

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Departamento de Física Fundamental



TESIS DOCTORAL

**Correcciones relativistas a un modelo atómico central
autoconsistente**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR

Joaquín Gómez del Río

Madrid, 2015

TP
1984

054

Joaquín Gómez del Río



* 5 3 0 9 8 6 3 3 3 7 *
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE

x-53-931525-3

CORRECCIONES RELATIVISTAS A UN MODELO ATOMICO CENTRAL AUTOCONSISTENTE

Departamento de Física Fundamental
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense de Madrid
1984



BIBLIOTECA

Colección Tesis Doctorales. Nº 54/84

© Joaquín Gómez del Río
Edita e imprime la Editorial de la Universidad
Complutense de Madrid. Servicio de Reprografía
Noviciado, 3 Madrid-8
Madrid, 1984
Xerox 9200 XB 480
Depósito Legal: M-10308-1984

MEMORIA QUE PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS FISICAS PRESENTA

D. JOAQUIN GOMEZ DEL RIO

CORRECCIONES RELATIVISTAS A UN MODELO ATOMICO
CENTRAL AUTOCONSISTENTE

DIRECTOR: D. CARLOS SANCHEZ DEL RIO
CATEDRATICO DE FISICA ATOMICA
Y NUCLEAR DE LA UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE DE MADRID.

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR
DEPARTAMENTO DE INVESTIGACION BASICA

MADRID, SEPTIEMBRE 1981

2

AGRADECIMIENTO

El presente trabajo se ha desarrollado por indicación de D. Carlos Sanchez del Rio a quien le -
debo las ideas fundamentales, no solo las que es
tán aquí vertidas sino las recibidas hace ya ba
santes años en las aulas de la Universidad, la -
interpretación de los resultados parciales y la
cuidadosa corrección del manuscrito final, y en
el que siempre he encontrado la amable atención
que la necesidad del momento requería.

Ha sido posible su realización gracias a la valio
sisima ayuda de los Doctores Yunta Carretero y --
Rodriguez Mayquez, que han compartido conmigo los
momentos más difíciles de su desarrollo y han co-
laborado en muchos de sus cálculos.

Finalmente estoy en deuda con la Junta de Energía
Nuclear, en donde comencé los primeros trabajos -
de mi vida y en la que he realizado materialmente
el trabajo que ahora presento, quizás con el ocul
to deseo de prolongar la corta estancia en ella -
a que me obligaron los avatares de la vida.

4

I N D I C E

=====

	<u>Pág.</u>
1. Introducción.	6
2. Ecuación de ondas relativista. Aproximación de Pauli.	13
3. Determinación del potencial: Modelo atómico del campo central. Método del campo autoconsistente.	25
4. Integración de la ecuación de ondas.	37
5. Integración por el método de perturbaciones: Potencial analítico.	55
6. Integración por el método de perturbaciones: Potencial autoconsistente.	73
7. Resultados.	80
8. Discusión.	84
9. Resumen y Conclusiones.	112
Tablas	
Apéndice	

1. INTRODUCCION

Los niveles de energía de un átomo real exhiben la bien conocida separación en su estructura fina de la que no da cuenta la teoría no relativista de Schrödinger. Esta estructura fina es debida, parcialmente, a la variación relativista de la masa con la velocidad y parcialmente al espín de los electrones. Los efectos de la variación de la masa pueden predecirse mediante la ecuación de Schrödinger relativista para partículas sin espín (ecuación de Klein-Gordon) pero no proporcionan resultados correctos para la estructura fina, el efecto Zeeman y otros fenómenos que dependen del espín de los electrones. La ecuación de Dirac, por otra parte, constituye la base de una teoría completa para partículas de espín $1/2$ y debe, por consiguiente, dar cuenta de los efectos que provocan todos estos fenómenos, como se puede comprobar a partir de la única solución exacta conocida correspondiente al átomo de hidrógeno.

La ecuación de Dirac para un átomo de muchos electrones es, sin embargo, tan compleja que para intentar resolverla es necesario hacer algunas aproximaciones que permitan atacar el de otra forma inabordable problema. La aproximación más inmediata, debida a Pauli, se aplica en el caso de partículas de relativamente baja energía y situadas en un campo escalar moderadamente débil, y transforma la ecuación de Dirac de cuatro componentes en otra de dos, me-

diante la eliminación de las llamadas "componentes pequeñas", pero la ecuación resultante es, todavía inabordable.

La siguiente aproximación, la más importante, consiste en suponer que cada electrón del átomo está en un campo de potencial esféricamente simétrico - que representa el efecto del núcleo y, de algún modo, - el efecto promedio de los demás electrones. Es lo que se conoce como aproximación del campo central y mediante la cual se puede simplificar la ecuación de Pauli y separar las partes angular y radial, dando esta última lugar a una ecuación de segundo orden que tiene la misma estructura que la ecuación relativista de Schrödinger pero con algunos términos más.

Reducida la ecuación de Dirac a esta única ecuación de segundo orden el problema surge entonces en la determinación del campo central.

Existen dos métodos clásicos para la determinación del campo: el estadístico de Thomas(1) y Fermi (2) y el del campo autoconsistente debido a Hartree (3). Las ecuaciones de Hartree y las más perfeccionadas de Hartree-Fock (4) proporcionan la mejor solución para cada estado atómico fundamental, en forma de una función separable, debido a que esta solución es la que hace mínima la energía total del sistema

Estas ecuaciones forman un sistema integro-diferencial en el que aparece un término no local en el potencial que complica extraordinariamente su cálculo. Es el llamado potencial de intercambio que tiene en cuenta el carácter antisimétrico de la función de onda de un sistema de fermiones en el intercambio de las coordenadas espaciales y de espín de cualquier par de partículas. Se han propuesto diversas aproximaciones para el potencial de intercambio, de las cuales, la debida a Slater (5) es la más utilizada.

La complejidad que introduce en las ecuaciones de Hartree-Fock el potencial de intercambio puede evitarse utilizando potenciales expresados en forma analítica, en los que, de algún modo, intervienen parámetros que se obtienen por diversos procedimientos. Se han propuesto potenciales deducidos de soluciones aproximadas de la ecuación de Thomas-Fermi o expresiones analíticas cuyos coeficientes están determinados mediante ajuste por mínimos cuadrados de las energías calculadas a partir de las ecuaciones de Hartree-Fock. Yunta et al. (6) han propuesto un potencial analítico de tres parámetros que se obtienen para cada átomo mediante un procedimiento autoconsistente, en un sentido próximo al de Hartree, y que ha proporcionado resultados de las energías de enlace bastante aproximados a los experimentales para los átomos de número atómico inferior a 40.

Sin embargo, para átomos pesados los efectos relativistas no pueden ignorarse y los resultados - que se obtienen con cualquiera de los métodos que se empleen se apartan mucho de los valores experimentales.

Los cálculos preliminares realizados por Williams (7) para el Cu^+ , por Mayers (8) para el Hg, por Cohen (9) para el Hg, V y W y por Herman-Skilman (10) para los átomos de número atómico par, en los que, de una u otra forma, ya se han tenido en cuenta los efectos relativistas, han proporcionado aproximaciones tan notables - que hacen atractivo el proseguir las investigaciones por este camino.

En el presente trabajo se ha efectuado el estudio sobre la integrabilidad de la ecuación de ondas relativista, y se ha demostrado que su integración solo - es posible por el método de perturbaciones que es, en este caso, aplicable por ser pequeñas las correcciones relativistas que intervienen.

Se han utilizado dos diferentes potenciales: el primero, propuesto por Rodríguez Mayquez et al. (6), un potencial expresado mediante una forma analítica de tres - parámetros, y el segundo, propuesto por Sánchez del Río - (11), un potencial con el término de cambio expresado, - en forma local, mediante una expresión aproximada, y obte

nido a partir de la propia distribución de carga de los electrones de los orbitales de cada átomo, que se hace autoconsistente a través de un proceso iterativo de cálculo mediante el que se consigue que el potencial producido por la propia distribución de carga de los orbitales hallados coincida precisamente con el potencial utilizado para calcular estos orbitales.

Los resultados obtenidos con estos cálculos demuestran que, a pesar de las importantes aproximaciones efectuadas para abordar el problema, tanto los potenciales utilizados como los métodos de cálculo seguidos proporcionan, con alguna excepción, unos valores de las energías de enlace correspondientes a los diferentes orbitales de cada uno de los elementos del sistema periódico muy ajustados a los obtenidos experimentalmente lo que, en último término, justifica la utilidad de los mismos.

UNIDADES

Con excepción de las expresiones teóricas que aparecen en el capítulo 2, en el resto de los capítulos y, desde luego, para la expresión de los resultados, se ha utilizado el sistema de unidades atómicas definido por el siguiente conjunto de unidades fundamentales:

- unidad de carga = carga del electron, e
- unidad de masa = masa del electrón, m_0
- unidad de longitud = radio de la primera órbita de Bohr para el átomo de H.

$$a = \frac{h^2}{4 \pi m_0 e^2}$$

y consecuentemente con ellas,

- unidad atómica de energía (u.a.) = doble de la energía de ionización del estado normal del átomo de H,

$$\frac{e^2}{a} = \frac{4 \pi^2 m_0 e^4}{h^2}$$

cuya relación con las unidades espectroscópicas habituales es:

$$1 \text{ u.a.} = 219.470, 12 \text{ cm}^{-1} = 27,21 \text{ eV} = 2 \text{ Ry}$$

También aparece en los cálculos la velocidad de la luz, c, que en este sistema de unidades se expresa como la inversa de la "constante de estructura fina", α , y que tiene un valor

$$c = 137.037$$

B I B L I O G R A F I A
=====

- (1) L.H.THOMAS, Proc. Camb. Phil. Soc., 23, 542, 1927
- (2) E. FERMI, Zeits. f. Physik, 48, 73, 1928
- (3) D.R.HARTREE, Proc. Camb. Phil. Soc., 24, 111, 1928
- (4) D.R.HARTREE, "The Calculation of atomic Structures,
Yohn Wiley and sons. New York, 1957
- (5) J.C.SLATER, Phys. Rev. 81, 385, 1951
- (6) E.RODRIGUEZ MAYQUEZ, J.YUNTA, C.SANCHEZ DEL RIO, An.
Fis, 72, 239,1976
- (7) A.O.WILLIAMS, Phys, Rev. 58, 723, 1940
- (8) D.F.MAYERS. Proc. Roy. Soc (London), A 241, 93, 1957
- (9) S.COHEN, Phys, Rev., 118, 489, 1960
- (10) F.HERMAN, S.SKILMAN: "Atomic Structure Calculations"
Prentice-Hall, Englewood Cliffs. - -
New Jersey, 1963
- (11) C.SANCHEZ DEL RIO, J.YUNTA, E.RODRIGUEZ MAYQUEZ, - -
J. Phys. B, 8, 2588, 1975

2. ECUACION DE ONDAS RELATIVISTA, APROXIMACION DE PAULI

Se expone en el presente capítulo, de forma resumida, la deducción de la ecuación de ondas relativista de Pauli, con objeto de destacar el origen de sus limitaciones no obstante la rigurosidad de su desarrollo. En la deducción se ha seguido a Bethe y Salpeter (1) y Rose (2), aunque el desarrollo se presenta de una forma algo diferente y más elaborado.

En el caso de partículas de relativamente baja energía, $E \approx mc^2$, y situadas en campos escalares moderadamente débiles, $e\phi \ll mc^2$, los factores que multiplican a las componentes u_3 y u_4 de la ecuación de Dirac independiente del tiempo

$$\left[E + e\phi - \beta mc^2 - \vec{\alpha} \cdot (c\vec{p} + e\vec{A}) \right] u = 0 \quad (2.1)$$

son mayores que los que multiplican a las componentes u_1 y u_2 , por lo que éstas últimas reciben el nombre de "componentes grandes" y aquéllas el de "componentes pequeñas"

Si las componentes grandes se denotan por U_A y por U_B las componentes pequeñas, la ecuación de Dirac se puede escribir en forma de un sistema de dos ecuaciones

$$\left. \begin{aligned} (E + e\varphi - mc^2) U_A &= \vec{\sigma}^P \cdot (c\vec{p} + e\vec{A}) U_B \\ (E + e\varphi + mc^2) U_B &= \vec{\sigma}^P \cdot (c\vec{p} + e\vec{A}) U_A \end{aligned} \right\} (2.2)$$

en donde

$$U_A = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad U_B = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

y $\vec{\sigma}^P$ son las matrices espín de Pauli, relacionadas con las matrices espín de Dirac, $\vec{\sigma}$, por

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma}^P & 0 \\ 0 & \vec{\sigma}^P \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Las matrices $\vec{\sigma}$ están, a su vez definidas por las relaciones

$$\sigma_j = -i \alpha_k \alpha_l \quad (2.4)$$

j, k, l combinación cíclica de los subíndices 1, 2 y 3

A partir de este sistema (2.2) se puede obtener ya una primera aproximación si en su segunda ecuación se hace $E = mc^2$ y se desprecia el término $e\varphi$, de acuerdo con las hipótesis de partida. Con estas hipótesis, la segunda ecuación del sistema (2.2) proporciona una expresión aproximada que relaciona las componentes pequeñas U_B con las componentes grandes; tal expresión es

$$U_B \approx \frac{1}{2mc} \left[\vec{\sigma}^P \cdot \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right) \right] U_A \quad (2.5)$$

sustituyendo esta expresión en la primera de las ecuaciones (2.2) se obtendría una única ecuación para las componentes grandes, pero el error que se cometería es muy superior (Bethe y Salpeter (1), Slater (3)) al que se obtiene siguiendo un método diferente que conduce a una única ecuación diferencial de segundo orden conocida como ecuación de Pauli

La deducción de la ecuación de Pauli se realiza de la siguiente forma:

La componente A de la matriz $\vec{\alpha}u$ es

$$(\vec{\alpha}u)_A = \vec{\sigma}^P U_B$$

que teniendo en cuenta la aproximación (2.5), con $\vec{A} = \vec{0}$ y las propiedades de las matrices espín de Pauli, se transforma en

$$(\vec{\alpha}u)_A = \frac{1}{2mc} \left[\vec{p} + i (\vec{p} \times \vec{\sigma}^P) \right] U_A \quad (2.6)$$

La utilización de esta expresión en la ecuación de Dirac requiere transformar esta última en su forma covariante. Para ello se multiplica la ecuación (2.1) por la izquierda por la matriz $i \frac{\beta}{c}$, con lo que resulta

$$\left[i \frac{\beta}{c} E + i \frac{\beta}{c} e \varphi - i\beta^2 mc - i\beta \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right] u = 0 \quad (2.7)$$

que utilizando las definiciones de los cuadvectores impulso y campo

$$p_{\mu} = (\vec{p}, \frac{i}{c} E)$$

$$A_{\mu} = (\vec{A}, i\varphi)$$

y la definición de las matrices γ de Dirac

$$\gamma_{\mu} = (-i\beta\vec{\alpha}, \beta),$$

conduce a la ecuación transformada de (2.7) en forma covariante

$$\left[\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \left(p_{\mu} + \frac{e}{c} A_{\mu} \right) - imc \right] u = 0$$

que puede escribirse en una forma más compacta utilizando el operador

$$\pi_{\mu} = p_{\mu} + \frac{e}{c} A_{\mu} \quad (2.8)$$

con lo que la ecuación de Dirac resulta, definitivamente

$$\left[\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \pi_{\mu} - imc \right] u = 0 \quad (2.9)$$

Es necesario, aún, deducir a partir de esta ecuación de primer orden otra ecuación diferencial de segundo orden en la que las matrices γ solo aparecen en aquellos términos que se anulan en ausencia de un campo electromagnético.

Esto se consigue multiplicando la ecuación (2.9) por la expresión $\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \pi_{\mu} + imc$,

$$\left(\sum_{\nu} \gamma_{\nu} \pi_{\nu} + imc \right) \left(\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \pi_{\mu} - imc \right) u = 0$$

$$\left[\sum_{\mu} (\gamma_{\mu} \pi_{\mu})^2 + \sum_{\mu} \sum_{\nu} (\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} \pi_{\mu} \pi_{\nu} + \gamma_{\nu} \gamma_{\mu} \pi_{\nu} \pi_{\mu}) + m^2 c^2 \right] u = 0$$

Esta expresión puede simplificarse considerablemente si se utiliza la definición del tensor electromagnético

$$F_{\alpha\beta} = \frac{\partial A_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}$$

y se tiene en cuenta las reglas de conmutación de las matrices, γ

$$\gamma_{\alpha} \gamma_{\beta} + \gamma_{\beta} \gamma_{\alpha} = 2 \delta_{\alpha\beta}$$

pues, entonces, el conmutador de π_{α} y π_{β} resulta

$$[\pi_{\alpha}, \pi_{\beta}] = \frac{\hbar e}{i c} F_{\alpha\beta}$$

y la expresión transformada de la ecuación de Dirac mediante todos los cambios anteriores conduce, definitivamente, a la siguiente ecuación diferencial

$$\left[\sum_{\mu} \pi_{\mu}^2 + \frac{\hbar e}{2ic} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} F_{\mu\nu} + m^2 c^2 \right] u = 0 \quad (2.10)$$

Conviene ahora expresar esta ecuación en forma desarrollada, sustituyendo las componentes del tensor electromagnético por las de los campos eléctrico, \mathcal{E} , y magnético, \mathcal{H} , correspondientes

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_j &= F_{j4} \\ \mathcal{K}_j &= F_{k,l} \quad ; j, k, l \text{ combinación cíclica de } 1, 2, 3 \end{aligned} \right\}$$

y aplicando las propiedades de las matrices γ

$$\gamma_j \gamma_k = i\sigma_i$$

$$\gamma_j \gamma_4 = i\sigma_4$$

con lo que si en la ecuación (2.10) se sustituye, además, el operador \vec{p} por su correspondiente

$$\vec{p} \rightarrow -i \hbar \text{ grad}$$

se divide por $-2m$ y se sustituye la energía total E por

$$E = E' + mc^2$$

resulta la ecuación

$$\left[\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{1}{2m} \left(\frac{e}{c} \right)^2 A^2 + \frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \cdot \nabla + \frac{1}{2mc^2} (E' + e\varphi)^2 + (E' + e\varphi) - \frac{\hbar e}{2mc} (\vec{\sigma} \cdot \mathcal{K}) + \frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{\alpha} \cdot \mathcal{E}) \right] u = 0 \quad (2.11)$$

y es sobre esta ecuación cuadrática, transformación exacta de la ecuación de Dirac, sobre la que se debe introducir la aproximación (2.5) para disminuir el error que la misma provoca. Si se introduce esta aproximación en la ecuación (2.11) se obtiene una nueva ecuación ya sólo con las componentes grandes U_A , que, simplificada, resulta

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2mc^2} (E' + e\phi)^2 + (E' + e\phi) + i \frac{\mu_0}{2mc} \boldsymbol{\xi} \cdot \vec{\sigma} - \frac{\mu_0}{2mc} \vec{\sigma}^D (\boldsymbol{\xi} \times \vec{p}) \right] U_{\hat{r}} = 0 \quad (2.12)$$

y que constituye la ecuación general de la aproximación de Pauli, en donde

$$\mu_0 = \frac{e \hbar}{2 mc}$$

es el magnetón de Bohr.

Todavía se introduce otra aproximación, la más importante, sobre la ecuación general de Pauli (2.12) consistente en suponer que el campo eléctrico es de tipo central,

$$\boldsymbol{\xi} = - \frac{\vec{r}}{r} \frac{d\phi}{dr}$$

ϕ dependiente únicamente de la distancia radial, y mediante la cual se simplifican notablemente sus términos más complicados $\boldsymbol{\xi} \cdot \vec{p}$ y $\boldsymbol{\xi} \times \vec{p}$. En efecto, el término $i \frac{\mu_0}{2mc} \boldsymbol{\xi} \cdot \vec{p}$ se transforma, teniendo en cuenta la definición del operador \vec{p} , en

$$- \frac{\mu_0 \hbar}{2mc} \frac{d\phi}{dr} \frac{\partial}{\partial r}$$

Para la simplificación del segundo término $-\frac{\mu_0}{2mc} \vec{\sigma}^D (\boldsymbol{\xi} \times \vec{p})$, es necesario recurrir a las definiciones de los operadores momento angular orbital

$$\hbar \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

y momento angular de espín

$$\hbar \vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}^D$$

mediante los cuales

$$\begin{aligned}
 - \frac{\mu_0}{2mc} \vec{\sigma}^P \cdot (\mathbf{e} \times \vec{p}) &= \frac{\mu_0}{2mc} 2\vec{S} \cdot \left(\frac{\vec{r}}{r} \frac{d\varphi}{dr} \times \vec{p} \right) = \\
 &= \frac{\mu_0}{2mc} \left(\frac{2}{r} \vec{S} \cdot \vec{L} \right) \frac{d}{dr}
 \end{aligned}$$

sustituyendo estos términos en (2.12), se obtiene la ecuación definitiva

$$\begin{aligned}
 \left[- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - e\varphi - \frac{1}{2mc^2} (E' + e\varphi)^2 + \frac{\mu_0 \hbar}{2mc} \frac{d\varphi}{dr} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{r} \vec{S} \cdot \vec{L} \right) \right] U_A &= \\
 &= E' U_A \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

conocida como ecuación de Pauli para un campo central

Para efectuar sobre esta ecuación la separación de variables angulares y radiales, es necesario tener en cuenta los autovalores de los momentos angulares orbital y de espín. El operador momento angular total se define por

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

de donde se deduce

$$2 \vec{L} \cdot \vec{S} = \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2$$

como \vec{J}^2 , \vec{L}^2 y \vec{S}^2 conmutan entre sí, se pueden encontrar estados estacionarios que sean estados propios simultáneos de \vec{J}^2 , \vec{L}^2 y \vec{S}^2 y, por consiguiente de $\vec{L} \cdot \vec{S}$. Para tales estados estacionarios se pueden sustituir los operadores por sus autovalores

$$\vec{L}^2 \longrightarrow 1(1+1)$$

$$\vec{J}^2 \longrightarrow j(j+1) ; j = 1 \pm \frac{1}{2}$$

$$\vec{S}^2 \longrightarrow s(s+1) ; s = \frac{1}{2}$$

con lo que los autovalores del operador $2 \vec{L} \cdot \vec{S}$ resultan ser

$$2 \vec{L} \cdot \vec{S} \longrightarrow j(j+1) - 1(1+1) - s(s+1)$$

que introducidos en la ecuación (2.13) permiten efectuar la separación de variables, lo que conduce a la ecuación radial

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1(1+1)}{r^2} \right) + E' + e\phi + \frac{1}{2mc^2} (E' + e\phi)^2 - \frac{\hbar \mu_0}{2mc} \frac{d\phi}{dr} \left(\frac{d}{dr} - \begin{Bmatrix} 1 \\ -1-1 \end{Bmatrix} \right) \right] R(r) = 0$$

en la que

$$\begin{aligned} 1 & \text{ para } j = l + \frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{ para } j = l - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

mientras que para $l = 0$ este término no aparece, debido a que el efecto de la interacción espín - órbita no se manifiesta en los orbitales s.

Finalmente, el cambio de variables

$$R(r) = \frac{P(r)}{r}$$

conduce a la ecuación en $P(r)$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 P}{dr^2} - \frac{\hbar \mu_0}{2mc} \frac{d\varphi}{dr} \frac{dP}{dr} + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + E' + e\varphi + \right. \\ \left. \frac{1}{2mc^2} (E' + e\varphi)^2 + \frac{\hbar \mu_0}{2mc} \frac{d\varphi}{dr} \begin{Bmatrix} 1 \\ l+1 \\ -1 \end{Bmatrix} \right] P = 0 \quad (2.15) \end{aligned}$$

en la que, consecuentemente con lo que se ha dicho en el párrafo anterior sobre la interacción espín - órbita, los coeficientes que afectan al último término son

1 para $l = 0$ (términos s)

1+1 para $j = l + \frac{1}{2}$

-1 para $j = l = l - \frac{1}{2}$

La integración de la ecuación (2.15) y el estudio de los resultados que se obtienen a partir de ella con unos determinados potenciales constituye el fundamento del presente trabajo.

Existen otros caminos más rápidos (4), (5), que conducen a esta ecuación pero en los que no se aprecian las aproximaciones que ha sido necesario efectuar para conseguirla, aproximaciones que, como se verá más adelante, condicionan fuertemente su integración por los métodos numéricos conocidos. Es por este motivo por el que se ha preferido presentar la deducción completa de la ecuación (2.15) siguiendo, aunque ligeramente modificado, el método de Pauli.

B I B L I O G R A F I A

=====

- (1) H.A. BETHE, E.E. SLPETER . "Quantum Mechanics of one and two Electron Systems" Encyclopedia of - Physics. Vol XXXV. Springer-Verlag. Berlin, 1957
- (2) M.E. ROSE. "Relativistic electron Theory" John Wiley. New York, 1961
- (3) J.C. SLATER. "Quantum Theory of Atomic Structure" Vol II, pág. 361. Mc-Graw Hill. New York, 1960
- (4) C. SANCHEZ DEL RIO, An. R.S.E.F2., LXIV, 321, 1968
- (5) L.I. SCHIFF. "Quantum Mechanics". 3ª ed. Mc-Graw-Hill Kogakusha. Tokyo, 1968, págs. 480 y sig.

3.- DETERMINACION DEL POTENCIAL: MODELO ATOMICO DEL CAMPO
CENTRAL. METODO DEL CAMPO AUTOCONSISTENTE

La ecuación de ondas presentada en (2.15) es únicamente aplicable a átomos de un único electrón. - Su extensión teórica a átomos de varios electrones es muy complicada, y su tratamiento numérico inabordable por el elevado número de variables que intervienen.

Se necesita, por consiguiente, utilizar -- aproximaciones que, compatibles con un visión teórica razonable de los átomos, simplifiquen las ecuaciones hasta llegarlas a hacer resolubles numéricamente y cuyos resultados concuerden suficientemente bien con los valores experimentales observados.

La aproximación más utilizada, por su simplicidad, consiste en suponer que, a causa del carácter dominante de la atracción nuclear en un sistema atómico - de cualquier número de electrones, cada electrón se puede considerar que está sometido a un campo central, que, de alguna manera, tenga en cuenta el potencial nuclear y el debido a la distribución de carga producida por los demás electrones: Es lo que se conoce como modelo atómico del -- campo central.

Fué Hartree (1) el que partiendo de este modelo, propuso la forma de calcular el potencial al que po-

dia responder el campo central, procedimiento que, por los motivos que se verán más adelante, denominó método del campo autoconsistente.

En esencia el fundamento del método -- consiste en determinar el potencial que interviene en -- la ecuación de ondas a la que deben de satisfacer cada uno de los orbitales del átomo, de forma que el potencial producido por la distribución electrostática de -- la carga de los electrones, que se deduce de los orbitales hallados, coincida, precisamente, con el potencial utilizado para encontrar los orbitales. Es decir, se trata de buscar una consistencia entre el potencial que se utiliza para calcular los orbitales y el que se obtiene a partir de ellos, y es por este motivo por -- el que ha recibido el nombre de campo autoconsistente.

En el modelo de Hartree se supone que la función de onda del átomo está formada por un simple -- producto de los orbitales

$$\Psi = \phi_a(1) \phi_b(2) \dots \phi_n(N)$$

en donde cada subíndice representa un conjunto de los -- cuatro números cuánticos n , l , m , y μ , y cada número -- entre paréntesis todas las coordenadas espaciales y de -- espín

Obligando a que la energía total del sistema

$$E = E_1 + E_2 + \dots + E_n$$

sea un mínimo, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, constituido por tantas ecuaciones como orbitales tiene el átomo, que se conoce como ecuaciones de Hartree y que, en unidades atómicas, se expresan

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} + \sum_{j \neq i} \int \frac{\varphi_j^*(2) \varphi_j(2)}{r_{12}} d(2) \right] \varphi_i(1) = E_i \varphi_i(1)$$

más otras tantas ecuaciones para los demás orbitales. -- Aquí $d(2) = d\vec{r}_2$ representa el elemento de volumen alrededor del punto 2. El primer término de esta ecuación representa la energía cinética del electrón situado en el punto \vec{r}_1 , el segundo término su energía potencial de interacción con el núcleo, y el tercer término su energía potencial de interacción con los demás electrones.

El sistema de ecuaciones de Hartree, sin embargo, adolece del defecto fundamental que consiste en ignorar que los electrones son fermiones y, por consiguiente, la función de onda del átomo debe ser antisimétrica. -- Una función de onda que tiene en cuenta esta característica de los átomos es la que se construye mediante el determinante de Slater

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_a(2) & \dots & \psi_a(N) \\ \psi_b(1) & \psi_b(2) & \dots & \psi_b(N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_n(1) & \psi_n(2) & \dots & \psi_n(N) \end{vmatrix}$$

Si partiendo de esta función de onda se obliga a que la energía total del sistema sea un mínimo, se obtiene otro sistema de ecuaciones integrodiferenciales acopladas que se conocen como ecuaciones de Hartree-Fock y que tienen la siguiente expresión

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} + \sum_j \int \frac{\psi_j^*(2) \psi_j(2)}{r_{12}} d(2) - \sum_j \int \frac{\psi_j^*(2) \psi_j(1) \psi_i(2)}{r_{12} \psi_i(1)} d(2) \right] \psi_i(1) = E_i \psi_i(1)$$

más otras tantas ecuaciones para los demás orbitales.

Estas ecuaciones difieren de las de Hartree en el tercer término, que es el que aparece como consecuencia directa de la antisimetría de la función de onda, y que tiene las características de una energía potencial. Se le denomina potencial de cambio debido a que resulta del intercambio de los electrones entre los diferentes orbitales, y tiene la característica fundamental de ser un potencial no local pues en él interviene la función de onda a determinar bajo el signo integral, lo que hace que la resolución del sistema de ecuaciones a que dá lugar sea mucho más complicada que la del sistema de Hartree.

Las ecuaciones de Hartree-Fock proporcionan el mejor conjunto de que se dispone de funciones de onda de un electrón para utilizarlo en una aproximación autoconsistente, pero son tan complicadas que su aplicación está severamente restringida. Se han propuesto diversas aproximaciones, todas tendentes a eliminar el término no local, de las cuales, una intuitiva debida a Slater (2) ha tenido amplia aplicación, y ha servido en el presente trabajo para contrastar los resultados.

En esta aproximación el potencial de cambio toma la forma

$$\left[-\frac{81}{8\pi} \sum_j \psi_j^*(1) \psi_j(1) \right]^{1/3}$$

que es ya un potencial local, y mediante el cual las ecuaciones de Hartree-Fock se transforman en el siguiente sistema

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1} + \sum_j \int \frac{\psi_j^{*(2)} \psi_j(2)}{r_{12}} d(2) - \left(\frac{81}{8\pi} \sum_j \psi_j^*(1) \psi_j(1) \right)^{1/3} \right] \psi_i(1) = E_i \psi_i(1)$$

que reciben el nombre de ecuaciones de Hartree-Fock-Slater

Una comparación entre el potencial de cambio que aparece en las ecuaciones de Hartree-Fock y el deducido por Slater ha sido obtenido por Hartree (3) apoyándose en los cálculos de Pratt (4) para el ión Cu^+ .

Por otra parte, Herman, Callaway y Acton (5) han propuesto en lugar del potencial de cambio de Slater, único para todo el átomo, diferentes potenciales de cambio aproximados para cada uno de los orbitales con el mismo momento angular, y obtenidos a partir de aquel imponiendo la condición de igualdad de los números cuánticos l .

Tanto de la comparación directa de Hartree como de la obtenida por Herman et al. a través de los potenciales individuales, se deduce el carácter de aproximado que posee el potencial de cambio de Slater, y es por esto por lo que se han seguido proponiendo otros potenciales de cambio locales que, además han permitido llegar a expresiones analíticas del campo central. lo que facilita enormemente los cálculos para la determinación de las propiedades atómicas.

Sánchez del Rio et al. (6), (7), han propuesto un potencial local que representa aproximadamente al potencial de cambio y que viene dado por la expresión (N , número de electrones):

$$-\frac{1}{2N} \sum_j \int \frac{1}{r_{12}} \psi_j^*(2) \psi_j(2) d(2)$$

mediante el cual el sistema de ecuaciones de Hartree-Fock se convierte en

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z + \frac{1}{2}}{r_1} + \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \sum_j \int \frac{\psi_j^*(2) \psi_j(2) d(2)}{r_{12}} \right] \psi_i(1) = E_i \psi_i(1)$$

en donde el $\frac{1}{2}$ que acompaña a Z ha tenido que introducirse para el que el comportamiento asintótico del potencial total (el nuclear más el de interacción) sea el correcto.

En la aproximación del campo central, las funciones de onda son de la forma

$$\psi_{n,l,m,s} = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \phi) \mu_s$$

en donde $Y(\theta, \phi)$ son los armónicos esféricos, $\frac{P_{nl}(r)}{r}$ la función radial y μ_s la función de espín, y, bajo esta aproximación, el potencial total -- se expresa, promediando sobre los ángulos, por

$$V_c(r) = -\frac{Z + \frac{1}{2}}{r} + \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \left[\frac{1}{r} \sum_{n,l} \int_0^r P_{nl}^2(r) dr + \sum_{n,l} \int_r^\infty \frac{P_{nl}^2(r)}{r} dr \right] \quad (3.1)$$

en donde los sumatorios están extendidos a todos los orbitales compatibles con el principio de Pauli.

Este potencial es el que se ha utilizado, en parte del presente trabajo, en el cálculo de cada uno de los términos de corrección que aparecen en la ecuación de ondas relativista.

