

# Таблиці даних

Таблиця 1: Точні значення енергії основного стану для деяких атомів

$Z$	Атом	Конфігурація	Точне значення енергії, Eh
2	He	$1s^2\ ^1S$	−2.903385
3	Li	$1s^2 2s\ ^2S$	−7.477976
4	Be	$1s^2 2s^2\ ^1S$	−14.668449
5	B	$1s^2 2s^2 2p\ ^2P$	−24.658211
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2\ ^3P$	−37.855668
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3\ ^4S$	−54.611893
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4\ ^3P$	−75.109991
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5\ ^2P$	−99.803888
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6\ ^1S$	−128.830462
11	Na	$[\text{Ne}] 3s\ ^2S$	−162.428221
12	Mg	$[\text{Ne}] 3s^2\ ^1S$	−200.309935
13	Al	$[\text{Ne}] 3s^2 3p\ ^2P$	−242.712031
14	Si	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2\ ^3P$	−289.868255
15	P	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^3\ ^4S$	−341.946219
16	S	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^4\ ^3P$	−399.034923
17	Cl	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5\ ^2P$	−461.381223
18	Ar	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^6\ ^1S$	−529.112009
19	K	$[\text{Ar}] 4s\ ^2S$	−601.967492
20	Ca	$[\text{Ar}] 4s^2\ ^1S$	−680.101971

Таблиця 2: Молекулярні коливальні константи основного стану для вибраних двоатомних молекул

Molecule	$\mu$ (а. о.)	$E$ , Eh	$R$ , Å	$k$ , Н/м	$\omega$ , см <sup>-1</sup>
H <sub>2</sub>	0.50		0.742	570	4401.21
HF	0.96		0.917	970	4138.32
HCl	0.98		1.275	520	2990.95
HBr	1.00		1.414	410	2649.67
HI	1.00		1.609	310	2309.60
CO	6.86		1.128	1900	2169.82
N <sub>2</sub>	7.00		1.098	2290	2358.07
NO	7.47		1.151	1600	1904.41
O <sub>2</sub>	8.00		1.207	1180	1580.36
F <sub>2</sub>	9.50		1.418	440	891.20
Cl <sub>2</sub>	17.48		1.988	320	560.50
Br <sub>2</sub>	39.46		2.670	250	325.29
IBr	48.66		2.470	210	268.71
I <sub>2</sub>	63.45		2.664	170	214.52