgO (${}^1\Sigma^+$)	4,16 (C)	PbCl (${}^2\Pi_{1/2}$)	3,8 (C)
MnCl (${}^1\Sigma$)	3,7 (B)	PbF (${}^2\Pi_{1/2}$)	3,0 (D)
MnF (${}^1\Sigma$)	5,2 (D)	PbO (${}^1\Sigma^+$)	3,9 (B)
MnH (${}^1\Sigma$)	2,4 (D)	PbS (${}^1\Sigma^+$)	3,5 (B)
MnO —	3,7 (C)	PbSe (${}^1\Sigma^+$)	2,5 (C)
MnS —	2,85 (C)	Pd ₂ (${}^1\Sigma$)	1,1 (D)
N ₂ (${}^1\Sigma_g^+$)	9,76 (A)	PdB —	3,4 (C)
NBr (${}^3\Sigma^-$)	2,8 (C)	PdO —	2,9 (D)
NCI (${}^3\Sigma^-$)	2,8 (C)	Po ₂ (${}^0_g^+$)	1,9 (C)
NF (${}^3\Sigma^-$)	3,2 (C)	Pr ₂ —	1,3 (D)
NH (${}^3\Sigma^-$)	3,5 (B)	PrO (${}^2\Pi_{3/2}$)	7,7 (B)
NI (${}^3\Sigma^-$)	1,64 (C)	PrS —	5,2 (B)
NO (${}^2\Pi_{1/2}$)	6,50 (A)	PtC (${}^1\Sigma$)	6,3 (B)
NS (${}^2\Pi$)	4,8 (C)	PtH (${}^2\Delta_{5/2}$)	3,6 (D)
NSe (${}^2\Pi_{1/2}$)	4,0 (D)	PtO (${}^1\Sigma$)	3,8 (C)
Na ₂ (${}^1\Sigma_g^+$)	0,75 (B)	PuF —	5,5 (C)
NaCl (${}^1\Sigma^+$)	4,3 (B)	Rb ₂ (${}^1\Sigma_g^+$)	0,47 (D)
NaCs (${}^1\Sigma_g^+$)	0,64 (C)	RbBr (${}^1\Sigma^+$)	3,94 (B)
NaF (${}^1\Sigma^+$)	4,9 (B)	RbCl (${}^1\Sigma^+$)	4,46 (B)
NaK (${}^1\Sigma_g^+$)	0,63 (C)	RbCs (${}^1\Sigma_g^+$)	0,47 (C)
NaRb (${}^1\Sigma_g^+$)	0,62 (C)	RbF (${}^1\Sigma^+$)	5,18 (B)
NbO (${}^4\Sigma^-$)	7,8 (B)	RbH (${}^1\Sigma^+$)	4,0 (C)
NdF —	5,9 (B)	RbI (${}^1\Sigma^+$)	3,37 (B)
NdO —	7,5 (B)	RhC (${}^2\Sigma^+$)	6,01 (A)
NdS —	4,9 (C)	RhO —	4,2 (C)
Ni ₂ —	2,4 (C)	RuC —	6,5 (B)
NiBr —	3,7 (B)	RuO —	5,3 (C)
NiCl (${}^2\Delta_{5/2}$)	3,8 (C)	S ₂ (${}^3\Sigma_g^-$)	4,4 (B)
NiF —	3,8 (D)	SF (${}^2\Pi$)	3,5 (B)
NiH (${}^2\Delta_{5/2}$)	2,6 (D)	SO (${}^3\Sigma^-$)	3,357 (A)
NiI —	3,0 (C)	Sb ₂ (${}^3\Sigma^-$)	2,4 (C)
NiS —	3,5 (C)	SbBr (${}^3\Sigma^-$)	3,2 (D)
O ₂ (${}^3\Sigma_g^-$)	5,12 (A)	SbCl (${}^3\Sigma^-$)	3,7 (D)
		SbF (${}^3\Sigma^-$)	4,5 (D)

Продолжение табл. 8.2

Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности	Молекула или радикал, терм	D_0 , эВ, и класс точности
SbO ($^2\Pi_r$)	4,0 (D)	SrO ($^1\Sigma^+$)	5,7 (D)
Sc ₂ —	1,1 (D)	SrS ($^1\Sigma^+$)	3,5 (C)
ScF ($^1\Sigma^+$)	6,1 (B)	TaO ($\Delta_{3/2}$)	8,4 (C)
SeO ($^2\Sigma^+$)	7,0 (D)	Te ₂ —	2,5 (D)
ScS —	4,9 (B)	TeO (0^+)	3,9 (B)
Se ₂ (0_g^+)	3,164 (A)	Th ₂ —	3,0 (D)
SeO ($^3\Sigma^-$)	4,3 (B)	ThO ($^1\Sigma$)	8,6 (B)
Si ₂ ($^3\Sigma_g^-$)	3,4 (C)	Ti ₂ ($^7\Delta$)	1,2 (D)
SiBr ($^2\Pi_{3/2}$)	3,5 (D)	TiCl —	4,3 (C)
SiC ($^1\Sigma$)	4,6 (C)	TiF ($^4\Sigma$)	5,9 (C)
SiCl ($^2\Pi$)	4,5 (D)	TiN ($^2\Sigma$)	4,8 (C)
SiF ($^2\Pi$)	5,0 (C)	TiO ($^3\Delta_u$)	7,0 (B)
SiH ($^2\Pi_{1/2}$)	3,0 (C)	TiS ($^3\Delta_u$)	4,4 (C)
SiN ($^2\Sigma$)	4,5 (C)	TlF ($^1\Sigma^+$)	4,5 (B)
SiO ($^1\Sigma^+$)	8,20 (A)	U ₂ —	1,8 (D)
SiS ($^1\Sigma^+$)	6,4 (B)	UB —	3,3 (D)
SiSe ($^1\Sigma^+$)	5,4 (C)	US —	5,4 (B)
SiTe ($^1\Sigma^+$)	5,2 (C)	V ₂ ($^1\Sigma$)	2,5 (C)
Sn ₂ —	2,0 (C)	VO ($^4\Sigma^-$)	6,4 (B)
SnCl ($^2\Pi_{1/2}$)	3,2 (C)	VS —	4,6 (C)
SnF ($^2\Pi_{1/2}$)	4,8 (B)	WO ($^3\Sigma^-$)	6,8 (C)
SnO ($^1\Sigma^+$)	5,40 (B)	Y ₂ —	1,6 (D)
SnS ($^1\Sigma^+$)	4,8 (B)	YC ₁ ($^1\Sigma^+$)	3,5 (D)
SnSe ($^1\Sigma^+$)	4,1 (B)	YF ($^1\Sigma^+$)	6,2 (C)
SnTe ($^1\Sigma^+$)	3,27 (A)	YO ($^2\Sigma^+$)	7,4 (B)
SrBr ($^2\Sigma^+$)	3,5 (D)	YS —	5,4 (B)
SrCl ($^2\Sigma^+$)	4,2 (C)	ZrN ($^2\Sigma$)	5,8 (C)
SrF ($^2\Sigma^+$)	5,4 (C)	ZrO ($^1\Sigma^+$)	7,8 (C)
SrI ($^2\Sigma^+$)	3,5 (D)	ZrS —	6,0 (B)

Таблица 8.3

Энергия диссоциации D_0 двухатомных положительных молекулярных ионов

Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности
Ar ₂ ⁺	1,23 (C)	C ₂ ⁺	5,22 (C)	CaF ⁺	5,8 (D)	F ₂ ⁺	3,3 (B)
BF ⁺	5,0 (C)	CF ⁺	8,0 (C)	Cl ₂ ⁺	4,03 (A)	GeO ⁺	3,6 (C)
BH ⁺	1,95 (C)	CH ⁺	3,8 (C)	ClF ⁺	2,85 (B)	H ₂ ⁺	2,649 (A)
BaF ⁺	6,4 (D)	CN ⁺	4,97 (B)	ClO ⁺	4,7 (C)	HBr ⁺	4,0 (B)
BeF ⁺	6,1 (D)	CO ⁺	8,34 (B)	Cs ₂ ⁺	0,7 (C)	HF ⁺	3,44 (A)
BrO ⁺	4,0 (C)	CS ⁺	6,69 (B)				

Продолжение табл. 8.3

Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности
He_2^+	2,47 (A)	Li_2^+	1,3 (C)	Ne_2^+	1,1 (D)	Se_2^+	4,1 (B)
I_2^+	2,6 (C)	MgF^+	4,7 (C)	O_2^+	6,66 (A)	SiF^+	6,5 (C)
IBr^+	2,4 (C)	N_2^+	8,713 (A)	OH^+	5,06 (A)	SnF^+	5,1 (C)
ICl^+	2,5 (C)	NH^+	3,76 (B)	Rb_2^+	0,7 (D)	SrF^+	6,3 (D)
K_2^+	0,76 (C)	NO^+	10,85 (A)	S_2^+	5,4 (C)	UO^+	8,3 (C)
Kr_2^+	1,15 (B)	Na_2^+	1,0 (C)	SO^+	5,5 (B)	Xe_2^+	1,0 (C)

Таблица 8.4

Энергия диссоциации D_0 двухатомных отрицательных молекулярных ионов

Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности	Молекулярный ион	D_0 , эВ, и класс точности
Br_2^-	1,18 (B)	Cl_2^-	1,3 (B)	NH^-	2,8 (C)	PH^-	3,8 (C)
C_2^-	8,5 (C)	F_2^-	1,0 (C)	NO^-	5,07 (A)	PO^-	5,8 (B)
CH^-	2,93 (B)	H_2^-	3,724 (A)	O_2^-	4,06 (A)	S_2^-	4,0 (B)
CN^-	10,3 (B)			OH^-	4,77 (A)	SO^-	2,56 (B)
CS^-	7,3 (A)	I_2^-	1,0 (C)				

§ 8.3. Энергии сродства двухатомных молекул к электрону

В табл. 8.5 собрана информация об энергии сродства двухатомных молекул к электрону, характеризующей собой энергию связи электрона в соответствующем молекулярном ионе [5]. Значения энергии сродства молекул к электрону распределены по четырем классам точности (см. предисловие).

