

С 332.6

И-498

29/11/71

918/2-71

7 - 5560

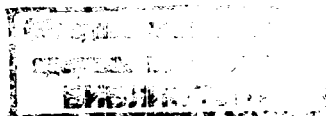
**В.И. Илющенко**

**РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛОВ  
РАВНОВЕСНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ЗОЛОТА  
ПО МОДИФИЦИРОВАННОМУ МЕТОДУ  
СЛЕЙТЕРА**

7 - 5560

В.И. Илющенко

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛОВ  
РАВНОВЕСНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ЗОЛОТА  
ПО МОДИФИЦИРОВАННОМУ МЕТОДУ  
СЛЕЙТЕРА



## Введение

При вычислении эффективных сечений последовательной ионизации электронным ударом необходимо иметь набор энергий связи или ионизационных потенциалов (ИП) орбитальных электронов, соответствующих всем переходам  $Z_0 \rightarrow Z_0 + 1$ , где  $Z = 0, 1, 2, \dots (Z - 1) = (Z - N)$  - зарядность или кратность ионизации иона с атомным номером  $Z$  и числом электронов ионного остова  $N$ . При энергии электронного пучка  $E_e$  и ИП, равных  $I$ , сечение  $\sigma = \sigma(E_e, I)$  для отдельных переходов  $Z_0 \rightarrow Z_0 + 1$  является суммой парциальных сечений  $\sigma_i(E_e, I_i)$ , каждое из которых учитывает удаление орбитального электрона в процессе ионизации из  $n\ell$ -подоболочки с номером  $i$  [1]. Полное эффективное сечение имеет вид:

$$\sigma = \epsilon_1 \frac{a \ln(E_e / I_1)}{I_1 E_e} \quad \text{при } I_1 \leq E_e \leq I_2 \quad \text{или}$$

$$\sigma = \sum_{i=1}^M \sigma_i = \sum_{i=1}^M \epsilon_i \frac{a \ln(E_e / I_i)}{I_i E_e} \quad \text{при } E_e \geq I_M$$

Здесь  $I_1$  - энергия связи электронов во внешней  $n\ell$ -подоболочке, или ИП равновесной ионизации;  $I_2 \dots I_M$  - энергия связи электронов в более глубоких подоболочках, или ИП неравновесной ионизации;  $\epsilon_i$  - число эквивалентных электронов в  $n\ell$ -подоболочке с номером  $i$ ;  $a = 4,0 \times 10^{-14}$  для атомов и однозарядных ионов и  $4,5 \times 10^{-14}$  - для многозарядных ионов в диапазоне  $500 \text{ эв} < E_0 < 10 \text{ кэВ}$ ;  $M = 2-4$  при  $Z = 2-92$ . Если энергии  $E_0$  и  $I_1$  измеряются в эв, то эффективное сечение  $\sigma$  будет иметь размерность  $\text{см}^2$ .

Имеющиеся в настоящее время таблицы ИП равновесной ионизации /2-7/ являются неполными, причём в ряде случаев неизвестны даже первые ИП. Таблица ИП неравновесной ионизации составлена на основе экспериментальных и расчётных данных только для атомов элементов с  $Z = 2-108$  /8/. Экспериментальные данные, собранные в таблицах Мура /7/, в случае  $Z = 79$  содержат только первые ИП равновесной ионизации, равные  $I_1 = 9,22$  и  $I_2 = 20,5$  эв, причём такое положение характерно для большей части элементов с  $Z \geq 30$ .

Однако имеется ряд экспериментальных задач, для решения которых необходимо знать все энергии связи электронов в атомах и ионах до области с  $Z = 92$  включительно. Например, в электроннолучевом ионном источнике ИЭЛ /9-11/ получены ионы  $\text{C}^{+6}$ ,  $\text{N}^{+7}$ ,  $\text{O}^{+8}$  и  $\text{Au}^{+19}$ . ИЭЛ предназначен для получения ионов сверхвысоких зарядностей  $\text{Au}^{+40}$  и  $\text{U}^{+50}$ . Аналогичные задачи ставятся и при создании ионного источника ИРАС /12,13/. В обоих случаях расчёт ионизационной цепочки можно выполнить только при наличии набора соответствующих энергий связи орбитальных электронов в атомах и ионах, включая ИП равновесной ионизации до  $I_{50-60}$ .