Se han propuesto, por otra parte, expresiones analíticas para el potencial que tienen la gran ventaja de que se simplifican extraordinariamente los cálculos sin pérdida considerable en la aproximación de los resultados.

Diveros autores, Rouse (8), Green, Sellin y Zachor (9), Szydlik y Green (10), han propuesto expresiones analíticas basadas en diferentes hipótesis de cálculo. En todo este trabajo se ha utilizado un potencial analítico, propuesto por Sánchez del Río (7), de tres parámetros que se determinan por un procedimiento autoconsistente, en un sentido muy similar al utilizado por Hartree, según se explica a continuación.

El potencial (3.1) se puede aproximar mediante una expresión analítica de la forma

$$V(r) = -\frac{1}{r} \left[(Z - N + 1) + (N - \frac{1}{2}) \right] f(r)$$

siempre que la función $f(r)$ satisfaga las condiciones en los límites

$$\lim_{r \rightarrow 0} f(r) = \lim_{r \rightarrow 0} (1 - k r)$$

siendo k la constante

$$k = \frac{1}{N} \sum_{n,1} \int_0^{\infty} \frac{P_{2n,1}^2(r)}{r} dr \quad (3.2)$$

y

$$\lim_{r \rightarrow \infty} f(r) = 0$$

La función más sencilla que cumple estas propiedades es una suma de exponenciales de la forma

$$f(r) = \sum_i A_i e^{-c_i r}$$

en donde los c_i son números positivos, y los A_i deben de cumplir las condiciones

$$\sum_i A_i = 1, \quad \sum_i A_i c_i = k \quad (3.3)$$

Basándose en un potencial de este tipo, pero de solo cuatro parámetros(*)

$$V_a(r) = -\frac{1}{r} \left[(N - \frac{1}{2}) (A_1 e^{-C_1 r} + A_2 e^{-C_2 r}) + Z - N + 1 \right]$$

que se puede escribir también en la forma

$$V_a(r) = \frac{1}{r} \left[(N - \frac{1}{2}) (1 - A_1 e^{-C_1 r} - A_2 e^{-C_2 r}) - Z - \frac{1}{2} \right], \quad (3.4)$$

Yunta et al. (11) han calculado cada uno de estos parámetros para cada átomo del sistema periódico utilizando un proceso iterativo similar al método del campo autoconsistente de Hartree. Partiendo de un valor arbitrario para cada átomo de los parámetros y de la energía de cada orbital se resuelve numéricamente la ecuación de ondas y se obtienen los autovalores E_{nl} y las autofunciones $P_{nl}(r)$ de todos los orbitales del átomo necesarios para acomodar los N electrones según el principio de Pauli. Con las funciones de onda obtenidas se calcula el potencial (3.1), $V_c(r)$, y se ajustan los parámetros por el método de los mínimos cuadrados de forma que el potencial analítico (3.4), $V_a(r)$, sea la aproximación mejor posible de (3.1). La aproximación se obtiene haciendo mínimo el cuadrado de la diferencia ponderada de ambos potenciales, el llamado índice de autoconsistencia

$$\sigma = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{V_a(r_i) - V_c(r_i)}{V_a(r_i)} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

(*) que se quedan reducidos a tres mediante las condiciones (3.3)

en donde r_i son los puntos en los que se realiza la integración de la ecuación de ondas y n el número de ellos.

Los parámetros así obtenidos son autoconsistentes en el sentido de que partiendo del potencial analítico (3.4) con estos parámetros se vuelve a encontrar el mismo potencial como mejor aproximación al potencial (3.1). Los valores de los parámetros para cada uno de los elementos del sistema periódico que se han utilizado en los presentes cálculos, son los publicados por Rodríguez Mayquez et al. (11) y aplicados por estos autores en los cálculos efectuados con la ecuación de ondas sin correcciones relativistas.

B I B L I O G R A F I A

=====

- (1) D.R. HARTREE, Proc. Camb. Phil. Soc 24, 111, 1928
- (2) J.C. SLATER, Phys. Rev., 81, 385, 1951
- (3) D.R. HARTREE, Phys. Rev., 109, 840, 1958
- (4) G.W. PRATT, Phys. Rev., 88, 1117, 1952
- (5) F. HERMAN, J. CALLAWAY, F.S. ACTON, Phys.Rev. 95,371,1955
- (6) C. SANCHEZ DEL RIO, J.YUNTA, E. RODRIGUEZ MAYQUEZ,
J. Phys. B, 8, 2588, 1975
- (7) C. SANCHEZ DEL RIO. "Introducción a la teoría del --
átomo". Alhambra. madrid, 1977
- (8) C.A. ROUSE, Phys. Rev., 159, 41, 1967
- (9) A.E.S. GREEN, D.I. SELLIN, A.S. ZACHOR, Phys. Rev., --
184, 1, 1969
- (10) P.P. SZYDLIK A.E.S. GREEN, Phys. Rev. A, 9, 1885, 1974
- (11) E. RODRIGUEZ MAYQUEZ, J. YUNTA, C. SANCHEZ DEL RÍO
An. Fis. 72, 239, 1976

4.- INTEGRACION DE LA ECUACION DE ONDAS

Tradicionalmente, la integración de la ecuación de ondas se ha efectuado por dos procedimientos, el numérico, propuesto por Hartree (1), y el analítico, propuesto inicialmente por Roothaan (2), (3) y (4), y utilizado o modificado posteriormente por Löwdin (5), Watson (6), (7) y (8), Freeman (9), Kim (10) y -- Kagawa (11).

En el procedimiento numérico el potencial y las funciones radiales se expresan por sus valores numéricos en puntos de una predeterminada malla, y las integrales y derivadas que surgen como consecuencia del proceso de cálculo se obtienen mediante los métodos usuales basados en las diferencias finitas.

Por el contrario, en el procedimiento analítico las funciones radiales se expresan como combinación lineal de un conjunto de determinadas funciones analíticas, con lo que la ecuación de ondas se reduce a un sistema lineal en el que los coeficientes y autovalores se pueden obtener por métodos matriciales conocidos. Este procedimiento presenta, con respecto al numérico la ventaja de que las operaciones matemáticas pueden efectuarse algebraicamente, pero su precisión está severamente limitada por la elección del conjunto de funciones analí

ticas que sirven para expresar los orbitales, y, -
debido a la necesidad de esta elección parece menos
general que el procedimiento anterior.

Elegido el procedimiento numérico por
su generalidad, la integración de la ecuación radial
se efectúa mediante cálculos por diferencias finitas
para los que existen, al menos, cuatro métodos distin
tos generalmente aplicados: Kutta, Nystrom, Kutta- δ^2
y Numerov.

Froese (12) ha efectuado un estudio -
para determinar cuál de los cuatro métodos es el que
proporciona resultados con mayor precisión cuando se
aplican a la integración de la ecuación de ondas radial,
y ha determinado que si bien la precisión no depende -
grandemente del método utilizado, es el método de Nume
rov el que converge más rápidamente y requiere menos -
cantidad de memoria.

Es por estas razones, y por utilizar -
un programa de cálculo ya existente basado en el método
de Numerov (13), por lo que se ha seguido en este traba
jo el mencionado camino.

La ecuación de ondas que se trata de integrar es la (2.15) que, expresada en unidades atómicas - ($e = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$) y con la notación usual del potencial $V = -e\phi$, se escribe

$$\frac{d^2 P}{dr^2} + \frac{1}{2c^2} \cdot \frac{dV}{dr} \cdot \frac{dP}{dr} - \left[\frac{1(1+1)}{r^2} + 2V - \frac{1}{c^2} (E - V)^2 + \frac{1}{2c^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1+1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} - 2E \right] P = 0 \quad (4.1)$$

$$\begin{array}{ll} 1 & \text{para } l = 0 \\ l+1 & \text{para } j = l + \frac{1}{2} \\ -1 & \text{para } j = l - \frac{1}{2} \end{array}$$

a la que, sin embargo, no se le puede aplicar el método de Numerov, pues este método sólo es aplicable a ecuaciones de la forma

$$y'' = f(x) \cdot y + g(x)$$

(véase referencias 1 y 14) y la ecuación (4.1) posee un término en $\frac{dP}{dr}$ que, por consiguiente, lo impide.

La ecuación que se trata de integrar es de la forma

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x) \frac{dy}{dx} + \dots = 0 \quad (4.2)$$

y se trata de buscar uno o varios cambios de variables que hagan desaparecer el término

$$f(x) \frac{dy}{dx}$$

Supóngase que para conseguirlo se hace el cambio de variable dependiente

$$y = w(u, x)$$

con lo que las derivadas se transforman según

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\partial w}{\partial u} \frac{du}{dx} + \frac{\partial w}{\partial x}$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{\partial^2 w}{\partial u^2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 w}{\partial u \partial x} \frac{du}{dx} +$$

$$+ \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial w}{\partial u} \frac{d^2 u}{dx^2}$$

Para que en la ecuación transformada no aparezca el término

$$\left(\frac{du}{dx} \right)^2$$

basta obligar que la función $w(u,x)$ cumpla

$$\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} = 0$$

lo que se consigue haciendo que $w(u,x)$ sea de la forma

$$w(u,x) = u \cdot v(x) \quad (4.3)$$

en donde $v(x)$ es una función a determinar.

Para que tampoco aparezcan términos en $\frac{du}{dx}$, la función $w(u,x)$ debe de cumplir además.

$$2 \frac{\partial^2 w}{\partial u \partial x} + f(x) \cdot \frac{\partial w}{\partial u} = 0 \quad (4.4)$$

De la condición (4.3) se deducen las ecuaciones

$$\frac{\partial w}{\partial u} = v$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial u \partial x} = \frac{dv}{dx}$$

que sustituidas en (4.4) proporcionan la ecuación diferencial que determina la función $v(x)$

$$2 \frac{dv}{dx} + f(x) v = 0$$

$$\frac{dv}{v} = -\frac{1}{2} f(x) \cdot dx$$

$$\ln v = -\frac{1}{2} \int f(x) dx$$

$$-\frac{1}{2} \int f(x) dx$$

$$v = e$$

Por consiguiente, el cambio de variables que hay que realizar en la ecuación (4.2) para que desaparezca el término de $\frac{dy}{dx}$ es

$$dx$$

$$y = u \cdot e^{-\frac{1}{2} \int f(x) dx}$$

En el caso particular de la ecuación --
radial (4.1)

$$\frac{d^2 P}{dr^2} + \frac{1}{2c^2} \frac{dV}{dr} \cdot \frac{dP}{dr} + F(r) \cdot P = 0 \quad (4.6)$$

en donde

$$F(r) \equiv - \left[\frac{1(1+1)}{r^2} + 2V - \frac{1}{c^2}(E-V)^2 - \frac{1}{2c^2} \left(\frac{-1}{1} \right) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} - 2E \right] \quad (4.7)$$

este cambio de variables es

$$- \frac{1}{4c^2} \int \frac{dV}{dr} dr$$

$$P(r) = u(r) \cdot e$$

es decir

$$P(r) = u(r) \cdot e^{-\frac{1}{4c^2} \cdot V} \quad (4.8)$$

de donde

$$\frac{dP}{dr} = \frac{\partial P}{\partial u} \frac{du}{dr} + \frac{\partial P}{\partial r}$$

$$\frac{\partial P}{\partial u} = e^{-\frac{1}{4c^2} V}$$

$$\frac{\partial P}{\partial r} = e^{-\frac{1}{4c^2} V} \left(-\frac{1}{4c^2} \cdot \frac{dV}{dr} \right) \cdot u(r)$$

$$\frac{dP}{dr} = e^{-\frac{1}{4c^2} V} \left(\frac{du}{dr} - \frac{1}{4c^2} \frac{dV}{dr} u \right) \quad (4.9)$$

$$\frac{d^2 P}{dr^2} = \frac{\partial^2 P}{\partial u^2} \left(\frac{du}{dr} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 P}{\partial u \partial r} \cdot \frac{du}{dr} + \frac{\partial^2 P}{\partial r^2} + \frac{\partial P}{\partial u} \frac{d^2 u}{dr^2}$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial u^2} = 0$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial u \partial r} = e^{-\frac{1}{4c^2} V} \left(-\frac{1}{4c^2} \frac{dV}{dr} \right)$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial r^2} = e^{-\frac{1}{4c^2} v} \left(-\frac{1}{4c^2} \right) \left[-\frac{1}{4c^2} \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 + \frac{d^2 v}{dr^2} \right] u$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 P}{dr^2} &= 2e^{-\frac{1}{4c^2} v} \left(-\frac{1}{4c^2} \frac{dv}{dr} \right) \frac{du}{dr} + \\ &+ e^{-\frac{1}{4c^2} v} \left(-\frac{1}{4c^2} \right) \left[-\frac{1}{4c^2} \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 + \frac{d^2 v}{dr^2} \right] u + \\ &+ e^{-\frac{1}{4c^2} v} \frac{d^2 u}{dr^2} \end{aligned} \quad (4.10)$$

sustituyendo (4.8), (4.9) y (4.10) en la ecuación radial (4.6) resulta

$$\begin{aligned} 2e^{-\frac{1}{4c^2} v} \left(-\frac{1}{4c^2} \frac{dv}{dr} \right) \frac{du}{dr} + \\ + e^{-\frac{1}{4c^2} v} \left(-\frac{1}{4c^2} \right) \left[-\frac{1}{4c^2} \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 + \frac{d^2 v}{dr^2} \right] u + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + e^{-\frac{1}{4c^2} V} \frac{d^2 u}{dr^2} + \\
& + \frac{1}{2c^2} \frac{dV}{dr} e^{-\frac{1}{4c^2} V} \left(\frac{du}{dr} - \frac{1}{4c^2} \frac{dV}{dr} u \right) + \\
& + F(r) e^{-\frac{1}{4c^2} V} \cdot u = 0
\end{aligned}$$

multiplicando por $e^{\frac{1}{4c^2} V}$ y reagrupando términos se obtiene

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{1}{4c^2} \left(\frac{1}{4c^2} \left(\frac{dV}{dr} \right)^2 + \frac{d^2 V}{dr^2} \right) + F(r) \right] u = 0$$

(4.11)

que es de la forma

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = G(r) \cdot u \quad (4.12)$$

en donde

$$\begin{aligned}
G(r) & \equiv \frac{1}{4c^2} \left[\frac{1}{4c^2} \left(\frac{dV}{dr} \right)^2 + \frac{d^2 V}{dr^2} \right] - F(r) = \\
& = \frac{1}{4c^2} \left[\frac{1}{4c^2} \left(\frac{dV}{dr} \right)^2 + \frac{d^2 V}{dr^2} \right] + \frac{1(1+1)}{r^2} + 2V - \\
& - \frac{1}{c^2} \left[(E-V)^2 + \frac{1}{2} \begin{Bmatrix} 0 \\ -1+1 \\ 1 \end{Bmatrix} \right] \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} - 2E \quad (4.13)
\end{aligned}$$

a la que ya le es aplicable el método de Numerov.

El proceso de integración de la ecuación
(4.12)

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = G(r) \cdot u$$

se efectúa, siguiendo a Hartree (1), en dos fases, una que se realiza con valores crecientes de r (solución "ascendente", partiendo desde $r = 0$ hasta el radio r_a en el que la función $G(r)$ pasa de negativa a positiva, y otra que partiendo desde un valor de r muy grande, va efectuando la integración con valores decrecientes de r (solución "descendente") hasta alcanzar el mismo radio r_a anterior, en donde ambas soluciones deben empalmar de forma suave, es decir, deben coincidir tanto sus ordenadas como sus derivadas primeras. La imposición de que las derivadas primeras deben ser iguales en r_a permite establecer un criterio para corregir el autovalor E (la energía) de la ecuación que se está integrando y, por un proceso de reiteración, conseguir su determinación.

Debido a que para la integración descendente se parte de un valor de r muy elevado, el programa de cálculo utilizado exige efectuar los cambios de variables

$$\left. \begin{aligned} t &= \ln r \\ v &= \frac{u}{\sqrt{r}} \end{aligned} \right\} \quad (4.14)$$

con objeto de reducir el intervalo de integración.

Si se efectúan estos cambios de variables la ecuación (4.12) se transforma del siguiente modo

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \frac{\frac{d^2 u}{dt^2} \frac{dr}{dt} - \frac{d^2 r}{dt^2} \frac{du}{dt}}{\left(\frac{dr}{dt}\right)^3} =$$

$$= \left[\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2 \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial v} \frac{dv}{dt} + \frac{\partial^2 u}{\partial v^2} \left(\frac{dv}{dt}\right)^2 + \frac{\partial u}{\partial v} \frac{d^2 v}{dt^2} \right) \cdot \left(\frac{\partial r}{\partial v} \frac{dv}{dt} + \frac{\partial r}{\partial t} \right) - \left(\frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + 2 \frac{\partial^2 r}{\partial t \partial v} \frac{dv}{dt} + \frac{\partial^2 r}{\partial v^2} \left(\frac{dv}{dt}\right)^2 + \frac{\partial r}{\partial v} \frac{d^2 v}{dt^2} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial v} \frac{dv}{dt} + \frac{\partial u}{\partial t} \right) \right]$$

$$\frac{1}{\left(\frac{\partial r}{\partial v} \frac{dv}{dt} + \frac{\partial r}{\partial t} \right)^3}$$

$$\frac{\partial u}{\partial v} = e^{\frac{t}{2}}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial v^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial v \partial t} = e^{\frac{t}{2}} \cdot \frac{1}{2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = ve^{\frac{t}{2}} \cdot \frac{1}{2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = ve^{\frac{t}{2}} \cdot \frac{1}{4}$$

$$\frac{\partial r}{\partial v} = 0, \quad \frac{\partial^2 r}{\partial v^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 r}{\partial v \partial t} = 0$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = e^t, \quad \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = e^t$$

sustituyendo estos valores en la expresión de $\frac{d^2 u}{dr^2}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dr^2} &= \left[\left(v e^{\frac{t}{2}} \frac{1}{4} + e^{\frac{t}{2}} \frac{dv}{dt} + e^{\frac{t}{2}} \frac{d^2 v}{dt^2} \right) e^{t-} \right. \\ &\quad \left. - e^t \left(e^{\frac{t}{2}} \frac{dv}{dt} + v e^{\frac{t}{2}} \frac{1}{2} \right) \right] \frac{1}{e^{3t}} = \\ &= e^{-\frac{3t}{2}} \left(\frac{d^2 v}{dt^2} - \frac{1}{4} v \right) \end{aligned}$$

con lo que la ecuación (4.12) resulta

$$e^{-\frac{3t}{2}} \left(\frac{d^2 v}{dt^2} - \frac{1}{4} v \right) = G(e^t) e^{\frac{t}{2}} v$$

es decir

$$\frac{d^2 v}{dt^2} = \left[e^{2t} G(e^t) + \frac{1}{4} \right] v \quad (4.15)$$

ecuación únicamente utilizable en la integración descendente

El estudio (15) de las ecuaciones diferenciales homogéneas del tipo

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + p(z) u = 0$$

similar al de la que se pretende integrar (4.12) demuestra que su integración solo es posible en los llamados "puntos regulares" que son aquellos puntos c en los que se cumple que la función

$$(z - c)^2 p(z)$$

es analítica en c .

Es evidente que estas condiciones no se dan en la ecuación (4.12) en el origen pues en su función $p(z)$ aparecen como términos de más importancia el cuadrado de la derivada primera del potencial, el producto de esta derivada por $\frac{1}{r}$ y la derivada segunda del potencial que varían con r como $\frac{1}{r^4}$, $\frac{1}{r^3}$ y $\frac{1}{r^3}$, respectivamente, lo que implica que el origen, donde necesariamente hay que apoyarse por ser una de las condiciones de contorno, sea un punto singular para esta ecuación.

Por consiguiente, la ecuación de ondas relativista no se puede integrar directamente porque:

- 1.- El origen, en el cual se establece una de las - condiciones de contorno, es un punto singular.
- 2.- No se puede partir de otro punto distinto del - origen pues, por ser una ecuación de segundo - orden aparecen dos constantes de integración, una de las cuales se puede determinar por la - condición de normalización pero la otra no.
- 3.- Su campo de validez está limitado a los radios en los que se cumple la condición $V \ll mc^2$

La ecuación de ondas relativista necesita, pues, otro tratamiento, y se considera que el más - - apropiado es el del método de perturbaciones que se presenta en los siguientes capítulos.

B I B L I O G R A F I A

=====

- (1) D.R. HARTREE "The Calculation of Atomic Structures"
John Wiley and sons. New York, 1957
- (2) C.J. ROOTHAAN, Rev. Mod. Phys. 23, 69, 1951
- (3) C.J. ROOTHAAN, Rev. Mod. Phys. 32, 179, 1960
- (4) C.J. ROOTHAAN, P.S. BAGUS, Methods Comput. Phys. 2,
47, 1963
- (5) P. -O. LOWDIN, Phys. Rev. 90, 120, 1953
- (6) R.E. WATSON, Phys. Rev. 118, 1036, 1960; *ibid.* 119
1934, 1960
- (7) R.E. WATSON, A.J. FREEMAN, Phys. Rev. 120, 1125, 1960
- (8) R.E. WATSON, A.J. FREEMAN, Phys. Rev., 123, 521, 1961
ibid. 124, 1117, 1961
- (9) A.J. FREEMAN, R.E. Watson, Phys, Rev., 127, 2058, 1962
- (10) Y.K. KIM, Phis. Rev. 154, 17, 1967
- (11) T. KAGAWA, Phys. Rev., A12, 2245, 1975
- (12) C. FROESE, Can. Jour. Phys., 41, 1895, 1963
- (13) J. YUNTA CARRETERO, E. RODRIGUEZ MAYQUEZ: "ORBITALES. -
Programa de cálculo de funciones de onda para un poten-
cial central analítico". JEN 264. Madrid, 1974
- (14) T. IGLESIAS. "Nociones de Cálculo Numérico" JEN, FTCT/34
Madrid, 1964

- (15) E.T. WHITTAKER, G.N. WATSON: "A Course of Modern --
Analysis". Mac Millan. New York. 1948. cap. X

5.- INTEGRACION POR EL METODO DE PERTURBACIONES: POTENCIAL ANALITICO

El hamiltoniano que constituye la ecuación de ondas relativista

$$H_u = Eu \quad (5.1)$$

está formado por una suma de términos (ecuación (2.13)).

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V - \frac{1}{2mc^2} (E-V)^2 - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{s} \cdot \vec{L} \quad (5.2)$$

cuya interpretación es la siguiente (véase referencias (1) a (5)):

Los dos primeros términos

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad (5.3)$$

forman el hamiltoniano no relativista que conduce directamente a la ecuación de Schrödinger.

El tercer término

$$H_m = - \frac{1}{2mc^2} (E-V)^2 \quad (5.4)$$

representa la corrección relativista debida al cambio de la masa con la velocidad.

Los términos cuarto y quinto son característicos de la teoría de Dirac. El cuarto

$$H_d = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \quad (5.5)$$

es el llamado término de Darwin, por haber sido formulado por este autor mucho antes de la formulación de la ecuación de Dirac.

El quinto término

$$H_{s-o} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (5.6)$$

es el que da cuenta del acoplamiento espín-órbita, responsable de la estructura fina de los niveles atómicos, y fué formulado, también mucho antes de la teoría de Dirac, por Thomas y Frenkel

La estructura de la ecuación de ondas - relativista en forma de suma de varios términos permite calcular la influencia de cada uno de ellos por el método de perturbaciones, debido a que cada uno de los términos que no constituyen el hamiltoniano principal, por ser lo suficientemente pequeños frente a éste, se puede considerar que forman una perturbación del mismo.

Por otra parte, la ecuación aproximada de Pauli difiere de la ecuación exacta de Dirac en términos del orden de magnitud de $\frac{p^2}{m^2 c^2}$ (véase referencia

(4)) y es por esta limitación por la que no interesa prolongar los cálculos más allá del primer orden de perturbaciones y, por consiguiente, en lo que sigue, solamente se llegará en el tratamiento de la ecuación de ondas hasta este mencionado primer orden.

El método de perturbaciones consiste en calcular la corrección debida a cada uno de los términos H_m , H_d y H_{s-0} supuesto que se conocen los valores propios y las funciones propias de la ecuación sin corregir. Si E_0 y u_0 son estos valores y funciones propios

$$H_0 u_0 = E_0 u_0 \quad (5.7)$$

y $R_0(r)$ es la función radial correspondiente, que cumple, por consiguiente, la ecuación

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + 2V + \frac{l(l+1)}{r^2} + 2E_0 \right] R_0(r) = 0$$

que se puede escribir

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_0}{dr} \right) = f(r) R_0(r) \quad (5.8)$$

en donde

$$f(r) = 2V + \frac{l(l+1)}{r^2} + 2E_0 \quad (5.9)$$

entonces, hasta el primer orden de perturbaciones, se puede sustituir E por E_0 en el término debido al operador H_m , con lo que la corrección relativista debida a la variación de la masa con la velocidad resulta

$$E_m = -\frac{1}{2c^2} \int_0^\infty r^2 R_0^2(r) (E_0 - V)^2 dr$$

La debida al operador H_d , término de Darwin,
es

$$E_d = -\frac{1}{4c^2} \int_0^\infty r^2 R_0(r) \frac{dV}{dr} \frac{dR_0}{dr} dr$$

y la corrección debida al operador H_{s-o} , interacción - - espín-órbita

$$E_{s-o} = -\frac{1}{4c^2} \left\{ \begin{array}{c} -1 \\ 1+1 \end{array} \right\} \int_0^{\infty} r^2 R_o^2(r) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr$$

Establecidas las fórmulas que determinan la contribución de los términos que intervienen en la ecuación de ondas relativista, el proceso de cálculo consiste en resolver mediante el programa "ORBITALES" (6), la ecuación (5.7) y, una vez conocidos E_o y $R_o(r)$ utilizar una modificación del mismo programa para calcular E_m , E_d y E_{s-o}

Debido a que el programa de cálculo utiliza la ecuación transformada con el cambio de variable

$$P(r) = \frac{R_o(r)}{r}$$

con el que la ecuación (5.8) se transforma en

$$\frac{d^2 P}{dr^2} = f(r) P(r) \quad (5.10)$$

(omitiendo ya el subíndice 0 que hace referencia a la ecuación sin corregir)

Las formulas que en realidad se utilizan para calcular cada uno de los términos de corrección son:

$$E_m = - \frac{1}{2c^2} \int_0^\infty P^2 (E_0 - V)^2 dr \quad (5.11)$$

$$E_d = - \frac{1}{4c^2} \int_0^\infty P \frac{dV}{dr} \frac{dP}{dr} dr + \frac{1}{2c^2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} P^2 dr \quad (5.12)$$

$$E_{s-0} = - \frac{1}{4c^2} \left\{ \begin{matrix} -1 \\ 1+1 \end{matrix} \right\} \int_0^\infty P^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr, \quad l \neq 0 \quad (5.13)$$

Para poder utilizar estas fórmulas en el proceso de cálculo numérico se necesita:

- 1.- Eliminar mediante una transformación conveniente, las derivadas de la función, -- pues el cálculo numérico de una derivada es más complejo que el cálculo de las integrales resultantes.
- 2.- Simplificar algebraicamente las operaciones con los términos cuya expresión analítica se conoce (el potencial y sus derivadas)
- 3.- Calcular analíticamente los valores de los integrandos en los límites de integración

En el resto de este capítulo se desarrollan -- cada uno de los puntos anteriores.

En el único término en el que aparece la derivada de la función es en el primer sumando del término de Darwin que, debido a que admite una integración por partes, se puede descomponer en

$$\begin{aligned}
 & - \frac{1}{4c^2} \int_0^{\infty} P \frac{dV}{dr} \frac{dP}{dr} dr = \\
 & = - \frac{1}{4c^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{2} \frac{dV}{dr} \frac{d^2P}{dr^2} dr = \\
 & = - \frac{1}{8c^2} \left[\frac{dV}{dr} P^2 \right]_0^{\infty} + \frac{1}{8c^2} \int_0^{\infty} P^2 \frac{d^2V}{dr^2} dr,
 \end{aligned}$$

con lo que la corrección debida al término de Darwin resulta, definitivamente,

$$\begin{aligned}
 E_d & = - \frac{1}{8c^2} \left[\frac{dV}{dr} P^2 \right]_0^{\infty} + \frac{1}{8c^2} \int_0^{\infty} P^2 \frac{d^2V}{dr^2} dr + \\
 & + \frac{1}{4c^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} P^2 dr = \\
 & = - \frac{1}{8c^2} \left[\frac{dV}{dr} P^2 \right]_0^{\infty} + \frac{1}{4c^2} \int_0^{\infty} P^2 \left(\frac{1}{2} \frac{d^2V}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) dr
 \end{aligned}$$

en donde ya aparece suprimida la derivada de la función.

Es necesario ahora calcular analíticamente las derivadas del potencial y simplificar algebraicamente las expresiones en las que intervienen.

De la definición del potencial utilizado -
(3.2)

$$V(r) = \frac{1}{r} \left[(N - \frac{1}{2}) (1 - A_1 e^{-c_1 r} - A_2 e^{-c_2 r}) - Z - \frac{1}{2} \right] \quad (5.15)$$

se obtiene la expresión de la derivada primera

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dr} = & \frac{(N - \frac{1}{2})}{r^2} \left[A_1 e^{-c_1 r} (1 + c_1 r) + A_2 e^{-c_2 r} (1 + c_2 r) \right] + \\ & + \frac{Z - N + 1}{r^2} \end{aligned} \quad (5.16)$$

y la de la derivada segunda

$$\begin{aligned} \frac{d^2V}{dr^2} = & - \frac{N - \frac{1}{2}}{r^3} \left[A_1 e^{-c_1 r} (2 + 2c_1 r + c_1^2 r^2) + \right. \\ & \left. + A_2 e^{-c_2 r} (2 + 2c_2 r + c_2^2 r^2) \right] - \\ & - 2 \frac{Z - N + 1}{r^3} \end{aligned} \quad (5.17)$$

que, sustituidas en el segundo término de la expresión de E_d , originan que este término se simplifique extraordinariamente

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 v}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} = -\frac{1}{2} \frac{N-1}{r} (A_1 e^{-c_1 r} c_1^2 + A_2 e^{-c_2 r} c_2^2) \quad (5.18)$$

Queda, finalmente, calcular los valores de cada uno de los integrados en los límites de integración.

Si se supone que la función $P(r)$ admite un desarrollo en serie de la forma

$$P(r) = r^m \sum_{i=0} a_i r^i,$$

se sustituye esta expresión y sus derivadas en la ecuación de ondas sin corregir (5.10) y se identifican coeficientes se obtiene que el parámetro m debe valer

$$m = l+1$$

y que queda un único coeficiente indeterminado, el a_0 , en función del cual aparecen todas las fórmulas siguientes, - que se determina al final imponiendo la condición de normalización.