§ 8.4. Энергии сродства атомов к протону

Энергия сродства атома к протону характеризует энергию, выделяющуюся при присоединении к атому иона водорода H^+ . Основными методами определения искомой энергии являются метод ионного удара (основанный на измерении потенциалов появления ионов в масс-спектрометре) и термохимический расчет (см. [1]). Приведенные в табл. 8.6 значения энергии сродства атомов к протону распределены по четырем классам точности (см. предисловие) в соответствии с теми погрешностями, которые были указаны авторами оригинальных работ. Основная информация по данному вопросу содержится в справочнике Л. В. Гурвича и др. [1].

Таблица 8.5

Энергия сродства EA двухатомных молекул к электрону

Молекула или радикал	EA , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	EA , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	EA , эВ, и класс точности	Молекула или радикал	EA , эВ, и класс точности
AsBr	1,3 (C)	CH	0,74 (C)	LiF	0,44 (C)	OH	1,827 (A)
AsCl	1,3 (C)	CN	3,82 (A)	LiH	0,30 (D)	OD	1,823 (B)
AsF	1,3 (C)	CS	1,2 (C)	NaCl	0,67 (C)	PH	1,03 (A)
Br ₂	2,6 (C)	Cl ₂	2,44 (B)	NaH	0,32 (D)	PO	1,09 (A)
BO	2,8 (C)	F ₂	2,96 (B)	NH	0,381 (B)	S ₂	1,66 (B)
Be ₂	0,3 (D)	I ₂	2,51 (B)	NO	0,031 (D)	SO	1,09 (C)
BeO	1,8 (C)	Li ₂	0,7 (D)	NS	1,3 (C)	SiH	1,28 (A)
C ₂	3,54 (B)	LiCl	0,6 (D)	O ₂	0,440 (B)		

Таблица 8.6

Энергия сродства атомов к протону

Атом или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности	Атом или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности	Атом или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности	Атом или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности
Ar	3,7 (B)	F	3,5 (C)	Kr	4,4 (B)	S	6,8 (C)
B	7,3 (C)	H	2,65 (A)	N	3,76 (A)	Si	6,5 (C)
Br	5,8 (C)	He	1,85 (A)	Ne	2,08 (B)	U	10,8 (C)
C	6,0 (C)	I	6,3 (C)	O	5,1 (B)	Xe	6,7 (D)
Cl	5,3 (C)						

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М., «Наука», 1974. Авт.: Л. В. Гурвич, Г. В. Караваевцев, В. Н. Кондратьев и др.
2. Gaydon A. G. Dissociation energies and spectra of diatomic molecules. 3rd ed. Lond., Chapman and Hall, 1968; Shafi M., Beckel C. L., Engelke R. «J. Mol. Spectr.», 1972, v. 42, p. 578; Ionization potentials, appearance potentials and heats of formation of gaseous positive ions. NSRDS-NBS 26, Washington, June 1969. Auth.: J. L. Franklin, J. G. Dillard, H. M. Rosenstock e. a.
3. Rosen B. (ed.). Spectroscopic data relative to diatomic molecules. N. Y.—Lond., Pergamon Press, 1970.
4. Suchard S. N. (ed.). Spectroscopic data. V. 1. N. Y.—Washington—Lond. IFI/Plenum, 1975; Suchard S. N., Melzer J. E. (ed.) Spectroscopic data. V. 2. N. Y.—Washington—Lond. IFI/Plenum, 1976.
5. Смирнов Б. М. Отрицательные ионы. М., Атомиздат, 1978; Смирнов Б. М. Комплексные ионы в газах.—«Успехи физ. наук», 1977, т. 121, с. 231.

Глава 9

МНОГОАТОМНЫЕ МОЛЕКУЛЫ

§ 9.1. Параметры трехатомных молекул

В табл. 9.1 приведены параметры ряда трехатомных молекул, наиболее часто встречающихся при анализе физико-химических свойств атмосферных газов. Расположение молекул в таблице соответствует латинскому алфавиту.

Сделаем пояснения для некоторых введенных параметров.

1. Во второй графе таблицы даны символы точечных групп симметрии, характеризующих набор преобразований координат (поворотов вокруг осей и отражений в плоскости, проходящей через данную ось), которые оставляют неизменным уравнение Шредингера для молекулы:

группа C_n — содержит одну ось симметрии n -го порядка (поворот на угол $2\pi/n$ вокруг оси, совмещающей молекулу саму с собой);

C_{nh} — содержит ось симметрии n -го порядка и перпендикулярную ей плоскость симметрии (простейшую группу C_{1h} обозначают также C_s);

C_{nv} — содержит ось симметрии n -го порядка и n плоскостей, пересекающихся друг с другом вдоль оси под углами π/n («вертикальные» плоскости);

D_{nh} — содержит ось симметрии n -го порядка, n перпендикулярных ей осей второго порядка, пересекающихся между собой под углами π/n , и горизонтальную плоскость, проходящую через n осей второго порядка (а вместе с тем и n вертикальных плоскостей, проходящих через вертикальную ось n -го порядка и одну из горизонтальных осей).

2. В третьей графе даны значения угла между двумя прямыми, исходящими из центра атома, через который проходит вертикальная ось симметрии, в направлении двух других атомов.

3. В пятой графе приведены значения собственных частот колебаний молекулы, классификация которых по симметрии и кратности полностью зависит от характеров неприводимого представления данной точечной группы симметрии молекулы (см. [1]).

4. В шестой графе представлены значения вращательных постоянных молекул.

Собранные в табл. 9.1 данные взяты из работы [2] и позволяют составить общее представление о свойствах рассмотренных трехатомных молекул.

Параметры трехатомных молекул

Таблица 9.1

Молекула	Тип симметрии	Угол, град	Длины связей, Å	Частоты колебаний, см ⁻¹			Вращательные постоянные, см ⁻¹			Энергия разрыва связи, эВ			D _{minim} , эВ	D _{maxim} , эВ
				ν_1	ν_2	ν_3	A_0	B_0	C_0	ν_1	ν_2	ν_3		
CN ₂	D _{∞h}	180	1,23	1,197	423	1475	—	0,40	—	—	—	—	—	0
CO ₂	D _{∞h}	180	1,162	1,162	1388	667	2349	—	0,39	—	5,45	(O—CO)	13,8	0
CS ₂	D _{∞h}	180	1,55	1,55	658	397	1532	—	0,109	—	—	—	10,1	0
FCN	C _{∞v}	180	1,26 (FC)	1,16 (CN)	1076	2290	451	—	—	—	—	—	—	—
FNO	C _s	110	1,51 (FN)	1,14 (NO)	1844	520	766	3,17	0,39	0,35	—	—	—	1,8
HCN	C _{∞v}	180	1,065 (HC)	1,153 (CN)	3311	2097	712	—	1,48	—	{9,69 5,6}	(HC—N H—CN)	13,9	—
HNO	C _s	108,05	1,09 (HN)	1,21 (NO)	2719	1564	1505	18,5	1,41	1,31	2,1	(H—NO)	—	—
H ₂ O	C _{2v}	104,3	0,56	0,957	3657	1595	3756	27,9	14,5	9,28	5,11	(H—OH)	12,6	1,84
H ₂ S	C _{2v}	92,1	1,34	1,34	2615	1183	2625	10,4	8,99	4,73	3,26	(H—SH)	10,45	1,0
KrF ₂	D _{∞h}	180	1,9	1,9	449	233	588	—	—	—	—	—	—	0
NH ₂	C _{2v}	103,4	1,024	1,024	(3173)	1499	3220	23,7	12,9	8,17	—	—	—	—
N ₂ O	C _{∞v}	180	1,15	1,15	2224	1285	589	—	0,419	—	{1,68 4,93}	(N ₂ —O N—ON)	12,7	0,16
NO ₂	C _{2v}	134,1	1,197	1,197	1320	750	1618	8,0	0,43	0,41	{3,11 4,50}	(O—NO N—O ₂)	9,8	0,32
OCS	C _{∞v}	180	1,15 (OC)	1,56 (CS)	2062	859	520	—	0,203	—	—	—	—	0,71
O ₃	C _{2v}	116,8	1,272	1,272	1103	701	1042	3,55	0,44	0,39	1,04	(O ₂ —O)	11,7	0,54
S ₂ O	C _s	118	1,88 (SS)	1,46 (SO)	1165	679	388	1,40	0,169	0,150	3,9	(S ₂ —O)	—	—
SO ₂	C _{2v}	118,5	1,43	1,43	1151	518	1362	2,03	0,34	0,29	5,61	(OS—O)	12,3	1,7
XeF ₂	D _{∞h}	180	1,98	1,98	515	213	555	—	—	—	—	—	—	—

* 1D (дебай) = 10⁻¹⁸ эл. СГЭ.

§ 9.2. Потенциалы ионизации многоатомных молекул

В табл. 9.2 включены потенциалы ионизации I ряда распространенных трех- и четырехатомных молекул, а также небольшого числа молекул более сложного состава [3]. Приведенные данные распределены по четырем классам точности (см. предисловие) в соответствии с погрешностями, указанными авторами оригинальных работ; молекулы расположены по алфавиту в порядке возрастания числа содержащихся в них атомов.