Целью настоящей работы является расчёт набора ИП равновесной ионизации  $I_1 - I_{50}$  атома золота, в котором выполняется условие  $I_{z_0+1} > I_{z_0}$  и отражена оболочечная структура электронного облака. Все вычисления выполнены нами с помощью настольного электронного калькулятора "Элка".

## 1. Влияние оболочечных эффектов на процесс последовательной ионизации

Можно показать, что в спектре зарядностей ИЭЛ на оптимальную зарядность приходится около 30% от общего числа ионов<sup>9,13/</sup>. Вероятность ионизации можно выразить как  $p = \sigma j \tau$ , где  $j$  - плотность тока электронного пучка и  $\tau$  - время ионизации. При постоянных  $j$ ,  $E_e$  и  $\tau$  форма спектра зарядностей будет определяться только величиной ИП. В частности, при монотонно увеличивающихся значениях ИП внутри какой-либо  $n \ell$ -подоболочки спектр приобретает квазисимметричную форму. В процессе перехода к очередной, более глубокой внутренней  $n' \ell'$ -подоболочке, где ИП испытывает резкий скачок и увеличивается в несколько раз, эффективное сечение резко уменьшается. Следствием такого уменьшения эффективного сечения будет "компрессия" спектра зарядностей перед барьером в форме более глубокой подоболочки, что позволяет уменьшить число компонент спектра и в пределе, соответствующем высоким ИП, получить монохроматичный зарядовый спектр. Подобный эффект может иметь место только при скорости инъекции нейтрального рабочего вещества, значительно меньшей скорости ионизации.

## 2. Методы расчета ИП

Проведенный нами сравнительный анализ известных методов расчёта ИП<sup>6,14-23/</sup> показывает, что наиболее универсальным и удовлетворяющим поставленным в настоящей работе целям является метод Слейтера<sup>15,16/x/</sup>. Правила Слейтера для нахождения величин параметров экранирования  $S_{n\ell} = (Z - \bar{r}_n / \bar{r})$  можно представить в форме компактной таблицы, которая приведена ниже (табл. 1).

---

x/ Результаты расчётов по методу Хартри-Фока полной энергии ионизации  $E_T$ <sup>25/</sup> и первых тринадцати ИП равновесной ионизации Ag, Cu, Kr, Xe и U<sup>26/</sup> использовались нами в качестве основы для сравнения.

Таблица 1

$n\ell$ - электрон, для которого определяется $S_{n\ell}$	Вклад в $S_{n\ell}$ от каждого $n'\ell'$ -электрона за исключением $n\ell$ -электрона			
	$s'$	$p'$	$d'$	$f'$
$ns, np$	$0,85(n-1)s$ $0,35ns$	$0,85(n-1)p$ $0,35np$	$0,85(n-1)d$ $0,00nd$	$0,85(n-1)f$ $0,00nf$
$nd$	$1,00(n-1)s$ $1,00ns$	$1,00(n-1)p$ $1,00np$	$1,00(n-1)d$ $0,35nd$	$1,00(n-1)f$ $0,00nf$
$nf$	$1,00(n-1)s$ $1,00ns$	$1,00(n-1)p$ $1,00np$	$1,00(n-1)d$ $1,00nd$	$1,00(n-1)f$ $0,35nf$

Правила Слейтера выведены из сравнения расчётных и экспериментальных значений различных энергетических параметров атомов и ионов при  $Z \leq 30$ , поэтому применение этих правил в области элементов с  $Z > 30$  является необоснованной экстраполяцией<sup>/16/</sup>.

Наиболее существенными недостатками правил Слейтера являются наличие  $s$  - ,  $p$  -вырождения по  $\ell$  и отсутствие релятивистского обобщения этих правил. Вследствие пренебрежения экранирующим действием внешних  $n'\ell'$  -электронов вычисленные по Слейтеру значения  $S_{n\ell}$  являются параметрами внутреннего экранирования. Однако учёт внешнего экранирования значительно увеличивает трудоемкость расчётов, не давая одновременно существенного выигрыша в точности расчётных ИП.

При снятии вырождения по  $\ell$  удобно представить параметр экранирования в виде  $S_{n\ell} = (P-1)X + QY + RV$ , где  $P$  - число электронов в собственной группе рассматриваемого электрона,  $Q$  и  $R$  - число электронов внутренних групп, каждый из которых даёт вклады  $Y$  и  $V$  соответственно. В случае эмпирических правил Слейтера  $X = 0,35$  (0,30),  $Y = 0,85$  и  $V = 1,00$ .