Por consiguiente:

$$P(r) = r^{l+1} \sum_{i=0} a_i r^i \quad (5.19)$$

y el cálculo de los límites para cada uno de los términos de corrección es el siguiente:

- Término de variación de la masa con la velocidad

$$\begin{aligned} & \lim_{r \rightarrow 0} P^2 (E_0 - V)^2 = \\ & = E_0^2 \lim_{r \rightarrow 0} P^2 + \lim_{r \rightarrow 0} P^2 V^2 - 2E_0 \lim_{r \rightarrow 0} P^2 V \\ & \lim_{r \rightarrow 0} P^2 = 0 \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} & \lim_{r \rightarrow 0} P^2 V^2 = \\ & = \lim_{r \rightarrow 0} \left[r^{2l+2} \left(\sum_{i=0} a_i r^i \right)^2 \frac{1}{r^2} \right. \\ & \left. \cdot \left((N - \frac{1}{2}) (1 - A_1 e^{-c_1 r} - A_2 e^{-c_2 r}) - Z \right)^2 \right] \end{aligned}$$

para $l = 0$

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} P^2 V^2 &= a_0^2 \left[(N - \frac{1}{2}) (1 - A_1 - A_2) - Z^2 \right] = \\ &= a_0^2 Z^2 \end{aligned} \quad (5.21)$$

para $l \neq 0$

$$\lim_{r \rightarrow 0} P^2 V^2 = 0 \quad (5.22)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} P^2 V =$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{r \rightarrow 0} \left[r^{2l+2} \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i \right)^2 \frac{1}{r} \right. \\ &\quad \left. \left((N - \frac{1}{2}) (1 - A_1 e^{-c_1 r} - A_2 e^{-c_2 r}) - Z \right) \right] = 0 \end{aligned}$$

para todo l (5.23)

De (5.20), (5.21), (5.22) y (5.23) resulta

$$\lim_{r \rightarrow 0} P^2 (E_0 - V)^2 = \begin{cases} a_0^2 Z^2 & \text{para } l = 0 \\ 0 & \text{para } l \neq 0 \end{cases} \quad (5.24)$$

- Término de Darwin

$$\lim_{r \rightarrow 0} P^2 \frac{dV}{dr} = \lim_{r \rightarrow 0} \left[r^{2l+2} \left(\sum_{i=0}^2 a_i r^i \right)^2 \right. \\ \left. \frac{1}{r^2} \left((N-\frac{1}{2}) (A_1 e^{-c_1 r} (1+c_1 r) + A_2 e^{-c_2 r} (1+c_2 r)) + Z - N + 1 \right) \right]$$

de donde

$$\lim_{r \rightarrow 0} P^2 \frac{dV}{dr} = \begin{cases} a_0^2 & \text{para } l = 0 \\ 0 & \text{para } l \neq 0 \end{cases} \quad (5.25)$$

Además, como para $r \rightarrow \infty$, $P \rightarrow 0$ por ser una de las condiciones de contorno impuestas por el significado físico de $P(r)$, y $\frac{dV}{dr} \rightarrow 0$,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P^2 \frac{dV}{dr} = 0 \quad \text{para todo } l \quad (5.26)$$

De ambos límites (5.25) y (5.26) resulta que el primer sumando del término de Darwin vale

$$-\frac{1}{8c^2} \left[P^2 \frac{dV}{dr} \right]_0^\infty = \begin{cases} \frac{a_0^2 Z}{8c^2} & \text{para } l = 0 \\ 0 & \text{para } l \neq 0 \end{cases} \quad (5.27)$$

Para el segundo sumando, haciendo uso de la simplificación (5.18), se tiene

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} P^2 \left[\frac{1}{2} \frac{d^2 V}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right] &= \\ = \lim_{r \rightarrow 0} \left[r^{2l+2} \left(\sum_{i=0}^{N-1} a_i r^i \right)^2 \left(\frac{1}{2} \right) \frac{N-1}{r} \right. \\ &\left. (A_1 e^{-c_1 r} c_1^2 + A_2 e^{-c_2 r} c_2^2) \right] = \end{aligned}$$

$$= 0, \text{ para todo } l \quad (5.28)$$

- Término de interacción espín-órbita

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} P^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} &= \lim_{r \rightarrow 0} \left[r^{2l+2} \left(\sum_{i=0}^{N-1} a_i r^i \right)^2 \right. \\ &\left. \frac{1}{r^3} \left((N-\frac{1}{2}) (A_1 e^{-c_1 r} (1+c_1 r) + A_2 e^{-c_2 r} (1+c_2 r)) + Z - N + 1 \right) \right] \\ &= 0, \text{ para } l \neq 0 \quad (5.29) \end{aligned}$$

(para $l = 0$ este término no aparece)

Por consiguiente, de (5.24), (5.27), (5.28) y (5.29) se deduce que las correcciones que hay que calcular debidas a cada uno de los términos que componen la ecuación de ondas relativista, son

$$E_m = -\frac{1}{2c^2} \int_0^\infty P^2 (E_o - V)^2 dr$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} -\frac{1}{2c^2} P^2 (E_o - V)^2 = \begin{cases} \frac{-a_o^2 z^2}{2c^2} & \text{para } l = 0 \\ 0 & \text{para } l \neq 0 \end{cases}$$

$$E_d = \left\{ \begin{array}{ll} -\frac{a_o^2 z^2}{8c^2} & \text{para } l = 0 \\ 0 & \text{para } l \neq 0 \end{array} \right\} -$$

$$-\frac{1}{8c^2} \int_0^\infty \frac{N-1}{r} (A_1 e^{-c_1 r} c_1^2 + A_2 e^{-c_2 r} c_2^2) P^2 dr$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{N-1}{r} (A_1 e^{-c_1 r} c_1^2 + A_2 e^{-c_2 r} c_2^2) P^2 = 0$$

para todo l

$$E_{s-0} = -\frac{1}{4c^2} \left\{ \begin{array}{ll} -1 & \text{para } j = 1 + \frac{1}{2} \\ 1+l & \text{para } j = 1 - \frac{1}{2} \end{array} \right\} \int_0^\infty P^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr, \quad l = 0$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} p^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr = 0$$

El cálculo de estas correcciones se ha insertado dentro del proceso que efectúa el programa ORBITALES - que, en líneas generales, se desarrolla en las siguientes - fases:

- 1.- Definido un átomo por su número atómico, Z, y su número de electrones N, y cada uno de sus orbitales por los números cuánticos principal, n, y azimutal, l, se le asigna a cada uno de estos un valor arbitrario de su energía.
- 2.- Se calcula el primer cero de la función f(r), de la ecuación de ondas sin corregir (5.10), en el que f(r) pasa de negativa a positiva y que constituye el punto de empalme, r_a . A partir de él, también se calcula la amplitud de los intervalos de integración, h.
- 3.- Se establecen las condiciones iniciales de la integración ascendente (en $r=0$, $r=h$ y $r=2h$) y se efectúa ésta integración, punto a punto para r crecientes, utilizando la fórmula de Numerov hasta llegar al punto de empalme, r_a .

4.- Se establecen las condiciones iniciales de la integración descendente (en un punto r lo suficientemente alejado y en $r-h$) y se efectúa la integración punto a punto, mediante la fórmula de Numerov, para r decrecientes hasta llegar nuevamente al punto de empalme r_a .

5.- En el punto de empalme se utiliza el criterio de Hartree (igualdad de la función e igualdad de las derivadas) para determinar la variación ΔE que hay que introducir a la energía para aproximarse al autovalor de la ecuación,

$$\Delta E = \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{dP}{dr} \right)_{asc} - \left(\frac{dP}{dr} \right)_{desc}}{P^2_{asc}(r_a) + P^2_{desc}(r_a)}$$

- 6.- Con la nueva energía $E + \Delta E$ se repite el proceso - desde el punto 2º, y el cálculo se concluye cuando el valor de ΔE que resulta es igual o inferior -- con respecto a E al índice de precisión elegido.

- 7.- Una vez conocida E dentro del límite de precisión establecido se repite el proceso, ya con el autovalor definitivo para calcular cada uno de los términos que constituyen las correcciones relativistas E_m , E_d y E_{s-o} . Como las integrales que se necesitan para el cálculo de ΔE se obtienen, por el método de Simpson, al mismo tiempo que se efectúa la integración ascendente y la integración descendente, se utiliza este mismo método y durante las mismas etapas, para calcular las integrales que -- intervienen en los términos de corrección, con lo que el cálculo queda concluido.

B I B L I O G R A F I A
=====

- (1) E.U. CONDON, G.H. SHORTLEY: "The Theory of Atomic Spectra". Cambridge at the University Press, 1953
- (2) J.C. SLATER: "Quantum Theory of Atomic Structure" Vol. II. Mc Graw Hill. New York, 1960, pág. 180
- (3) F. HERMAN, S. SKILMAN: "Atomic Structure Calculation". Prentice-Hall. New Jersey, 1963, pág. 2-2
- (4) H.A. BETHE, E.E. SALPETER: "Quantum Mechanics of one and two Electron Systems". Encyclopedia of Physics. Vol XXXV, págs. 133 y sig... Berlín, 1957
- (5) C. SANCHEZ DEL RIO. An. R.S.E.F.Q. LXIV, 321,1968
- (6) J. YUNTA CARRETERO; E. RODRIGUEZ MAYQUEZ: "ORBITALES. Programa de cálculo de funciones de onda para un potencial central analítico" -- JEN 264. Madrid, 1974

6. INTEGRACION POR EL METODO DE PERTURBACIONES:
POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

Los resultados obtenidos utilizando el potencial analítico pueden mejorarse sensiblemente - utilizando para el cálculo de los términos de corrección, mediante el método de perturbaciones, el potencial autoconsistente definido en (3.1)

El cálculo se realiza según el siguiente proceso:

- 1º.- Partiendo del potencial analítico con los parámetros propios de cada átomo, se resuelve la ecuación de ondas no relativista, obteniéndose los valores propios E_0 y las funciones propias R_0 de la ecuación sin perturbar. A partir de estas funciones propias se calcula el potencial (3.1) creado por el núcleo y los electrones que forman el átomo.
- 2º.- Se repiten los cálculos utilizando los valores del potencial creado obtenidos anteriormente. Se repite el proceso iterativamente hasta conseguir que el potencial sea autoconsistente.
- 3º.- Con los datos de las energías y funciones propias hallados, se calculan por el método de perturbaciones las correcciones debidas a cada uno de los términos que intervienen en la ecuación de ondas relativista, H_m , H_d y H_{s-0}

Las expresiones de las correcciones debidas a cada uno de los términos relativistas son las dadas en las fórmulas (5.11), (5.12) y (5.13) - pero sustituyendo en ellas el potencial analítico -- por el potencial calculado.

$$\begin{aligned}
 V_c(r) = & -\frac{Z+\frac{1}{2}}{r} + \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r} \sum_{n,l} \int_0^r P_{n,l}^2(r) dr + \\
 & + \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \sum_{n,l} \int_r^\infty \frac{P_{n,l}^2(r)}{r} dr \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

y es necesario, al igual que se hizo para el potencial analítico, calcular algebraicamente las expresiones de las derivadas primera y segunda del potencial y simplificar las expresiones matemáticas resultantes.

De la definición del potencial calculado se obtiene la expresión de su derivada primera.

$$\begin{aligned}
 \frac{dV_c}{dr} = & \frac{Z+\frac{1}{2}}{r^2} + \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \left(-\frac{1}{r^2} \sum_{n,l} \int_0^r P_{n,l}^2 dr + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{r} \sum_{n,l} P_{n,l}^2 \right) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \sum_{n,1} \frac{P_{n,1}^2}{r} = \\
& = \frac{Z + \frac{1}{2}}{r^2} - \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^2} \sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr \quad (6.2)
\end{aligned}$$

y la de su derivada segunda

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 V_c}{dr^2} &= -2 \frac{Z + \frac{1}{2}}{r^3} - \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \left(\sum_{n,1} P_{n,1}^2 r^2 - \right. \\
& \quad \left. - 2r \sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr \right) \frac{1}{r^4} = \\
& = -2 \frac{Z + \frac{1}{2}}{r^3} - \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^2} \sum_{n,1} P_{n,1}^2 + \\
& + 2 \frac{N - \frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^3} \sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr \quad (6.3)
\end{aligned}$$

y obtenidas estas derivadas es necesario calcular y simplificar la expresión que aparece en el integrando del término de Darwin (5.12)

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \frac{d^2 V_C}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV_C}{dr} = \\
& = -\frac{Z+\frac{1}{2}}{r^3} - \frac{1}{2} \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^2} \sum_{n,1} P_{n,1}^2 + \\
& + \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^3} \sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr + \\
& + \frac{Z+\frac{1}{2}}{r^3} - \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^3} \sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr
\end{aligned}$$

que, simplificada, resulta

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 V_C}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV_C}{dr} = -\frac{1}{2} \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \frac{1}{r^2} \sum_{n,1} P_{n,1}^2$$

(6.4)

Las correcciones que hay que calcular - y los valores de los integrandos en los límites de integración son los siguientes:

- Corrección debida a la variación de la masa con la velocidad

$$E_m = - \frac{1}{2c^2} \int_0^{\infty} P_{n,l}^2 (E_0 - v_c)^2 dr \quad (6.5)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{n,l}^2 (E_0 - v)^2 = \begin{cases} a_0^2 (Z + \frac{1}{2})^2, & l = 0 \\ 0, & l \neq 0 \end{cases} \quad (6.6)$$

- Corrección debida al término de Darwin

$$E_d = - \frac{1}{8c^2} \left[\frac{dv_c}{dr} P_{n,l}^2 \right]_0^{\infty} - \frac{1}{8c^2} \frac{N - \frac{1}{2}}{N}$$

$$\int_0^{\infty} P_{n,l}^2 \frac{1}{r^2} \sum_{n,l} P_{n,l}^2 dr \quad (6.7)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{n,l}^2 \frac{dv_c}{dr} = \begin{cases} a_0^2 (Z + \frac{1}{2}) & \text{para } l = 0 \\ 0 & \text{para } l \neq 0 \end{cases}$$

(6.8)

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{n,l}^2 \frac{dv_c}{dr} = 0 \quad \text{para todo } l \quad (6.9)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{n,l}^2 \frac{1}{r^2} \sum_{n,l} P_{n,l}^2 = 0 \quad (6.10)$$

- Corrección debida al término de interacción espín-órbita

$$\begin{aligned}
 E_{S-O} &= -\frac{1}{4c^2} \left\{ \begin{array}{c} -1 \\ 1+1 \end{array} \right\} \left[(Z+\frac{1}{2}) \int_0^\infty P_{n,1}^2 \frac{1}{r^3} dr - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \int_0^\infty P_{n,1}^2 \frac{1}{r^3} \left(\sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr \right) dr \right] = \\
 &= -\frac{1}{4c^2} \left\{ \begin{array}{c} -1 \\ 1+1 \end{array} \right\} \int_0^\infty (Z+\frac{1}{2} - \frac{N-\frac{1}{2}}{N} \sum_{n,1} \int_0^r P_{n,1}^2 dr) \cdot \\
 &\quad \cdot P_{n,1}^2 \frac{1}{r^3} dr \quad (6.11)
 \end{aligned}$$

en donde

$$\begin{aligned}
 -1 &\quad \text{para } j = 1 - \frac{1}{2} \\
 1+1 &\quad \text{para } j = 1 + \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

para $l = 0$ este término no aparece

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{n,1}^2 \frac{1}{r^3} = 0 \quad (6.12)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} P_{n,1}^2 \frac{1}{r^3} \sum_{n,1} P_{n,1}^2 = 0 \quad (6.13)$$

Obtenidas las expresiones de cada uno de estos términos, el proceso de cálculo sigue un camino totalmente diferente del seguido en el caso del potencial analítico, pues mientras en este caso los términos de corrección se obtienen durante la integración de la ecuación de ondas, en el caso del potencial autoconsistente es necesario tener la solución de la ecuación de ondas, una vez conseguida la autoconsistencia del potencial, para poder proceder al cálculo de los términos de corrección.

7. RESULTADOS

En las tablas que figuran al final se presentan los resultados obtenidos para todos los elementos del sistema periodico, desde el Helio ($Z=2$) hasta el Nobelio ($Z=102$), a partir de cada uno de los potenciales utilizados: el potencial analítico - y el potencial autoconsistente. Se dan también, como obligada referencia, los valores experimentales según K. Siegbahn et al. (1). Todos ellos están expresados en unidades atómicas y, en el caso de los valores - experimentales, se ha utilizado el factor de conversión que figura en el capítulo 1

$$1 \text{ u.a.} = 27,21 \text{ eV}$$

para expresar los resultados de Siegbahn en estas unidades.

Las tablas están organizadas por elementos ordenados en sentido creciente de su número atómico desde $Z = 2$ hasta $Z = 102$, y dentro de cada elemento - aparecen cada una de sus capas, ordenadas también en sentido creciente de los números cuánticos principal, n , y de momento angular orbital l , éste último expresado en la notación espectroscópica habitual (s, p, d, f, \dots) y de acuerdo con la estructura atómica normalmente admitida para el elemento correspondiente.

En la primera línea de cada capa aparece el símbolo del elemento, su número atómico y la identificación de la capa mediante los números cuánticos n y l . En las líneas que siguen se presentan las energías, con su signo, debidas a cada uno de los sumandos que intervienen en la ecuación de ondas identificadas por las siguientes abreviaturas:

EO = energía obtenida de la ecuación de ondas sin corregir.

EM = energía debida a la corrección relativista de variación de la masa con la velocidad.

ED = energía debida al término de Darwin

ESO = energía de acoplamiento espín-órbita, sin afectar del factor -1 y $1+1$ proveniente de los dos valores que puede tomar el número cuántico j .

Esta energía no aparece en los orbitales s .

$E(L = 0) = EO + EM + ED$, energía total de enlace de los orbitales s

$E(J = L - \frac{1}{2}) = EO + EM + ED + (1+1) \cdot ESO$, energía total de enlace de los orbitales p, d y f cuando $j = l - \frac{1}{2}$

$$E(J = L + \frac{1}{2}) = E_0 + E_M + E_D - I \cdot E_{SO}, \text{ energía total de enlace de los orbitales p,d y f cuando } j = l + \frac{1}{2}$$

Los encabezamientos de las columnas explican por sí mismos el significado de los números que contienen y no necesitan más aclaración. Conviene, sin embargo decir que cuando en la columna de los valores experimentales se desconoce uno de los valores en que se desdobra la energía como consecuencia de la interacción espín-órbita, el único valor conocido se le ha asignado, arbitrariamente, a la energía correspondiente a $j = l - \frac{1}{2}$.

Queda, finalmente, por decir que de la observación de estas tablas se deduce una de las ventajas que proporcionan los métodos teóricos, pues permiten predecir los numerosos resultados que todavía son experimentalmente desconocidos.

B I B L I O G R A F I A

=====

- (1) K. SIEGBAHN et al., ESCA, Uppsala, 1967

8. DISCUSION

8.1. Comparación con los resultados experimentales

El único contraste para comprobar la validez de los métodos empleados consiste en comparar los resultados obtenidos con los que se conocen de los métodos experimentales. Si se efectúa esta comparación sistemáticamente con todos los orbitales de todos los átomos se comprueba cuán bien se aproximan los resultados teóricos a los experimentales, aun a pesar de las importantes simplificaciones efectuadas para hacer -- abordable el problema. En las figuras 8-1 a 8-4, que -- representan los resultados teóricos obtenidos con el -- potencial autoconsistente junto con los experimentales correspondientes a $j = l - \frac{1}{2}$, según Siegbahn, se puede -- observar hasta qué punto coinciden unos y otros resultados y qué importancia tienen las correcciones relativistas utilizadas. En estas figuras se comprueba que, con algunas excepciones, las curvas experimentales son fielmente reproducidas por las teóricas. En algunos -- casos, como los niveles 5s, 5p y 5d de la serie de los lantánidos y elementos próximos, los valores teóricos -- no siguen las fuertes variaciones que presentan los resultados experimentales, quizás porque los potenciales utilizados no logran reproducir, en estos átomos, con -- la misma fidelidad el potencial real a que se encuentran sometidos todos sus electrones. En general, las energías

ORBITALES s 85

→ ENERGIAS TEORICAS (POTENCIAL AUTOCONSISTENTE)

△ ENERGIAS EXPERIMENTALES

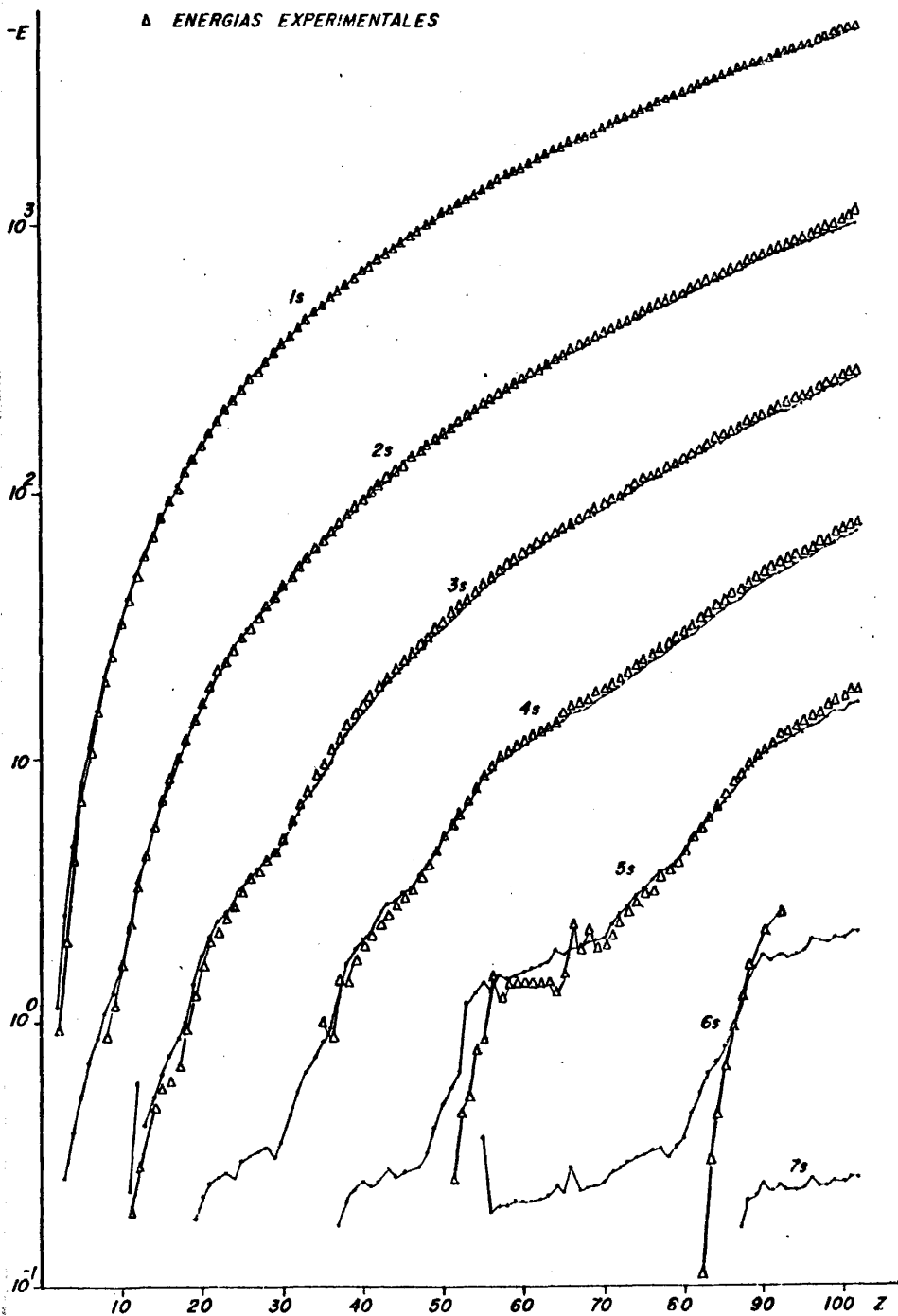


Fig. 8-1

ORBITALES p 86

— ENERGIAS TEORICAS (POTENCIAL AUTOCONSISTENTE)
Δ ENERGIAS EXPERIMENTALES

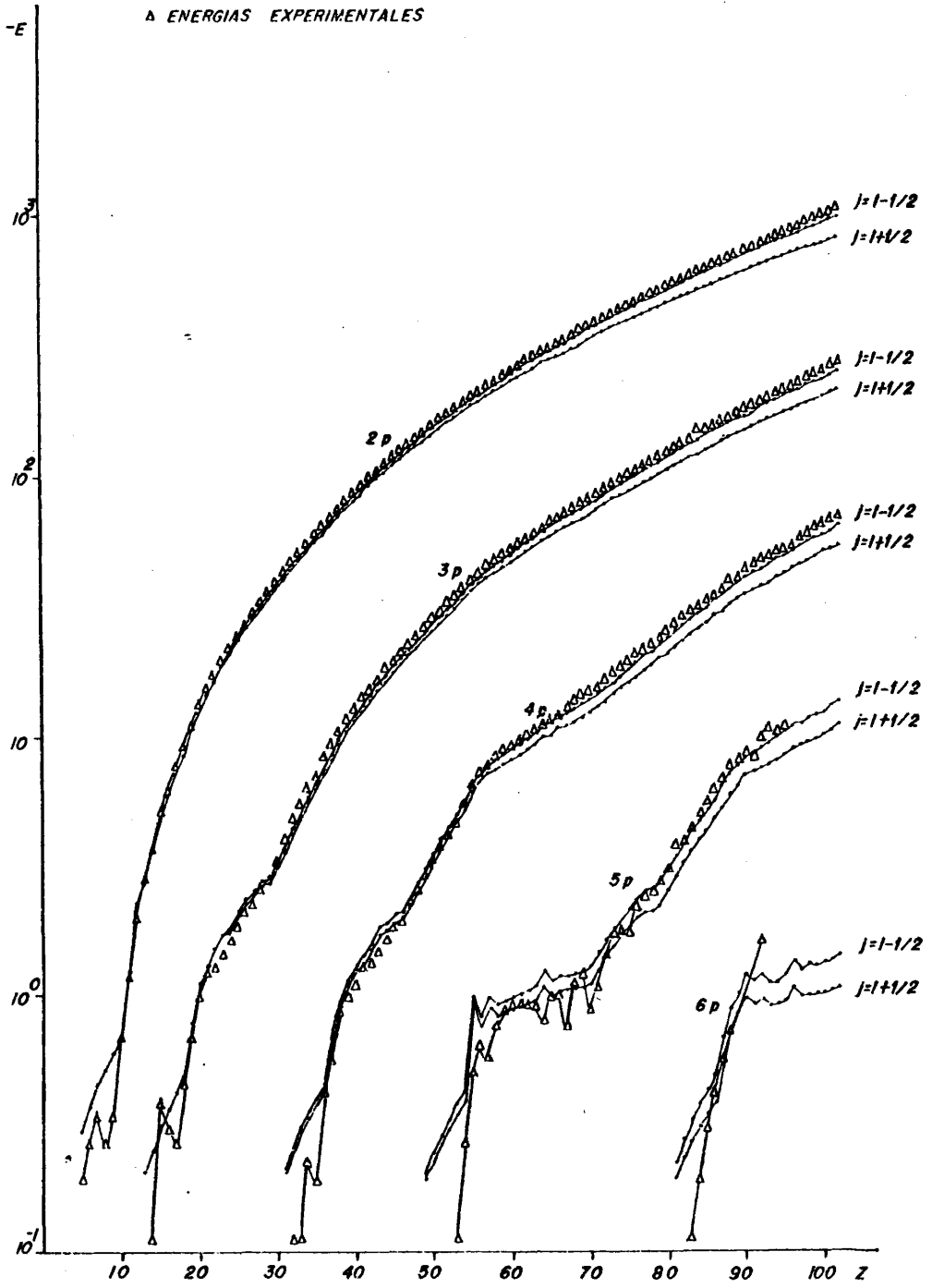


Fig. 8-2

ORBITALES d 87

→ ENERGIAS TEORICAS (POTENCIAL AUTOCONSISTENTE)

△ ENERGIAS EXPERIMENTALES

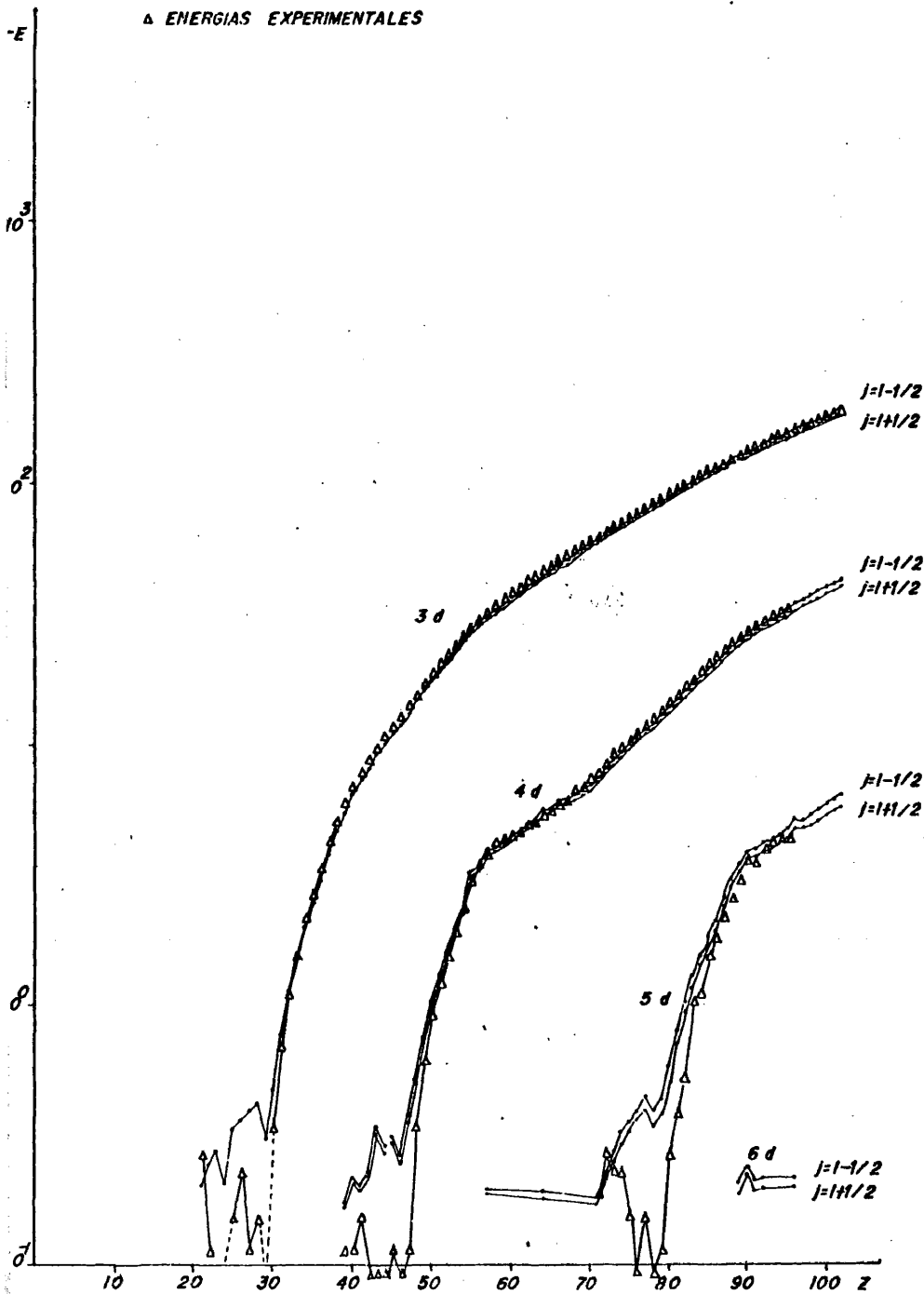


Fig. 8-3

ORBITALES 1

88

→ ENERGIAS TEORICAS (POTENCIAL AUTOCONSISTENTE)

△ ENERGIAS EXPERIMENTALES

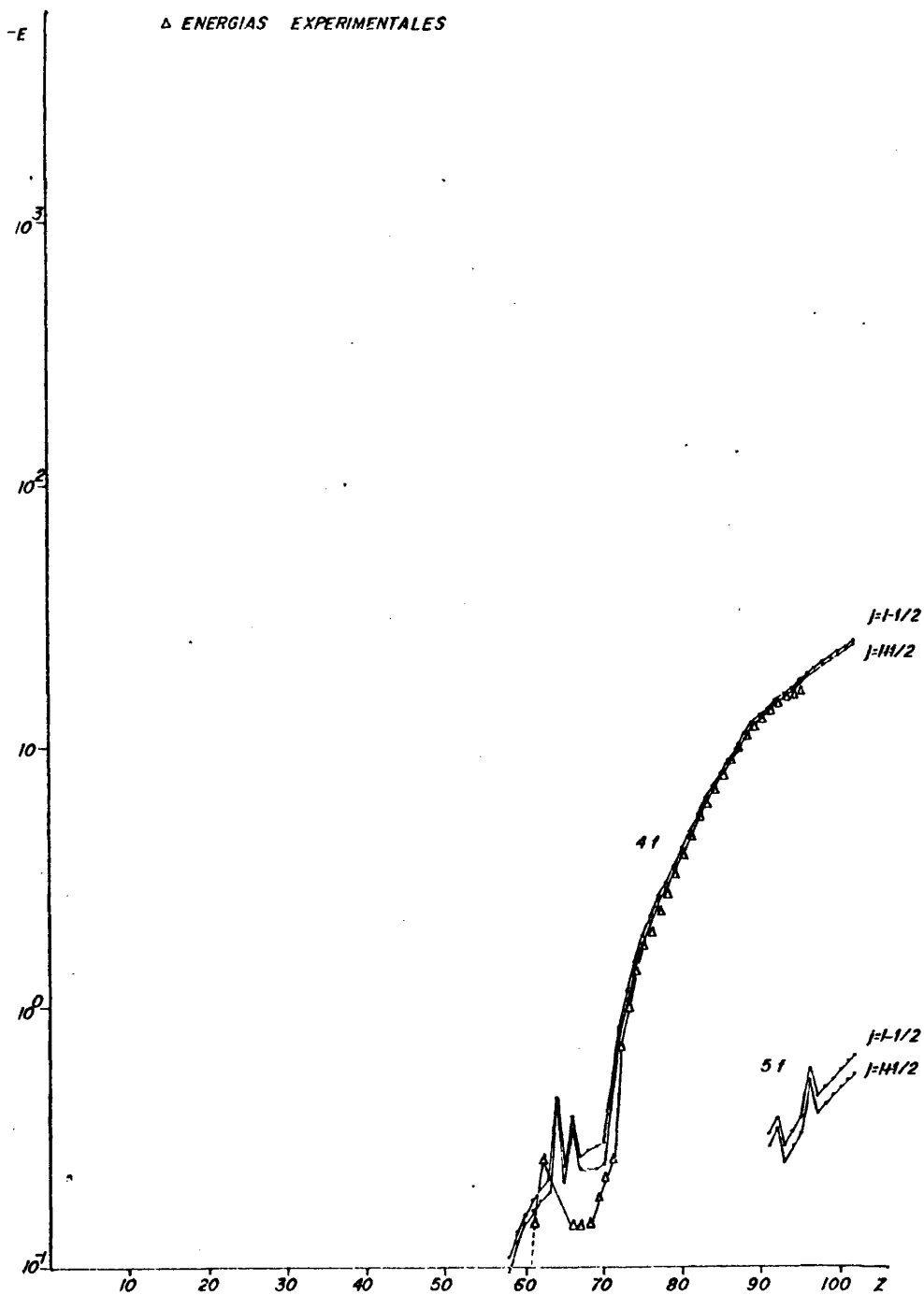


Fig. 8-4

teóricas de los primeros elementos en cada nivel se separan de las energías experimentales relativamente más que las del mismo nivel del resto de los elementos pero hay que tener en cuenta que debido a que por ser más pequeñas, en valor absoluto, arrastran un mayor error experimental. El fenómeno está más extendido en los niveles 5d y 6s en los que la separación afecta a la totalidad de los elementos que poseen estos niveles.