Таблица 9.2

Потенциалы ионизации многоатомных молекул

Молекула, радикал	I , эВ, и класс точности	Молекула, радикал	I , эВ, и класс точности	Молекула, радикал	I , эВ, и класс точности
BH_2	9,8 (C)	Li_2O	6,8 (B)	CBr_4	11,0 (B)
BaCl_2	9,2 (B)	NF_2	12,11 (A)	CCl_4	11,47 (A)
BaI_2	8,1 (C)	NH_2	10,15 (A)	CF_2Cl_2	12,31 (A)
BeF_2	14,7 (C)	NO_2	9,78 (A)	CFCI_3	11,77 (A)
BrCN	11,84 (A)	N_2O	12,89 (A)	CH_4	12,98 (A)
CCl_2	13,2 (B)	O_3	12,52 (A)	CH_2Cl_2	11,35 (A)
CF_2	11,8 (B)	SO_2	12,34 (A)	CH_3Br	10,53 (A)
CH_2	10,396 (A)	SiC_2	10,2 (B)	CH_3I	9,538 (A)
CO_2	13,79 (A)	SiF_2	11,0 (C)	SiH_4	11,4 (C)
COS	11,18 (A)	SiO_2	11,7 (C)	SnBr_4	11,0 (A)
CS_2	10,07 (A)	SnCl_2	10,2 (C)	SnCl_4	12,10 (A)
CaCl_2	10,3 (A)		9,7 (B)	XeF_4	12,65 (A)
ClCN	12,34 (A)	UO_2	5,5 (B)	C_2Cl_4	9,34 (A)
ClO_2	11,1 (C)	XeF_2	12,42 (A)	C_2F_4	10,12 (A)
Cs_2O	4,45 (A)	BBr_3	10,68 (A)	C_2H_4	10,51 (A)
CsOH	7,21 (B)	BCl_3	11,73 (A)	CH_3OH	10,85 (A)
FCN	13,32 (A)	BF_3	15,95 (A)	N_2F_4	12,0 (A)
GeBr_2	9,5 (C)	BH_3	11,4 (C)	N_2H_4	8,74 (A)
GeCl_2	10,4 (C)	BI_3	9,40 (A)	SF_6	15,7 (A)
GeF_2	11,8 (B)	CH_3	9,840 (A)	UF_6	14,14 (A)
HCN	13,73 (A)	C_2H_2	11,406 (A)	XeF_6	12,19 (A)
HO_2	11,53 (A)	H_2O_2	10,9 (C)	B_2H_6	11,41 (A)
H_2O	12,614 (A)	HBO_2	12,6 (B)	C_2H_6	11,50 (A)
H_2S	10,47 (A)	NH_3	10,15 (A)	$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$	10,29 (A)
ICN	10,87 (A)	PF_3	9,71 (A)	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	10,47 (A)

§ 9.3. Энергии разрыва связей в многоатомных молекулах

В табл. 9.3 представлены данные об энергии разрыва химической связи в ряде распространенных многоатомных молекул [3]. Все величины распределены по классам точности (см. предисловие) в соответствии с погрешностями, указанными авторами оригинальных работ. Молекулы расположены по алфавиту в порядке возрастания числа содержащихся в них атомов.

Таблица 9.3

Энергия разрыва связи в многоатомных молекулах

Молекула или радикал	Связь	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Связь	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности
CO_2	$\text{CO}-\text{O}$	5,45 (A)	H_2CO	$\text{H}-\text{COH}$	3,77 (B)
CS_2	$\text{CS}-\text{S}$	4,51 (A)	H_2O_2	$\text{HO}-\text{OH}$	2,22 (B)
ClO_2	$\text{ClO}-\text{O}$	2,5 (B)		HO_2-H	3,8 (C)
HCN	$\text{HC}-\text{N}$	9,58 (A)	NH_3	NH_2-H	4,48 (B)
HCO	$\text{H}-\text{CO}$	0,75 (C)	N_2H_2	$\text{NH}-\text{NH}$	4,9 (C)
H_2O	$\text{H}-\text{O}$	8,37 (B)	NO_3	NO_2-O	2,13 (B)
	$\text{H}-\text{OH}$	5,12 (A)	SO_3	SO_2-O	3,55 (A)
	H_2-O	5,0 (B)	CBr_4	CBr_3-Br	2,2 (C)
H_2S	$\text{H}-\text{SH}$	3,93 (B)	CCl_4	CCl_3-Cl	3,18 (B)
NH_2	$\text{NH}-\text{H}$	3,9 (C)	CF_4	CF_3-F	5,6 (B)
NO_2	$\text{NO}-\text{O}$	3,11 (A)	CF_2Cl_2	$\text{CF}_2\text{Cl}-\text{Cl}$	3,26 (C)
N_2O	$\text{N}-\text{NO}$	4,93 (A)	CFCl_3	CFCl_2-Cl	3,72 (C)
	N_2-O	1,67 (A)	CH_4	CH_3-H	4,51 (A)
NOH	$\text{NO}-\text{H}$	2,11 (B)	CH_3Cl	CH_3-Cl	3,6 (C)
O_3	O_2-O	1,04 (B)	CH_3I	CH_3-I	2,43 (B)
SO_2	$\text{SO}-\text{O}$	5,66 (A)	C_2H_4	$\text{C}_2\text{H}_3-\text{H}$	4,60 (B)
BF_3	BF_2-F	7,4 (B)	N_2H_4	$\text{N}_2\text{H}_3-\text{H}$	2,6 (C)
CO_3	CO_2-O	0,5 (D)	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	$\text{C}_2\text{H}_5\text{O}-\text{H}$	4,40 (A)

§ 9.4. Энергии разрыва связи у сложных и комплексных ионов

В табл. 9.4—9.6 приведены значения энергии разрыва связи (энергии диссоциации) для ряда сложных и комплексных ионов, представляющих интерес для низкотемпературной плазмы [4]. Значения энергии разрыва связей распределены по классам точности (см. предисловие); в случае комплексных ионов, образованных в парах воды, погрешность определения искомых величин энергии находится в диапазоне 10—20%. Молекуллярные ионы в таблице расположены по алфавиту в порядке увеличения числа содержащихся в них атомных частиц.

Таблица 9.4

Энергия разрыва связи в комплексных ионах

Искомая связь в ионе	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности	Искомая связь в ионе	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности
He_2^+-He	0,17 (C)	O_2^+-N_2	0,24 (C)
N^+-N_2	2,6 (B)	O_2^+-O_2	0,44 (B)
Cs^+-SO_2	0,5 (D)	H_3^+-H_2	0,25 (C)
N_2^+-N_2	0,8 (C)	$\text{NO}^+-\text{H}_2\text{O}$	0,8 (D)
NO^+-N_2	0,2 (D)	$\text{O}_2^+-\text{H}_2\text{O}$	0,7 (C)
O_2^+-H_2	0,2 (D)	$\text{O}_2^+-\text{N}_2\text{O}$	0,6 (D)

Продолжение табл. 9.4

Искомая связь в ионе	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности	Искомая связь в ионе	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности
$S_2^+ - CS_2$	1,0 (D)	$O_2^- - NO$	4,1 (D)
$CS_2^+ - CS_2$	0,7 (D)	$O_2^- - O_2$	0,09 (D)
$O_4^+ - O_2$	0,28 (C)	$O^- - CO_2$	2,0 (C)
$CS_2H^+ - CS_2$	0,5 (D)	$O_2^- - CO_2$	0,6 (C)
$O_6^+ - O_2$	0,13 (C)	$OH^- - CO_2$	2,5 (C)
$O_8^+ - O_2$	0,12 (C)	$SF_5^- - F$	1,4 (D)
$O_{10}^+ - O_2$	0,11 (C)	$NO_3^- - H_2O$	0,5 (D)
$O^- - O_2$	1,4 (C)	$NO_3^- - HNO_3$	0,9 (D)

Таблица 9.5

Энергия разрыва связи $X^+ - CO_2$

Ион X^+	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности	Ион X^+	Энергия разрыва связи, эВ, и класс точности
Cs^+	0,3 (D)	H_3O^+	0,62 (C)
NO^+	0,4 (D)	CO_2H^+	0,9 (D)
O_2^+	1,0 (C)	$O_2^+ \cdot CO_2$	0,3 (D)
CO_2^+	0,70 (C)	$CO_2^+ \cdot CO_2$	0,3 (D)

Таблица 9.6

Энергия разрыва связи $X^+ \cdot (H_2O)_n - H_2O$, эВ

n	X						
	Li	Na	K	Rb	Cs	Pb	Bi
0	1,50	1,04	0,78	0,69	0,60	0,97	0,99
1	1,12	0,86	0,70	0,59	0,54	0,73	0,77
2	0,90	0,68	0,57	0,53	0,48	0,53	0,61
3	0,71	0,60	0,51	0,48	0,46	0,47	0,52
4	0,60	0,53	0,46	0,45	—	0,43	0,46
5	0,52	0,46	0,43	—	—	0,42	0,42

Энергия разрыва связи $X^- \cdot (H_2O)_n - H_2O$, эВ

n	X					
	F	Cl	Br	I	OH	O ₂
0	1,01	0,57	0,55	0,44	0,98	0,80
1	0,72	0,55	0,53	0,42	0,71	0,75
2	0,59	0,51	0,50	0,41	0,65	0,67
3	0,58	0,48	0,47	—	0,62	—
4	0,57	—	—	—	0,61	—

§ 9.5. Энергии сродства многоатомных молекул к электрону

В табл. 9.7 собраны значения энергии сродства многоатомных молекул к электрону, адекватной энергии связи электрона в соответствующем молекулярном ионе [3, 5, 6]. Искомые значения энергии распределены по классам точности (см. предисловие); молекулы в таблице расположены по алфавиту в порядке увеличения числа содержащихся в молекуле атомов.

Таблица 9.7

Энергия сродства многоатомных молекул к электрону

Молекула или радикал	Энергия сродства к электрону, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Энергия сродства к электрону, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Энергия сродства к электрону, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Энергия сродства к электрону, эВ, и класс точности
AsBr ₂	3,5 (C)	NF ₂	1,7 (D)	CF ₃ I	1,4 (D)	IrF ₆	4,3 (C)
AsCl ₂	2,2 (C)	NO ₂	2,43 (B)	CH ₃ Br	0,4 (D)	MoF ₆	3,9 (D)
AsF ₂	0,8 (D)	O ₃	2,0 (C)	PBr ₃	1,6 (D)	ReF ₆	3,9 (D)
AsH ₂	1,27 (B)	P ₃	0,9 (D)	PBr ₂ Cl	1,6 (D)	SF ₆	0,65 (D)
BO ₂	4,2 (B)	PH ₂	1,27 (A)	PCl ₃	0,8 (D)	SeF ₆	3,0 (C)
C ₃	2,5 (C)	SH ₂	1,1 (C)	PCl ₂ Br	1,5 (D)	TeF ₆	3,3 (B)
C ₂ H	3,73 (B)	SO ₂	1,06 (B)	POCl ₂	3,8 (C)	UF ₆	5,0 (B)
CNS	2,0 (C)	SiH ₂	1,12 (B)	CO ₄	1,22 (C)	WF ₆	4,3 (C)
CO ₃	2,69 (A)	CH ₃	1,1 (C)	OH·H ₂ O	1,95 (C)	C ₆ F ₆	1,8 (D)
COS	0,46 (D)	CF ₃	2,2 (C)	HNO ₃	0,6 (D)	C ₇ F ₈	1,7 (D)
CS ₂	0,85 (D)	NO ₃	3,7 (B)	POCl ₃	1,4 (D)	C ₆ F ₁₀	1,4 (D)
NCO	2,6 (D)	SO ₃	1,7 (C)	SF ₅	2,8 (C)	C ₆ H ₅ NO ₂	0,7 (D)
NH ₂	0,757 (B)	CFCI ₃	1,0 (D)	UF ₅	4,0 (C)		

§ 9.6. Энергии сродства молекул к протону

В табл. 9.8 включены значения энергии сродства молекул к протону, т. е. энергии, выделяющейся при присоединении к молекуле иона водорода H⁺ [3]. Значения распределены по четырем классам точности (см. предисловие) в соответствии с теми погрешностями, которые были указаны авторами оригинальных работ.

