

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	$[Ne] 3s \ ^2S$	-162.428221
12	Mg	$[Ne] 3s^2 \ ^1S$	-200.309935
13	Al	$[Ne] 3s^2 3p \ ^2P$	-242.712031
14	Si	$[Ne] 3s^2 3p_2 \ ^3P$	-289.868255
15	P	$[Ne] 3s^2 3p^3 \ ^4S$	-341.946219
16	S	$[Ne] 3s^2 3p^4 \ ^3P$	-399.034923
17	Cl	$[Ne] 3s^2 3p^5 \ ^2P$	-461.381223
18	Ar	$[Ne] 3s^2 3p^6 \ ^1S$	-529.112009
19	K	$[Ar] 4s \ ^2S$	-601.967492
20	Ca	$[Ar] 4s^2 \ ^1S$	-680.101971

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

Molecule	μ (a. o.)	E , Eh	R , Å	k , Н/м	ω , см ⁻¹
H ₂	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 ₂	7.00		1.098	2290	2358.07
NO	7.47		1.151	1600	1904.41
O ₂	8.00		1.207	1180	1580.36
F ₂	9.50		1.418	440	891.20
Cl ₂	17.48		1.988	320	560.50
Br ₂	39.46		2.670	250	325.29
IBr	48.66		2.470	210	268.71
I ₂	63.45		2.664	170	214.52