Similares consideraciones pueden hacerse para el caso de las energías obtenidas a partir del potencial analítico, aunque en este caso las energías teóricas se separan, en general, algo más de las experimentales que las procedentes del potencial autoconsistente.

Una apreciación más exacta del grado de precisión alcanzado se puede obtener calculando las diferencias porcentuales entre las energías teóricas y las experimentales. Si se efectúa este cálculo con las energías correspondientes a cada uno de los orbitales en los que se conocen los valores experimentales, se obtienen unas distribuciones generalmente asimétricas en las que el valor que mejor indica la aproximación conseguida en cada capa es el valor más probable.

Estos valores, correspondientes a cada una de las capas en las que existe una estadística suficiente son los que se dan en la tabla 8-1 siguiente.

De esta tabla se deduce:

1º. Las energías teóricas son, en general, ligeramente superiores a las experimentales (inferiores en valor absoluto)

2º. Las energías obtenidas a partir del potencial autoconsistente se aproximan más a las experimentales que las obtenidas a partir del potencial analítico

3º. Las máximas diferencias porcentuales se sitúan en torno a $\pm 5\%$ en el caso del potencial autoconsistente y llegan hasta un -21% en el caso de las energías de los orbitales d calculadas mediante el potencial analítico.

Por otra parte, la importancia de cada uno de los términos de corrección que intervienen en la ecuación de ondas relativista se puede observar en las figuras 8-5, 8-6 y 8-7. En la figura 8-5 están representadas las energías debidas al término de variación de la masa con la velocidad, $-E_M$; en la figura 8-6, las energías debidas al término de Darwin, $-E_D$, pero indicando con --

T A B L A 8 - 1

=====

VALORES MAS PROBABLES DE LAS DIFERENCIAS PORCENTUALES
ENTRE LAS ENERGIAS CALCULADAS Y LAS EXPERIMENTALES

$$\frac{E_{\text{cal.}} - E_{\text{exp.}}}{E_{\text{exp.}}} \cdot 100$$

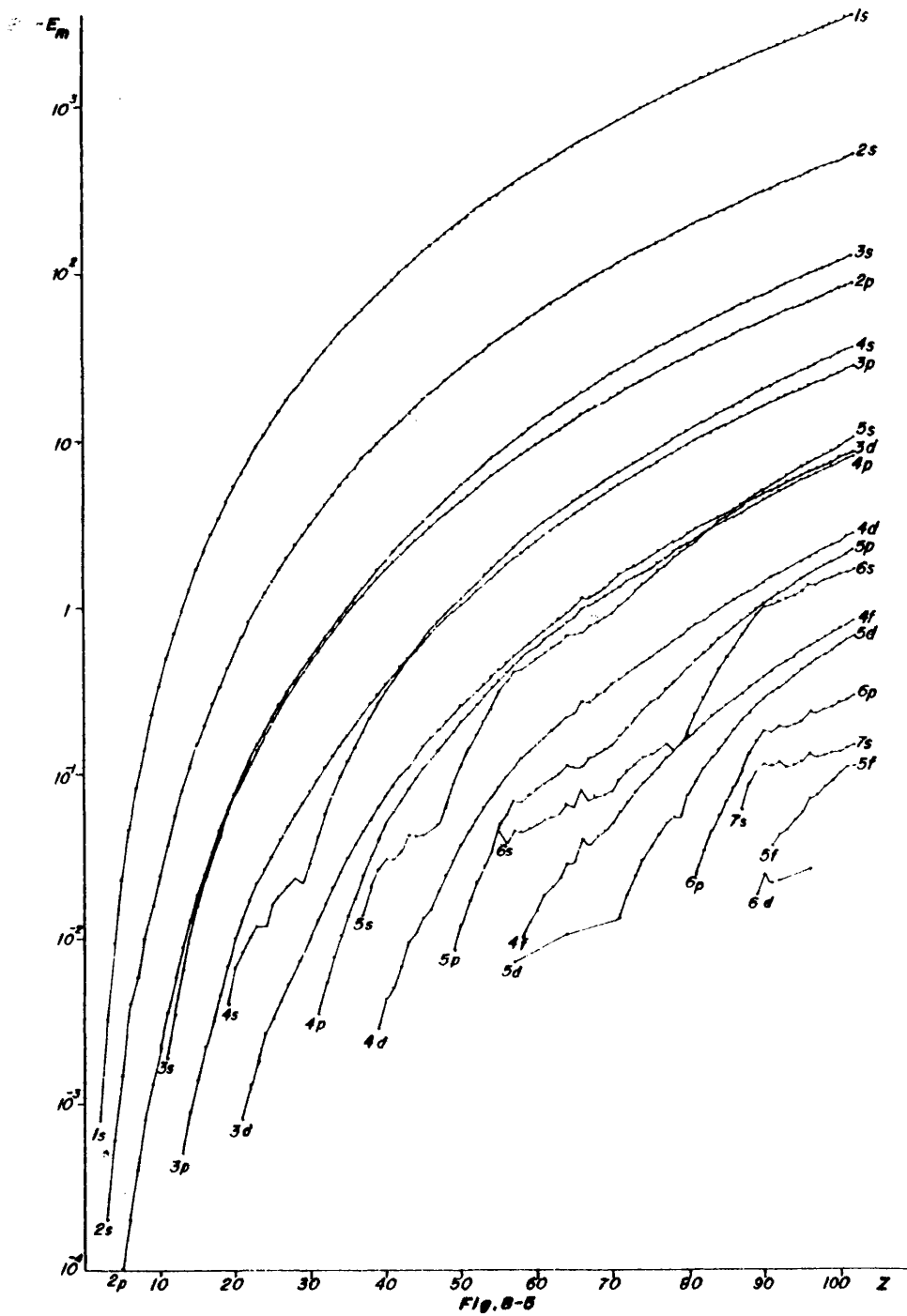
$$E_{\text{exp.}}$$

ORBITAL	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE
1s	0,7	0,3
2s	- 7	- 1
2p (j=1-½)	- 7	- 1
2p (j=1+½)	- 7	1
3s	-13	- 3
3p (j=1-½)	-15	- 3
3p (j=1+½)	-13	1
3d (j=1-½)	-21	1
3d (j=1+½)	-21	1
4s	- 7	- 5
4p (j=1-1)	- 9	- 5
4p (j=1+½)	- 5	- 1
4d (j=1-½)	- 5	- 1
4d (j=1+½)	- 5	- 1
4f (j=1-½)	(x)	(x)
4f (j=1+½)	(x)	(x)
5s	2	- 5
5p (j=1-½)	3	- 5
5p (j=1+½)	11	5

(x) La estadística es muy pequeña

ENERGIAS DEBIDAS AL TERMINO DE VARIACION DE LA MASA CON LA VELOCIDAD

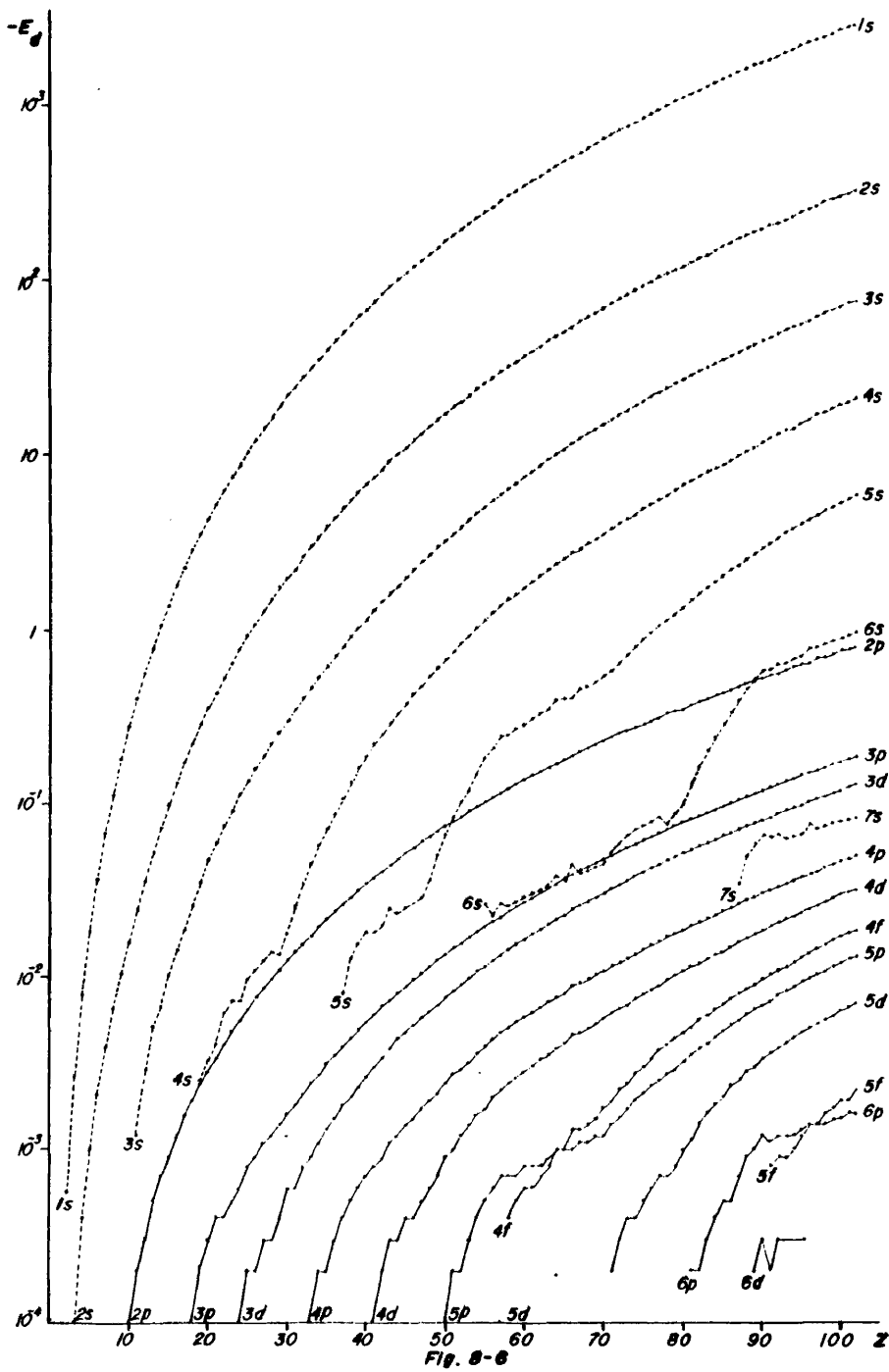
92



ENERGIAS DEBIDAS AL TERMINO DE DARWIN

--- POSITIVAS
—•— NEGATIVAS

93



ENERGIAS DEBIDAS AL TERMINO DE INTERACCION ESPIN-ORBITA

-- RESULTADOS TEORICOS
▲ RESULTADOS EXPERIMENTALES

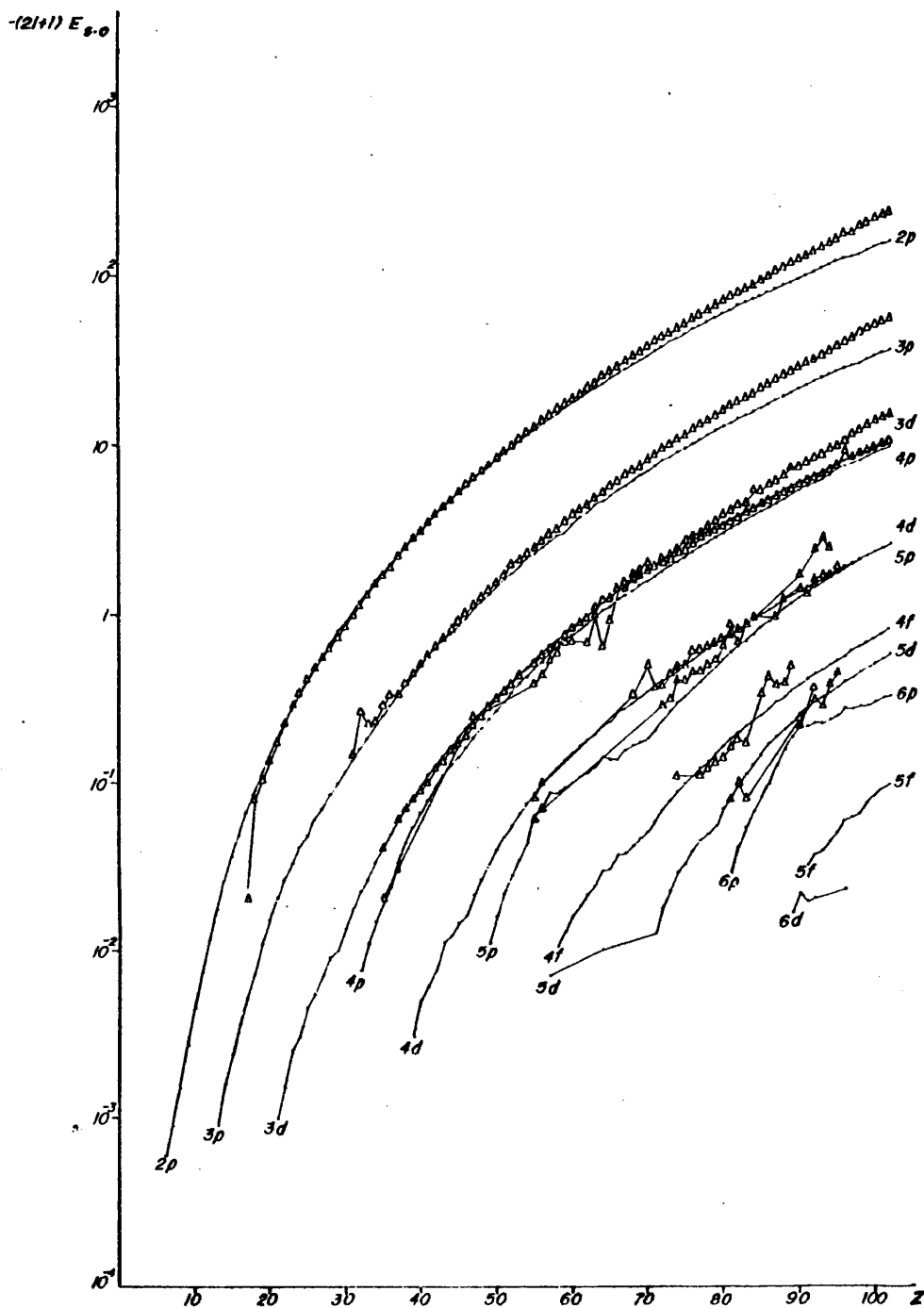


Fig. 8-7

trazo discontinuo las correspondientes a los orbitales s para destacar que en estos orbitales dichas energías son positivas, y, finalmente, en la figura 8-7, las -- energías interacción espín-órbita.

Las dos primeras energías no admiten -- comparación con ningún resultado experimental, pero sí las últimas que se pueden comparar directamente con la separación de las líneas espectrales correspondientes que aparecen en los espectros de emisión, si en lugar de representar $(l+1) \cdot E_{s-o}$ y $-lE_{s-o}$ se representa -- $(2l+1) \cdot E_{s-o}$. Esto es lo que se ha hecho en la figura -- 8-7 en donde aparecen superpuestas las separaciones -- entre las energías calculadas y las obtenidas por dife -- rencias entre los niveles correspondientes de las líneas espectrales según Bearden y Burr (1). En esta figura -- se observa que, en general, las curvas teóricas están -- por debajo de las experimentales a partir del átomo -- $Z = 40$ y el desplazamiento es de una cuantía similar al que presentan las energías totales teóricas con respec -- to a las experimentales, lo que induce a pensar que es éste término el responsable fundamental de las diferen -- cias existentes entre unas y otras energías de los orbi -- tales con $l \neq 0$ debido, quizás, a que en él aparece -- fundamentalmente la derivada del potencial, y además -- multiplicada por $\frac{1}{r}$, por lo que los posibles defectos -- debidos a la simplicidad del potencial utilizado se au -- mentan al calcular su derivada primera y se agravan pa -- ra radios pequeños.

En resumen, se puede decir que los --
potenciales y los métodos de cálculo utilizados repro
ducen muy bien, aunque en general por exceso, las - -
energías de enlace experimentales (mejor con el poten
cial autoconsistente que con el analítico) y que en los
orbitales p, d y f, la mayor falta de acuerdo entre la
teoría y el experimento puede ser, principalmente, debi
da al término de interacción espín-órbita.

8.2. Comparación con los resultados obtenidos por otros autores

Es evidente que la comparación con los resultados experimentales, aunque imprescindible, no expresa hasta qué punto el método seguido es preferible al seguido por otros autores, tanto en simplicidad de los cálculos como en aproximación de los resultados.

Dejando aparte la mayor sencillez que, evidentemente, supone el disponer de un potencial expresado analíticamente, queda el comprobar el grado de aproximación que proporcionan los potenciales utilizados y el método de cálculo seguido en comparación con otros potenciales y procedimientos de cálculo que también han pretendido obtener los niveles energéticos de los átomos a partir de la ecuación de ondas relativista.

Los primeros resultados que aparecieron publicados sobre la integración de la ecuación de ondas relativista fueron los de Mayers (2) para el caso del Hg^{2+} , que, utilizando el potencial autoconsistente de Hartree, integró mediante el método de Runge-Kutta el sistema lineal de dos ecuaciones a que se puede reducir la ecuación de Dirac. En la misma línea, pero utilizando el método de Milne para la integración del sistema de ecuaciones, está el trabajo de Cohen (3) cuyos resultados para el Hg aparecen en la tabla 8-2 en comparación con los obtenidos en el presente trabajo y los valores experimentales.

COMPARACION CON LOS RESULTADOS DE COHEN (3) PARA EL Hg 80

Energías de enlace en (a.u.)

(A) Cohen	(B) Potencial analítico	(C) Potencial autoconsistente	(D) Valores experimentales	A-D	B-D	C-D
1s	- 3072,85	- 3042,12	- 3055,76	- 17,09	- 23,09	13,64
2s	- 540,9	- 534,38	- 545,64	4,74	36,60	11,26
2p _{1/2}	- 520,85	- 515,37	- 522,47	1,62	33,92	7,10
2p _{3/2}	- 448,95	- 456,38	- 451,70	2,75	20,49	4,68
3s	- 127,85	- 127,05	- 130,98	3,13	16,41	3,93
3p _{1/2}	- 118,05	- 117,84	- 120,57	2,52	16,58	2,73
3p _{3/2}	- 102,35	- 105,06	- 104,70	2,35	11,70	0,36
3d _{3/2}	- 86,6	- 88,85	- 87,70	1,10	14,67	- 1,15
3d _{5/2}	- 83,2	- 85,43	- 84,39	1,19	14,05	- 1,04
4s	- 27,93	- 27,80	- 29,42	1,49	2,09	1,62
4p _{1/2}	- 23,71	- 23,75	- 24,89	1,18	1,76	1,14
4p _{3/2}	- 19,91	- 20,73	- 20,99	1,08	0,50	0,26
4d _{3/2}	- 13,1	- 13,81	- 13,94	0,84	0,68	0,13

T A B L A 8-2 continuación

COMPARACION CON LOS RESULTADOS DE COHEN (3) PARA EL Hg 80

Energías de enlace en (a.u.)

(A) Cohen	(B) Potencial analítico	(C) Potencial autoconsistente	(D) Valores experimentales	A-D	B-D	C-D
$4d_{3/2}^5$	- 12,69	- 13,10	- 13,24	0,85	0,55	0,14
$4f_{5/2}^7$	- 4,34	- 4,05	- 3,79	0,07	0,55	0,26
$4f_{7/2}^7$	- 4,25	- 3,89	- 3,64	0,07	0,61	0,25
$5s$	- 4,40	- 4,41	- 4,41	0,01	0,21	0,00
$5p_{1/2}^3$	- 3,16	- 3,04	- 2,98	- 0,02	- 0,18	- 0,06
$5p_{3/2}^3$	- 2,31	- 2,51	- 2,13	- 0,18	- 0,47	- 0,38
$5d_{3/2}^2$	- 0,43	- 0,57	- 0,26	- 0,17	- 0,25	- 0,31
$5d_{5/2}^2$	- 0,36	- 0,51				
$6s$	- 0,28	- 0,36				

De la mencionada tabla se deduce que los resultados obtenidos por Cohen, partiendo de puntos muy diferentes del presente trabajo y siguiendo caminos muy distintos, son, sin embargo, muy similares a los obtenidos con el potencial autoconsistente aunque mejores, en general, que los obtenidos a partir del potencial analítico.

De la comparación con los restantes cálculos de Cohen (W-74, Pt-78 y U-92) se obtienen parecidas conclusiones, lo que permite afirmar que el potencial autoconsistente utilizado y el método de perturbaciones seguido proporcionan resultados del mismo orden de precisión que la integración directa del sistema lineal a que conduce la ecuación de Dirac en el caso de un potencial central autoconsistente.

En orden cronológico creciente, los siguientes cálculos de interés son los debidos a Herman y Skilman (4), los cuales, utilizando un potencial autoconsistente en el que se tiene en cuenta el potencial de cambio mediante la expresión debida a Slater, ya mencionada en el capítulo 3, integran las ecuaciones de Hartree Fock-Slater y calculan las correcciones relativistas mediante el método de perturbaciones.

Los únicos resultados relativistas publicados por estos autores son los correspondientes a los átomos de número atómico par y cuya comparación con los obtenidos en éste trabajo con el potencial autoconsistente aparece en las figuras 8-8, 8-9, 8-10 y 8-11 para los orbitales 1s, 2s, 2p, 3p, 3d y 4f.

Como se puede observar en estas curvas, y en otras que podrían dibujarse con el resto de los orbitales, ambos potenciales, el Hartree-Fock-Slater y el autoconsistente propuesto, producen resultados prácticamente coincidentes en todo el sistema periódico, por lo que, debido a que en ambos trabajos se ha utilizado el método de perturbaciones de primer orden, puede afirmarse que el potencial autoconsistente propuesto reproduce muy aproximadamente el efecto que introduce el potencial de cambio debido a Slater.

Aunque, como ya se mencionó en el capítulo 4, el procedimiento analítico, desarrollo de las funciones radiales como combinación lineal de un conjunto de funciones analíticas, debido a Roothaan es menos preciso que el procedimiento numérico, es interesante contrastar los resultados que se obtienen con uno y otro procedimiento.

Los cálculos relativistas más recientes, mediante el procedimiento analítico, de que se dispone -- son los debidos a T. Kagawa (5) que ha realizado la integración del sistema de ecuaciones lineales a que conduce

o HARTREE-FOCK-SLATER
+ POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

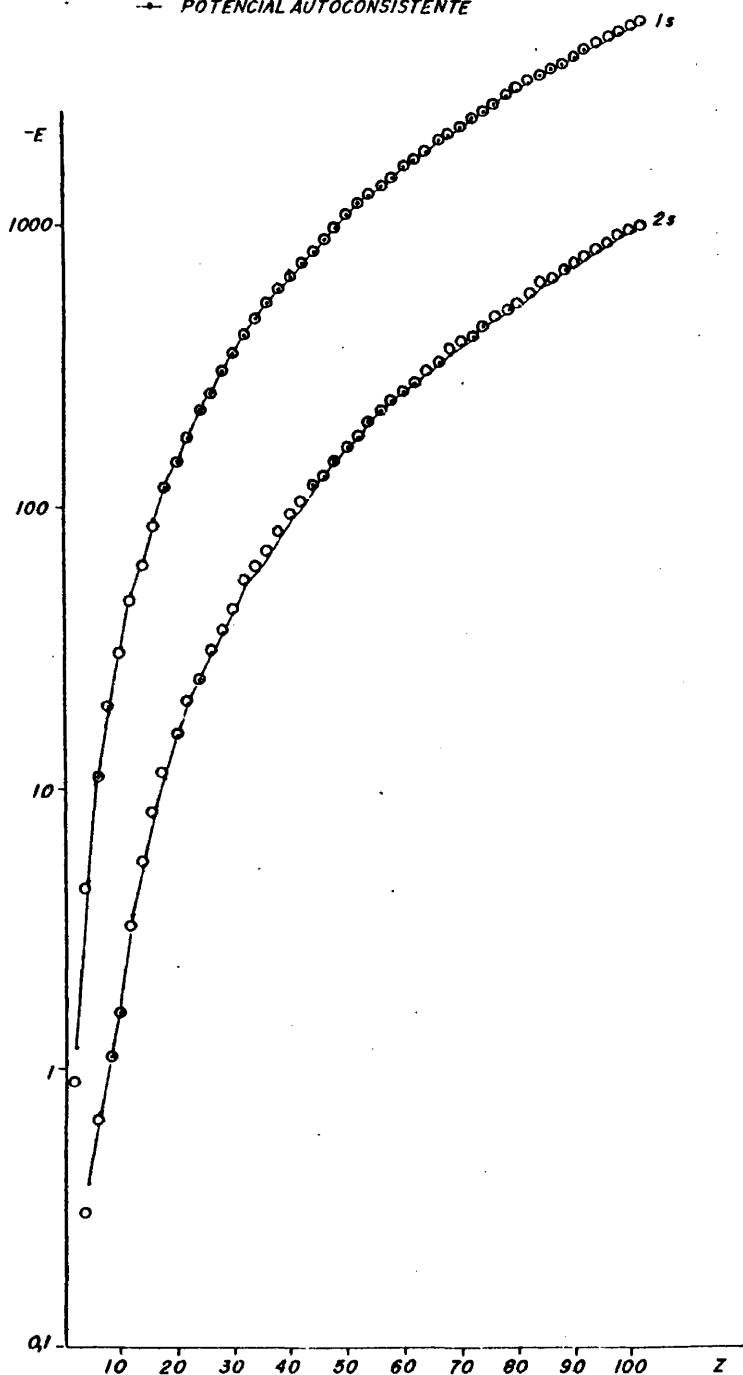


Fig. 8-8

ENERGIAS TEORICAS, ORBITALES p

○ HARTREE-FOCK-SLATER

→ POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

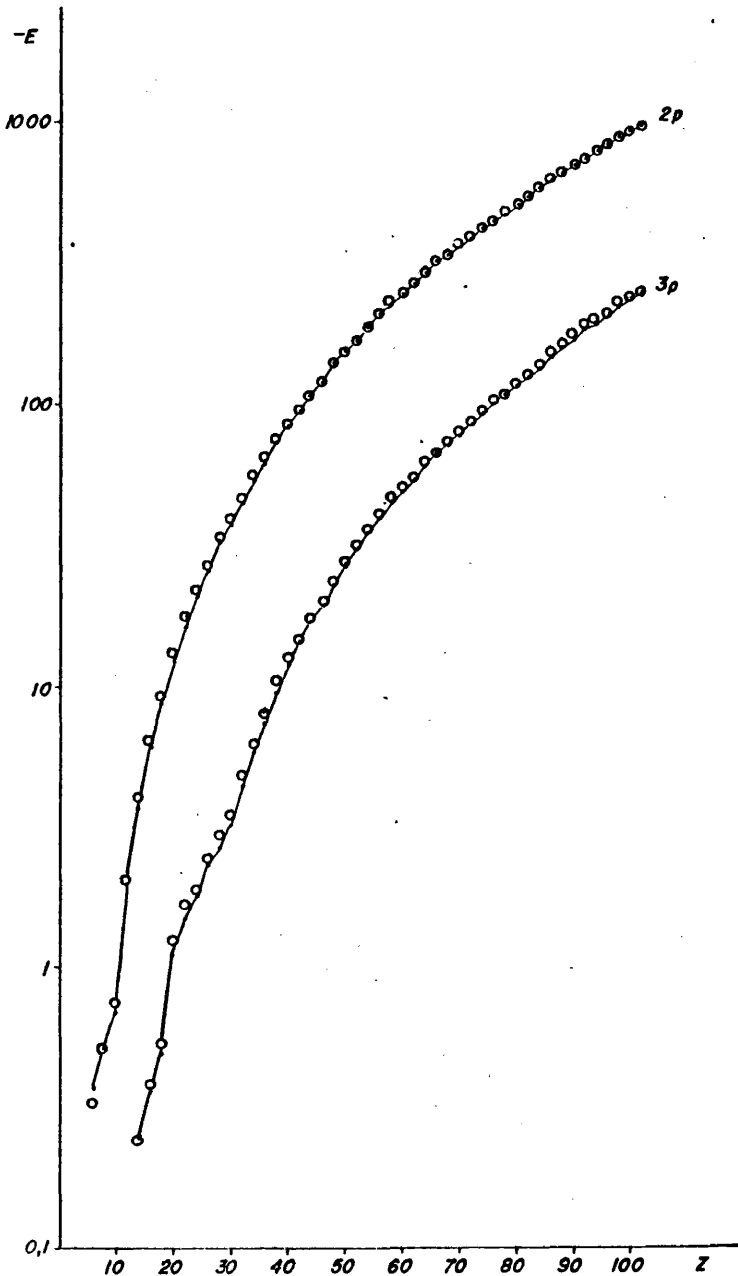


Fig. 8-9

ENERGIAS TEORICAS . ORBITALES *d*

○ HARTREE-FOCK-SLATER
— POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

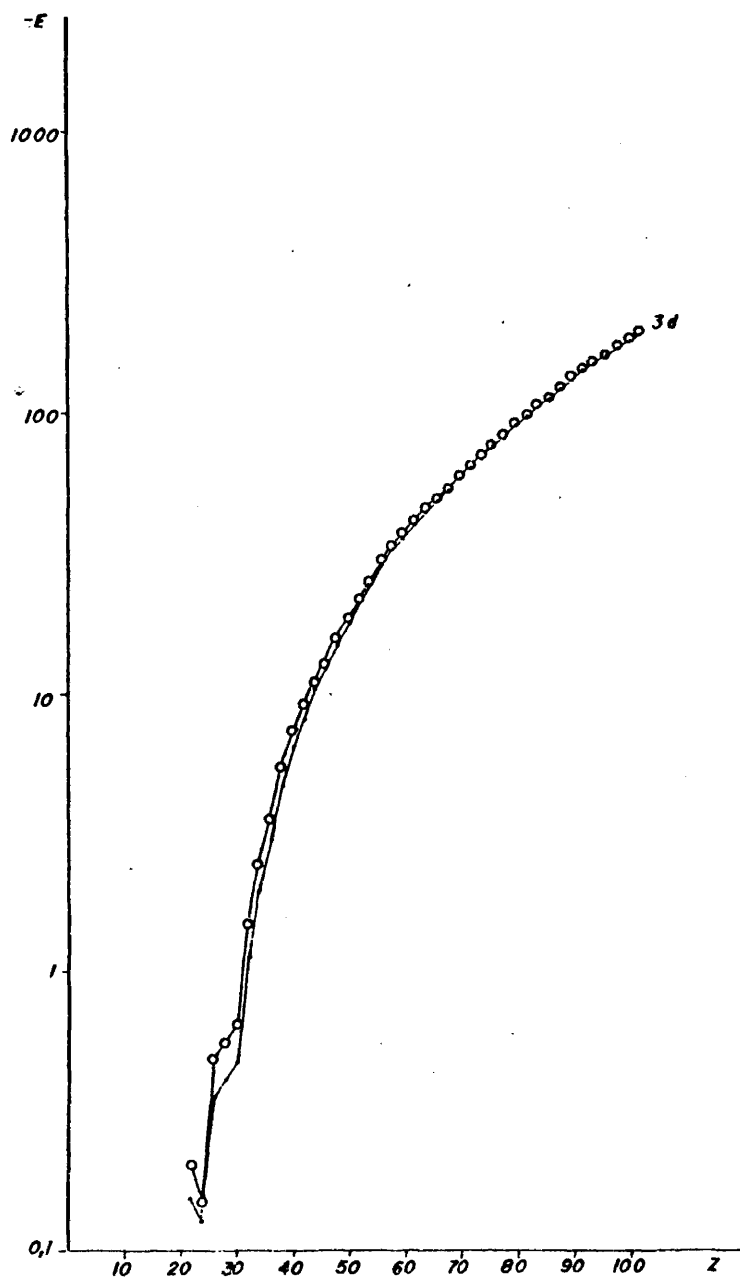


Fig. 8-10

105

ENERGIAS TEORICAS . ORBITALES γ

○ HARTREE-FOCK-SLATER

→ POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

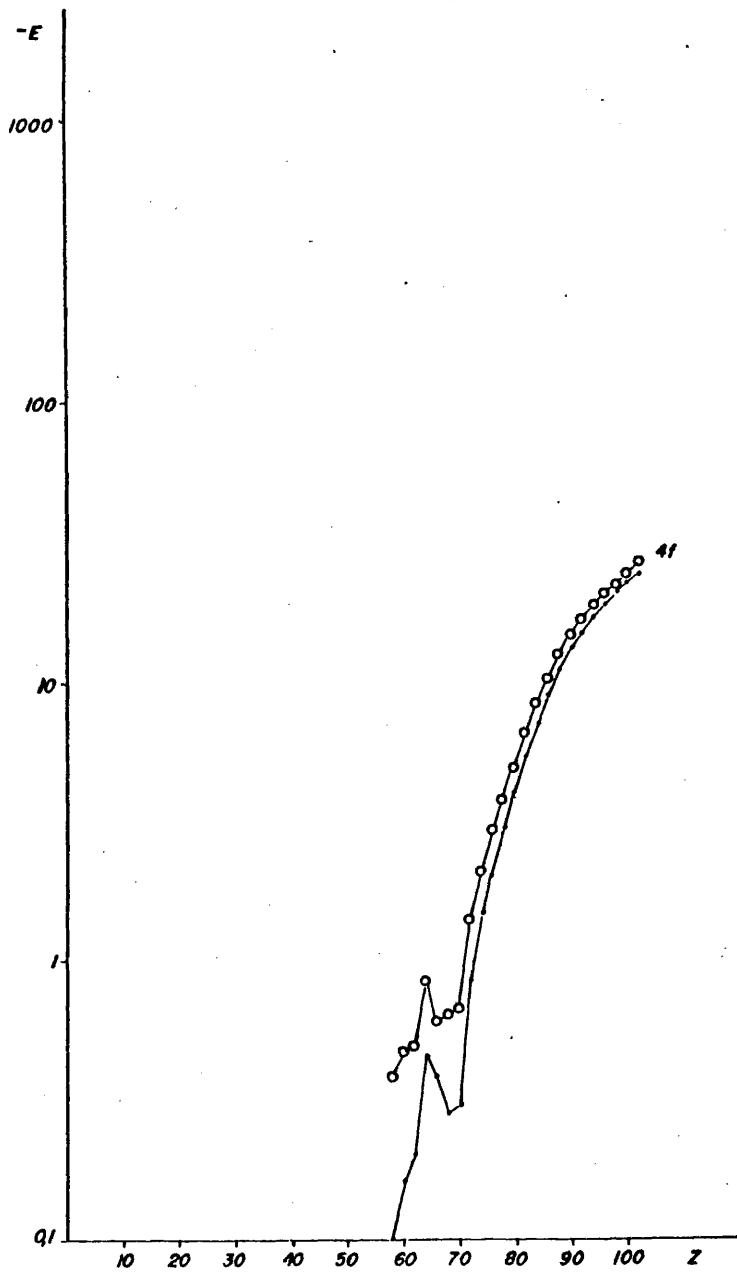


Fig. 8-11

la ecuación de Dirac en el caso de un potencial central, pero expresando las componentes grandes y pequeñas de la función de onda radial en términos de unos orbitales del tipo Slater cuyos coeficientes determina, al igual que Roothaan, por el método de variaciones, aunque los exponentes que aparecen en estos orbitales los toma de las tablas no relativistas de Clementi (6), y los mejora mediante algunos cálculos de tanteo.