Таблица 9.8

Энергия сродства молекул к протону

Молекула или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности	Молекула или радикал	Энергия сродства к протону, эВ, и класс точности
CO	6,20 (A)	O ₂	4,1 (B)	NH ₂	8,0 (C)	N ₂ H ₂	7,9 (C)
CN	5 (D)	OH	6,2 (C)	NO ₂	6,6 (B)	PH ₃	8,07 (A)
H ₂	4,3 (B)	CO ₂	5,3 (C)	N ₂ O	5,8 (B)	SO ₃	6,2 (B)
HBr	6,07 (A)	CH ₂	8,6 (B)	PH ₂	7,2 (C)	CF ₄	5,2 (C)
HS	7,2 (C)	HCN	7,4 (B)	CH ₃	5,4 (C)	CH ₄	5,3 (C)
N ₂	4,8 (C)	H ₂ O	7,14 (B)	HNO ₂	8,1 (C)	HNO ₃	7,5 (B)
NH	6,1 (C)	HO ₂	6,4 (C)	NF ₃	6,6 (C)	SF ₆	3,7 (C)
NO	5,5 (B)	H ₂ S	7,4 (B)	NH ₃	9,00 (A)		

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. З-е изд. М., «Наука», 1974;
Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул.
Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1949.
2. Молекулярные постоянные неорганических соединений (справочник). Л., «Химия», 1979. Авт.: К. С. Краснов, Н. В. Филиппенко, В. А. Бобкова, Н. Л. Лебедева, Е. В. Морозов, Т. И. Устинова, Г. А. Романова.
3. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство
к электрону. М., «Наука», 1974. Авт.: Л. В. Гурвич, Г. В. Каракецов,
В. Н. Кондратьев и др.
4. Смирнов Б. М. «Успехи физ. наук», 1977, т. 121, с. 231; Meot — Ner M., Fi-
eld F. H. «J. Chem. Phys.», 1976, v. 66, p. 4527.
5. Massey H. S. W. Negative ions. 3rd ed. Oxford, Cambridge University Press,
1976.
6. Смирнов Б. М. Отрицательные ионы. М., Атомиздат, 1978.

Глава 10

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ

§ 10.1. Дипольные моменты простых молекул

Электрический дипольный момент молекулы определяется равенством

$$\mu = \left\langle \sum_i e_i r_i \right\rangle, \quad (10.1)$$

где e_i , r_i — заряд электрона и вектор его положения; суммирование ведется по всем элементарным зарядам в молекуле, причем выбор начала отсчета для координат зарядов может быть произволен для нейтральной молекулы. Угловые скобки в (10.1) обозначают усреднение по волновой функции молекулы, так что дипольный момент μ зависит от электронно-колебательно-вращательного состояния молекулы. Опыт показывает, что уровень возбуждения вращательного состояния молекулы почти не оказывает влияния на значение μ ; дипольные моменты, отвечающие соседним уровням колебательного возбуждения, могут отличаться на 1—2%; разным электронным состояниям молекулы могут отвечать дипольные моменты, различающиеся в пределах 30% и более. В зависимости от изотопного состава молекулы также могут наблюдаться вариации μ в пределах нескольких процентов.

Ниже приведены значения дипольных моментов μ для ряда молекул, распространенных в газовой фазе. Эти значения распределены по введенным выше классам точности (см. предисловие), к которым добавлен еще один класс S , охвативший те молекулы, дипольный момент которых $\mu \equiv 0$ вследствие свойств симметрии молекулы. Единица измерения дипольного момента — *дебай* (принятое сокращение D), где $1D = 10^{-18}$ ед. СГСЭ.

Для некоторых двухатомных молекул указаны значения дипольного момента, отвечающие разному изотопному составу и колебательному возбуждению: $\mu_v = \mu_e + \mu_a(v+1/2) + \mu_b(v+1/2)^2 + \dots$, где $v = 0, 1, 2 \dots$ — номер колебательного уровня. Во всех прочих случаях следует относить приведенное значение μ к доминантному изотопному составу, а также невозбужденному электронно-колебательному состоянию. Методы определения дипольных моментов и способы оценки погрешностей в их измерении можно найти в работах [1, 3] и цитированной там литературе. Включенные в табл. 10.1 данные заимствованы главным образом из справочных изданий [1, 2] и обзоров [3]; химические символы молекул расположены в таблице в алфавитном порядке; для обозначения величин μ_1 и μ_2 использованы соответственно метки * и **.

Таблица 10.1

Дипольные моменты молекул

Молекула, радикал	Дипольный момент μ , D, и класс точности	Молекула, радикал	Дипольный момент μ , D, и класс точности	Молекула, радикал	Дипольный момент μ , D и класс точности
AgCl	5,70 (B)	Cl ₂ O	1,7 (C)	³⁹ K ¹⁹ F	8,593 (A)
AgF	6,2 (C)	Cl ₃ P	0,56 (C)		8,661* (A)
AlF	1,53 (A)	CsBr	10,82 (A)		8,731** (A)
BBr ₃	0 (S)	¹³³ Cs ³⁵ Cl	10,387 (A)	KI	10,82 (A)
BCl ₃	0 (S)		10,445* (A)	KNO ₃	1,6 (C)
BF	0,5 (D)		10,503** (A)	⁶ Li ⁷⁹ Br	7,268 (A)
BF ₂ H	0,97 (B)	CsF	7,883 (A)		7,352* (A)
BH	1,3 (D)		7,953* (A)		7,439** (A)
BF ₃	0 (S)		8,024** (A)	⁷ Li ⁷⁹ Br	7,265 (A)
B ₂ O ₃	3,5 (C)	CsI	11,69 (A)	⁷ Li ³⁵ Cl	7,119 (A)
BaO	7,955 (A)	CsOH	7,01 (A)		7,207* (A)
	7,997* (A)	CuF	5,8 (C)		7,296** (A)
	8,039** (A)	DBr	0,83 (B)	⁷ Li ¹⁹ F	6,325 (A)
BaS	10,86 (A)	D ³⁵ Cl	1,103 (A)		6,407* (A)
BrCl	0,519 (A)		1,125* (A)		6,491** (A)
BrF	1,3 (C)	DF	1,820 (A)	⁷ LiH	5,88 (A)
BrH	0,83 (A)	DH	5,9 · 10 ⁻⁴ (B)		5,99* (B)
BrF ₅	1,5 (D)	DI	0,44 (C)	⁶ Li ¹²⁷ I	7,428 (A)
BrGeH ₃	2,00 (A)	D ₂ O	1,86 (B)		7,512* (A)
BrO	1,5 (C)	F ₂ O	0,297 (A)	LiN ₃	0,47 (C)
CClF ₃	0,50 (A)	F ₂ O ₂	1,44 (B)	NDF ₂	1,93 (B)
CCl ₂ O	1,17 (A)	F ₂ Si	1,23 (B)	NF ₃	0,235 (C)
CCl ₄	0 (S)	F ₂ SO ₂	1,12 (B)	NH (A ³ Π)	1,31 (B)
CF	0,65 (C)	FeCl ₃	1,27 (C)	NHF ₂	1,92 (B)
CF ₂	0,46 (B)	GeO	3,28 (C)	NH ₃	1,47 (A)
CFN	2,17 (B)	GeS	2,00 (B)	NO	0,15 (B)
CH (² Π _{1/2})	1,46 (C)	GeSe	1,65 (C)	NOBr	1,8 (C)
CHN	2,98 (A)	GeTe	1,06 (C)	NOCl	1,83 (B)
CHNO	3,06 (C)	HBr	0,827 (A)	NOF	1,81 (B)
CH ₂ O	2,33 (A)	HCl	1,108 (A)	¹⁵ N ¹⁶ O ₂	0,29 (C)
CH ₂ O ₂	1,415 (A)	HF	1,827 (A)	NO ₂ Cl	0,53 (A)
CH ₃ Br	1,84 (B)	HI	0,448 (A)	NO ₂ F	0,47 (B)
CH ₃ Cl	1,89 (A)	HNF ₂	1,93 (A)	NS	1,8 (C)
CH ₃ F	1,85 (A)	HNO ₃	0,911 (A)	NSCl	1,87 (B)
CH ₃ I	1,62 (B)	HNO ₂	1,42 (A)	NSF	1,90 (A)
CH ₄	0 (S)	HNO ₃	2,17 (A)	N ₂ F ₂	0,16 (C)
CN	1,45 (C)	HN ₃	0,83 (A)	N ₂ H ₄	1,75 (C)
CO	0,1 (D)	H ₂ O	1,85 (A)	N ₂ O	0,1608 (A)
COS	0,71 (A)	H ₂ O ₂	2,2 (C)	N ₂ O ₃	2,12 (A)
CS	1,96 (A)	H ₂ S	0,974 (A)	N ₃ H	0,847 (A)
	1,94* (A)	H ₂ Se	0,24 (C)	NaBr	9,17* (A)
C ₂ H ₂	0 (S)	HgBr ₂	0 (S)	²³ Na ³⁵ Cl	9,002 (A)
C ₂ H ₄ O	2,7 (B)	IBr	1,21 (C)		9,062* (A)
C ₂ H ₄ OS	3,72 (B)	ICl	1,08 (C)		9,122** (A)
C ₂ H ₄ O ₂	1,70 (B)	IO (² Π)	2,45 (C)	²³ Na ¹⁹ F	8,156 (A)
C ₂ H ₆	0 (S)	IF ₅	2,28 (C)		8,221* (A)
C ₃ H ₆	0,366 (A)	InF	3,4 (B)		8,287** (A)
C ₃ H ₈	0,084 (A)	³⁹ K ⁷⁹ Br	10,628 (A)	²³ Na ¹²⁷ I	9,236 (A)
CIF	0,88 (C)		10,679* (A)		9,286* (A)
C ₁ FO ₃	0,025 (D)		10,729** (A)		9,337** (A)
C ₁ F ₃	0,6 (C)	³⁹ K ³⁵ Cl	10,269 (A)	OH	1,72 (B)
C ₁ O	1,26 (C)		10,329* (A)		1,66* (C)
C ₁ O ₂	1,785 (A)		10,388** (A)		1,64** (B)