Денти<sup>/24/</sup> предложил для снятия  $s$ -,  $p$ -вырождения учитывать вклад внутренних  $n'\ell'$  -подоболочек по старым правилам Слейтера, а  $X$  находить из уравнения

$$\sum_i \left( \frac{Z - S_i}{n_i^*} \right)^2 - \sum_{i \neq m} \left( \frac{Z - S_{im}}{n_i^*} \right)^2 = I(n_m, \ell_m),$$

$$I(n, \ell) = I(n, \ell, j) + \frac{\ell+1}{2\ell+1} [I(n, \ell, j+1) - I(n, \ell, j)], \quad (1)$$

$$I(n, 0) = I(n, 0, 1/2), \quad \ell = j + 1/2,$$

где  $I(n, \ell, j)$  являются экспериментальными ИП неравновесной ионизации для элементов с  $Z = 2-41$ . В работе<sup>/24/</sup> рассмотрены как нерелятивистская, так и релятивистская методики определения  $S_n \ell$  для элементов с  $Z \leq 36$ . Тем не менее даже при использовании экспериментальных ИП для подгонки значений  $X$  по нерелятивистскому методу Слейтера-Денти  $s$ -,  $p$ -вырождение потенциалов равновесной ионизации не снимается, так как  $(Q \cdot Y + R \cdot V)_{ns} = (Q \cdot Y + R \cdot V)_{np}$  и условие  $I_{z_0+1} > I_{z_0}$  заведомо не выполняется, потому что последние ИП для  $s$ - и  $p$ -подоболочек совпадают по величине.

### 3. Новые правила Слейтер-М и Слейтер-MN

Из сравнения экспериментальных ИП равновесной ионизации<sup>/5,7/</sup> и полных энергий ионизации  $E_T$  <sup>/25/</sup> с расчётными в области  $Z = 1-92$  нами найдены новые эмпирические правила Слейтер-М для определения  $S_n \ell$  и эффективного главного квантового числа  $n^*$ . Получающийся в результате расчёта по новым правилам набор нерелятивистских ИП удовлетворяет поставленным в настоящей работе целям и не имеет  $s$ -,  $p$ -вырождения. Правила Слейтер-М имеют следующий вид:

а) При  $n = 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7$  эффективное квантовое число  $n^* = 1; 2; 3; 3,7; 4,0; 4,2; 4,3$ , т.е. для  $n = 7$  вводится новое эффективное квантовое число  $n^* = 4,3$ .

б) Для определения  $S_{n\ell}$  электроны разделяются на группы, совпадающие с  $n\ell$ -подоболочками:  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ ,  $4s$  ...  $7s$ .

в) Электронные группы, находящиеся снаружи рассматриваемой группы, не влияют на величину  $S_{n\ell}$ , т.е. по аналогии с соответствующим правилом Слейтера учитывается только внутреннее экранирование.

г) Каждый электрон из собственной группы рассматриваемого  $n\ell$ -электрона увеличивает  $S_{n\ell}$  на  $X = 0,30$  при  $n = 1$  и на  $X = 0,35$  при  $n \geq 2$ .

д) Если рассматриваемый электрон относится к  $ns$ -группе, то каждый электрон внутренней группы с главным числом  $(n-1)$  увеличивает  $S_{n\ell}$  на  $Y = 0,80$ , а каждый электрон из еще более глубокой внутренней группы - на  $V = 1,00$ .

е) Если рассматриваемый электрон относится к  $np$ -группе, то при  $n \leq 3$  каждый электрон из  $ns$ -группы и всех внутренних групп с главным квантовым числом  $(n-1)$  увеличивает  $S_{n\ell}$  на  $Y = 0,80$ . При  $n > 3$  электроны из  $(n-1)s$ - и  $(n-1)p$ -групп дают вклад  $Y = 1,00$ , а электроны из  $(n-1)d$ - и  $(n-1)f$ -групп  $Y = 0,80$ . В обоих случаях каждый электрон из еще более глубокой внутренней группы увеличивает  $S_{n\ell}$  на  $V = 1,00$ .

ж) Если рассматриваемый электрон относится к  $nd$ -группе, то каждый электрон из  $ns$ - и  $np$ -групп увеличивает  $S_{n\ell}$  на  $Y = 0,80$ , а каждый электрон из еще более глубоких внутренних групп - на  $Y = 1,00$ .