En la tabla 8-3 se presenta la comparación entre los resultados de Kagawa para el Cu-29, el único que publica, y los obtenidos en este trabajo. Aunque se trata de un único elemento y de pocos orbitales, se puede observar que de los cálculos por el método de Roothaan se obtienen resultados que se aproximan menos a los experimentales que los obtenidos mediante el potencial autoconsistente, pero son algo mejores que los obtenidos con el potencial analítico.

Finalmente, la comparación más interesante es la que se puede realizar con los resultados de J. Mc Ennan et al, (7) ya que estos autores han empleado para sus cálculos un potencial en el interior del átomo que viene dado por una expresión analítica, un desarrollo en serie en potencias crecientes de r , de la siguiente forma:

COMPARACION CON LOS RESULTADOS DE T. KAGAWA (METODO DE ROOTHAAN) PARA EL Cu - 29

Energías de enlace en (a.u.)

(A)	(B)	(C)	(D)	A-D	B-D	C-D
Kagawa	Potencial analítico	Potencial autoconsistente	Valores experimentales			
1s	- 332,66	- 330,76	- 330,16	- 2,50	- 0,34	- 0,60
2s	- 41,66	- 39,57	- 40,30	- 1,36	2,19	0,73
2p _{1/2}	- 36,30	- 34,56	- 34,97	- 1,33	2,30	0,41
2p _{3/2}	- 35,55	- 33,81	- 34,23	- 1,32	2,28	0,42
3s	- 3,15	- 4,33	- 4,41	1,26	0,08	0,09
3p _{1/2}	- 3,42	- 2,78	- 2,81	- 0,70	- 0,06	- 0,09
3p _{3/2}	- 3,32	- 2,69	- 2,71			
3d _{3/2}	- 0,48	- 0,27	- 0,30	- 0,07	- 0,20	- 0,23
3d _{5/2}	- 0,47	- 0,26	- 0,29			
4s	- 0,24	- 0,25	- 0,31			

$$V(r) = \frac{\alpha Z}{r} \left[1 + V_1(\lambda r) + V_2(\lambda r)^2 + V_3(\lambda r)^3 + \dots \right]$$

(en unidades naturales $\hbar = m = c = 1$)

en donde α es la constante de la estructura fina y $\lambda = 1,13 \alpha Z^{1/3}$ es un parámetro que caracteriza el apantallamiento.

Los resultados de estos autores, que integran el sistema de ecuaciones lineales a que da origen la ecuación de Dirac en el caso de que el potencial sea central, para algunos orbitales del Al 13, Zn 30 y W 74 se dan en la tabla 8-4, junto con los obtenidos en el presente trabajo y los correspondientes experimentales. De esta tabla se deduce que los resultados obtenidos con cualquiera de los potenciales utilizados en el presente trabajo se aproximan mucho más a los valores experimentales que los obtenidos por Mc Ennan et al., por lo que es preciso concluir que el potencial utilizado por estos autores no representa tan bien como cualquiera de aquellos potenciales el existente realmente en el interior de los átomos.

Como conclusión a todo este apartado de comparación con los resultados de otros autores y, por consiguiente, de otros potenciales de partida y otros procedimientos de cálculo, se puede decir:

COMPARACION CON LOS RESULTADOS DE J.MC ENNAN ET AL. (POTENCIAL ANALITICO) para el Al (13), Zn (30),
y W (74)

Energías de enlace (en a.u.)

Elemento	Orbital	Mc Ennan	Potencial analítico	Potencial autoconsistente	Valores Experimentales
Al-13	1s	- 54,723	- 57,503	- 57,752	- 57,362
	1s	- 358,618	- 355,311	- 355,791	- 355,168
	2s	- 35,465	- 40,916	- 43,101	- 43,904
Zn-30	2p _{1/2}	- 32,121	- 35,120	- 37,874	- 38,400
	2p _{3/2}	- 31,018	- 34,284	- 36,979	- 37,500
	1s	- 2636,90	- 2577,07	- 2554,08	- 2556,48
W-74	2s	- 459,39	- 414,01	- 437,86	- 444,89
	2p _{1/2}	- 450,57	- 395,58	- 420,56	- 424,40
	2p _{3/2}	- 394,34	- 354,14	- 377,96	- 375,00

1º.- El disponer de un potencial expresable en forma analítica simplifica extraordinariamente los cálculos sin suponer una pérdida notable en la aproximación de los resultados.

2º.- Se obtienen valores similares de las energías de enlace, tanto integrando la ecuación de Dirac como integrando la ecuación de ondas relativista por el método de perturbaciones.

3º.- Otros procedimientos de cálculo (desarrollo de las funciones radiales como combinación lineal de un conjunto de funciones) y otros potenciales analíticos utilizados, proporcionan peores resultados que los obtenidos utilizando el potencial analítico y el potencial autoconsistente de este trabajo.

B I B L I O G R A F I A

=====

- (1) J.A. BEARDEN, A.F. BURR, "CRC Handbook of Chemistry and Physics". CRC Press, 1980. E-191
- (2) D.F. MAYERS, Proc. Roy. Soc.(London), A241, 93, 1957
- (3) S. COHEN, Phys. Rev., 118, 489, 1960
- (4) F. HERMAN, S. SKILMAN, "Atomic Structure Calculations" Prentice Hall, New Jersey, 1973
- (5) T. KAGAWA, Phys. Rev. A, 12, 2245, 1975
- (6) E. CLEMENTI, "Tables of Atomic Functions" IBM J. of -- Res. and Develop. 9, 2, 1965
- (7) J. MC ENNAN, D.J. BOTTO, R.H. PRATT, D. BUNACIU, V. FLO RESCU, Phys, Rev. A, 16, 1768, 1977



9.- RESUMEN Y CONCLUSIONES

El tratamiento teórico de los átomos - de varios electrones es un tema de tan extraordinaria complejidad que todavía no se ha encontrado una ecuación relativista exacta que dé cuenta de todos los fenómenos que posiblemente hay implicados en los átomos, y las ecuaciones aproximadas que se han propuesto hasta ahora son tan complicadas que solamente han podido utilizarse para confirmar la validez de la teoría en el átomo de helio. Es por ambos motivos por lo que es necesario efectuar simplificaciones tajantes que, proporcionando una descripción razonable de los sistemas atómicos, permitan abordar el, de otra forma, intratable problema. Las simplificaciones más importantes utilizadas en el presente trabajo han sido la debida a Pauli, que reduce el sistema de ecuaciones relativista a una única ecuación diferencial de segundo orden, y la del campo central que permite efectuar la separación de variables angulares y radial de esta ecuación.

El tratamiento del problema ha seguido - tres caminos diferentes:

a) transformación, mediante cambios de variables adecuados, de la ecuación de ondas relativista para su integración por el método de Numerov y estudio de las ecuaciones resultantes en relación con su integrabilidad.

b) integración de la ecuación de ondas relativista utilizando un potencial analítico de tres parámetros;

c) la misma integración anterior, pero utilizando el potencial analítico, únicamente como punto de partida, para pasar inmediatamente al potencial creado por la propia distribución de carga que se hace autoconsistente mediante un proceso iterativo del cálculo.

La ecuación de ondas relativista en la aproximación de Pauli es una ecuación lineal homogénea en cuyos coeficientes aparecen como términos más importantes el cuadrado de la derivada primera del potencial, el producto de esta derivada por $\frac{1}{r}$ y la derivada segunda del potencial, que varían con r -- como $\frac{1}{r^4}$, $\frac{1}{r^3}$ y $\frac{1}{r^3}$ respectivamente, lo que implica que el --

origen sea, para esta ecuación, un punto singular en el que, por consiguiente, no se puede efectuar la integración.

Es, además, éste un punto en el no es válida la ecuación de -- ondas relativista en la aproximación de Pauli pues su deducción rigurosa se apoya en la hipótesis de la pequeñez del potencial ($V \ll mc^2$) lo que en el origen es claramente inválido.

Como, por otra parte, tampoco se puede partir de un punto -- distinto del origen, pues en él se desconoce el valor que -- toma la solución, que es una de las condiciones de contorno, resulta que la ecuación de ondas relativista en su forma

diferencial de segundo orden no se puede integrar por los métodos normales de integración de las ecuaciones lineales y es necesario recurrir al método de perturbaciones.

La estructura de la ecuación de ondas - relativista en forma de suma de varios términos permite calcular la influencia de cada uno de ellos considerando que, por ser lo suficientemente pequeños, constituyen una perturbación de primer orden del hamiltoniano principal. Como, además, la ecuación aproximada de Pauli difiere de la ecuación exacta de Dirac en términos del orden de magnitud $\frac{p^2}{m^2 c^2}$ carece de sentido el prolon-

gar los cálculos para conseguir una mayor aproximación cuando ésta ya viene limitada por la propia procedencia de la ecuación.

Una vez decidido el método de perturbaciones como el único válido para la integración de la ecuación de ondas, se ha efectuado esta integración sobre dos ecuaciones que se diferencian en los potenciales incluidos en cada una de ellas: uno el analítico de tres parámetros, diferentes para cada átomo, y otro el autoconsistente definido a través de la propia distribución de carga.

Los términos perturbativos, tal y como aparecen en la ecuación de ondas admiten un difícil - tratamiento numérico, en especial el cálculo de la de rivada primera de la función; es, además, conveniente simplificar al máximo las expresiones que intervienen y, por último, hay que calcular analíticamente los valores que toman los integrandos en cada uno de los límites de integración. Para conseguir todo esto ha sido necesario efectuar las transformaciones y cálculos matemáticos precisos que han conducido a las expresiones que, finalmente, se han utilizado en los programas de cálculo.

La totalmente diferente procedencia de - los potenciales utilizados ha obligado a seguir cálculos numéricos también diferentes. Los términos perturbativos de la ecuación que contenía el potencial analítico se han obtenido siguiendo un camino simultáneo al que - se sigue para la integración de la ecuación no relativista, mientras que los correspondientes a la ecuación que contenía el potencial creado se han obtenido al final - del proceso de cálculo una vez conseguida la autoconsistencia del potencial.

De los resultados de estos cálculos y de su comparación con los valores experimentales conocidos, se deduce que las energías teóricas se aproximan muy bien a las experimentales y son, en general, ligeramente superio

res a ellas (inferiores en valor absoluto), con algunas excepciones en la serie de los lantánidos y elementos próximos en que las energías teóricas de los niveles 5s, 5p y 5d no siguen las fuertes variaciones elemento a elemento que presentan las energías experimentales, quizás porque los potenciales utilizados no logran reproducir en estos átomos con la misma fidelidad el potencial real a que se encuentran sometidos sus electrones. Las energías obtenidas con el potencial autoconsistente son, por otra parte, más próximas a las experimentales que las obtenidas a partir del potencial analítico, pero la falta de aproximación puede venir compensada por la simplicidad que supone el disponer de un potencial definido por una expresión analítica. Las diferencias que existen entre las energías teóricas y las experimentales pueden explicarse, en parte, como debidas al término de interacción espín-órbita pues estas diferencias son similares a las que existen entre las energías debidas a este término y la separación de las correspondientes líneas espectrales que aparecen en los espectros de emisión.

De la comparación con los cálculos efectuados por otros autores se deduce que los resultados obtenidos en el presente trabajo mediante el método de perturbaciones, son similares a los que se han obtenido por aquéllos integrando el sistema lineal de -

dos ecuaciones o mediante el método de perturbaciones y utilizando potenciales autoconsistentes del tipo - Hartree o Hartree-Fock-Slater, aunque sus cálculos - son, generalmente, más complicados, y son bastante - mejores que los obtenidos por los autores que han -- utilizado otros potenciales analíticos u otros méto- dos de cálculo. Por todo ello, se puede concluir que los procedimientos de cálculo y los potenciales utili- zados en este trabajo proporcionan una aproximación muy satisfactoria a las energías de enlace de los -- átomos, al mismo tiempo que aportan una notable sim- plificación sobre los cálculos efectuados con ante- rioridad.

118

119

T A B L A S

=====

120

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

HE 2	1 S			
	E0	-1.1616	-1.1600	
	EM	-.0008	-.0008	
	ED	.0007	.0006	
	E(L=0)	-1.1617	-1.1602	-.919

LI 3	1 S			
	E0	-2.7364	-2.5984	
	EM	-.0035	-.0033	
	ED	.0027	.0027	
	E(L=0)	-2.7372	-2.5990	-2.022
LI 3	2 S			
	E0	-.2665	-.2657	
	EM	-.0002	-.0002	
	ED	.0002	.0001	
	E(L=0)	-.2665	-.2658	-----

BE 4	1 S			
	E0	-4.9840	-4.7336	
	EM	-.0103	-.0098	
	ED	.0079	.0079	
	E(L=0)	-4.9864	-4.7355	-4.081
BE 4	2 S			
	E0	-.3803	-.3787	
	EM	-.0006	-.0006	
	ED	.0004	.0004	
	E(L=0)	-.3805	-.3789	-----

B 5	1 S			
	E0	-7.9797	-7.5873	
	EM	-.0240	-.0229	
	ED	.0184	.0185	
	E(L=0)	-7.9853	-7.5917	-6.913
B 5	2 S			
	E0	-.5306	-.5246	
	EM	-.0014	-.0015	
	ED	.0009	.0010	
	E(L=0)	-.5311	-.5251	-----
B 5	2 P			
	E0	-.2888	-.2947	
	EM	-.0001	-.0001	
	ED	.0000	-.0000	
	ES0	.0000	-.0001	
	E(J=L-1/2)	-.2889	-.2949	-.184
	E(J=L+1/2)	-.2889	-.2947	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

C	6 1 S			
	EO	-11.3978	-11.1369	
	EM	-.0482	-.0465	
	ED	.0370	.0375	
	E(L=0)	-11.4090	-11.1459	-10.443
C	6 2 S			
	EO	-.7103	-.6892	
	EM	-.0029	-.0031	
	ED	.0020	.0021	
	E(L=0)	-.7112	-.6902	-----
C	6 2 P			
	EO	-.3639	-.3648	
	EM	-.0002	-.0002	
	ED	.0000	-.0000	
	ESO	-.0001	-.0002	
	E(J=L-1/2)	-.3643	-.3654	-.258
	E(J=L+1/2)	-.3640	-.3648	-----

N	7 1 S			
	EO	-15.7819	-15.3753	
	EM	-.0876	-.0848	
	ED	.0670	.0683	
	E(L=0)	-15.8025	-15.3918	-14.672
N	7 2 S			
	EO	-.8989	-.8731	
	EM	-.0055	-.0058	
	ED	.0036	.0039	
	E(L=0)	-.9008	-.8750	-----
N	7 2 P			
	EO	-.4388	-.4386	
	EM	-.0004	-.0004	
	ED	.0000	-.0000	
	ESO	-.0003	-.0003	
	E(J=L-1/2)	-.4398	-.4397	-.331
	E(J=L+1/2)	-.4389	-.4388	-----

O	8 1 S			
	EO	-20.7630	-20.3047	
	EM	-.1473	-.1431	
	ED	.1121	.1152	
	E(L=0)	-20.7982	-20.3326	-19.562

122

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

0	8 2 S			
	EO	-1.1101	-1.0767	
	EM	-.0095	-.0099	
	ED	.0063	.0066	
	E(L=0)	-1.1133	-1.0800	-.883
0	8 2 P			
	EO	-.5181	-.5165	
	EM	-.0007	-.0008	
	ED	-.0001	-.0001	
	ESO	-.0005	-.0005	
	E(J=L-1/2)	-.5199	-.5184	-.257
	E(J=L+1/2)	-.5184	-.5169	-----

F	9 1 S			
	EO	-26.5107	-25.9219	
	EM	-.2334	-.2274	
	ED	.1774	.1830	
	E(L=0)	-26.5667	-25.9663	-24.122
F	9 2 S			
	EO	-1.3378	-1.2995	
	EM	-.0154	-.0159	
	ED	.0101	.0105	
	E(L=0)	-1.3431	-1.3049	-1.140
F	9 2 P			
	EO	-.6008	-.5983	
	EM	-.0013	-.0013	
	ED	-.0001	-.0001	
	ESO	-.0009	-.0009	
	E(J=L-1/2)	-.6040	-.6015	-.331
	E(J=L+1/2)	-.6013	-.5988	-----

NE	10 1 S			
	EO	-33.0538	-32.2262	
	EM	-.3530	-.3444	
	ED	.2676	.2770	
	E(L=0)	-33.1390	-32.2936	-31.88
NE	10 2 S			
	EO	-1.5793	-1.5418	
	EM	-.0236	-.0242	
	ED	.0154	.0159	
	E(L=0)	-1.5875	-1.5501	-1.65

123

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

NE 10 2 P			
EO	-.6840	-.6840	
EM	-.0021	-.0021	
ED	-.0002	-.0001	
ES0	-.0014	-.0015	
E(J=L-1/2)	-.6891	-.6892	-.662
E(J=L+1/2)	-.6849	-.6847	-----

NA 11 1 S			
EO	-39.6914	-39.7995	
EM	-.5136	-.5017	
ED	.3914	.4034	
E(L=0)	-39.8136	-39.8978	-39.418
NA 11 2 S			
EO	-2.3067	-2.2546	
EM	-.0347	-.0373	
ED	.0226	.0244	
E(L=0)	-2.3188	-2.2675	-2.316
NA 11 2 P			
EO	-1.1695	-1.2139	
EM	-.0030	-.0036	
ED	-.0004	-.0002	
ES0	-.0020	-.0025	
E(J=L-1/2)	-1.1769	-1.2227	-1.140
E(J=L+1/2)	-1.1709	-1.2152	-----
NA 11 3 S			
EO	-.2075	-.2329	
EM	-.0016	-.0019	
ED	.0011	.0012	
E(L=0)	-.2080	-.2336	-.189

MG 12 1 S			
EO	-47.9688	-48.5828	
EM	-.7241	-.7076	
ED	.5525	.5689	
E(L=0)	-48.1404	-48.7215	-47.986
MG 12 2 S			
EO	-3.1214	-3.4484	
EM	-.0508	-.0556	
ED	.0331	.0362	
E(L=0)	-3.1391	-3.4678	-3.273

124

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

MG 12	2 P			
	EO	-1.7661	-2.2188	
	EM	-.0047	-.0059	
	ED	-.0005	-.0003	
	ESO	-.0032	-.0039	
	E(J=L-1/2)	-1.7777	-2.2328	-1.912
	E(J=L+1/2)	-1.7681	-2.2211	-----
MG 12	3 S			
	EO	-.2845	-.5899	
	EM	-.0034	-.0046	
	ED	.0022	.0029	
	E(L=0)	-.2857	-.5916	-.280

AL 13	1 S			
	EO	-57.2668	-57.5616	
	EM	-.9915	-.9712	
	ED	.7557	.7806	
	E(L=0)	-57.5026	-57.7522	-57.362
AL 13	2 S			
	EO	-4.1444	-4.1175	
	EM	-.0739	-.0799	
	ED	.0479	.0519	
	E(L=0)	-4.1704	-4.1455	-4.339
AL 13	2 P			
	EO	-2.5713	-2.6936	
	EM	-.0074	-.0089	
	ED	-.0008	-.0005	
	ESO	-.0049	-.0059	
	E(J=L-1/2)	-2.5693	-2.7148	-2.720
	E(J=L+1/2)	-2.5746	-2.6971	-2.680
AL 13	3 S			
	EO	-.4032	-.4061	
	EM	-.0065	-.0066	
	ED	.0042	.0042	
	E(L=0)	-.4055	-.4085	-.057
AL 13	3 P			
	EO	-.1934	-.2025	
	EM	-.0004	-.0005	
	ED	.0000	-.0000	
	ESO	-.0002	-.0003	
	E(J=L-1/2)	-.1942	-.2036	-----
	E(J=L+1/2)	-.1936	-.2027	-----

125

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

SI 14	1 S			
	EO	-67.4772	-67.7553	
	EM	-1.3259	-1.3027	
	ED	1.0083	1.0468	
	E(L=0)	-67.7948	-68.0112	-67.621
SI 14	2 S			
	EO	-5.3069	-5.2602	
	EM	-.1056	-.1118	
	ED	.0683	.0724	
	E(L=0)	-5.3442	-5.2996	-5.479
SI 14	2 P			
	EO	-3.5208	-3.6376	
	EM	-.0113	-.0130	
	ED	-.0012	-.0007	
	ESO	-.0074	-.0086	
	E(J=L-1/2)	-3.5481	-3.6685	-3.670
	E(J=L+1/2)	-3.5259	-3.6427	-3.640
SI 14	3 S			
	EO	-.5160	-.5145	
	EM	-.0103	-.0107	
	ED	.0065	.0067	
	E(L=0)	-.5198	-.5185	-.294
SI 14	3 P			
	EO	-.2464	-.2522	
	EM	-.0008	-.0009	
	ED	.0000	-.0000	
	ESO	-.0004	-.0005	
	E(J=L-1/2)	-.2480	-.2541	-.110
	E(J=L+1/2)	-.2468	-.2526	-----

P 15	1 S			
	EO	-78.5633	-78.8000	
	EM	-1.7382	-1.7129	
	ED	1.3175	1.3761	
	E(L=0)	-78.9840	-79.1368	-79.020
P 15	2 S			
	EO	-6.6032	-6.5207	
	EM	-.1469	-.1526	
	ED	.0945	.0986	
	E(L=0)	-6.6556	-6.5747	-6.949

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

P	15 2 P			
	EO	-4.6082	-4.6945	
	EM	-.0166	-.0184	
	ED	-.0017	-.0009	
	ESO	-.0107	-.0120	
	E(J=L-1/2)	-4.6479	-4.7378	-5.000
	E(J=L+1/2)	-4.6158	-4.7018	-4.960
P	15 3 S			
	EO	-.6283	-.6260	
	EM	-.0153	-.0160	
	ED	.0097	.0101	
	E(L=0)	-.6339	-.6319	-.558
P	15 3 P			
	EO	-.2993	-.3037	
	EM	-.0013	-.0014	
	ED	-.0001	-.0001	
	ESO	-.0007	-.0008	
	E(J=L-1/2)	-.3021	-.3067	-.368
	E(J=L+1/2)	-.3000	-.3043	-----

S	16 1 S			
	EO	-90.5857	-90.7001	
	EM	-2.2404	-2.2131	
	ED	1.6908	1.7776	
	E(L=0)	-91.1353	-91.1356	-90.897
S	16 2 S			
	EO	-8.0538	-7.9001	
	EM	-.1997	-.2039	
	ED	.1281	.1314	
	E(L=0)	-8.1254	-7.9726	-8.421
S	16 2 P			
	EO	-5.8565	-5.8669	
	EM	-.0235	-.0253	
	ED	-.0023	-.0012	
	ESO	-.0151	-.0165	
	E(J=L-1/2)	-5.9125	-5.9264	-6.045
	E(J=L+1/2)	-5.8672	-5.8769	-----
S	16 3 S			
	EO	-.7470	-.7411	
	EM	-.0217	-.0229	
	ED	.0136	.0143	
	E(L=0)	-.7551	-.7497	-.588

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

S 16 3 P			
EO	-.3560	-.3572	
EM	-.0020	-.0022	
ED	-.0001	-.0001	
ESO	-.0011	-.0012	
E(J=L-1/2)	-.3603	-.3619	-.294
E(J=L+1/2)	-.3570	-.3583	-----

CL 17 1 S			
EO	-103.4680	-103.4452	
EM	-2.8435	-2.8159	
ED	2.1507	2.2613	
E(L=0)	-104.1608	-103.9998	-103.804
CL 17 2 S			
EO	-9.6105	-9.3985	
EM	-.2653	-.2672	
ED	.1697	.1719	
E(L=0)	-9.7061	-9.4938	-.9.928
CL 17 2 P			
EO	-7.2141	-7.1526	
EM	-.0324	-.0339	
ED	-.0030	-.0015	
ESO	-.0207	-.0220	
E(J=L-1/2)	-7.2909	-7.2320	-7.390
E(J=L+1/2)	-7.2288	-7.1660	-----
CL 17 3 S			
EO	-.8653	-.8612	
EM	-.0298	-.0315	
ED	.0186	.0197	
E(L=0)	-.8765	-.8730	-.662
CL 17 3 P			
EO	-.4118	-.4134	
EM	-.0029	-.0032	
ED	-.0001	-.0001	
ESO	-.0015	-.0017	
E(J=L-1/2)	-.4178	-.4201	-.257
E(J=L+1/2)	-.4133	-.4150	-----

A 18 1 S			
EO	-117.2720	-117.0426	
EM	-3.5628	-3.5343	
ED	2.6805	2.8378	
E(L=0)	-118.1543	-117.7391	-117.776

128

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

A	18 2 S			
	EO	-11.3155	-11.0153	
	EM	-.3462	-.3442	
	ED	.2211	.2210	
	E(L=0)	-11.4406	-11.1385	-11.767
A	18 2 P			
	EO	-8.7278	-8.5536	
	EM	-.0437	-.0446	
	ED	-.0040	-.0019	
	ESO	-.0276	-.0288	
	E(J=L-1/2)	-8.8307	-8.6577	-9.040
	E(J=L+1/2)	-8.7479	-8.5713	-----
A	18 3 S			
	EO	-.9898	-.9861	
	EM	-.0398	-.0422	
	ED	.0248	.0262	
	E(L=0)	-1.0048	-1.0021	-.919
A	18 3 P			
	EO	-.4709	-.4720	
	EM	-.0041	-.0046	
	ED	-.0002	-.0001	
	ESO	-.0021	-.0024	
	E(J=L-1/2)	-.4794	-.4815	-.441
	E(J=L+1/2)	-.4731	-.4743	-----

K	19 1 S			
	EO	-131.4771	-131.8277	
	EM	-4.4271	-4.3827	
	ED	3.3515	3.5190	
	E(L=0)	-132.5527	-132.6914	-132.668
K	19 2 S			
	EO	-12.9430	-13.0476	
	EM	-.4266	-.4375	
	ED	.2717	.2805	
	E(L=0)	-13.0979	-13.2046	-13.862
K	19 2 P			
	EO	-10.0491	-10.3672	
	EM	-.0544	-.0578	
	ED	-.0050	-.0023	
	ESO	-.0344	-.0373	
	E(J=L-1/2)	-10.1773	-10.5019	-10.850
	E(J=L+1/2)	-10.0741	-10.3900	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

K 19	3 S			
	EO	-1.3770	-1.3603	
	EM	-.0559	-.0574	
	ED	.0347	.0356	
	E(L=0)	-1.3982	-1.3821	-1.250
K 19	3 P			
	EO	-.7541	-.7598	
	EM	-.0066	-.0069	
	ED	-.0002	-.0002	
	ESO	-.0034	-.0036	
	E(J=L-1/2)	-.7677	-.7741	-.662
	E(J=L+1/2)	-.7575	-.7633	-----
K 19	4 S			
	EO	-.1603	-.1810	
	EM	-.0031	-.0040	
	ED	.0019	.0025	
	E(L=0)	-.1615	-.1825	-----

CA 20	1 S			
	EO	-146.7444	-147.5065	
	EM	-5.4402	-5.3750	
	ED	4.1056	4.3153	
	E(L=0)	-148.0790	-148.5662	-148.480
CA 20	2 S			
	EO	-14.7324	-15.2505	
	EM	-.5250	-.5486	
	ED	.3338	.3512	
	E(L=0)	-14.9236	-15.4479	-16.106
CA 20	2 P			
	EO	-11.5503	-12.3505	
	EM	-.0679	-.0737	
	ED	-.0064	-.0028	
	ESO	-.0429	-.0473	
	E(J=L-1/2)	-11.7104	-12.5216	-12.870
	E(J=L+1/2)	-11.5817	-12.3797	-12.760
CA 20	3 S			
	EO	-1.8202	-1.7747	
	EM	-.0741	-.0765	
	ED	.0459	.0473	
	E(L=0)	-1.8484	-1.8039	-1.618

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CA 20 3 P			
EO	-1.1030	-1.0863	
EM	-.0095	-.0099	
ED	-.0003	-.0003	
ESO	-.0049	-.0051	
E(J=L-1/2)	-1.1226	-1.1067	-.956
E(J=L+1/2)	-1.1079	-1.0914	-----
CA 20 4 S			
EO	-.1957	-.2246	
EM	-.0055	-.0068	
ED	.0034	.0042	
E(L=0)	-.1978	-.2272	-----

SC 21 1 S			
EO	-163.0608	-163.9294	
EM	-6.6020	-6.5277	
ED	4.9979	5.2400	
E(L=0)	-164.6649	-165.2171	-165.211
SC 21 2 S			
EO	-16.7506	-17.4252	
EM	-.6522	-.6803	
ED	.4136	.4349	
E(L=0)	-16.9892	-17.6706	-18.385
SC 21 2 P			
EO	-13.3289	-14.3063	
EM	-.0861	-.0928	
ED	-.0078	-.0034	
ESO	-.0541	-.0594	
E(J=L-1/2)	-13.5310	-14.5213	-14.960
E(J=L+1/2)	-13.3687	-14.3431	-14.780
SC 21 3 S			
EO	-2.0852	-2.0586	
EM	-.0940	-.0980	
ED	.0581	.0604	
E(L=0)	-2.1211	-2.0962	-1.986
SC 21 3 P			
EO	-1.2876	-1.2892	
EM	-.0124	-.0132	
ED	-.0004	-.0004	
ESO	-.0063	-.0068	
E(J=L-1/2)	-1.3130	-1.3164	-1.177
E(J=L+1/2)	-1.2941	-1.2960	-----

131

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

SC 21	3 D			
	EO	-0.2115	-0.2002	
	EM	-0.0008	-0.0008	
	ED	-0.0001	-0.0001	
	ESO	-0.0002	-0.0002	
	E(J=L-1/2)	-0.2130	-0.2016	-0.257
	E(J=L+1/2)	-0.2120	-0.2006	-----
SC 21	4 S			
	EO	-0.2092	-0.2424	
	EM	-0.0068	-0.0085	
	ED	0.0042	0.0052	
	E(L=0)	-0.2118	-0.2457	-----

TI 22	1 S			
	EO	-180.2260	-181.1998	
	EM	-7.9444	-7.8567	
	ED	6.0055	6.3062	
	E(L=0)	-182.1649	-182.7503	-182.566
TI 22	2 S			
	EO	-18.8504	-19.6940	
	EM	-0.8007	-0.8348	
	ED	0.5071	0.5329	
	E(L=0)	-19.1440	-19.9959	-21.474
TI 22	2 P			
	EO	-15.1858	-16.3561	
	EM	-0.1076	-0.1158	
	ED	-0.0099	-0.0040	
	ESO	-0.0674	-0.0736	
	E(J=L-1/2)	-15.4381	-16.6231	-16.950
	E(J=L+1/2)	-15.2359	-16.4023	-16.700
TI 22	3 S			
	EO	-2.3465	-2.3277	
	EM	-0.1169	-0.1229	
	ED	0.0720	0.0755	
	E(L=0)	-2.3914	-2.3751	-2.169
TI 22	3 P			
	EO	-1.4675	-1.4773	
	EM	-0.0158	-0.0170	
	ED	-0.0005	-0.0004	
	ESO	-0.0080	-0.0087	
	E(J=L-1/2)	-1.4998	-1.5121	-1.250
	E(J=L+1/2)	-1.4758	-1.4860	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TI 22 3 D			
EO	-.2465	-.2375	
EM	-.0012	-.0013	
ED	-.0001	-.0001	
ESO	-.0003	-.0003	
E(J=L-1/2)	-.2487	-.2398	-.110
E(J=L+1/2)	-.2472	-.2383	-----
TI 22 4 S			
EO	-.2207	-.2563	
EM	-.0082	-.0102	
ED	.0050	.0062	
E(L=0)	-.2239	-.2603	-----