Продолжение табл. 10.1

Молекула, радикал	Дипольный момент μ , D, и класс точности	Молекула, радикал	Дипольный момент μ , D, и класс точности	Молекула, радикал	Дипольный момент μ , D, и класс точности
OH ($A^2\Sigma^+$)	1,98 (C)	SF (${}^2\Pi$)	0,87 (C)	SiF ₂	1,23 (B)
OHCl	1,3 (D)	SF ₂	1,05 (C)	SiH	5,95 (C)
O ₃	0,53 (B)	SF ₄	0,632 (A)	²⁸ SiO	3,098 (A)
PCl ₃	0,56 (C)	SF ₆	0 (S)		3,118* (A)
PF ₅	0 (S)	SH (${}^2\Pi$)	0,62 (B)		3,137** (A)
PH ₃	0,574 (A)	SNF ₃	1,91 (B)	SiS	1,73 (C)
PN	2,75 (A)	SO	1,51 (C)	SnO	4,32 (B)
POF ₃	1,73 (B)	SOCl ₂	1,45 (B)	SnS	3,2 (C)
PSF ₃	0,63 (C)	SOF ₂	1,62 (A)	SnSe	2,8 (C)
PbO	4,6 (C)	SO ₂	1,633 (A)	SnTe	2,2 (C)
PbS	3,6 (B)	³² SO ₂	1,59 (A)	SrCO ₃	1,9 (C)
PbSe	3,3 (C)	SO ₂ F	0,23 (B)	SrO	8,90 (A)
PbTe	2,7 (C)	SO ₃	0 (S)		8,87* (A)
RbBr	10,86* (B)	S ₂ F	1,03 (C)	TeCS	0,17 (B)
⁸⁵ Rb ³⁵ Cl	10,510 (A)	S ₂ F ₂	1,45 (C)	²⁰⁵ Tl ⁷⁹ Br	4,49 (B)
	10,564* (A)	S ₂ O	1,47 (B)	TlCl	4,54 (B)
	10,618** (A)	SeF (${}^2\Pi$)	1,52 (C)	TlF	4,228 (A)
⁸⁵ Rb ¹⁹ F	8,546 (A)	SeF ₄	1,78 (B)		4,297* (A)
	8,613* (A)	SeH	0,48 (C)		4,296** (A)
RbI	11,48* (B)	SeO (${}^1\Delta$)	2,01 (B)	²⁰⁵ Tl ¹²⁷ I	4,61 (B)
				UF ₆	0 (S)

§ 10.2. Поляризуемость молекул

Дипольная поляризуемость молекул является тензорной величиной в соответствии с формулой (4.2). Ниже приводится среднее значение поляризуемости для ряда наиболее распространенных газофазных молекул, которое вводится на основе соотношения

$$\bar{\alpha} = (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3)/3,$$

где $\alpha_1, 2, 3$ — компоненты тензора поляризуемости, приведенного к главным осям. Включенные в табл. 10.2 данные взяты главным образом из работ [4, 5], в которых также рассмотрены методы измерения поляризуемости молекул. Молекулы в таблице расположены в алфавитном порядке и распределены по четырем классам точности (см. предисловие); при переводе единиц измерения поляризуемости использовался коэффициент перехода: $1a^3_0 \cong 0,1482 \text{ \AA}^3$.

Таблица 10.2

Средняя дипольная поляризуемость молекул $\bar{\alpha}$

Молекула	$\bar{\alpha}$		Класс точности	Молекула	$\bar{\alpha}$		Класс точности
	\AA^3	a^3_0			\AA^3	a^3_0	
Br ₂	6,46	43,6	(D)	CH ₂ Cl ₂	6,5	44,1	(D)
CCl ₄	10,2	68,8	(C)	CH ₃ Cl	4,6	31	(D)
CF ₄	2,82	19,0	(C)	CH ₄	2,564	17,3	(A)
CHCl ₃	8,3	56	(D)	CO	1,95	13,2	(C)

Продолжение табл. 10.2

Молекула	$\bar{\alpha}$		Класс точности	Молекула	$\bar{\alpha}$		Класс точности
	Å^3	a^3_0			Å^3	a^3_0	
CO_2	2,59	17,5	(C)	H_2S	3,67	24,8	(C)
Cl_2	4,61	31,1	(D)	NH_3	2,19	14,8	(B)
Cs_2	8,7	59	(D)	NO	1,70	11,5	(C)
D_2	0,80	5,39	(D)	NO_2	3,02	20,4	(C)
HBr	3,52	23,8	(C)	$(\text{NO}_2)_2$	6,64	44,8	(D)
HCl	2,58	17,4	(C)	N_2	1,740	11,74	(A)
HF	0,83	5,60	(C)	N_2O	2,92	19,7	(C)
HI	5,23	35,3	(D)	O_2	1,571	10,60	(A)
H_2	0,767	5,178	(A)	SF_6	4,48	30,2	(D)
H_2O	1,455	9,82	(B)	SO_2	3,78	25,5	(C)

§ 10.3. Квадрупольный момент молекул

Квадрупольный момент молекул определяется как симметричный тензор

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int \rho [3r_\alpha r_\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta}] d\tau,$$

где ρ — плотность зарядов, r_α , r_β — компоненты радиуса вектора зарядов; $\alpha, \beta = x, y, z$; $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера; $d\tau$ — элемент объема. Можно показать [6], что если молекула обладает осью симметрии n -го порядка, то для определения ее любого электрического мультипольного тензора ранга $p < n$ достаточно одной скалярной величины. В табл. 10.3 приведены квадрупольные моменты для молекул, обладающих указанным свойством (в случае молекул SO_2 и C_2H_4 под приведенным значением следует понимать лишь Q_{zz} — компоненту тензора квадрупольного момента) [6—8]. Величина квадрупольного момента молекулы зависит от выбора начала отсчета, так что в последующем за начало отсчета принята точка центра масс молекулы; ось z считается совпадающей с поворотной осью симметрии молекулы, а оси $y, x \perp z$. С учетом этого в табл. 10.3 даны значения квадрупольного момента Q , определенного равенством:

$$Q = Q_{zz} = -2Q_{xx} = -2Q_{yy}.$$

Квадрупольный момент молекулы характеризуется также знаком, для определения которого существует несколько способов [6]; ряд экспериментальных методов позволяет определить только абсолютное значение искомого момента, которое и включено в этом случае в таблицу без указания символа знака. Молекулы в таблице расположены в алфавитном порядке и распределены по классам точности (см. предисловие). Переводный множитель для единиц измерения квадрупольного момента определяется соотношением: 1 а. е. $Q = 1,345 \cdot 10^{-26}$ ед. СГСЭ.

Таблица 10.3

Квадрупольные моменты молекул

Молекула	Квадрупольный момент Q		Класс точности	Молекула	Квадрупольный момент Q		Класс точности
	10^{-26} ед. СГСЭ	а. е.			10^{-26} ед. СГСЭ	а. е.	
BrCN	7	5	(D)	HF	+2,6	+1,9	(C)
BF	-4,5	-3,4	(D)	H ₂	+0,651	+0,484	(A)
Cl ₂	+6,14	+4,56	(D)	HI	+6	+4,5	(D)
CICN	6,6	4,9	(D)	KF	-9,3	-6,9	(C)
CO	-2,5	-1,9	(D)	LiF	+5,82	+4,33	(D)
CO ₂	-4,3	-3,2	(C)	LiH	-5	-3,7	(D)
C ₂ H ₂	3,0	2,2	(D)	Li ₂	+13,8	+10,3	(C)
C ₂ H ₄	+1,5	+1,1	(D)	NH	-0,3	-0,2	(D)
C ₂ H ₆	-0,65	-0,48	(D)	NH ₃	-1	-0,7	(D)
C ₆ H ₆	3,6	2,7	(D)	NO	-1,8	-1,3	(C)
C ₆ F	-18,1	-10,0	(C)	N ₂	-1,52	-1,13	(C)
Cs ₂	1,8	1,3	(D)	N ₂ O	-3	-2,2	(D)
D ₂	+0,649	+0,483	(B)	NaF	-2,0	-1,5	(C)
F ₂	+0,88	+0,65	(D)	OCS	3,1	2,3	(D)
HBr	+4	+3	(D)	O ₂	-0,39	-0,29	(C)
HCl	+3,8	+2,8	(D)	SO ₂	4,4	3,3	(D)
HD	+0,642	+0,477	(B)	³⁰⁵ TlF	-13,5	-10,0	(C)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Осипов О. А., Минкин В. И., Гарновский А. Д. Справочник по дипольным моментам. М., «Высшая школа», 1971.
2. McClellan A. L. Tables of experimental dipole moments. Rahara Enterprises, 1974.
3. Nelson R. D., Jr., Lide D. R., Maryott A. A. NSRDS-NBS 10, Sept. 1, 1967; Miller C. E., Finney A. A., Inman F. W. «Atomic Data», 1973, v. 5, № 1.
4. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
5. Maryott A. A., Buckley F. US National bureau of Standards, Circular 537, 1953.
6. Stogryn D. E., Stogryn A. P. «Mol. Phys.», 1966, v. 11, p. 371.
7. Birnbaum G. «Advances Chem. Phys.», 1967, v. 12, p. 487.
8. Bloom M., Oppenheim J. «Advances Chem. Phys.», 1967, v. 12, p. 549.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ

П.1. Коэффициенты Клебша—Гордана

Коэффициенты Клебша — Гордана возникают при сложении моментов двух частиц или моментов различной природы (например, орбитального и спино-вого) одной частицы в полный момент системы. Пусть полный момент системы равен j , а моменты отдельных его частей равны j_1 и j_2 . Тогда волновая функция системы может быть представлена следующим образом через комбинацию волновых функций ее частей:

$$\Psi_{jm} = \Sigma (j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2}.$$

Здесь $\psi_{j_1 m_1}$, $\psi_{j_2 m_2}$ — волновые функции складываемых моментов, отвечающие соответствующему значению момента и его проекции на выделенное направление, волновая функция Ψ_{jm} описывает состояние всей системы с моментом j и проекцией момента m на выделенное направление. Коэффициенты разложения $(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm)$ называются коэффициентами Клебша — Гордана*.