з) Если рассматриваемый электрон относится к  $nf$ -группе, то при  $n = 4$  все электроны всех внутренних групп увеличивают  $S_{n\ell}$  на  $Y = V = 1,00$ . При  $n \geq 5$  электроны из  $ns$ -,  $np$ - и  $nd$ -групп дают вклад  $Y = 0,80$ .

В табл. 2 правила Слейтер - М приведены в более удобной форме.



Таблица 2

$n\ell$ -электрон, для которого определяется $S_{n\ell}$	Вклад в $S_{n\ell}$ от каждого $n'\ell'$ -электрона за исключением $n\ell$ -электрона			
$n\ell$	$s'$	$p'$	$d'$	$f'$
$ns$	$0,8(n-1)s$ (0,30)0,35ns	$0,8(n-1)p$ 0,0np	$0,8(n-1)d$ 0,0nd	$0,8(n-1)f$ 0,0nf
$np$	(1,0) $0,8(n-1)s$ 0,8ns	(1,0) $0,8(n-1)p$ 0,35np	$0,8(n-1)d$ 0,0nd	$0,8(n-1)f$ 0,0nf
$nd$	$1,0(n-1)s$ 0,8ns	$1,0(n-1)p$ 0,8np	$1,0(n-1)d$ 0,35nd	$1,0(n-1)f$ 0,0nf
$nf$	$1,0(n-1)s$ (0,8)1,0ns	$1,0(n-1)p$ (0,8)1,0np	$1,0(n-1)d$ (0,8)1,0nd	$1,0(n-1)f$ 0,35nf

Результаты применения правил Слейтер-М при  $Z = 79$  приведены ниже. В скобках даны значения  $S_{n\ell}$ , полученные по старым правилам.

$1s^2$	$1 \times 0,30$	+	$0 \times 0,8$	+	$0 \times 1,0$	=	0,30	(0,30)
$2s^2$	$1 \times 0,35$	+	$2 \times 0,8$	+	$0 \times 1,0$	=	1,95	(4,15)
$2p^6$	$5 \times 0,35$	+	$4 \times 0,8$	+	$0 \times 1,0$	=	4,95	(4,15)
$3s^2$	$1 \times 0,35$	+	$8 \times 0,8$	+	$2 \times 1,0$	=	8,75	(11,25)
$3p^6$	$5 \times 0,35$	+	$10 \times 0,8$	+	$2 \times 1,0$	=	11,75	(11,25)
$3d^{10}$	$9 \times 0,35$	+	$8 \times 0,8$	+	$10 \times 1,0$	=	19,55	(21,15)
$4s^2$	$1 \times 0,35$	+	$18 \times 0,8$	+	$10 \times 1,0$	=	24,75	(27,75)
$4p^6$	$5 \times 0,35$	+	$12 \times 0,8$	+	$18 \times 1,0$	=	29,35	(27,75)
$4d^{10}$	$9 \times 0,35$	+	$8 \times 0,8$	+	$28 \times 1,0$	=	37,55	(39,15)
$4f^{14}$	$13 \times 0,35$	+	$0 \times 0,8$	+	$46 \times 1,0$	=	50,55	(50,55)

$5s^2$	$1 \times 0,35$	+	$32 \times 0,8$	+	$28 \times 1,0$	=	53,95 (57,65)
$5p^6$	$5 \times 0,35$	+	$26 \times 0,8$	+	$36 \times 1,0$	=	58,55 (57,65)
$5d^{10}$	$9 \times 0,35$	+	$8 \times 0,8$	+	$60 \times 1,0$	=	69,55 (71,15)
$6s^1$	$0 \times 0,35$	+	$18 \times 0,8$	+	$60 \times 1,0$	=	74,40 (75,30)

Для увеличения точности расчёта правила Слейтер-М дополняются процедурой подгонки величин  $S_n \ell$  по экспериментальным и экстраполированным значениям энергий связи электронов<sup>/5,8/</sup>. В этом случае (правила Слейтер- MN) в уравнение  $S_n \ell = (P-1)X + QY + RV$  подставляются  $X = 0,35$ ,  $V = 1,00$  и по формулам (1) определяется оптимальное значение  $Y$ . Если это значение  $Y > 1,00$ , то для  $Y = 1,0$  определяется оптимальное значение  $X$ .