V 23 1 S			
EO	-198.2719	-199.3496	
EM	-9.4805	-9.3785	
ED	7.1524	7.5271	
E(L=0)	-200.6000	-201.2010	-200.952
V 23 2 S			
EO	-21.0781	-22.0689	
EM	-.9746	-1.0140	
ED	.6161	.6466	
E(L=0)	-21.4566	-22.4363	-22.982
V 23 2 P			
EO	-17.1924	-18.5096	
EM	-.1331	-.1421	
ED	-.0122	-.0048	
ESO	-.0830	-.0903	
E(J=L-1/2)	-17.5037	-18.8371	-19.210
E(J=L+1/2)	-17.2547	-18.5662	-18.860
V 23 3 S			
EO	-2.6078	-2.5954	
EM	-.1439	-.1517	
ED	.0884	.0930	
E(L=0)	-2.6633	-2.6541	-2.427
V 23 3 P			
EO	-1.6449	-1.6624	
EM	-.0200	-.0216	
ED	-.0006	-.0005	
ESO	-.0100	-.0109	
E(J=L-1/2)	-1.6855	-1.7063	-1.397
E(J=L+1/2)	-1.6555	-1.6736	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

V 23 3 0			
EO	-0.2731	-0.2702	
EM	-0.0016	-0.0018	
ED	-0.0001	-0.0001	
ESO	-0.0004	-0.0005	
E(J=L-1/2)	-0.2760	-0.2736	-0.073
E(J=L+1/2)	-0.2740	-0.2711	-----
V 23 4 S			
EO	-0.2293	-0.2687	
EM	-0.0096	-0.0120	
ED	0.0059	0.0073	
E(L=0)	-0.2330	-0.2734	-----

CR 24 1 S			
EO	-217.3065	-218.1976	
EM	-11.2154	-11.1145	
ED	8.4734	8.9192	
E(L=0)	-220.0485	-220.3929	-220.219
CR 24 2 S			
EO	-23.5631	-24.4135	
EM	-1.1850	-1.2210	
ED	0.7480	0.7775	
E(L=0)	-24.0001	-24.8570	-25.556
CR 24 2 P			
EO	-19.4552	-20.6348	
EM	-0.1646	-0.1731	
ED	-0.0142	-0.0056	
ESO	-0.1021	-0.1097	
E(J=L-1/2)	-19.8382	-21.0329	-21.470
E(J=L+1/2)	-19.5319	-20.7038	-----
CR 24 3 S			
EO	-2.7329	-2.7382	
EM	-0.1746	-0.1833	
ED	0.1070	0.1121	
E(L=0)	-2.8005	-2.8094	-2.721
CR 24 3 P			
EO	-1.6898	-1.7251	
EM	-0.0246	-0.0265	
ED	-0.0007	-0.0006	
ESO	-0.0122	-0.0133	
E(J=L-1/2)	-1.7395	-1.7788	-1.581
E(J=L+1/2)	-1.7029	-1.7389	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

CR 24 3 D			
EO	-.1836	-.2029	
EM	-.0019	-.0021	
ED	-.0002	-.0001	
ESO	-.0005	-.0006	
E(J=L-1/2)	-.1872	-.2069	-.073
E(J=L+1/2)	-.1847	-.2039	-----
CR 24 4 S			
EO	-.2180	-.2582	
EM	-.0092	-.0120	
ED	.0056	.0073	
E(L=0)	-.2216	-.2629	-----

MN 25 1 S			
EO	-236.9399	-238.1764	
EM	-13.2134	-13.0787	
ED	9.9731	10.4947	
E(L=0)	-240.1802	-240.7604	-240.443
MN 25 2 S			
EO	-25.8688	-27.1572	
EM	-1.4024	-1.4578	
ED	.8842	.9273	
E(L=0)	-26.3870	-27.6877	-28.277
MN 25 2 P			
EO	-21.4649	-23.1512	
EM	-.1970	-.2088	
ED	-.0173	-.0065	
ESO	-.1221	-.1320	
E(J=L-1/2)	-21.9234	-23.6305	-23.770
E(J=L+1/2)	-21.5571	-23.2345	-----
MN 25 3 S			
EO	-3.1704	-3.1416	
EM	-.2103	-.2227	
ED	.1287	.1359	
E(L=0)	-3.2520	-3.2284	-3.088
MN 25 3 P			
EO	-2.0318	-2.0379	
EM	-.0303	-.0330	
ED	-.0009	-.0008	
ESO	-.0150	-.0165	
E(J=L-1/2)	-2.0930	-2.1047	-1.801
E(J=L+1/2)	-2.0480	-2.0552	-----

135

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

MN 25	3 D			
	EO	-.3381	-.3276	
	EM	-.0028	-.0033	
	ED	-.0002	-.0002	
	ESO	-.0007	-.0009	
	E(J=L-1/2)	-.3432	-.3338	-.147
	E(J=L+1/2)	-.3397	-.3293	-----
MN 25	4 S			
	EO	-.2479	-.2909	
	EM	-.0131	-.0161	
	ED	.0080	.0098	
	E(L=0)	-.2530	-.2972	-----

FE 26	1 S			
	EO	-257.5391	-258.8955	
	EM	-15.4421	-15.2935	
	ED	11.6842	12.2709	
	E(L=0)	-261.2970	-261.9181	-265.586
FE 26	2 S			
	EO	-28.4300	-29.8733	
	EM	-1.6637	-1.7276	
	ED	1.0472	1.0977	
	E(L=0)	-29.0465	-30.5032	-31.108
FE 26	2 P			
	EO	-23.7760	-25.6457	
	EM	-.2365	-.2498	
	ED	-.0209	-.0075	
	ESO	-.1461	-.1575	
	E(J=L-1/2)	-24.3256	-26.2180	-26.340
	E(J=L+1/2)	-23.8873	-25.7455	-----
FE 26	3 S			
	EO	-3.4422	-3.4238	
	EM	-.2506	-.2657	
	ED	.1530	.1619	
	E(L=0)	-3.5398	-3.5276	-3.493
FE 26	3 P			
	EO	-2.2123	-2.2311	
	EM	-.0366	-.0400	
	ED	-.0010	-.0009	
	ESO	-.0181	-.0199	
	E(J=L-1/2)	-2.2861	-2.3118	-2.059
	E(J=L+1/2)	-2.2318	-2.2521	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTA

FE 26 3 D			
EO	-.3507	-.3538	
EM	-.0035	-.0042	
ED	-.0003	-.0002	
ESO	-.0009	-.0011	
E (J=L-1/2)	-.3572	-.3615	-.221
E (J=L+1/2)	-.3527	-.3560	-----
FE 26 4 S			
EO	-.2530	-.3013	
EM	-.0147	-.0184	
ED	.0090	.0111	
E (L=0)	-.2587	-.3086	-----

CO 27 1 S			
EO	--279.0196	-280.4817	
EM	-17.9521	-17.7785	
ED	13.5450	14.2638	
E (L=0)	-283.4267	-283.9964	-283.465
CO 27 2 S			
EO	-31.0968	-32.7105	
EM	-1.9584	-2.0335	
ED	1.2317	1.2908	
E (L=0)	-31.8235	-33.4532	-34.051
CO 27 2 P			
EO	-26.1867	-28.2556	
EM	-.2815	-.2967	
ED	-.0240	-.0086	
ESO	-.1735	-.1866	
E (J=L-1/2)	-26.8392	-28.9341	-29.19
E (J=L+1/2)	-26.3187	-28.3743	-28.60
CO 27 3 S			
EO	-3.7417	-3.7132	
EM	-.2964	-.3144	
ED	.1807	.1912	
E (L=0)	-3.8574	-3.8364	-3.71
CO 27 3 P			
EO	-2.4170	-2.4289	
EM	-.0440	-.0481	
ED	-.0012	-.0011	
ESO	-.0216	-.0237	
E (J=L-1/2)	-2.5054	-2.5255	-2.20
E (J=L+1/2)	-2.4406	-2.4544	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CO 27 3 D			
EO	-0.3779	-0.3786	
EM	-0.0044	-0.0053	
ED	-0.0004	-0.0003	
ESO	-0.0011	-0.0014	
E(J=L-1/2)	-0.3860	-0.3884	-0.110
E(J=L+1/2)	-0.3805	-0.3814	-----
CO 27 4 S			
EO	-0.2603	-0.3114	
EM	-0.0166	-0.0209	
ED	0.0100	0.0126	
E(L=0)	-0.2669	-0.3197	-----

NI 28 1 S			
EO	-301.3488	-302.9332	
EM	-20.7490	-20.5551	
ED	15.6965	16.4903	
E(L=0)	-306.4013	-306.9980	-306.410
NI 28 2 S			
EO	-33.8616	-35.6635	
EM	-2.2909	-2.3781	
ED	1.4383	1.5081	
E(L=0)	-34.7142	-36.5335	-37.065
NI 28 2 P			
EO	-28.6919	-30.9823	
EM	-0.3326	-0.3499	
ED	-0.0289	-0.0098	
ESO	-0.2045	-0.2196	
E(J=L-1/2)	-29.4624	-31.7812	-32.060
E(J=L+1/2)	-28.8489	-31.1224	-31.440
NI 28 3 S			
EO	-4.0428	-4.0103	
EM	-0.3477	-0.3692	
ED	0.2117	0.2242	
E(L=0)	-4.1788	-4.1553	-4.118
NI 28 3 P			
EO	-2.6208	-2.6319	
EM	-0.0522	-0.0572	
ED	-0.0014	-0.0012	
ESO	-0.0255	-0.0281	
E(J=L-1/2)	-2.7254	-2.7465	-2.500
E(J=L+1/2)	-2.6489	-2.6622	-----

138

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTA

NI 28	3 0			
	EO	-.3984	-.4024	
	EM	-.0053	-.0067	
	ED	-.0004	-.0003	
	ESO	-.0014	-.0018	
	E(J=L-1/2)	-.4083	-.4148	-.14
	E(J=L+1/2)	-.4013	-.4058	-----
NI 28	4 S			
	EO	-.2666	-.3212	
	EM	-.0187	-.0235	
	ED	.0113	.0142	
	E(L=D)	-.2740	-.3305	-----

CU 29	1 S			
	EO	-324.8267	-326.0847	
	EM	-23.8248	-23.6461	
	ED	18.1508	18.9687	
	E(L=D)	-330.5007	-330.7621	-330.16
CU 29	2 S			
	EO	-37.1131	-38.5525	
	EM	-2.6891	-2.7652	
	ED	1.6882	1.7520	
	E(L=D)	-38.1140	-39.5657	-40.30
CU 29	2 P			
	EO	-31.7614	-33.6447	
	EM	-.3943	-.4100	
	ED	-.0324	-.0111	
	ESO	-.2415	-.2568	
	E(J=L-1/2)	-32.6711	-34.5794	-34.97
	E(J=L+1/2)	-31.9466	-33.8090	-34.23
CU 29	3 S			
	EO	-4.1688	-4.1493	
	EM	-.4091	-.4283	
	ED	.2484	.2597	
	E(L=D)	-4.3295	-4.3179	-4.41
CU 29	3 P			
	EO	-2.6523	-2.6773	
	EM	-.0624	-.0670	
	ED	-.0016	-.0014	
	ESO	-.0302	-.0328	
	E(J=L-1/2)	-2.7767	-2.8113	-2.72
	E(J=L+1/2)	-2.6861	-2.7129	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CU 29	3 D			
	EO	-.2604	-.2858	
	EM	-.0064	-.0075	
	ED	-.0006	-.0004	
	ESO	-.0017	-.0020	
	E(J=L-1/2)	-.2725	-.2997	-.074
	E(J=L+1/2)	-.2640	-.2897	-----
CU 29	4 S			
	EO	-.2478	-.3004	
	EM	-.0166	-.0224	
	ED	.0100	.0135	
	E(L=0)	-.2544	-.3093	-----

ZN 30	1 S			
	EO	-348.6373	-350.4346	
	EM	-27.3228	-27.0717	
	ED	20.6489	21.7155	
	E(L=0)	-355.3112	-355.7908	-355.168
ZN 30	2 S			
	EO	-39.7642	-41.9284	
	EM	-3.0807	-3.1969	
	ED	1.9293	2.0239	
	E(L=0)	-40.9156	-42.1014	-43.504
ZN 30	2 P			
	EO	-34.0681	-36.7879	
	EM	-.4553	-.4772	
	ED	-.0392	-.0325	
	ESO	-.2787	-.2984	
	E(J=L-1/2)	-35.1200	-37.8744	-38.400
	E(J=L+1/2)	-34.2839	-36.9792	-37.500
ZN 30	3 S			
	EO	-4.6888	-4.6294	
	EM	-.4704	-.4993	
	ED	.2855	.3023	
	E(L=0)	-4.8737	-4.8264	-5.038
ZN 30	3 P			
	EO	-3.0626	-3.0543	
	EM	-.0723	-.0793	
	ED	-.0019	-.0016	
	ESO	-.0350	-.0386	
	E(J=L-1/2)	-3.2068	-3.2124	-3.199
	E(J=L+1/2)	-3.1018	-3.0966	-----

140

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

ZN 30	3 D			
	EO	-.4496	-.4476	
	EM	-.0079	-.0100	
	ED	-.0007	-.0005	
	ESO	-.0021	-.0027	
	E(J=L-1/2)	-.4645	-.4662	-.331
	E(J=L+1/2)	-.4540	-.4527	-----
ZN 30	4 S			
	EO	-.2795	-.3400	
	EM	-.0233	-.0295	
	ED	.0140	.0177	
	E(L=0)	-.2888	-.3518	-----

GA 31	1 S			
	EO	-375.1645	-375.7876	
	EM	-31.0615	-30.8575	
	ED	23.6279	24.7506	
	E(L=0)	-382.5986	-381.8945	-381.201
GA 31	2 S			
	EO	-46.6020	-45.5699	
	EM	-3.4716	-3.6766	
	ED	2.1752	2.3259	
	E(L=0)	-47.8984	-46.9206	-47.728
GA 31	2 P			
	EO	-40.4076	-40.1932	
	EM	-.5095	-.5524	
	ED	-.0434	-.0140	
	ESO	-.3126	-.3448	
	E(J=L-1/2)	-41.5857	-41.4492	-42.020
	E(J=L+1/2)	-40.6479	-40.4148	-41.040
GA 31	3 S			
	EO	-8.5144	-5.2591	
	EM	-.6290	-.5799	
	ED	.3819	.3506	
	E(L=0)	-8.7615	-5.4884	-5.810
GA 31	3 P			
	EO	-6.7062	-3.5769	
	EM	-.1029	-.0935	
	ED	-.0024	-.0018	
	ESO	-.0496	-.0454	
	E(J=L-1/2)	-6.9107	-3.7630	-3.900
	E(J=L+1/2)	-6.7619	-3.6268	-3.790

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

GA 31 3 D			
EO	-3.8207	-0.7457	
EM	-0.0161	-0.0130	
ED	-0.0011	-0.0006	
ESO	-0.0040	-0.0035	
E(J=L-1/2)	-3.8499	-0.7698	-0.662
E(J=L+1/2)	-3.8299	-0.7523	-----
GA 31 4 S			
EO	-1.1851	-0.4346	
EM	-0.1205	-0.0422	
ED	0.0724	0.0254	
E(L=0)	-1.2332	-0.4514	-----
GA 31 4 P			
EO	-0.7010	-0.2021	
EM	-0.0173	-0.0035	
ED	-0.0004	-0.0001	
ESO	-0.0079	-0.0016	
E(J=L-1/2)	-0.7345	-0.2089	-0.037
E(J=L+1/2)	-0.7108	-0.2041	-----

GE 32 1 S			
EO	-399.4873	-402.0751	
EM	-35.4518	-35.0260	
ED	27.0395	28.0930	
E(L=0)	-407.6996	-409.0081	-408.301
GE 32 2 S			
EO	-45.6135	-49.4042	
EM	-4.0054	-4.2083	
ED	2.5026	2.6602	
E(L=0)	-47.1163	-50.9523	-51.957
GE 32 2 P			
EO	-39.2603	-43.7925	
EM	-0.6030	-0.6361	
ED	-0.0535	-0.0157	
ESO	-0.3685	-0.3964	
E(J=L-1/2)	-40.6538	-45.2371	-45.930
E(J=L+1/2)	-39.5483	-44.0479	-44.750
GE 32 3 S			
EO	-6.1188	-5.9525	
EM	-0.6076	-0.5718	
ED	0.3683	0.4057	
E(L=0)	-6.3581	-6.2186	-6.655

142

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

GE 32	3 P			
	EO	-4.2652	-4.1597	
	EM	-0.0947	-0.1099	
	ED	-0.0023	-0.0021	
	ESO	-0.0459	-0.0531	
	E(J=L-1/2)	-4.4540	-4.3779	-4.740
	E(J=L+1/2)	-4.3163	-4.2186	-4.490
GE 32	3 D			
	EO	-1.1690	-1.0964	
	EM	-0.0107	-0.0166	
	ED	-0.0009	-0.0008	
	ESO	-0.0028	-0.0044	
	E(J=L-1/2)	-1.1890	-1.1270	-1.066
	E(J=L+1/2)	-1.1750	-1.1050	-----
GE 32	4 S			
	EO	-0.4667	-0.5245	
	EM	-0.0583	-0.0577	
	ED	0.0350	0.0346	
	E(L=0)	-0.4900	-0.5476	-----
GE 32	4 P			
	EO	-0.1915	-0.2422	
	EM	-0.0041	-0.0054	
	ED	-0.0001	-0.0001	
	ESO	-0.0019	-0.0025	
	E(J=L-1/2)	-0.1995	-0.2527	-0.111
	E(J=L+1/2)	-0.1938	-0.2452	-----

AS 33	1 S			
	EO	-426.5296	-429.2967	
	EM	-40.0762	-39.6049	
	ED	30.4375	31.7639	
	E(L=0)	-436.1683	-437.1377	-436.357
AS 33	2 S			
	EO	-49.3331	-54.4332	
	EM	-4.5658	-4.7964	
	ED	2.8472	3.0301	
	E(L=0)	-51.0517	-56.1995	-56.149
AS 33	2 P			
	EO	-42.6931	-47.5786	
	EM	-0.6920	-0.7289	
	ED	-0.0598	-0.0175	
	ESO	-0.4222	-0.4536	
	E(J=L-1/2)	-44.2893	-49.2322	-49.900
	E(J=L+1/2)	-43.0227	-47.8714	-48.600

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

S 33	3 S			
	EO	-6.8869	-6.6947	
	EM	-.7020	-.7759	
	ED	.4250	.4680	
	E(L=0)	-7.1639	-7.0026	-7.501
S 33	3 P			
	EO	-4.9120	-4.7885	
	EM	-.1110	-.1288	
	ED	-.0026	-.0024	
	ESO	-.0536	-.0621	
	E(J=L-1/2)	-5.1328	-5.0439	-5.410
	E(J=L+1/2)	-4.9720	-4.8576	-5.190
S 33	3 D			
	EO	-1.5646	-1.4919	
	EM	-.0133	-.0207	
	ED	-.0011	-.0009	
	ESO	-.0035	-.0055	
	E(J=L-1/2)	-1.5895	-1.5300	-1.507
	E(J=L+1/2)	-1.5720	-1.5025	-----
S 33	4 S			
	EO	-.5720	-.6145	
	EM	-.0782	-.0753	
	ED	.0470	.0450	
	E(L=0)	-.6032	-.6448	-----
S 33	4 P			
	EO	-.2368	-.2639	
	EM	-.0067	-.0078	
	ED	-.0001	-.0001	
	ESO	-.0031	-.0036	
	E(J=L-1/2)	-.2498	-.2990	-.110
	E(J=L+1/2)	-.2405	-.2682	-----

E 34	1 S			
	EO	-454.5158	-457.4334	
	EM	-45.1276	-44.6184	
	ED	34.5428	35.7829	
	E(L=0)	-465.1006	-466.2689	-465.440
E 34	2 S			
	EO	-53.3365	-57.6412	
	EM	-5.1858	-5.4434	
	ED	3.2329	3.4367	
	E(L=0)	-55.2894	-59.6479	-60.310

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

SE 34 2 P			
EO	-46.4131	-51.5431	
EM	-.7907	-.8314	
ED	-.0666	-.0195	
ESO	-.4818	-.5167	
E(J=L-1/2)	-48.2340	-53.4274	-54.270
E(J=L+1/2)	-46.7886	-51.8773	-52.800
SE 34 3 S			
EO	-7.6909	-7.4935	
EM	-.8116	-.8930	
ED	.4908	.5380	
E(L=0)	-8.0117	-7.8485	-8.531
SE 34 3 P			
EO	-5.5914	-5.4707	
EM	-.1302	-.1503	
ED	-.0031	-.0027	
ESO	-.0626	-.0722	
E(J=L-1/2)	-5.8499	-5.7681	-6.180
E(J=L+1/2)	-5.6621	-5.5515	-5.960
SE 34 3 D			
EO	-1.9890	-1.9372	
EM	-.0166	-.0256	
ED	-.0013	-.0011	
ESO	-.0043	-.0067	
E(J=L-1/2)	-2.0198	-1.9840	-2.096
E(J=L+1/2)	-1.9983	-1.9505	-----
SE 34 4 S			
EO	-.6785	-.7056	
EM	-.0995	-.0958	
ED	.0596	.0572	
E(L=0)	-.7184	-.7442	-----
SE 34 4 P			
EO	-.2877	-.3264	
EM	-.0097	-.0106	
ED	-.0002	-.0002	
ESO	-.0045	-.0049	
E(J=L-1/2)	-.3066	-.3470	-.221
E(J=L+1/2)	-.2931	-.3323	-----

BR 35 1 S			
EO	-483.4061	-486.4803	
EM	-50.6648	-50.0952	
ED	38.3610	40.1735	
E(L=0)	-495.7099	-496.4020	-495.448

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

35	2 S			
	EO	-57.5195	-62.0290	
	EM	-5.8687	-6.1532	
	ED	3.6577	3.8223	
	E(L=0)	-59.7305	-64.2999	-65.525
35	2 P			
	EO	-50.7132	-55.6871	
	EM	-.8996	-.9444	
	ED	-.0793	-.0216	
	ESO	-.5471	-.5862	
	E(J=L-1/2)	-52.3864	-57.8255	-58.700
	E(J=L+1/2)	-50.7451	-56.0669	-56.900
35	3 S			
	EO	-8.5114	-8.3409	
	EM	-.9347	-1.0243	
	ED	.5645	.6164	
	E(L=0)	-8.8816	-8.7488	-9.450
35	3 P			
	EO	-6.2853	-6.1985	
	EM	-.1520	-.1745	
	ED	-.0035	-.0031	
	ESO	-.0728	-.0835	
	E(J=L-1/2)	-6.5864	-6.5431	-6.900
	E(J=L+1/2)	-6.3680	-6.2926	-6.700
35	3 D			
	EO	-2.4261	-2.4269	
	EM	-.0204	-.0312	
	ED	-.0016	-.0012	
	ESO	-.0053	-.0081	
	E(J=L-1/2)	-2.4640	-2.4837	-2.600
	E(J=L+1/2)	-2.4375	-2.4432	-2.500
35	4 S			
	EO	-.7848	-.7979	
	EM	-.1226	-.1193	
	ED	.0733	.0711	
	E(L=0)	-.8341	-.8461	-.993
35	4 P			
	EO	-.3420	-.3698	
	EM	-.0130	-.0138	
	ED	-.0002	-.0002	
	ESO	-.0060	-.0064	
	E(J=L-1/2)	-.3672	-.3966	-.184
	E(J=L+1/2)	-.3492	-.3774	-----

146

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

KR 36	1 S			
	EO	-513.2295	-516.4762	
	EM	-56.6528	-56.0576	
	ED	43.2221	44.9534	
	E(L=0)	-526.6602	-527.5804	-526.776
KR 36	2 S			
	EO	-62.0558	-66.6010	
	EM	-6.6214	-6.9319	
	ED	4.1194	4.3714	
	E(L=0)	-64.5578	-69.1615	-70.636
KR 36	2 P			
	EO	-54.5648	-60.0102	
	EM	-1.0192	-1.0685	
	ED	-.0878	-.0238	
	ESO	-.6190	-.6624	
	E(J=L-1/2)	-56.9098	-62.4273	-63.500
	E(J=L+1/2)	-55.0528	-60.4401	-61.600
KR 36	3 S			
	EO	-9.4040	-9.2340	
	EM	-1.0797	-1.1706	
	ED	.6513	.7038	
	E(L=0)	-9.8324	-9.7008	-10.627
KR 36	3 P			
	EO	-7.0480	-6.9709	
	EM	-.1783	-.2019	
	ED	-.0040	-.0035	
	ESO	-.0080	-.0063	
	E(J=L-1/2)	-7.4003	-7.3689	-8.200
	E(J=L+1/2)	-7.1453	-7.0800	-7.900
KR 36	3 D			
	EO	-2.9323	-2.9584	
	EM	-.0256	-.0376	
	ED	-.0020	-.0015	
	ESO	-.0066	-.0098	
	E(J=L-1/2)	-2.9797	-3.0269	-3.273
	E(J=L+1/2)	-2.9467	-2.9779	-----
KR 36	4 S			
	EO	-.8827	-.8917	
	EM	-.1474	-.1458	
	ED	.0881	.0868	
	E(L=0)	-.9420	-.9507	-.882

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

36 4 P			
EO	-0.3915	-0.4146	
EM	-0.0166	-0.0177	
ED	-0.0003	-0.0033	
ESO	-0.0076	-0.0081	
E(J=L-1/2)	-0.4236	-0.4488	-0.404
E(J=L+1/2)	-0.4008	-0.4245	----

37 1 S			
EO	-544.0771	-547.7694	
EM	-63.2293	-62.5610	
ED	48.3636	50.1786	
E(L=0)	-558.9428	-560.1518	-558.914
37 2 S			
EO	-65.2114	-71.5940	
EM	-7.4330	-7.7839	
ED	4.6213	4.9071	
E(L=0)	-69.0231	-74.4708	-75.930
B 37 2 P			
EO	-58.4331	-64.7509	
EM	-1.1524	-1.2048	
ED	-0.0967	-0.0263	
ESO	-0.6990	-0.7485	
E(J=L-1/2)	-61.0802	-67.4790	-68.500
E(J=L+1/2)	-58.9832	-65.2335	-66.400
B 37 3 S			
EO	-10.4250	-10.4002	
EM	-1.2051	-1.3341	
ED	0.7264	0.8014	
E(L=0)	-10.9037	-10.9329	-11.840
B 37 3 P			
EO	-7.9407	-8.0126	
EM	-0.2000	-0.2326	
ED	-0.0045	-0.0039	
ESO	-0.0951	-0.1110	
E(J=L-1/2)	-8.3354	-8.4711	-9.120
E(J=L+1/2)	-8.0501	-8.1381	-8.790
B 37 3 D			
EO	-3.5429	-3.7571	
EM	-0.0287	-0.0449	
ED	-0.0023	-0.0018	
ESO	-0.0074	-0.0117	
E(J=L-1/2)	-3.5961	-3.8389	-4.120
E(J=L+1/2)	-3.5591	-3.7034	-4.080

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

RB 37 4 S			
EO	-1.1697	-1.1824	
EM	-.1913	-.1815	
ED	.1142	.1080	
E(L=0)	-1.2468	-1.2559	-1.434
RB 37 4 P			
EO	-.5887	-.6376	
EM	-.0250	-.0243	
ED	-.0004	-.0004	
ESO	-.0114	-.0111	
E(J=L-1/2)	-.6369	-.6845	-.550
E(J=L+1/2)	-.6027	-.6512	-.520
RB 37 5 S			
EO	-.1423	-.1665	
EM	-.0094	-.0137	
ED	.0056	.0081	
E(L=0)	-.1461	-.1721	----

SR 38 1 S			
EO	-575.8999	-579.8494	
EM	-70.3551	-69.5883	
ED	53.9515	55.8113	
E(L=0)	-592.3035	-593.6264	-592.191
SR 38 2 S			
EO	-70.5723	-76.7728	
EM	-8.3239	-8.7095	
ED	5.1724	5.4876	
E(L=0)	-73.7238	-79.9947	-81.848
SR 38 2 P			
EO	-62.5168	-69.6788	
EM	-1.2991	-1.3535	
ED	-.1152	-.0288	
ESO	-.7867	-.8400	
E(J=L-1/2)	-65.5045	-72.7411	-73.800
E(J=L+1/2)	-63.1444	-70.2211	-71.300
SR 38 3 S			
EO	-11.4784	-11.6321	
EM	-1.3407	-1.5147	
ED	.8074	.9090	
E(L=0)	-12.0117	-12.2378	-13.164

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

R 38	3 P			
	EO	-8.8639	-9.1201	
	EM	-.2236	-.2669	
	ED	-.0048	-.0044	
	ESO	-.1062	-.1270	
	E(J=L-1/2)	-9.3047	-9.6454	-10.290
	E(J=L+1/2)	-8.9861	-9.2644	-9.800
R 38	3 D			
	EO	-4.1780	-4.6204	
	EM	-.0321	-.0532	
	ED	-.0027	-.0020	
	ESO	-.0083	-.0138	
	E(J=L-1/2)	-4.2377	-4.7170	-4.960
	E(J=L+1/2)	-4.1962	-4.6480	-4.290
R 38	4 S			
	EO	-1.5119	-1.4911	
	EM	-.2383	-.2229	
	ED	.1421	.1324	
	E(L=0)	-1.6081	-1.5816	-1.397
R 38	4 P			
	EO	-.8491	-.8787	
	EM	-.0341	-.0320	
	ED	-.0006	-.0005	
	ESO	-.0155	-.0145	
	E(J=L-1/2)	-.9148	-.9407	-.735
	E(J=L+1/2)	-.8683	-.8967	-----
R 38	5 S			
	EO	-.1625	-.2027	
	EM	-.0138	-.0213	
	ED	.0082	.0127	
	E(L=0)	-.1681	-.2113	-----

39	1 S			
	EO	-508.6649	-612.8076	
	EM	-78.0707	-77.1991	
	ED	59.5760	61.9151	
	E(L=0)	-527.1596	-628.0916	-626.535
39	2 S			
	EO	-75.4546	-82.0665	
	EM	-9.2969	-9.7163	
	ED	5.7757	6.1189	
	E(L=0)	-78.9758	-85.6639	-87.257

150

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

Y	39 2 P			
	EO	-67.1184	-74.7207	
	EM	-1.4582	-1.5156	
	ED	-.1263	-.0316	
	ESO	-.8819	-.9396	
	E(J=L-1/2)	-70.4667	-78.1471	-79.200
	E(J=L+1/2)	-67.8210	-75.3283	-76.500
Y	39 3 S			
	EO	-12.6061	-12.8466	
	EM	-1.5118	-1.7139	
	ED	.9092	1.0277	
	E(L=0)	-13.2087	-13.5328	-14.524
Y	39 3 P			
	EO	-9.8559	-10.2079	
	EM	-.2544	-.3050	
	ED	-.0054	-.0049	
	ESO	-.1204	-.1446	
	E(J=L-1/2)	-10.3565	-10.8070	-11.500
	E(J=L+1/2)	-9.9953	-10.3732	-11.070
Y	39 3 D			
	EO	-4.8836	-5.4632	
	EM	-.0377	-.0625	
	ED	-.0031	-.0023	
	ESO	-.0097	-.0161	
	E(J=L-1/2)	-4.9535	-5.5763	-5.880
	E(J=L+1/2)	-4.9050	-5.4958	-5.810
Y	39 4 S			
	EO	-1.8061	-1.7341	
	EM	-.2851	-.2687	
	ED	.1697	.1594	
	E(L=0)	-1.9215	-1.8434	-1.691
Y	39 4 P			
	EO	-1.0759	-1.0582	
	EM	-.0428	-.0402	
	ED	-.0007	-.0006	
	ESO	-.0193	-.0182	
	E(J=L-1/2)	-1.1580	-1.1354	-.956
	E(J=L+1/2)	-1.1001	-1.0808	-----
Y	39 4 D			
	EO	-.1085	-.1664	
	EM	-.0022	-.0028	
	ED	-.0001	-.0001	
	ESO	-.0005	-.0006	
	E(J=L-1/2)	-.1123	-.1711	-.111
	E(J=L+1/2)	-.1098	-.1681	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

39 5 S			
EO	-.1828	-.2217	
EM	-.0191	-.0264	
ED	.0114	.0156	
E(L=0)	-.1905	-.2325	----

R 40 1 S			
EO	-542.3278	-646.6656	
EM	-86.3320	-85.4153	
ED	65.9488	68.5022	
E(L=0)	-662.7110	-663.6787	-661.798
R 40 2 S			
EO	-80.7177	-87.5148	
EM	-10.3574	-10.8092	
ED	6.4212	6.8043	
E(L=0)	-84.6539	-91.5197	-93.103
R 40 2 P			
EO	-72.0941	-79.9165	
EM	-1.6300	-1.6921	
ED	-.1378	-.0345	
ESO	-.9847	-1.0480	
E(J=L-1/2)	-75.8313	-83.7391	-84.830
E(J=L+1/2)	-72.8772	-80.5951	-81.800
R 40 3 S			
EO	-13.7847	-14.0799	
EM	-1.7154	-1.9329	
ED	1.0307	1.1580	
E(L=0)	-14.4694	-14.8548	-15.848
R 40 3 P			
EO	-10.8955	-11.3135	
EM	-.2921	-.3471	
ED	-.0061	-.0054	
ESO	-.1377	-.1642	
E(J=L-1/2)	-11.4691	-11.9944	-12.700
E(J=L+1/2)	-11.0560	-11.5018	-12.170
R 40 3 D			
EO	-5.6406	-6.3212	
EM	-.0453	-.0730	
ED	-.0037	-.0026	
ESO	-.0116	-.0182	
E(J=L-1/2)	-5.7244	-6.4532	-6.730
E(J=L+1/2)	-5.6664	-6.2592	-6.620