Далее мы приведем простейшие соотношения, которым удовлетворяют коэффициенты Клебша — Гордана, а также численные значения этих величин для относительно небольших значений складываемых моментов. Более полную информацию по этому вопросу можно получить в книгах [1—3].

1. Сложение проекций моментов:

$$m = m_1 + m_2.$$

2. Перестановочное свойство:

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm) = (-1)^{j_1+j_2-j} (j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 jm) = (-1)^{j_1+j_2-j} (j_1 j_2 - m_1 - m_2 | j_1 j_2 j - m) = (j_2 j_1 - m_2 - m_1 | j_2 j_1 j - m).$$

3. Связь с 3j-символами Вигнера:

$$(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 jm) = (-1)^{j_1-j_2+m} \sqrt{2j+1} \binom{j_1 j_2 j}{m_1 m_2 m}.$$

4. Численные значения.

В таблице представлены численные значения коэффициентов Клебша — Гордана для небольших моментов $j \leq 3$, $j_{1,2} \leq 5/2$. В таблицу сведены коэффициенты Клебша — Гордана, аргументы которых удовлетворяют соотношениям $j_1 \geq j_2$, $m_1 \geq m_2$. От последних условий можно избавиться, воспользовавшись перестановочными свойствами. Численные значения коэффициентов взяты из работы [3].

* Часто используются другие обозначения для коэффициентов Клебша — Гордана, именно: $(j_1 j_2 m_1 m_2 | jm)$ или $C_{m_1 m_2}^{jm}$, или $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm}$.

Таблица П.1

Численные значения коэффициентов Клебша—Гордана

j_1	m_1	j_2	m_2	J	m	$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j_1 j_2 J m)$
0	0	0	0	0	0	1
1/2	1/2	0	0	1/2	1/2	1
		1/2	1/2	1	1	1
			-1/2	0	0	$1/\sqrt{2}$
				1		$1/\sqrt{2}$
1	0	0	0	1	0	1
	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	$-1/\sqrt{3}$
			3/2			$\sqrt{2/3}$
		1	0	0	0	$-1/\sqrt{3}$
				1		0
				2		
			1	2		
1	0	0	1	1	1	1
	1/2	1/2	3/2	3/2		1
		-1/2	1/2	1/2		$\sqrt{2/3}$
			3/2			$1/\sqrt{3}$
	1	0	1	1		$1/\sqrt{2}$
			2			$1/\sqrt{2}$
		-1	0	0		$1/\sqrt{3}$
			1			$1/\sqrt{2}$
			2			$1/\sqrt{6}$
			1	2	1	1
3/2	1/2	0	0	3/2	1/2	1
	1/2	1/2	1	1		$-1/2$
			2			$\sqrt{3}/2$
		-1/2	1	0		$1/\sqrt{2}$
			2			$1/\sqrt{2}$
	1	0	1/2	1/2		$-1/\sqrt{3}$
			3/2			$1/\sqrt{15}$
			5/2			$\sqrt{3/5}$
	1	-1	1/2	-1/2		$1/\sqrt{6}$
			3/2			$2\sqrt{2}/\sqrt{15}$
			5/2			$\sqrt{3/10}$
	1	1	3/2	3/2		$-V^{2/5}$
			5/2			$V^{3/5}$
	3/2	1/2	1	1		$-V^{2/5}$

Продолжение табл. П.1

j_1	m_1	j_2	m_2	J	m	$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 j_1 j_2 J m \rangle$
$3/2$	$3/2$	0	$-1/2$	2		0
				3		$\sqrt{3/5}$
				0	0	$0,7746$
				1		$-1/2$
				2		$-1/2\sqrt{5}$
				3		$1/2$
		$1/2$	$-3/2$	1	-1	$3/2\sqrt{5}$
				2		$\sqrt{3/10}$
				3		$-1/\sqrt{2}$
				2		$1/\sqrt{5}$
				3		$0,5477$
				1		$-0,7071$
2	2	0	0	$3/2$	$3/2$	1
				2	2	$\sqrt{3}/2$
				1	1	$\sqrt{3}/2$
				2		$1/\sqrt{2}$
				$3/2$	$3/2$	$\sqrt{3}/5$
				$5/2$		$\sqrt{2}/5$
		$1/2$	-1	$1/2$	$1/2$	$1/\sqrt{2}$
				$3/2$		$\sqrt{2}/5$
				$5/2$		$1/\sqrt{10}$
				$5/2$	$5/2$	$\sqrt{3}/5$
				2	2	$1/\sqrt{2}$
				3		$1/\sqrt{2}$
2	0	$1/2$	1	$3/2$	3	1
				2	0	$0,5$
				1		$3/2\sqrt{5}$
				2		$1/2$
				3		$1/2\sqrt{5}$
				1	1	$-1/2\sqrt{5}$
		1	-1	2		$1/\sqrt{2}$
				3		$1/\sqrt{5}$
				1	0	$0,4472$
				2		$0,5477$
				1		$-0,7071$
				0		$0,7746$

Продолжение табл. П.1

j_1	m_1	j_2	m_2	j	m	$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 j_1 j_2 jm \rangle$
2	1	3/2	1/2	3		$\sqrt{2/5}$
				1/2	1/2	$1/\sqrt{5}$
				3/2		$-1/\sqrt{5}$
				5/2		$-\sqrt{3/35}$
				3/2	3/2	$1/\sqrt{5}$
		3/2	3/2	5/2		$-3\sqrt{2/35}$
				2	0	0
				1	0	$-\sqrt{2/7}$
				2		0
				3	-1	$-\sqrt{3/10}$
2	1	2	-1	1	-1	$-1/\sqrt{14}$
				2		$1/\sqrt{5}$
				3	-2	$\sqrt{2/7}$
				2		$1/\sqrt{2}$
				3	-2	0
		-2	-2	1	1	1
				2		$-1/\sqrt{5}$
				3	1/2	$2/\sqrt{5}$
				5/2		$\sqrt{3/5}$
				3/2	1/2	$\sqrt{2/5}$
2	1	1	0	2	1	$-\sqrt{3/10}$
				1	1	$1/\sqrt{6}$
				2		$2\sqrt{2/15}$
				3	2	$-1/\sqrt{3}$
				2		$\sqrt{3/5}$
		-1	-1	1	0	$1/\sqrt{2}$
				2		$1/\sqrt{5}$
				3		$1/\sqrt{5}$
				3/2	3/2	$-\sqrt{2/5}$
				5/2		$1/\sqrt{35}$
2	1	3/2	1/2	5/2	5/2	$-\sqrt{3/7}$
				3/2	1/2	$-\sqrt{3/10}$
				3/2		0
				5/2		$\sqrt{5/14}$
				-1/2	-1/2	$1/\sqrt{10}$
		-3/2	1/2	3/2		$\sqrt{2/5}$
				5/2		$3\sqrt{3}/\sqrt{10}$
				1/2		0,6325
				3/2		0,3162
				5/2		0,6211

Продолжение табл. П.1

j_1	m_1	j_2	m_2	j	m	$(j_1 j_2 m_1 m_2 \pm j_1 j_2 jm)$
2	2	0	0	2	2	1
			1/2	5/2	5/2	$\sqrt{3/5}$
			-1/2	3/2	3/2	$2/\sqrt{5}$
		1	0	5/2		$\sqrt{2/5}$
			1	2	2	$\sqrt{2/3}$
			-1	3		$1/\sqrt{3}$
		3/2	1	3	3	-1
			-1	1	0	$\sqrt{3/10}$
			1/2	2		$1/\sqrt{3}$
			-1/2	3/2	3/2	$\sqrt{2/5}$
			3/2	5/2		$4/\sqrt{35}$
			-3/2	1/2	1/2	$\sqrt{2/5}$
			2	3/2		$\sqrt{2/5}$
			2	5/2		$\sqrt{6/35}$
2	2	2	1	3	3	$1/\sqrt{2}$
			2	-1	1	$1/\sqrt{5}$
			2	2		$\sqrt{3/7}$
		2	2	3		$\sqrt{3/10}$
			2	-2	0	$1/\sqrt{5}$
			2	1		$\sqrt{2/5}$
		2	2	2		$\sqrt{2/7}$
			2	3		$1/\sqrt{10}$
			2	0		0,3162
5/2	1/2	0	0	5/2	1/2	1
			1/2	2	1	$-1/\sqrt{3}$
			1/2	3		$\sqrt{2/3}$
		1/2	-1/2	2	0	$1/\sqrt{2}$
			1/2	3		$1/\sqrt{2}$
			1	0	3/2	$-V\sqrt{2/5}$
		1	0	3/2	1/2	$1/\sqrt{35}$
			1	5/2		0,1690
			1	3/2	3/2	$1/\sqrt{15}$
		1	1	5/2		$-4/\sqrt{35}$
			1	3/2	-1/2	$1/\sqrt{5}$
			1	5/2		$3\sqrt{2}/\sqrt{35}$
5/2	1/2	3/2	1/2	1	1	$\sqrt{3/2}\sqrt{5}$
			1/2			0,3873

Продолжение табл. П.1

j_1	m_1	j_2	m_2	J	m	$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j_1 j_2 jm)$
$5/2$	$1/2$	$3/2$	$-1/2$	2	2	$-5/2\sqrt{21}$
					3	$-1/2\sqrt{15}$
					2	$1/\sqrt{7}$
					3	$-1/\sqrt{2}$
					1	0
					2	$-\sqrt{3/10}$
					3	$-1/\sqrt{14}$
					1	$1/\sqrt{5}$
					2	$3/2\sqrt{7}$
					3	$3/2\sqrt{5}$
	2	0	$1/2$	2	1/2	$1/\sqrt{5}$
					3/2	$-\sqrt{2/35}$
					5/2	$-2\sqrt{2}/\sqrt{35}$
					2	$3/\sqrt{35}$
					1	$-\sqrt{6/35}$
		1	$3/2$	2	5/2	$\sqrt{3/14}$
					5/2	$-\sqrt{2/15}$
					2	$-\sqrt{5/21}$
					1	0
					2	0
	$5/2$	2	-1	2	3/2	$2/\sqrt{35}$
					5/2	$\sqrt{27/70}$
					1	$3/\sqrt{35}$
					2	0
					3	$-2/\sqrt{15}$
		$-1/2$	$-1/2$	2	0	$-1/\sqrt{6}$
					1	$1/\sqrt{70}$
					2	$-2/\sqrt{35}$
					3	$-2/3\sqrt{5}$
					1	$-\sqrt{8/35}$
	$3/2$	0	0	2	2	$1/\sqrt{7}$
					3	$1/\sqrt{70}$
					2	$-V\bar{5}/2V\bar{7}$
					3	$-V\bar{5}/2V\bar{3}$
					1	1
		$1/2$	$1/2$	2	2	$-1/\sqrt{6}$
					3	$\sqrt{5/6}$
					2	$\sqrt{2/3}$
					1	0,8165
					0	0,9129