Результаты расчётов ИП равновесной ионизации золота до  $I_{50}$  по методам Слейтера, Слейтер-М и Слейтер- MN приведены в табл. 3. В таблице 4 показаны сравнительные данные по полным энергиям ионизации  $E_T$ , полученные для ряда элементов от гелия до урана в расчётах по методу Слейтера, Слейтер-М, нерелятивистским методам Хартри (NR-H)<sup>/25/</sup>, Хартри-Фока (NR-HF)<sup>/25/</sup>, релятивистскому методу Дирака-Слейтера (R-DS)<sup>/25/</sup>, а также в экспериментах по определению ИП<sup>/5,7/</sup>.

#### 4. Выводы

Вся совокупность полученных данных свидетельствует о том, что предложенные нами правила Слейтер-М наряду со снятием вырождения по  $\ell$  обеспечивают набор ИП и полные энергии ионизации  $E_T$ , практически совпадающие с соответствующими величинами из нерелятивистских численных расчётов по методу Хартри (NR-H)<sup>/25/</sup>.

Более точные значения энергий связи электронов можно получить из релятивистского обобщения правил Слейтер- MN по формулам из работы<sup>/24/</sup>, результатом применения которых являются правила Слейтер- MR.

Методы расчёта по правилам Слейтер-М, Слейтер- MN и Слейтер- MR связаны между собой, т.к. каждый предыдущий набор правил является первым приближением для последующего. Формальное различие

между тремя вариантами отображается в значениях параметров  $X$  и  $Y$  и изменении формы уравнений (1) при переходе к релятивистским правилам Слейтер- MR .

ИП неравновесной ионизации получаются в форме промежуточных результатов при расчётах по методам Слейтер- MN и Слейтер- MR .

В заключение автор считает своим приятным долгом поблагодарить Е.Д. Донца за ценные дискуссии по затронутым в статье вопросам.

### Л и т е р а т у р а

1. W. Lotz. *Astroph.J.Suppl.*, 14, 207 (1967).
2. E. Lisitzin. *Comm.Phys.-Math.Soc.Sci.Fenn.*, 10, H.4 (1938).
3. W. Finkelburg, W. Humbach. *Naturwiss.*, 42, 35 (1955).
4. M. Von Ardenne. *Tabellen der Elektronenphysik, Ionenphysik und Übermikroskopie*, I, 580 (1962).
5. W. Lotz. *J.Opt.Soc.Am.*, 57, 873 (1967).
6. S.O. Kastner. *J.Chem.Phys.*, 50, 2896 (1969).
7. Ch.E. Moore. *Circular of Natl.Bureau of Sts.*, No 467, III, Table 34 (1958).
8. W. Lotz. *J.Opt.Soc.Am.*, 60, 206 (1970).
9. Е.Д. Донец, В.И. Илющенко, В.А. Альперт. Препринт ОИЯИ, P7-4124, Дубна, 1968.
10. Е.Д. Донец, В.И. Илющенко, В.А. Альперт. Препринт ОИЯИ, P7-4469, Дубна, 1969.
11. E.D. Donets, V.I. Ilyushchenko, V.A. Alpert. *Premiere conference internationale sur les sources d'ions*, p. 635, INSTN, Saclay, 18-20 juine 1969.
12. G.S. Janes, R.H. Levy, H.A. Bethe, B.T. Feld. *Phys.Rev.*, 145, 925 (1966).
13. J.D. Daugherty, L. Grodzins, G.S. Janes, R.H. Levy. *Phys.Rev.Lett.*, 20, 369 (1968).
14. A. Sommerfeld. *Z.f.Physik*, 80, 415 (1933).

15. J.C. Slater. *Phys.Rev.*, 36, 57 (1930).
16. J.C. Slater. *Quantum theory of atomic Structure*, I, p. 368 McGraw-Hill Co., New York (1960).
17. E. Clementi, D.L. Raimondi. *J.Chem.Phys.*, 38, 2686 (1963).
18. E. Clementi, D.L. Raimondi, W.P. Reinhardt. *J. Chem. Phys.*, 47, 1300 (1967).
19. G. Burns. *J.Chem.Phys.*, 41, 1592 (1964).
20. Ch. Froese. *Can.J.Phys.*, 41, 51 (1963).
21. R.F. Bacher, S. Goudsmit. *Phys.Rev.*, 46, 948 (1934).
22. P.G. Kruger, W.E. Shoupp. *Phys.Rev.*, 46, 124 (1934).
23. L. Pauling, J. Scherman, Z.F. *Kristallographie.*, 81, 1 (1932).
24. P. Denti. *Nuovo Cimento.*, 56B, 105 (1968).
25. E.C. Snow, J.M. Confield, J.T. Waber. *Phys.Rev.*, 135, A969 (1964).
26. R.S. Livingston. *Proc.Intern Conf. Heavy Ions.*, p.p. 498-517, Heidelberg, 1969.