152

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

ZR 40 4 S			
EO	-2.0410	-1.9557	
EM	-.3333	-.3189	
ED	.1983	.1889	
E(L=0)	-2.1760	-2.0857	-1.912
ZR 40 4 P			
EO	-1.2513	-1.2186	
EM	-.0514	-.0492	
ED	-.0008	-.0007	
ESO	-.0230	-.0221	
E(J=L-1/2)	-1.3495	-1.3127	-1.066
E(J=L+1/2)	-1.2805	-1.2464	-----
ZR 40 4 D			
EO	-.1529	-.2042	
EM	-.0038	-.0043	
ED	-.0002	-.0001	
ESO	-.0009	-.0010	
E(J=L-1/2)	-.1596	-.2116	-.111
E(J=L+1/2)	-.1551	-.2066	-----
ZR 40 5 S			
EO	-.1973	-.2347	
EM	-.0236	-.0307	
ED	.0140	.0182	
E(L=0)	-.2069	-.2472	-----

NB 41 1 S			
EO	-676.7771	-681.7234	
EM	-95.4364	-94.3020	
ED	72.4923	75.6552	
E(L=0)	-699.7212	-700.3702	-698.128
NB 41 2 S			
EO	-86.2803	-93.1014	
EM	-11.5192	-11.9976	
ED	7.1328	7.5512	
E(L=0)	-90.6667	-97.5478	-99.207
NB 41 2 P			
EO	-77.3605	-85.2481	
EM	-1.8132	-1.8843	
ED	-.1505	-.0376	
ESO	-1.0915	-1.1737	
E(J=L-1/2)	-81.5072	-89.5174	-90.600
E(J=L+1/2)	-78.2327	-85.9963	-87.200

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

41 3 S			
EO	-14.9407	-15.2778	
EM	-1.9578	-2.1742	
ED	1.1738	1.3018	
E(L=0)	-15.7247	-16.1502	-17.245
B 41 3 P			
EO	-11.9113	-12.3817	
EM	-.3371	-.3937	
ED	-.0069	-.0060	
ESO	-.1579	-.1870	
E(J=L-1/2)	-12.5711	-13.1554	-13.900
E(J=L+1/2)	-12.0974	-12.5944	-9.700
B 41 3 D			
EO	-6.3868	-7.1368	
EM	-.0553	-.0847	
ED	-.0044	-.0030	
ESO	-.0140	-.0219	
E(J=L-1/2)	-6.4885	-7.2902	-7.650
E(J=L+1/2)	-6.4185	-7.1807	-7.560
B 41 4 S			
EO	-2.1623	-2.0914	
EM	-.3804	-.3726	
ED	.2256	.2205	
E(L=0)	-2.3171	-2.2435	-2.132
NB 41 4 P			
EO	-1.3236	-1.2966	
EM	-.0592	-.0586	
ED	-.0009	-.0008	
ESO	-.0263	-.0264	
E(J=L-1/2)	-1.4363	-1.4088	-1.250
E(J=L+1/2)	-1.3574	-1.3296	-----
NB 41 4 D			
EO	-.1497	-.1889	
EM	-.0045	-.0051	
ED	-.0002	-.0001	
ESO	-.0010	-.0012	
E(J=L-1/2)	-.1574	-.1977	-.147
E(J=L+1/2)	-.1524	-.1917	-----
NB 41 5 S			
EO	-.1978	-.2289	
EM	-.0246	-.0306	
ED	.0146	.0181	
E(L=0)	-.2078	-.2414	-----

154

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

MO 42	1 S			
	EO	-712.3065	-716.9892	
	EM	-104.7400	-103.7847	
	ED	80.1154	83.2250	
	E(L=0)	-736.9311	-737.5489	-735.413
MO 42	2 S			
	EO	-92.1811	-98.8004	
	EM	-12.7388	-13.2679	
	ED	7.8990	8.3442	
	E(L=0)	-97.0209	-103.7241	-105.385
MO 42	2 P			
	EO	-82.9635	-90.6983	
	EM	-2.0145	-2.0911	
	ED	-.1637	-.0409	
	ESO	-1.2143	-1.2927	
	E(J=L-1/2)	-87.5703	-95.4157	-96.500
	E(J=L+1/2)	-83.9274	-91.5376	-92.660
MO 42	3 S			
	EO	-16.2803	-16.5499	
	EM	-2.2213	-2.4346	
	ED	1.3320	1.4561	
	E(L=0)	-17.1696	-17.5284	-18.569
MO 42	3 P			
	EO	-13.1105	-13.5245	
	EM	-.3880	-.4444	
	ED	-.0078	-.0067	
	ESO	-.1814	-.2091	
	E(J=L-1/2)	-13.8691	-14.3938	-15.070
	E(J=L+1/2)	-13.3249	-13.7665	-14.450
MO 42	3 D			
	EO	-7.3206	-8.0328	
	EM	-.0668	-.0976	
	ED	-.0051	-.0034	
	ESO	-.0169	-.0250	
	E(J=L-1/2)	-7.4432	-8.2088	-8.460
	E(J=L+1/2)	-7.3587	-8.0838	-8.350
MO 42	4 S			
	EO	-2.3599	-2.2866	
	EM	-.4380	-.4321	
	ED	.2598	.2554	
	E(L=0)	-2.5381	-2.4633	-2.279

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

42 4 P			
EO	-1.4629	-1.4330	
EM	-.0696	-.0694	
ED	-.0011	-.0009	
ESO	-.0308	-.0309	
E(J=L-1/2)	-1.5952	-1.5651	-1.287
E(J=L+1/2)	-1.5028	-1.4724	-----
0 42 4 D			
EO	-.1781	-.2136	
EM	-.0062	-.0068	
ED	-.0002	-.0002	
ESO	-.0014	-.0015	
E(J=L-1/2)	-.1887	-.2251	-.074
E(J=L+1/2)	-.1817	-.2176	-----
0 42 5 S			
EO	-.2046	-.2352	
EM	-.0275	-.0338	
ED	.0162	.0199	
E(L=0)	-.2159	-.2491	-----

TC 43 1 S			
EO	-748.6525	-754.1271	
EM	-115.2881	-114.0663	
ED	87.2699	91.5061	
E(L=0)	-776.6707	-776.6873	-773.802
TC 43 2 S			
EO	-98.1539	-104.9167	
EM	-14.0962	-14.6528	
ED	8.7189	9.2146	
E(L=0)	-103.5312	-110.3549	-111.893
TC 43 2 P			
EO	-88.6374	-96.5528	
EM	-2.2290	-2.3159	
ED	-.1778	-.0444	
ESO	-1.3391	-1.4400	
E(J=L-1/2)	-93.7224	-101.7931	-102.700
E(J=L+1/2)	-89.7051	-97.4731	-98.400
TC 43 3 S			
EO	-17.5916	-17.9959	
EM	-2.5111	-2.7225	
ED	1.5027	1.6275	
E(L=0)	-18.6000	-19.0909	-20.003

156

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

TC 43	3 P			
	EO	-14.2818	-14.8387	
	EM	-.4426	-.5006	
	ED	-.0088	-.0073	
	ESO	-.2056	-.2365	
	E(J=L-1/2)	-15.1444	-15.8196	-16.360
	E(J=L+1/2)	-14.5276	-15.1101	-15.630
TC 43	3 D			
	EO	-8.2298	-9.0916	
	EM	-.0794	-.1120	
	ED	-.0058	-.0038	
	ESO	-.0200	-.0288	
	E(J=L-1/2)	-8.3750	-9.2938	-9.450
	E(J=L+1/2)	-8.2750	-9.1498	-9.300
TC 43	4 S			
	EO	-2.5353	-2.5836	
	EM	-.4992	-.4998	
	ED	.2954	.2951	
	E(L=0)	-2.7391	-2.7883	-2.500
TC 43	4 P			
	EO	-1.5828	-1.6670	
	EM	-.0804	-.0821	
	ED	-.0012	-.0011	
	ESO	-.0353	-.0367	
	E(J=L-1/2)	-1.7350	-1.8236	-1.434
	E(J=L+1/2)	-1.6291	-1.7135	-----
TC 43	4 D			
	EO	-.1980	-.3105	
	EM	-.0079	-.0098	
	ED	-.0003	-.0003	
	ESO	-.0017	-.0022	
	E(J=L-1/2)	-.2113	-.3272	-.073
	E(J=L+1/2)	-.2028	-.3162	-----
TC 43	5 S			
	EO	-.2091	-.2623	
	EM	-.0299	-.0428	
	ED	.0176	.0252	
	E(L=0)	-.2214	-.2799	-----

RU 44	1 S			
	EO	-786.0253	-791.1283	
	EM	-125.9955	-125.0014	
	ED	95.1446	100.2372	
	E(L=0)	-815.8762	-815.8925	-813.256

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

U 44	2 S			
	EO	-104.3577	-110.8424	
	EM	-15.5166	-16.1276	
	ED	9.6124	10.1349	
	E(L=0)	-110.2619	-116.8351	-118.598
U 44	2 P			
	EO	-94.5470	-102.2200	
	EM	-2.4648	-2.5569	
	ED	-.2025	-.0480	
	ESO	-1.4826	-1.5780	
	E(J=L-1/2)	-100.1795	-107.9809	-109.100
	E(J=L+1/2)	-95.7317	-103.2469	-104.100
U 44	3 S			
	EO	-18.9697	-19.2370	
	EM	-2.8207	-3.0306	
	ED	1.6888	1.8098	
	E(L=0)	-20.1016	-20.4578	-21.510
U 44	3 P			
	EO	-15.5203	-15.9488	
	EM	-.5033	-.5611	
	ED	-.0097	-.0081	
	ESO	-.2337	-.2628	
	E(J=L-1/2)	-16.5007	-17.0436	-17.800
	E(J=L+1/2)	-15.7996	-16.2552	-16.900
U 44	3 D			
	EO	-9.2088	-9.9501	
	EM	-.0937	-.1277	
	ED	-.0070	-.0042	
	ESO	-.0235	-.0325	
	E(J=L-1/2)	-9.3800	-10.1795	-10.440
	E(J=L+1/2)	-9.2625	-10.0170	-10.250
U 44	4 S			
	EO	-2.7262	-2.6763	
	EM	-.5659	-.5681	
	ED	.3348	.3350	
	E(L=0)	-2.9573	-2.9094	-2.750
U 44	4 P			
	EO	-1.7164	-1.7047	
	EM	-.0926	-.0943	
	ED	-.0014	-.0012	
	ESO	-.0406	-.0417	
	E(J=L-1/2)	-1.8916	-1.8836	-1.580
	E(J=L+1/2)	-1.7698	-1.7585	-----

158

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

RU 44 4 D			
EO	-0.2256	-0.2634	
EM	-0.0099	-0.0110	
ED	-0.0003	-0.0003	
ESO	-0.0021	-0.0024	
E(J=L-1/2)	-0.2421	-0.2819	-0.073
E(J=L+1/2)	-0.2316	-0.2699	-----
RU 44 5 S			
EO	-0.2142	-0.2460	
EM	-0.0326	-0.0399	
ED	0.0192	0.0235	
E(L=0)	-0.2276	-0.2624	-----

RH 45 1 S			
EO	-924.3052	-829.5237	
EM	-137.7464	-136.7320	
ED	105.1795	109.6372	
E(L=0)	-856.8721	-856.6185	-853.814
RH 45 2 S			
EO	-110.7076	-117.1131	
EM	-17.0667	-17.7179	
ED	10.5834	11.1296	
E(L=0)	-117.1909	-123.7014	-125.461
RH 45 2 P			
EO	-100.6039	-108.2399	
EM	-2.7176	-2.8173	
ED	-0.2190	-0.0519	
ESO	-1.6332	-1.7373	
E(J=L-1/2)	-106.8069	-114.5837	-115.680
E(J=L+1/2)	-101.9073	-109.3718	-110.500
RH 45 3 S			
EO	-20.3659	-20.6381	
EM	-3.1599	-3.3670	
ED	1.8900	2.0092	
E(L=0)	-21.6358	-21.9959	-23.055
RH 45 3 P			
EO	-16.7770	-17.2166	
EM	-0.5691	-0.6275	
ED	-0.0109	-0.0088	
ESO	-0.2632	-0.2932	
E(J=L-1/2)	-17.8834	-18.4393	-19.160
E(J=L+1/2)	-17.0938	-17.5597	-18.230

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

45	3 D			
	EO	-10.2074	-10.9621	
	EM	-.1095	-.1451	
	ED	-.0079	-.0047	
	ESO	-.0273	-.0369	
	E(J=L-1/2)	-10.4067	-11.2226	-11.470
	E(J=L+1/2)	-10.2702	-11.0381	-11.280
45	4 S			
	EO	-2.9133	-2.8706	
	EM	-.6384	-.6451	
	ED	.3772	.3800	
	E(L=0)	-3.1745	-3.1357	-2.978
45	4 P			
	EO	-1.8466	-1.8398	
	EM	-.1058	-.1086	
	ED	-.0016	-.0014	
	ESO	-.0461	-.0478	
	E(J=L-1/2)	-2.0462	-2.0454	-1.760
	E(J=L+1/2)	-1.9079	-1.9020	-----
45	4 D			
	EO	-.2516	-.2294	
	EM	-.0122	-.0135	
	ED	-.0004	-.0004	
	ESO	-.0026	-.0029	
	E(J=L-1/2)	-.2720	-.3110	-.111
	E(J=L+1/2)	-.2590	-.2965	-----
45	5 S			
	EO	-.2185	-.2508	
	EM	-.0353	-.0430	
	ED	.0208	.0253	
	E(L=0)	-.2330	-.2685	-----

46	1 S			
	EO	-963.5614	-868.7609	
	EM	-150.3076	-149.3066	
	ED	114.3372	119.7194	
	E(L=0)	-899.5318	-898.3481	-895.365
46	2 S			
	EO	-117.5329	-123.4474	
	EM	-18.7397	-19.4245	
	ED	11.6233	12.1970	
	E(L=0)	-124.6493	-130.6749	-132.556

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

PD 46 2 P			
EO	-107.1413	-114.3147	
EM	-2.9886	-3.0972	
ED	-.2356	-.0559	
ESO	-1.7945	-1.9084	
E(J=L-1/2)	-113.9545	-121.2846	-122.500
E(J=L+1/2)	-108.5710	-115.5594	-116.700
PD 46 3 S			
EO	-21.7964	-21.9742	
EM	-3.5554	-3.7311	
ED	2.1247	2.2249	
E(L=0)	-23.2271	-23.4804	-24.636
PD 46 3 P			
EO	-18.0738	-18.4180	
EM	-.6474	-.6996	
ED	-.0121	-.0096	
ESO	-.2982	-.3262	
E(J=L-1/2)	-19.3297	-19.7796	-20.550
E(J=L+1/2)	-18.4351	-18.8010	-19.520
PD 46 3 D			
EO	-11.2841	-11.9054	
EM	-.1298	-.1641	
ED	-.0093	-.0052	
ESO	-.0322	-.0416	
E(J=L-1/2)	-11.5198	-12.1995	-12.500
E(J=L+1/2)	-11.3588	-11.9915	-12.320
PD 46 4 S			
EO	-2.9943	-2.9645	
EM	-.7107	-.7265	
ED	.4194	.4275	
E(L=0)	-3.2856	-3.2635	-3.162
PD 46 4 P			
EO	-1.8774	-1.8767	
EM	-.1185	-.1234	
ED	-.0017	-.0015	
ESO	-.0514	-.0542	
E(J=L-1/2)	-2.1004	-2.1100	-1.875
E(J=L+1/2)	-1.9462	-1.9474	-----
PD 46 4 D			
EO	-.2121	-.2346	
EM	-.0132	-.0151	
ED	-.0004	-.0004	
ESO	-.0028	-.0032	
E(J=L-1/2)	-.2341	-.2597	-.0136
E(J=L+1/2)	-.2201	-.2437	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

47 1 S			
EO	-903.6462	-909.6534	
EM	-164.1853	-162.7506	
ED	124.0047	130.5472	
E(L=0)	-943.8268	-941.8568	-938.166
47 2 S			
EO	-123.7384	-130.2641	
EM	-20.5555	-21.2647	
ED	12.6980	13.3524	
E(L=0)	-131.5959	-138.1764	-139.949
47 2 P			
EO	-113.0602	-120.8668	
EM	-3.2816	-3.3984	
ED	-.2572	-.0603	
ESO	-1.9637	-2.1065	
E(J=L-1/2)	-120.5264	-128.5385	-129.600
E(J=L+1/2)	-114.6353	-122.2190	-123.200
47 3 S			
EO	-23.1753	-23.5784	
EM	-3.9139	-4.1279	
ED	2.3319	2.4606	
E(L=0)	-24.7573	-25.2457	-26.364
47 3 P			
EO	-19.3058	-19.8856	
EM	-.7150	-.7785	
ED	-.0133	-.0105	
ESO	-.3278	-.3646	
E(J=L-1/2)	-20.6897	-21.4038	-22.130
E(J=L+1/2)	-19.7063	-20.3100	-20.990
47 3 D			
EO	-12.2070	-13.1112	
EM	-.1452	-.1850	
ED	-.0103	-.0057	
ESO	-.0359	-.0471	
E(J=L-1/2)	-12.4702	-13.4432	-13.700
E(J=L+1/2)	-12.2907	-13.2077	-13.500
47 4 S			
EO	-3.2915	-3.2645	
EM	-.7991	-.8189	
ED	.4705	.4816	
E(L=0)	-3.6201	-3.6018	-3.493

162

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTA

AG 47 4 P			
EO	-2.1110	-2.1142	
EM	-.1351	-.1411	
ED	-.0019	-.0017	
ESO	-.0583	-.0621	
E(J=L-1/2)	-2.3646	-2.3812	-2.270
E(J=L+1/2)	-2.1897	-2.1949	-2.050
AG 47 4 D			
EO	-.3076	-.3401	
EM	-.0174	-.0196	
ED	-.0006	-.0005	
ESO	-.0036	-.0042	
E(J=L-1/2)	-.3364	-.3728	-.110
E(J=L+1/2)	-.3184	-.3518	-----
AG 47 5 S			
EO	-.2271	-.2598	
EM	-.0412	-.0494	
ED	.0242	.0289	
E(L=0)	-.2441	-.2803	-----

CD 48 1 S			
EO	-944.6692	-950.4718	
EM	-178.1616	-176.9621	
ED	135.9652	141.8843	
E(L=0)	-986.8656	-985.5496	-982.217
CD 48 2 S			
EO	-130.0056	-137.1194	
EM	-22.4285	-23.2067	
ED	13.8899	14.5618	
E(L=0)	-138.5442	-145.7643	-147.744
CD 48 2 P			
EO	-119.0413	-127.4637	
EM	-3.6019	-3.7187	
ED	-.2883	-.0647	
ESO	-2.1585	-2.2881	
E(J=L-1/2)	-127.2485	-135.8233	-137.040
E(J=L+1/2)	-120.7730	-128.9590	-130.000
CD 48 3 S			
EO	-24.5976	-25.2282	
EM	-4.2746	-4.5488	
ED	2.5487	2.7088	
E(L=0)	-26.3235	-27.0682	-28.313

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

48 3 P			
EO	-20.5765	-21.4008	
EM	-.7858	-.8627	
ED	-.0145	-.0114	
ESO	-.3605	-.4006	
E(J=L-1/2)	-22.0978	-23.0761	-23.970
E(J=L+1/2)	-21.0163	-21.8743	-22.700
48 3 D			
EO	-13.1476	-14.3675	
EM	-.1608	-.2076	
ED	-.0113	-.0063	
ESO	-.0398	-.0524	
E(J=L-1/2)	-13.4391	-14.7386	-15.110
E(J=L+1/2)	-13.2401	-14.4766	-14.800
48 4 S			
EO	-3.6516	-3.6020	
EM	-.8948	-.9194	
ED	.5272	.5400	
E(L=0)	-4.0192	-3.9814	-3.971
48 4 P			
EO	-2.4044	-2.3887	
EM	-.1541	-.1607	
ED	-.0021	-.0019	
ESO	-.0664	-.0701	
E(J=L-1/2)	-2.6934	-2.6915	-2.460
E(J=L+1/2)	-2.4942	-2.4812	-----
48 4 D			
EO	-.4541	-.4814	
EM	-.0224	-.0247	
ED	-.0007	-.0006	
ESO	-.0046	-.0052	
E(J=L-1/2)	-.4910	-.5223	-.330
E(J=L+1/2)	-.4680	-.4963	-----
48 5 S			
EO	-.2489	-.2944	
EM	-.0524	-.0635	
ED	.0307	.0372	
E(L=0)	-.2706	-.3207	-----

49 1 S			
EO	-385.6641	-992.8299	
EM	-194.1057	-192.1759	
ED	147.3144	154.0910	
E(L=0)	-1033.4554	-1030.9148	-1027.372

164

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

IN 49 2 S			
EO	-135.6768	-144.3654	
EM	-24.5190	-25.2883	
ED	15.1334	15.8640	
E(L=0)	-145.0624	-153.7897	-155.834
IN 49 2 P			
EO	-124.4655	-134.4428	
EM	-3.9505	-4.0601	
ED	-.3171	-.0695	
ESO	-2.3592	-2.4977	
E(J=L-1/2)	-133.4515	-143.5678	-144.800
E(J=L+1/2)	-126.3739	-136.0747	-137.100
IN 49 3 S			
EO	-25.7879	-27.0667	
EM	-4.5973	-5.0118	
ED	2.7352	2.9828	
E(L=0)	-27.6500	-29.0957	-30.370
IN 49 3 P			
EO	-21.6025	-23.1024	
EM	-.8439	-.9554	
ED	-.0154	-.0124	
ESO	-.3859	-.4429	
E(J=L-1/2)	-23.2336	-24.9560	-25.810
E(J=L+1/2)	-22.0759	-23.6273	-24.400
IN 49 3 D			
EO	-13.7528	-15.8106	
EM	-.1711	-.2325	
ED	-.0124	-.0069	
ESO	-.0425	-.0587	
E(J=L-1/2)	-14.0638	-16.2261	-16.580
E(J=L+1/2)	-13.8513	-15.9326	-16.290
IN 49 4 S			
EO	-4.1483	-4.0048	
EM	-.9926	-1.0302	
ED	.5838	.6045	
E(L=0)	-4.5571	-4.4305	-4.486
IN 49 4 P			
EO	-2.8342	-2.7275	
EM	-.1733	-.1823	
ED	-.0023	-.0021	
ESO	-.0745	-.0792	
E(J=L-1/2)	-3.1588	-3.0703	-2.831
E(J=L+1/2)	-2.9353	-2.8327	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

49 4 D			
EO	-0.7253	-0.6892	
EM	-0.0279	-0.0303	
ED	-0.0009	-0.0007	
ESO	-0.0058	-0.0064	
E(J=L-1/2)	-0.7715	-0.7394	-0.588
E(J=L+1/2)	-0.7425	-0.7074	-----
49 5 S			
EO	-0.3011	-0.3702	
EM	-0.0780	-0.0877	
ED	0.0458	0.0513	
E(L=0)	-0.3333	-0.4066	-----
49 5 P			
EO	-0.1410	-0.1843	
EM	-0.0050	-0.0086	
ED	-0.0001	-0.0001	
ESO	-0.0021	-0.0037	
E(J=L-1/2)	-0.1503	-0.2004	-0.030
E(J=L+1/2)	-0.1440	-0.1893	-----

N 50 1 S			
EO	-1029.6614	-1036.1363	
EM	-209.9165	-208.3439	
ED	160.1911	167.0430	
E(L=0)	-1079.3868	-1077.4372	-1073.703
N 50 2 S			
EO	-142.5556	-151.7529	
EM	-26.6517	-27.5184	
ED	16.4740	17.2570	
E(L=0)	-152.7333	-162.0143	-164.180
N 50 2 P			
EO	-131.0505	-141.5701	
EM	-4.3155	-4.4259	
ED	-0.3499	-0.3744	
ESO	-2.5809	-2.7221	
E(J=L-1/2)	-140.8777	-151.5186	-152.800
E(J=L+1/2)	-133.1350	-143.2523	-144.500
N 50 3 S			
EO	-27.5171	-28.9184	
EM	-5.0174	-5.4965	
ED	2.9869	2.2692	
E(L=0)	-29.5476	-31.1457	-32.505

166

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

SN 50 3 P			
EO	-23.1754	-24.8152	
EM	-.9270	-1.0529	
ED	-.0169	-.0134	
ESO	-.4243	-.4871	
E(J=L-1/2)	-24.9679	-26.8557	-27.800
E(J=L+1/2)	-23.6950	-25.3944	-25.900
SN 50 3 D			
EO	-14.9931	-17.2582	
EM	-.1900	-.2592	
ED	-.0136	-.0076	
ESO	-.0471	-.0652	
E(J=L-1/2)	-15.3380	-17.7206	-18.160
E(J=L+1/2)	-15.1025	-17.3946	-17.800
SN 50 4 S			
EO	-4.6692	-4.4970	
EM	-1.1143	-1.1518	
ED	.6557	.6753	
E(L=0)	-5.1278	-4.9735	-5.037
SN 50 4 P			
EO	-3.2808	-3.1514	
EM	-.1980	-.2070	
ED	-.0026	-.0024	
ESO	-.0852	-.0897	
E(J=L-1/2)	-3.6518	-3.5402	-3.272
E(J=L+1/2)	-3.3962	-3.2711	-----
SN 50 4 D			
EO	-1.0118	-.9641	
EM	-.0345	-.0375	
ED	-.0011	-.0009	
ESO	-.0072	-.0079	
E(J=L-1/2)	-1.0690	-1.0262	-.880
E(J=L+1/2)	-1.0330	-.9867	-----
SN 50 5 S			
EO	-.3562	-.4393	
EM	-.1050	-.1138	
ED	.0616	.0665	
E(L=0)	-.3996	-.4866	-.030
SN 50 5 P			
EO	-.1595	-.2182	
EM	-.0077	-.0124	
ED	-.0001	-.0001	
ESO	-.0033	-.0053	
E(J=L-1/2)	-.1739	-.2413	-.030
E(J=L+1/2)	-.1640	-.2254	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

B 51 1 S			
EO	-1073.6238	-1080.3958	
EM	-227.1946	-225.5018	
ED	173.6376	180.7955	
E(L=0)	-1127.1808	-1125.1021	-1121.174
B 51 2 S			
EO	-149.4974	-159.3831	
EM	-28.9702	-29.8855	
ED	17.9045	18.7357	
E(L=0)	-160.5631	-170.5329	-172.780
B 51 2 P			
EO	-137.7120	-148.9319	
EM	-4.7058	-4.8214	
ED	-0.3740	-0.0797	
ES0	-2.8122	-2.9608	
E(J=L-1/2)	-148.4162	-159.7546	-161.090
E(J=L+1/2)	-139.9796	-150.8722	-151.900
SB 51 3 S			
EO	-29.2063	-30.8699	
EM	-5.4627	-6.0231	
ED	3.2506	3.5803	
E(L=0)	-31.4184	-33.3127	-34.711
SB 51 3 P			
EO	-24.7058	-26.6278	
EM	-1.0134	-1.1593	
ED	-0.0186	-0.0145	
ES0	-0.4629	-0.5354	
E(J=L-1/2)	-26.6636	-28.8724	-29.800
E(J=L+1/2)	-25.2749	-27.2662	-28.160
SB 51 3 D			
EO	-16.1753	-18.8086	
EM	-0.2097	-0.2884	
ED	-0.0158	-0.0082	
ES0	-0.0519	-0.0725	
E(J=L-1/2)	-16.5565	-19.3227	-19.750
E(J=L+1/2)	-16.2970	-18.9602	-19.300
SB 51 4 S			
EO	-5.1989	-4.9818	
EM	-1.2405	-1.2849	
ED	0.7295	0.7526	
E(L=0)	-5.7099	-5.5141	-5.588

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

SB 51 4 P			
EO	-3.7389	-3.5677	
EM	-.2234	-.2339	
ED	-.0029	-.0027	
ESO	-.0958	-.1010	
E(J=L-1/2)	-4.1568	-4.0063	-3.640
E(J=L+1/2)	-3.8694	-3.7033	-----
SB 51 4 D			
EO	-1.3192	-1.2383	
EM	-.0411	-.0451	
ED	-.0012	-.0010	
ESO	-.0085	-.0094	
E(J=L-1/2)	-1.3870	-1.3126	-1.176
E(J=L+1/2)	-1.3445	-1.2656	-----
SB 51 5 S			
EO	-.4256	-.5082	
EM	-.1380	-.1432	
ED	.0809	.0836	
E(L=0)	-.4827	-.5678	-.257
SB 51 5 P			
EO	-.1867	-.2521	
EM	-.0119	-.0169	
ED	-.0001	-.0002	
ESO	-.0050	-.0072	
E(J=L-1/2)	-.2087	-.2836	-.070
E(J=L+1/2)	-.1937	-.2620	-----

TE 52 1 S			
EO	-1118.5682	-1125.5754	
EM	-245.5182	-243.6783	
ED	187.9176	195.3577	
E(L=0)	-1176.1688	-1173.8960	-1169.820
TE 52 2 S			
EO	-156.6239	-167.2117	
EM	-31.4441	-32.4010	
ED	19.4310	20.3060	
E(L=0)	-168.6370	-179.3067	-181.610
TE 52 2 P			
EO	-144.5659	-156.4947	
EM	-5.1234	-5.2380	
ED	-.3989	-.0851	
ESO	-3.0594	-3.2146	
E(J=L-1/2)	-156.2070	-168.2470	-169.580
E(J=L+1/2)	-147.0288	-158.6032	-159.600

169

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TE 52	3 S			
	EO	-30.9134	-32.8908	
	EM	-5.9405	-6.5870	
	ED	3.5354	3.9132	
	E(L=0)	-33.3185	-35.5646	-36.990
TE 52	3 P			
	EO	-26.2528	-28.5088	
	EM	-1.1066	-1.2735	
	ED	-0.0201	-0.2156	
	ESO	-0.5046	-0.5871	
	E(J=L-1/2)	-28.3887	-30.9721	-32.000
	E(J=L+1/2)	-26.8749	-29.2108	-30.110
TE 52	3 D			
	EO	-17.3695	-20.4267	
	EM	-0.2313	-0.3200	
	ED	-0.0172	-0.0090	
	ESO	-0.0572	-0.0803	
	E(J=L-1/2)	-17.7896	-20.9966	-21.400
	E(J=L+1/2)	-17.5036	-20.5951	-21.030
TE 52	4 S			
	EO	-5.7314	-5.4897	
	EM	-1.3729	-1.4299	
	ED	0.8066	0.8369	
	E(L=0)	-6.2977	-6.0827	-6.177
TE 52	4 P			
	EO	-4.2015	-4.0060	
	EM	-0.2499	-0.2635	
	ED	-0.0032	-0.0029	
	ESO	-0.1070	-0.1135	
	E(J=L-1/2)	-4.6686	-4.4994	-4.045
	E(J=L+1/2)	-4.3476	-4.1589	-----
TE 52	4 D			
	EO	-1.6368	-1.5339	
	EM	-0.0480	-0.0535	
	ED	-0.0014	-0.0012	
	ESO	-0.0099	-0.0111	
	E(J=L-1/2)	-1.7159	-1.6219	-1.471
	E(J=L+1/2)	-1.6664	-1.5664	-----
TE 52	5 S			
	EO	-0.5064	-0.5767	
	EM	-0.1752	-0.1757	
	ED	0.1026	0.1025	
	E(L=0)	-0.5790	-0.6499	-0.441

170

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

TE 52	5 P			
	EO	-.2234	-.2862	
	EM	-.0174	-.0219	
	ED	-.0002	-.0002	
	ESO	-.0074	-.0093	
	E(J=L-1/2)	-.2558	-.3269	-.070
	E(J=L+1/2)	-.2336	-.2990	----

I 53	1 S			
	EO	-1164.5264	-1171.7587	
	EM	-265.0128	-262.9763	
	ED	202.2174	210.8333	
	E(L=0)	-1227.3218	-1223.9017	-1219.682
I 53	2 S			
	EO	-164.0837	-175.2549	
	EM	-34.0753	-35.0753	
	ED	21.0545	21.9758	
	E(L=0)	-177.1045	-188.3544	-190.766
I 53	2 P			
	EO	-151.7526	-164.2698	
	EM	-5.5676	-5.6814	
	ED	-.4249	-.0908	
	ESO	-3.3222	-3.4848	
	E(J=L-1/2)	-164.3895	-177.0116	-178.400
	E(J=L+1/2)	-154.4229	-166.5572	-169.600
I 53	3 S			
	EO	-32.7291	-34.9812	
	EM	-6.4640	-7.1909	
	ED	3.8447	4.2697	
	E(L=0)	-35.3484	-37.9024	-39.418
I 53	3 P			
	EO	-27.9088	-30.4591	
	EM	-1.2098	-1.3963	
	ED	-.0217	-.0168	
	ESO	-.5507	-.6426	
	E(J=L-1/2)	-30.2417	-33.1574	-34.230
	E(J=L+1/2)	-28.5896	-31.2296	-32.200
I 53	3 D			
	EO	-18.6804	-22.1124	
	EM	-.2559	-.3542	
	ED	-.0189	-.0098	
	ESO	-.0633	-.0887	
	E(J=L-1/2)	-19.1451	-22.7425	-23.200
	E(J=L+1/2)	-18.8286	-22.2990	-22.800