Продолжение табл. П.1

j_1	m_1	j_2	m_2	J	m	$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j_1 j_2 jm)$
$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	3		$1/\sqrt{3}$
				$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-2/\sqrt{15}$
				$\frac{5}{2}$		$3/\sqrt{35}$
				1	$\frac{5}{2}$	$-\sqrt{2/7}$
				$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\sqrt{2/5}$
				$-\frac{5}{2}$		$\sqrt{2/7}$
				2		$-2\sqrt{2}/\sqrt{21}$
				3		$\sqrt{5}/2\sqrt{2}$
				$\frac{3}{2}$	3	$-\sqrt{3}/2\sqrt{2}$
				$-\frac{1}{2}$	1	$-\sqrt{3/10}$
				2		$1/\sqrt{42}$
				3		$\sqrt{5}/2\sqrt{3}$
				$-\frac{3}{2}$	1	$1/\sqrt{5}$
				2		$\sqrt{3/7}$
				3		$1/2\sqrt{2}$
$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	2	0	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-2\sqrt{3}/\sqrt{35}$
				$\frac{5}{2}$		$-1/\sqrt{70}$
				1	$\frac{5}{2}$	$-\sqrt{3/7}$
				$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-2/\sqrt{15}$
				$\frac{3}{2}$		$-\sqrt{2/105}$
				$\frac{5}{2}$		$\sqrt{6/35}$
				$-\frac{2}{2}$	$\frac{1}{2}$	$1/\sqrt{15}$
				$\frac{3}{2}$		$4\sqrt{2}/\sqrt{105}$
				$\frac{5}{2}$		$\sqrt{27/70}$
				$\frac{5}{2}$	2	$-3/2\sqrt{7}$
				3		$-1/2\sqrt{3}$
				$\frac{3}{2}$	3	$-2/3$
				$-\frac{1}{2}$	1	$-\sqrt{8/35}$
				2		$-\sqrt{7/70}$
$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	3		$1/\sqrt{70}$
				$-\frac{3}{2}$	0	$-1/\sqrt{6}$
				1		$-3/\sqrt{70}$
				2		$1/2\sqrt{21}$
				3		$7/6\sqrt{5}$
				$-\frac{5}{2}$	1	$1/\sqrt{7}$
				2		$\sqrt{5/14}$
						0,5976

Продолжение табл. П.1

j_1	m_1	j_2	m_2	j	m	$(j_1 j_2 m_1 m_2 \mid j_1 j_2 jm)$
5/2	5/2	0	0	3		$1/\sqrt{3}$
		1/2	1/2	5/2	5/2	1
		1/2	-1/2	3	3	1
	5/2	1	0	2	2	$1/\sqrt{2}$
				3		$1/\sqrt{6}$
				5/2		$\sqrt{5/7}$
				3/2	3/2	$\sqrt{2/3}$
				5/2		$\sqrt{2/7}$
	3/2	1/2	3	3		$\sqrt{5/8}$
		-1/2	2	2		$\sqrt{10/21}$
				3		$\sqrt{5/12}$
				-3/2	1	$1/\sqrt{2}$
					2	$\sqrt{5/14}$
					3	$1/2\sqrt{2}$
		0	5/2	5/2		$\sqrt{5/14}$
2	2	-1	3/2	3/2		$\sqrt{2/7}$
			5/2			$\sqrt{3/7}$
			-2	1/2	1/2	$1/\sqrt{3}$
				3/2		$2\sqrt{2/21}$
				5/2		$\sqrt{3/14}$
	5/2	1/2	3	3		$\sqrt{5/3}\sqrt{2}$
		-1/2	2	2		$\sqrt{5/2}\sqrt{7}$
			3			$\sqrt{5/2}\sqrt{3}$
			-3/2	1	1	$1/\sqrt{7}$
				2		$\sqrt{5/14}$

Приведем также формулы для коэффициентов Клебша — Гордана при значениях $j_2 = 1/2, 1, 3/2$ и 2 [4] (см. след. стр.):

$$\left(j_1 \frac{1}{2} m_1 m_2 | j_1 \frac{1}{2} jm \right)$$

$$j = \begin{cases} & m_2 = \frac{1}{2} \\ & m_2 = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$j_1 + \frac{1}{2} \quad \sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} \quad \sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$$

$$j_1 - \frac{1}{2} \quad -\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} \quad \sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$$

$$(j_1 m_1 m_2 | j_1 jm)$$

$$j = \begin{cases} & m_2 = 1 \\ & m_2 = 0 \\ & m_2 = -1 \end{cases}$$

$$j_1 + 1 \quad \sqrt{\frac{(j_1 + m)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}} \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 + m + 1)}{(2j_1 + 1)(j_1 + 1)}} \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}}$$

$$j_1 \quad -\sqrt{\frac{(j_1 + m)(j_1 - m + 1)}{2j_1(j_1 + 1)}} \quad \frac{m}{\sqrt{j_1(j_1 + 1)}} \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)}{2j_1(j_1 + 1)}}$$

$$j_1 - 1 \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 - m + 1)}{2j_1(2j_1 + 1)}} \quad -\sqrt{\frac{(j_1 - m)(j_1 + m)}{j_1(2j_1 + 1)}} \quad \sqrt{\frac{(j_1 + m + 1)(j_1 + m)}{2j_1(2j_1 + 1)}}$$

$$\left(j_1 \frac{3}{2} m_1 m_2 | j_1 \frac{3}{2} jm \right)$$

П р о д о л ж е н и е

234

$$\begin{aligned}
 j = & \quad m_2 = \frac{3}{2} \quad m_2 = -\frac{1}{2} \\
 i_1 + \frac{3}{2} & \quad \sqrt{\frac{\left(i_1 + m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 + m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 + m + \frac{3}{2}\right)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)}} \sqrt{\frac{3\left(i_1 + m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 + m + \frac{3}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{3}{2}\right)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)}} \\
 i_1 + \frac{1}{2} & \quad -\sqrt{\frac{3\left(i_1 + m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 + m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{3}{2}\right)}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)}} -\left(i_1 - 3m + \frac{3}{2}\right) \sqrt{\frac{i_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 3)}} \\
 i_1 - \frac{1}{2} & \quad \sqrt{\frac{3\left(i_1 + m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{3}{2}\right)}{(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}} -\left(i_1 + 3m - \frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{i_1 - m + \frac{1}{2}}{(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}} \\
 i_1 - \frac{3}{2} & \quad -\sqrt{\frac{\left(i_1 - m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{3}{2}\right)}{2j_1(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)}} \sqrt{\frac{3\left(i_1 + m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{1}{2}\right)}{2j_1(2j_1 - 1)(2j_1 + 1)}} \\
 j = & \quad m_2 = -\frac{1}{2} \quad m_2 = -\frac{3}{2} \\
 i_1 + \frac{3}{2} & \quad \sqrt{\frac{3\left(i_1 + m + \frac{3}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{3}{2}\right)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)}} \sqrt{\frac{\left(i_1 - m - \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{1}{2}\right)\left(i_1 - m + \frac{3}{2}\right)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)}}
 \end{aligned}$$

Продолжение

$$j_1 + \frac{1}{2} \quad \left(j_1 + 3m + \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 (2j_1 + 1) (2j_1 + 3)}} \sqrt{\frac{3 \left(j_1 + m + \frac{3}{2} \right) \left(j_1 - m - \frac{1}{2} \right) \left(j_1 - m + \frac{1}{2} \right)}{2j_1 (2j_1 + 1) (2j_1 + 3)}}$$

$$j_1 - \frac{1}{2} \quad - \left(j_1 - 3m - \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{(2j_1 - 1) (2j_1 + 1) (2j_1 + 2)}} \sqrt{\frac{3 \left(j_1 + m + \frac{1}{2} \right) \left(j_1 + m + \frac{3}{2} \right) \left(j_1 - m - \frac{1}{2} \right)}{(2j_1 - 1) (2j_1 + 1) (2j_1 + 2)}}$$

$$j_1 - \frac{3}{2} \quad - \sqrt{\frac{3 \left(j_1 + m - \frac{1}{2} \right) \left(j_1 + m + \frac{1}{2} \right) \left(j_1 - m - \frac{1}{2} \right)}{2j_1 (2j_1 - 1) (2j_1 + 1)}} \sqrt{\frac{\left(j_1 + m - \frac{1}{2} \right) \left(j_1 + m + \frac{1}{2} \right) \left(j_1 + m + \frac{3}{2} \right)}{2j_1 (2j_1 - 1) (2j_1 + 1)}}$$

$(j_1 2m_1 m_2 | j_1 2jm)$

$$j = \begin{cases} m_2 = 2 & \\ & m_2 = 1 \end{cases}$$

$$j_1 + 2 \quad \sqrt{\frac{(j_1 + m - 1) (j_1 + m) (j_1 + m + 1) (j_1 + m + 2)}{(2j_1 + 1) (2j_1 + 2) (2j_1 + 3) (2j_1 + 4)}} \sqrt{\frac{(j_1 - m + 2) (j_1 + m + 2) (j_1 + m + 1) (j_1 + m)}{(2j_1 + 1) (j_1 + 1) (2j_1 + 3) (j_1 + 2)}}$$

$$j_1 + 1 \quad - \sqrt{\frac{(j_1 + m - 1) (j_1 + m) (j_1 + m + 1) (j_1 - m + 2)}{2j_1 (j_1 + 1) (j_1 + 2) (2j_1 + 1)}} - \sqrt{\frac{(j_1 + m + 1) (j_1 + m) (j_1 + 2m + 2)}{2j_1 (2j_1 + 1) (j_1 + 1) (j_1 + 2)}}$$