Рукопись поступила в издательский отдел

8 января 1971 года.

Таблица 3

ИП равновесной ионизации атома золота (эв)

№ п/п	Зоммерфельд /14/	Слейтер /15/	Слейтер-М (настоящая работа)	Слейтер- MN	Лисицын /2/
1	1,8	10,5	16,3	9,3	9,3
2	8,2	9,4	24,3	18,5	18,8
3	17,4	17,3	34,1	27,6	30,5
4	29,0	25,8	44,5	37,4	43,5
5	42,8	34,9	55,5	47,7	57,8
6	58,7	44,7	67,3	58,7	73,1
7	76,7	55,0	79,5	70,3	96,4
8	96,7	66,0	92,5	82,5	114,4
9	118,8	77,7	105,9	95,4	133,3
10	142,8	89,9	120,1	108,9	152,5
11	161,2	102,8	134,9	123,0	172,0
12	197,6	297,6	294,1	209,1	—
13	227,7	322,0	317,8	229,3	—
14	261,1	347,0	342,1	250,2	—
15	295,9	372,6	367,1	271,7	—
16	333,7	398,8	392,7	293,9	—
17	372,6	425,7	418,9	316,6	—
18	418,6	453,2	518,4	424,0	—
19	459,9	481,3	548,9	451,2	—
20	511,8	545,3	545,3	490,6	—
21	555,5	582,2	582,2	524,9	—
22	611,9	619,8	619,8	561,1	—
23	667,9	658,3	658,3	597,5	—
24	726,0	697,2	697,2	634,9	—
25	791,4	737,1	737,1	673,2	—
26	855,0	777,6	777,6	712,0	918,0
27	926,8	819,0	819,0	751,6	953,0
28	999,1	860,9	860,9	791,9	987,0
29	1070	903,6	903,6	833,0	1040
30	1156	947,0	947,0	874,8	1060
31	1237	991,3	991,3	917,3	1080
32	1330	1036	1036	960,6	1199
33	1424	1081	1081	1004	1210
34	1516	1327	1446	1574	2190
35	1617	1380	1502	1632	2260
36	1737	1434	1558	1691	2310
37	1832	1490	1616	1751	2360
38	1963	1545	1674	1811	2410
39	2083	1602	1733	1872	2550
40	2229	1659	1792	1934	2590
41	2350	1717	1853	1997	2630
42	2425	1776	1914	2061	2670
43	2637	1836	1976	2125	2700
44	2812	2358	2275	2334	2970
45	2979	2428	2343	2403	3000
46	3141	2498	2413	2473	3030
47	3343	2570	2483	2543	3130
48	3523	2642	2553	2615	3150
49	3720	2715	2624	2687	3170
50	3957	2789	2885	2964	3230

 $E_T = 560,77 \quad 478,46 \quad 482,87 \quad 508,07 \quad 531,77 \text{ (кэв)}$ 
 $E_T(NR-H) = 486,03 \text{ кэв}, \quad E_T(R-DS) = 517,57 \text{ кэв.}$

Таблица 4  
 Полные энергии ионизации  $E_T$  (эВ)

Z	Эксперимен- тальные зна- чения /5,7/	Слейтер-М (наст. работа)	Слейтер /15/	Хартри /25/ (NR-H)	Дирак-Слейтер /25/ (R-DS)
2	79,0	78,6	78,6	77,8	76,1
5	671,0	675,1	669,7	667,6	654,4
6	1030,1	1036,1	1027,4	1024,9	1008,2
7	1486,1	1492,4	1479,6	1478,3	1457,6
8	2043,7	2052,8	2035,0	2037,0	2011,7
9	2715,7	2725,8	2702,3	2710,4	2679,7
10	3511,6	3520,1	3490,0	3507,6	3470,5
18	14397	14360	14290	14371	14314
29	44705	44488	43955	44646	44866
35	—	69135	68757	70061	70715
54	—	194695	192559	196874	202331
79	—	482867	478458	486035	517572
83	—	543737	538905	546691	586441
92	—	696870	690805	698136	763174

$1Ry = 13,6$  эВ.