П р о д о л ж е н и е

j_1	$\sqrt{\frac{3(j_1+m-1)(j_1+m)(j_1-m+1)(j_1-m+2)}{(2j_1-1)j_1(j_1+1)(2j_1+3)}} \quad (1-2m)\sqrt{\frac{3(j_1-m+1)(j_1+m)}{(2j_1-1)j_1(2j_1+2)(2j_1+3)}}$
j_1-1	$-\sqrt{\frac{(j_1+m-1)(j_1-m)(j_1-m+1)(j_1-m+2)}{2(j_1-1)j_1(j_1+1)(2j_1+1)}} \quad (j_1+2m-1)\sqrt{\frac{(j_1-m+1)(j_1-m)}{(j_1-1)j_1(2j_1+1)(2j_1+2)}}$
j_1-2	$\sqrt{\frac{(j_1-m-1)(j_1-m)(j_1-m+1)(j_1-m+2)}{(2j_1-2)(2j_1-1)2j_1(j_1+1)(2j_1+1)}} \quad -\sqrt{\frac{(j_1-m+1)(j_1-m)(j_1-m-1)(j_1+m-1)}{(j_1-1)(2j_1-1)j_1(2j_1+1)}}$
$j=0$	$m_2=0 \quad m_2=-1$
j_1+2	$\sqrt{\frac{3(j_1-m+2)(j_1-m+1)(j_1+m+2)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)(j_1+2)}} \quad \sqrt{\frac{(j_1-m+2)(j_1-m+1)(j_1-m)(j_1+m+2)}{(2j_1+1)(j_1+1)(2j_1+3)(j_1+2)}}$
j_1+1	$m\sqrt{\frac{3(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{j_1(2j_1+1)(j_1+1)(j_1+2)}} \quad (j_1+2m+2)\sqrt{\frac{(j_1-m+1)(j_1-m)}{j_1(2j_1+1)(2j_1+2)(j_1+2)}}$
j_1	$\frac{3m^2-j_1(j_1+1)}{V(2j_1-1)j_1(j_1+1)(2j_1+3)} \quad (2m+1)\sqrt{\frac{3(j_1-m)(j_1+m+1)}{(2j_1-1)j_1(2j_1+2)(2j_1+3)}}$
j_1-1	$-m\sqrt{\frac{3(j_1-m)(j_1+m)}{(j_1-1)j_1(2j_1+1)(j_1+1)}} \quad -(j_1-2m-1)\sqrt{\frac{(j_1+m+1)(j_1+m)}{(j_1-1)j_1(2j_1+1)(2j_1+2)}}$

П р о д о л ж е н и е

$$j_1 - 2 \quad \sqrt{\frac{3(j_1 - m)(j_1 - m - 1)(j_1 + m)(j_1 + m - 1)}{(2j_1 - 2)(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)}} - \sqrt{\frac{(j_1 - m - 1)(j_1 + m + 1)(j_1 + m)(j_1 + m - 1)}{(j_1 - 1)(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)}}$$

$$j = \pm$$

$$j_1 + 2 \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m - 1)(j_1 - m)(j_1 - m + 1)(j_1 - m + 2)}{(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)(2j_1 + 4)}}$$

$$j_1 + 1 \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m - 1)(j_1 - m)(j_1 - m + 1)(j_1 + m + 2)}{j_1(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2j_1 + 4)}}$$

$$j_1 \quad \sqrt{\frac{3(j_1 - m - 1)(j_1 - m)(j_1 + m + 1)(j_1 + m + 2)}{(2j_1 - 1)j_1(2j_1 + 2)(2j_1 + 3)}}$$

$$j_1 - 1 \quad \sqrt{\frac{(j_1 - m - 1)(j_1 + m)(j_1 + m + 1)(j_1 + m + 2)}{(j_1 - 1)j_1(2j_1 + 1)(2j_1 + 2)}}$$

$$j_1 - 2 \quad \sqrt{\frac{(j_1 + m - 1)(j_1 + m)(j_1 + m + 1)(j_1 + m + 2)}{(2j_1 - 2)(2j_1 - 1)2j_1(2j_1 + 1)}}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. 3-е изд. М., «Наука», 1974.
2. Юцис А. П., Бандзайтис А. А. Теория момента количества движения в квантовой механике. Вильнюс, «Минтис», 1965.
3. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л., «Наука», 1975.
4. Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1949.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Введение	6
Г л а в а 1. Единицы измерения физических величин	6
§ 1.1. Системы единиц измерения физических величин	6
§ 1.2. Фундаментальные физические постоянные	8
§ 1.3. Система атомных единиц	12
§ 1.4. Таблицы переводных множителей	12
Список литературы	15
Часть I. АТОМ И АТОМНЫЙ ИОН	
Г л а в а 2. Изотопный состав и атомная масса элементов	17
§ 2.1. Стабильные и долгоживущие радиоактивные изотопы	17
§ 2.2. Атомные массы элементов и массы изотопов	34
Список литературы	40
Г л а в а 3. Строение электронных оболочек атомных частиц	41
§ 3.1. Электронные конфигурации и термы основных состояний атомов	41
§ 3.2. Периодическая система элементов	48
§ 3.3. Параметры волновых функций валентных электронов в атомах, положительных и отрицательных ионах	48
Список литературы	66
Г л а в а 4. Энергетические параметры атомов и ионов	67
§ 4.1. Потенциалы ионизации атомов и ионов	67
§ 4.2. Энергии сродства атомов к электрону	76
§ 4.3. Атом в постоянном электрическом и магнитном поле. Поляризуемость и магнитная восприимчивость атомных частиц	78
§ 4.4. Сверхтонкое расщепление уровней атомов	80
Список литературы	88
Г л а в а 5. Уровни энергии и спектры атомных частиц	90
§ 5.1. Низколежащие термы атомов и ионов	90
§ 5.2. Спектры атомных частиц и силы осцилляторов переходов	125
Список литературы	143
	239

Часть II. МОЛЕКУЛЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИОНЫ

Глава 6. Потенциалы взаимодействия атомных частиц	144
§ 6.1. Постоянные мультипольного взаимодействия атомных частиц	144
§ 6.2. Дальнодействующее обменное взаимодействие атомных частиц	149
§ 6.3. Параметры взаимодействия атомов и молекул в области минимума потенциала взаимодействия	149
§ 6.4. Короткодействующее взаимодействие атомных и молекулярных частиц	150
Список литературы	155
Глава 7. Двухатомные молекулы и ионы	156
§ 7.1. Квантовые числа двухатомной молекулы. Электронные конфигурации двухатомных молекул	156
§ 7.2. Параметры состояний двухатомных молекул и молекулярных ионов	161
§ 7.3. Потенциальные кривые двухатомных молекул и ионов	191
§ 7.4. Времена жизни электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул и ионов	191
Список литературы	204
Глава 8. Энергия разрыва связей в двухатомных молекулах и ионах	205
§ 8.1. Потенциалы ионизации двухатомных молекул	205
§ 8.2. Энергии диссоциации двухатомных молекул и молекулярных ионов	206
§ 8.3. Энергии сродства двухатомных молекул к электрону	211
§ 8.4. Энергии сродства атомов к протону	211
Список литературы	212
Глава 9. Многоатомные молекулы	213
§ 9.1. Параметры трехатомных молекул	213
§ 9.2. Потенциалы ионизации многоатомных молекул	215
§ 9.3. Энергии разрыва связей в многоатомных молекулах	215
§ 9.4. Энергии разрыва связи у сложных и комплексных ионов	216
§ 9.5. Энергии сродства многоатомных молекул к электрону	218
§ 9.6. Энергии сродства молекул к протону	218
Список литературы	219
Глава 10. Электромагнитные свойства молекул	220
§ 10.1. Дипольные моменты простых молекул	220
§ 10.2. Поляризуемость молекул	222
§ 10.3. Квадрупольный момент молекул	223
Список литературы	224
Математическое приложение	225
П.1. Коэффициенты Клебша—Гордана	225
Список литературы	238

Группы		Периодическая система элементов									
Периоды	1	Электронные конфигурации, основные термы, потенциалы ионизации.			VII			VIII			
1	^1H	$^2S_{1/2}^{1/2}$	$1s$			$1s$			$1s^2$		
1	Водород	13.998	9.0079	$1s$	$2s$	$2s^2$	10.81	$2s^2p^2$	12.011	$2s^2p^4$	14.9067
2	^3Li	7.3812	$2s$	9.0128	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$2s^2p^2$	12.011	$2s^2p^5$	15.9894
3	^1Na	12.9977	10.99877	$2s$	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_0$	7C	$3p_2$	8O
4	^1K	19.9949	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$2p_{1/2}$	13Al	$3p_{3/2}$	14Si	$3p_{5/2}$
5	^1Rb	36.0983	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
6	^1Cs	54.9976	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
7	^3Fr	79.9981	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
8	^1At	104.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
9	^1Rn	183.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
10	^1Nh	283.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
11	^1Hg	403.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
12	^3Rb	104.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
13	^1Cs	183.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
14	^1Fr	283.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
15	^1Nh	403.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
16	^1Nh	483.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
17	^1Nh	563.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
18	^1Nh	643.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
19	^1Nh	723.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
20	^1Nh	803.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
21	^1Nh	883.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
22	^1Nh	963.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
23	^1Nh	1043.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
24	^1Nh	1123.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
25	^1Nh	1203.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
26	^1Nh	1283.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
27	^1Nh	1363.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
28	^1Nh	1443.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
29	^1Nh	1523.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
30	^1Nh	1603.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
31	^1Nh	1683.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
32	^1Nh	1763.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
33	^1Nh	1843.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
34	^1Nh	1923.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
35	^1Nh	2003.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
36	^1Nh	2083.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
37	^1Nh	2163.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
38	^1Nh	2243.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
39	^1Nh	2323.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
40	^1Nh	2403.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
41	^1Nh	2483.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
42	^1Nh	2563.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
43	^1Nh	2643.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
44	^1Nh	2723.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
45	^1Nh	2803.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
46	^1Nh	2883.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
47	^1Nh	2963.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
48	^1Nh	3043.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
49	^1Nh	3123.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
50	^1Nh	3203.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
51	^1Nh	3283.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
52	^1Nh	3363.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
53	^1Nh	3443.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
54	^1Nh	3523.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
55	^1Nh	3603.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
56	^1Nh	3683.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
57	^1Nh	3763.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
58	^1Nh	3843.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
59	^1Nh	3923.9988	11.9983	$2s^2$	$2s^2p$	10.81	$3p_{3/2}$	14Al	$3p_{5/2}$	15P	$3p_{7/2}$
60											