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

53	4 S			
	EO	-6.2746	-6.0191	
	EM	-1.5168	-1.5875	
	ED	.8905	.9283	
	E(L=0)	-6.9009	-6.6783	-6.839
I	53 4 P			
	EO	-4.6738	-4.4645	
	EM	-.2789	-.2959	
	ED	-.0035	-.0032	
	ESO	-.1190	-.1271	
	E(J=L-1/2)	-5.1942	-5.0178	-4.523
	E(J=L+1/2)	-4.8372	-4.6365	-----
I	53 4 D			
	EO	-1.9654	-1.8492	
	EM	-.0555	-.0628	
	ED	-.0016	-.0014	
	ESO	-.0114	-.0129	
	E(J=L-1/2)	-2.0567	-1.9521	-1.838
	E(J=L+1/2)	-1.9997	-1.8876	-----
I	53 5 S			
	EO	-.5936	-.6453	
	EM	-.2150	-.2114	
	ED	.1257	.1232	
	E(L=0)	-.6829	-.7335	-.515
I	53 5 P			
	EO	-.2678	-.3207	
	EM	-.0240	-.0275	
	ED	-.0003	-.0003	
	ESO	-.0101	-.0117	
	E(J=L-1/2)	-.3123	-.3719	-.111
	E(J=L+1/2)	-.2820	-.3368	-----

XE	54 1 S			
	EO	-1211.4051	-1219.5205	
	EM	-286.1760	-283.4691	
	ED	217.5108	227.3445	
	E(L=0)	-1280.0703	-1275.6451	-1271.830
XE	54 2 S			
	EO	-171.9751	-183.6206	
	EM	-36.9188	-37.9328	
	ED	22.7374	23.7680	
	E(L=0)	-186.1565	-197.7854	-200.511

172

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

XE 54	2 P			
	EO	-159.3533	-172.3614	
	EM	-6.0299	-6.1544	
	ED	-4.4755	-4.0969	
	ESO	-3.5868	-3.7982	
	E(J=L-1/2)	-173.0323	-186.2091	-187.680
	E(J=L+1/2)	-162.2719	-174.8145	-175.800
XE 54	3 S			
	EO	-34.7340	-37.1716	
	EM	-7.0600	-7.8410	
	ED	4.1866	4.6545	
	E(L=0)	-37.6074	-40.3581	-42.102
XE 54	3 P			
	EO	-29.7557	-32.5070	
	EM	-1.3258	-1.5287	
	ED	-0.0232	-0.0181	
	ESO	-6.0007	-6.7071	
	E(J=L-1/2)	-32.3061	-35.4680	-36.730
	E(J=L+1/2)	-30.5040	-33.3467	-34.450
XE 54	3 D			
	EO	-20.2042	-23.8902	
	EM	-2.2849	-3.3910	
	ED	-0.0209	-0.0106	
	ESO	-0.0703	-0.0984	
	E(J=L-1/2)	-20.7209	-24.5870	-25.180
	E(J=L+1/2)	-20.3694	-24.0950	-24.700
XE 54	4 S			
	EO	-6.8273	-6.5789	
	EM	-1.6811	-1.7597	
	ED	.9849	1.0285	
	E(L=0)	-7.5235	-7.3101	-7.648
XE 54	4 P			
	EO	-5.1531	-4.9518	
	EM	-0.3117	-0.3316	
	ED	-0.0038	-0.0036	
	ESO	-0.1323	-0.1430	
	E(J=L-1/2)	-5.7332	-5.5730	-5.405
	E(J=L+1/2)	-5.3363	-5.1440	-----
XE 54	4 D			
	EO	-2.2992	-2.1902	
	EM	-0.0642	-0.0732	
	ED	-0.0018	-0.0015	
	ESO	-0.0132	-0.0151	
	E(J=L-1/2)	-2.4048	-2.3102	-2.316
	E(J=L+1/2)	-2.3388	-2.2347	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

XE 54 5 S			
EO	-.6767	-.7154	
EM	-.2554	-.2507	
ED	.1490	.1460	
E(L=0)	-.7831	-.8201	-.662
XE 54 5 P			
EO	-.3125	-.3566	
EM	-.0308	-.0339	
ED	-.0004	-.0004	
ESO	-.0129	-.0144	
E(J=L-1/2)	-.3695	-.4197	-.257
E(J=L+1/2)	-.3308	-.3765	-----

CS 55 1 S			
EO	-1259.2369	-1267.5059	
EM	-307.3015	-304.9458	
ED	235.2020	244.4701	
E(L=0)	-1331.3364	-1327.9816	-1323.191
CS 55 2 S			
EO	-179.1640	-192.5276	
EM	-39.8567	-40.9203	
ED	24.5869	25.6253	
E(L=0)	-194.4338	-207.8226	-210.070
CS 55 2 P			
EO	-166.3127	-180.9975	
EM	-6.5480	-6.6527	
ED	-.5118	-.1030	
ESO	-3.9002	-4.0760	
E(J=L-1/2)	-181.1729	-195.9052	-197.100
E(J=L+1/2)	-169.4723	-183.6772	-189.300
CS 55 3 S			
EO	-36.3370	-39.9532	
EM	-7.5641	-8.5226	
ED	4.4887	5.0549	
E(L=0)	-39.4124	-43.4209	-44.750
CS 55 3 P			
EO	-31.1850	-35.1478	
EM	-1.4266	-1.6682	
ED	-.0251	-.0194	
ESO	-.6473	-.7653	
E(J=L-1/2)	-33.9313	-38.3660	-39.200
E(J=L+1/2)	-31.9894	-36.0701	-36.700

174

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

CS 55	3 D			
	EO	-21.2101	-26.2676	
	EM	-0.3070	-0.4303	
	ED	-0.0239	-0.0114	
	ESO	-0.0758	-0.1074	
	E(J=L-1/2)	-21.7684	-27.0315	-27.200
	E(J=L+1/2)	-21.3894	-26.4945	-26.700
CS 55	4 S			
	EO	-7.5144	-7.7260	
	EM	-1.8202	-1.9452	
	ED	1.0671	1.1357	
	E(L=0)	-8.2675	-8.5355	-8.494
CS 55	4 P			
	EO	-5.7737	-6.0265	
	EM	-0.3404	-0.3704	
	ED	-0.0040	-0.0039	
	ESO	-0.1447	-0.1582	
	E(J=L-1/2)	-6.4075	-6.7172	-6.320
	E(J=L+1/2)	-5.9734	-6.2426	-5.960
CS 55	4 D			
	EO	-2.7783	-3.1204	
	EM	-0.0717	-0.0848	
	ED	-0.0020	-0.0017	
	ESO	-0.0147	-0.0173	
	E(J=L-1/2)	-2.8961	-3.2588	-2.900
	E(J=L+1/2)	-2.8226	-3.1723	-2.830
CS 55	5 S			
	EO	-0.8666	-1.3031	
	EM	-0.3227	-0.3193	
	ED	0.1884	0.1857	
	E(L=0)	-1.0009	-1.4367	-0.846
CS 55	5 P			
	EO	-0.4370	-0.8770	
	EM	-0.0447	-0.0502	
	ED	-0.0005	-0.0005	
	ESO	-0.0187	-0.0211	
	E(J=L-1/2)	-0.5196	-0.9699	-0.480
	E(J=L+1/2)	-0.4635	-0.9066	-0.440
CS 55	6 S			
	EO	-0.1229	-0.3467	
	EM	-0.0162	-0.0450	
	ED	0.0094	0.0262	
	E(L=0)	-0.1297	-0.3655	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

BA 56 1 S			
EO	-1308.0780	-1316.2792	
EM	-330.2868	-327.7170	
ED	253.2256	262.7200	
E(L=0)	-1385.1392	-1381.2762	-1376.730
BA 56 2 S			
EO	-186.8042	-200.9459	
EM	-43.0197	-44.1016	
ED	26.5344	27.6103	
E(L=0)	-203.2895	-217.4372	-221.146
BA 56 2 P			
EO	-173.7142	-189.1452	
EM	-7.0905	-7.1823	
ED	-0.5417	-0.1095	
ESO	-4.2201	-4.3982	
E(J=L-1/2)	-189.7866	-205.2334	-206.800
E(J=L+1/2)	-177.1263	-192.0388	-192.900
BA 56 3 S			
EO	-38.1485	-42.0160	
EM	-8.1330	-9.2546	
ED	4.8234	5.4863	
E(L=0)	-41.4581	-45.7843	-47.544
BA 56 3 P			
EO	-32.8237	-37.0682	
EM	-1.5384	-1.8183	
ED	-0.0277	-0.0208	
ESO	-0.6967	-0.8329	
E(J=L-1/2)	-35.7832	-40.5731	-41.800
E(J=L+1/2)	-33.6931	-38.0744	-39.090
BA 56 3 D			
EO	-22.4419	-27.9174	
EM	-0.3329	-0.4727	
ED	-0.0259	-0.0123	
ESO	-0.0822	-0.1178	
E(J=L-1/2)	-23.0473	-28.7558	-29.270
E(J=L+1/2)	-22.6363	-28.1668	-28.700
BA 56 4 S			
EO	-8.2709	-8.0919	
EM	-1.9779	-2.1440	
ED	1.1588	1.2509	
E(L=0)	-9.0900	-8.9850	-9.303

176

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

BA 56	4 P			
	EO	-6.4611	-6.3195	
	EM	-.3725	-.4120	
	ED	-.0043	-.0043	
	ESO	-.1582	-.1756	
	E(J=L-1/2)	-7.1543	-7.0870	-7.060
	E(J=L+1/2)	-6.6797	-6.5602	-6.620
BA 56	4 D			
	EO	-3.3208	-3.2697	
	EM	-.0802	-.0971	
	ED	-.0023	-.0020	
	ESO	-.0165	-.0197	
	E(J=L-1/2)	-3.4528	-3.4279	-3.420
	E(J=L+1/2)	-3.3703	-3.3294	-3.310
BA 56	5 S			
	EO	-1.0990	-1.1670	
	EM	-.3975	-.3609	
	ED	.2319	.2097	
	E(L=0)	-1.2646	-1.3182	-1.470
BA 56	5 P			
	EO	-.6056	-.7136	
	EM	-.0606	-.0569	
	ED	-.0007	-.0006	
	ESO	-.0253	-.0238	
	E(J=L-1/2)	-.7175	-.8187	-.620
	E(J=L+1/2)	-.6416	-.7473	-.550
BA 56	6 S			
	EO	-.1347	-.1768	
	EM	-.0207	-.0385	
	ED	.0121	.0224	
	E(L=0)	-.1433	-.1929	-----

LA 57	1 S			
	EO	-1358.0275	-1366.3656	
	EM	-354.4849	-351.7442	
	ED	272.1453	281.9764	
	E(L=0)	-1440.3671	-1436.1334	-1431.297
LA 57	2 S			
	EO	-195.0373	-209.9210	
	EM	-46.3605	-47.4666	
	ED	28.5920	29.7096	
	E(L=0)	-212.8058	-227.6780	-230.441

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

LA 57 2 P			
EO	-181.6969	-197.8484	
EM	-7.6610	-7.7434	
ED	-0.5731	-0.1163	
ESO	-4.5565	-4.7394	
E(J=L-1/2)	-199.0440	-215.1869	-216.620
E(J=L+1/2)	-185.3745	-200.9687	-201.600
LA 57 3 S			
EO	-40.2298	-44.5012	
EM	-8.7833	-10.0336	
ED	5.2107	5.9452	
E(L=0)	-43.8024	-48.5896	-50.070
LA 57 3 P			
EO	-34.7361	-39.4105	
EM	-1.6679	-1.9784	
ED	-0.0298	-0.0223	
ESO	-0.7541	-0.9050	
E(J=L-1/2)	-37.9420	-43.2212	-44.300
E(J=L+1/2)	-35.6797	-40.5062	-41.330
LA 57 3 D			
EO	-23.9754	-29.9926	
EM	-0.3646	-0.5183	
ED	-0.0281	-0.0133	
ESO	-0.0900	-0.1290	
E(J=L-1/2)	-24.6381	-30.9112	-31.200
E(J=L+1/2)	-24.1881	-30.2662	-30.600
LA 57 4 S			
EO	-9.0566	-8.8285	
EM	-2.1589	-2.3595	
ED	1.2642	1.3756	
E(L=0)	-9.9513	-9.8124	-9.960
LA 57 4 P			
EO	-7.1738	-8.9817	
EM	-0.4097	-0.4575	
ED	-0.0046	-0.0047	
ESO	-0.1736	-0.1945	
E(J=L-1/2)	-7.9353	-7.8329	-7.570
E(J=L+1/2)	-7.4145	-7.2494	-7.060
LA 57 4 D			
EO	-3.8848	-3.7864	
EM	-0.0903	-0.1109	
ED	-0.0026	-0.0022	
ESO	-0.0185	-0.0224	
E(J=L-1/2)	-4.0332	-3.9667	-3.640
E(J=L+1/2)	-3.9407	-3.8547	-----

178

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

LA 57	5 S			
	EO	-1.3385	-1.3349	
	EM	-.4731	-.4231	
	ED	.2758	.2456	
	E(L=0)	-1.5358	-1.5124	-1.213
LA 57	5 P			
	EO	-.7889	-.8379	
	EM	-.0765	-.0692	
	ED	-.0008	-.0007	
	ESO	-.0318	-.0289	
	E(J=L-1/2)	-.9298	-.9656	-.550
	E(J=L+1/2)	-.8344	-.8789	-----
LA 57	5 D			
	EO	-.0938	-.1814	
	EM	-.0043	-.0073	
	ED	-.0001	-.0001	
	ESO	-.0009	-.0014	
	E(J=L-1/2)	-.1009	-.1930	-----
	E(J=L+1/2)	-.0964	-.1860	-----
LA 57	6 S			
	EO	-.1484	-.1899	
	EM	-.0275	-.0456	
	ED	.0160	.0264	
	E(L=0)	-.1599	-.2091	-----

CE 58	1 S			
	EO	-1408.1469	-1416.9081	
	EM	-379.9640	-377.0713	
	ED	290.4103	302.2763	
	E(L=0)	-1497.7006	-1491.7031	-1487.152
CE 58	2 S			
	EO	-203.6498	-218.5621	
	EM	-49.8422	-51.0322	
	ED	30.7436	31.9333	
	E(L=0)	-222.7484	-237.6610	-240.811
CE 58	2 P			
	EO	-189.9914	-206.2267	
	EM	-8.2430	-8.3392	
	ED	-.6083	-.1233	
	ESO	-4.9004	-5.1013	
	E(J=L-1/2)	-208.6435	-224.8918	-226.700
	E(J=L+1/2)	-193.9423	-209.5879	-210.500

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CE 58 3 S			
EO	-42.0668	-46.4350	
EM	-9.6085	-10.8686	
ED	5.6903	6.4366	
E(L=0)	-45.9850	-50.8670	-52.765
CE 58 3 P			
EO	-36.4212	-41.2043	
EM	-1.8364	-2.1513	
ED	-.0321	-.0238	
ESO	-.8284	-.9825	
E(J=L-1/2)	-39.9465	-45.3444	-46.800
E(J=L+1/2)	-37.4613	-42.3969	-43.600
CE 58 3 D			
EO	-25.3897	-31.5266	
EM	-.4102	-.5681	
ED	-.0306	-.0143	
ESO	-.1009	-.1412	
E(J=L-1/2)	-26.1332	-32.5326	-33.160
E(J=L+1/2)	-25.6287	-31.8266	-32.500
CE 58 4 S			
EO	-9.0559	-9.0285	
EM	-2.3503	-2.5608	
ED	1.3748	1.4918	
E(L=0)	-10.0314	-10.0975	-10.661
CE 58 4 P			
EO	-7.1068	-7.1162	
EM	-.4476	-.4988	
ED	-.0051	-.0050	
ESO	-.1889	-.2115	
E(J=L-1/2)	-7.9373	-8.0430	-8.230
E(J=L+1/2)	-7.3706	-7.4085	-7.650
CE 58 4 D			
EO	-3.7040	-3.7988	
EM	-.0993	-.1220	
ED	-.0027	-.0024	
ESO	-.0202	-.0246	
E(J=L-1/2)	-3.8666	-3.9970	-4.080
E(J=L+1/2)	-3.7656	-3.8740	-----
CE 58 4 F			
EO	-.4298	-.0924	
EM	-.0106	-.0102	
ED	-.0006	-.0004	
ESO	-.0015	-.0015	
E(J=L-1/2)	-.4470	-.1090	-.036
E(J=L+1/2)	-.4365	-.0985	-----

180

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

CE 58	5 S			
	EO	-1.1536	-1.2809	
	EM	-.4625	-.4333	
	ED	.2694	.2513	
	E(L=0)	-1.3467	-1.4629	-1.390
CE 58	5 P			
	EO	-.6249	-.7836	
	EM	-.0706	-.0692	
	ED	-.0008	-.0007	
	ESO	-.0292	-.0288	
	E(J=L-1/2)	-.7547	-.9111	-.735
	E(J=L+1/2)	-.6671	-.8247	-----
CE 58	6 S			
	EO	-.1364	-.1851	
	EM	-.0221	-.0445	
	ED	.0128	.0258	
	E(L=0)	-.1457	-.2038	-----

PR 59	1 S			
	EO	-1459.5585	-1468.5759	
	EM	-406.7886	-403.7468	
	ED	311.2795	323.6543	
	E(L=0)	-1555.0676	-1548.6684	-1544.034
PR 59	2 S			
	EO	-211.9814	-227.5958	
	EM	-53.5848	-54.7919	
	ED	33.0020	34.2782	
	E(L=0)	-232.5642	-248.1095	-251.327
PR 59	2 P			
	EO	-198.0693	-214.9939	
	EM	-8.8788	-8.9679	
	ED	-.6447	-.1306	
	ESO	-5.2751	-5.4831	
	E(J=L-1/2)	-218.1430	-235.0586	-236.340
	E(J=L+1/2)	-202.3177	-218.6093	-215.600
PR 59	3 S			
	EO	-43.8183	-48.6547	
	EM	-10.3755	-11.7515	
	ED	6.1411	6.9561	
	E(L=0)	-48.0527	-53.4501	-55.560

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PR 59	3 P			
	EO	-38.0070	-43.2820	
	EM	-1.9918	-2.3342	
	ED	-.0345	-.0254	
	ESO	-.8970	-1.0645	
	E(J=L-1/2)	-41.8273	-47.7706	-49.200
	E(J=L+1/2)	-39.1363	-44.5771	-45.700
PR 59	3 D			
	EO	-26.6176	-33.3398	
	EM	-.4503	-.6210	
	ED	-.0343	-.0154	
	ESO	-.1106	-.1541	
	E(J=L-1/2)	-27.4340	-34.4385	-34.960
	E(J=L+1/2)	-26.8810	-33.6680	-34.230
PR 59	4 S			
	EO	-9.4054	-9.4584	
	EM	-2.5322	-2.7849	
	ED	1.4803	1.6213	
	E(L=0)	-10.4573	-10.6220	-11.215
PR 59	4 P			
	EO	-7.3909	-7.4765	
	EM	-.4841	-.5456	
	ED	-.0054	-.0054	
	ESO	-.2039	-.2308	
	E(J=L-1/2)	-8.2882	-8.4891	-8.710
	E(J=L+1/2)	-7.6765	-7.7967	-8.010
PR 59	4 D			
	EO	-3.8629	-4.0262	
	EM	-.1084	-.1353	
	ED	-.0030	-.0026	
	ESO	-.0220	-.0272	
	E(J=L-1/2)	-4.0403	-4.2457	-4.190
	E(J=L+1/2)	-3.9303	-4.1097	-----
PR 59	4 F			
	EO	-.4299	-.1171	
	EM	-.0116	-.0125	
	ED	-.0006	-.0005	
	ESO	-.0016	-.0018	
	E(J=L-1/2)	-.4485	-.1373	-.070
	E(J=L+1/2)	-.4373	-.1247	-----
PR 59	5 S			
	EO	-1.1880	-1.3216	
	EM	-.4968	-.4680	
	ED	.2892	.2713	
	E(L=0)	-1.3956	-1.5183	-1.390

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

PR 59 5 P			
EO	-.6412	-.8055	
EM	-.0761	-.0749	
ED	-.0008	-.0007	
ESO	-.0314	-.0311	
E(J=L-1/2)	-.7809	-.9433	-.840
E(J=L+1/2)	-.6867	-.8500	-----
PR 59 6 S			
EO	-.1378	-.1875	
EM	-.0232	-.0469	
ED	.0135	.0272	
E(L=0)	-.1475	-.2072	-----

ND 60 1 S			
EO	-1511.9467	-1521.1723	
EM	-435.0071	-431.8060	
ED	333.2552	346.1412	
E(L=0)	-1613.6986	-1606.8371	-1602.060
ND 60 2 S			
EO	-220.5290	-236.7939	
EM	-57.5213	-58.7565	
ED	35.4272	36.7499	
E(L=0)	-242.6231	-258.8005	-262.027
ND 60 2 P			
EO	-206.3653	-223.9250	
EM	-9.5490	-9.6319	
ED	-.7309	-.1381	
ESO	-5.6678	-5.8862	
E(J=L-1/2)	-227.9808	-245.4674	-247.140
E(J=L+1/2)	-210.9774	-227.8088	-228.300
ND 60 3 S			
EO	-45.6374	-50.9003	
EM	-11.1909	-12.6866	
ED	6.6203	7.5060	
E(L=0)	-50.2080	-56.0809	-57.950
ND 60 3 P			
EO	-39.6595	-45.3839	
EM	-2.1578	-2.5285	
ED	-.0369	-.0271	
ESO	-.9700	-1.1514	
E(J=L-1/2)	-43.7942	-50.2423	-51.600
E(J=L+1/2)	-40.8842	-46.7881	-47.700

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

ND 60 3 D			
EO	-27.9105	-35.1782	
EM	-.4936	-.6775	
ED	-.0371	-.0165	
ESO	-.1211	-.1679	
E(J=L-1/2)	-28.8045	-36.3759	-36.800
E(J=L+1/2)	-28.1990	-35.5364	-35.960
ND 60 4 S			
EO	-9.7762	-9.8827	
EM	-2.7266	-3.0210	
ED	1.5930	1.7575	
E(L=0)	-10.9098	-11.1462	-11.619
ND 60 4 P			
EO	-7.6948	-7.8310	
EM	-.5233	-.5949	
ED	-.0057	-.0058	
ESO	-.2199	-.2511	
E(J=L-1/2)	-8.6636	-8.9339	-8.970
E(J=L+1/2)	-8.0039	-8.1806	-8.270
ND 60 4 D			
EO	-4.0381	-4.2474	
EM	-.1181	-.1496	
ED	-.0033	-.0028	
ESO	-.0240	-.0299	
E(J=L-1/2)	-4.2315	-4.4895	-4.238
E(J=L+1/2)	-4.1115	-4.3400	-----
ND 60 4 F			
EO	-.4397	-.1376	
EM	-.0126	-.0149	
ED	-.0007	-.0006	
ESO	-.0018	-.0022	
E(J=L-1/2)	-.4602	-.1619	-.070
E(J=L+1/2)	-.4476	-.1465	-----
ND 60 5 S			
EO	-1.2274	-1.3600	
EM	-.5343	-.5034	
ED	.3108	.2916	
E(L=0)	-1.4509	-1.5718	-1.390
ND 60 5 P			
EO	-.6612	-.8256	
EM	-.0822	-.0807	
ED	-.0008	-.0008	
ESO	-.0339	-.0334	
E(J=L-1/2)	-.8120	-.9739	-.880
E(J=L+1/2)	-.7103	-.8737	-----

184

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

ND 60 6 S			
EO	-0.1393	-0.1899	
EM	-0.0243	-0.0494	
ED	0.0141	0.0286	
E(L=0)	-0.1495	-0.2107	-----

PM 61 1 S			
EO	-1565.1697	-1574.6778	
EM	-464.6304	-461.2977	
ED	356.2863	369.7777	
E(L=0)	-1673.5138	-1666.1978	-1661.482
PM 61 2 S			
EO	-229.3559	-246.1617	
EM	-61.6507	-62.9336	
ED	37.9708	39.3538	
E(L=0)	-253.0358	-269.7415	-273.130
PM 61 2 P			
EO	-214.9212	-233.0284	
EM	-10.2520	-10.3323	
ED	-0.7710	-0.1460	
ESO	-6.0817	-6.3113	
E(J=L-1/2)	-238.1076	-256.1293	-257.870
E(J=L+1/2)	-219.8625	-237.1954	-237.500
PM 61 3 S			
EO	-47.5819	-53.1773	
EM	-12.0719	-13.6763	
ED	7.1381	8.0878	
E(L=0)	-52.5157	-58.7658	-60.670
PM 61 3 P			
EO	-41.4378	-47.5177	
EM	-2.3374	-2.7347	
ED	-0.0409	-0.0288	
ESO	-1.0485	-1.2436	
E(J=L-1/2)	-45.9131	-52.7684	-54.120
E(J=L+1/2)	-42.7676	-49.0376	-49.800
PM 61 3 D			
EO	-29.3418	-37.0461	
EM	-0.5412	-0.7377	
ED	-0.0416	-0.0176	
ESO	-0.1326	-0.1826	
E(J=L-1/2)	-30.3224	-38.3492	-38.680
E(J=L+1/2)	-29.6594	-37.4362	-37.800

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PM 61 4 S			
EO	-10.1461	-10.3048	
EM	-2.9406	-3.2696	
ED	1.7169	1.9009	
E(L=0)	-11.3698	-11.6735	-12.171
PM 61 4 P			
EO	-7.9950	-8.1827	
EM	-.5668	-.6471	
ED	-.0061	-.0062	
ESO	-.2376	-.2726	
E(J=L-1/2)	-9.0431	-9.3812	-9.370
E(J=L+1/2)	-8.3303	-8.5634	-8.700
PM 61 4 D			
EO	-4.2056	-4.4651	
EM	-.1292	-.1647	
ED	-.0034	-.0030	
ESO	-.0261	-.0329	
E(J=L-1/2)	-4.4165	-4.7315	-4.449
E(J=L+1/2)	-4.2860	-4.5670	-----
PM 61 4 F			
EO	-.4317	-.1545	
EM	-.0140	-.0175	
ED	-.0008	-.0006	
ESO	-.0020	-.0026	
E(J=L-1/2)	-.4545	-.1830	-.147
E(J=L+1/2)	-.4405	-.1648	-----
PM 61 5 S			
EO	-1.2505	-1.3969	
EM	-.5706	-.5397	
ED	.3317	.3124	
E(L=0)	-1.4894	-1.6242	-1.390
PM 61 5 P			
EO	-.6675	-.8446	
EM	-.0876	-.0866	
ED	-.0009	-.0008	
ESO	-.0361	-.0358	
E(J=L-1/2)	-.8282	-1.0036	-.880
E(J=L+1/2)	-.7199	-.8962	-----
PM 61 6 S			
EO	-.1400	-.1922	
EM	-.0251	-.0519	
ED	.0146	.0300	
E(L=0)	-.1505	-.2141	-----

186

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

SM 62	1 S			
	EO	-1619.3711	-1629.1148	
	EM	-495.7406	-492.2858	
	ED	380.4963	394.6112	
	E(L=0)	-1734.6154	-1726.7894	-1722.153
SM 62	2 S			
	EO	-238.4014	-255.7041	
	EM	-66.0004	-67.3311	
	ED	40.6505	42.0944	
	E(L=0)	-263.7513	-280.9408	-284.494
SM 62	2 P			
	EO	-223.6972	-242.3038	
	EM	-10.9935	-11.0705	
	ED	-0.8155	-0.1541	
	ESO	-6.5182	-6.7590	
	E(J=L-1/2)	-248.5426	-267.0464	-268.900
	E(J=L+1/2)	-228.9880	-246.7694	-246.900
SM 62	3 S			
	EO	-49.5971	-55.4880	
	EM	-13.0101	-14.7225	
	ED	7.6854	8.7026	
	E(L=0)	-54.9218	-61.5079	-63.389
SM 62	3 P			
	EO	-43.2863	-49.6850	
	EM	-2.5291	-2.9533	
	ED	-0.0437	-0.0307	
	ESO	-1.1326	-1.3411	
	E(J=L-1/2)	-48.1243	-55.3512	-56.700
	E(J=L+1/2)	-44.7265	-51.3279	-52.250
SM 62	3 D			
	EO	-30.8427	-38.9472	
	EM	-0.5925	-0.8018	
	ED	-0.0448	-0.0188	
	ESO	-0.1449	-0.1983	
	E(J=L-1/2)	-31.9147	-40.3627	-40.700
	E(J=L+1/2)	-31.1902	-39.3712	-39.700
SM 62	4 S			
	EO	-10.5373	-10.7260	
	EM	-3.1700	-3.5313	
	ED	1.8495	2.0518	
	E(L=0)	-11.8578	-12.2055	-12.760

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

SM 62 4 P			
EO	-8.3150	-8.5333	
EM	-.6134	-.7021	
ED	-.0065	-.0066	
ESO	-.2566	-.2951	
E(J=L-1/2)	-9.4481	-9.8322	-9.800
E(J=L+1/2)	-8.6783	-8.9469	-9.150
SM 62 4 D			
EO	-4.3894	-4.6807	
EM	-.1412	-.1807	
ED	-.0038	-.0033	
ESO	-.0285	-.0359	
E(J=L-1/2)	-4.6199	-4.9724	-4.780
E(J=L+1/2)	-4.4774	-4.7929	-----
SM 62 4 F			
EO	-.4332	-.1687	
EM	-.0155	-.0203	
ED	-.0009	-.0007	
ESO	-.0022	-.0030	
E(J=L-1/2)	-.4584	-.2017	-.257
E(J=L+1/2)	-.4430	-.1807	-----
SM 62 5 S			
EO	-1.2776	-1.4328	
EM	-.6098	-.5772	
ED	.3542	.3339	
E(L=0)	-1.5332	-1.6761	-1.434
SM 62 5 P			
EO	-.6766	-.8627	
EM	-.0937	-.0926	
ED	-.0009	-.0008	
ESO	-.0385	-.0382	
E(J=L-1/2)	-.8482	-1.0325	-.880
E(J=L+1/2)	-.7327	-.9179	-----
SM 62 6 S			
EO	-.1409	-.1944	
EM	-.0259	-.0545	
ED	.0150	.0315	
E(L=0)	-.1518	-.2174	-----

EU 63 1 S			
EO	-1574.4952	-1684.4751	
EM	-528.6273	-524.8121	
ED	404.0637	420.6770	
E(L=0)	-1799.0588	-1788.6102	-1784.075

188

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

EU 63	2 S			
	EO	-247.6202	-265.4223	
	EM	-70.5756	-71.9564	
	ED	43.4714	44.9765	
	E(L=0)	-274.7244	-292.4022	-296.077
EU 63	2 P			
	EO	-232.6462	-251.7557	
	EM	-11.7744	-11.8477	
	ED	-.8584	-.1626	
	ESO	-6.9776	-7.2303	
	E(J=L-1/2)	-259.2342	-278.2266	-280.100
	E(J=L+1/2)	-238.3014	-256.5357	-256.500
EU 63	3 S			
	EO	-51.6535	-57.8342	
	EM	-13.9984	-15.8278	
	ED	8.2656	9.3518	
	E(L=0)	-57.3863	-64.3102	-66.187
EU 63	3 P			
	EO	-45.1749	-51.8874	
	EM	-2.7323	-3.1847	
	ED	-.0467	-.0326	
	ESO	-1.2217	-1.4443	
	E(J=L-1/2)	-50.3973	-57.9933	-59.340
	E(J=L+1/2)	-46.7322	-53.6604	-54.450
EU 63	3 D			
	EO	-32.3817	-40.8803	
	EM	-.6472	-.8699	
	ED	-.0482	-.0201	
	ESO	-.1580	-.2148	
	E(J=L-1/2)	-33.5511	-42.4147	-42.690
	E(J=L+1/2)	-32.7611	-41.3407	-41.600
EU 63	4 S			
	EO	-10.9343	-11.1483	
	EM	-3.4119	-3.8067	
	ED	1.9891	2.2105	
	E(L=0)	-12.3571	-12.7445	-13.237
EU 63	4 P			
	EO	-8.6400	-8.8845	
	EM	-.6629	-.7603	
	ED	-.0069	-.0071	
	ESO	-.2767	-.3189	
	E(J=L-1/2)	-9.8632	-10.2897	-10.440
	E(J=L+1/2)	-9.0331	-9.3330	-9.450

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

EU 63 4 D			
EO	-4.5761	-4.8960	
EM	-.1541	-.1978	
ED	-.0041	-.0035	
ESO	-.0310	-.0392	
E(J=L-1/2)	-4.8273	-5.2149	-4.927
E(J=L+1/2)	-4.6723	-5.0189	-----
EU 63 4 F			
EO	-.4337	-.1804	
EM	-.0171	-.0232	
ED	-.0010	-.0008	
ESO	-.0024	-.0034	
E(J=L-1/2)	-.4614	-.2180	-----
E(J=L+1/2)	-.4446	-.1942	-----
EU 63 5 S			
EO	-1.3042	-1.4684	
EM	-.6509	-.6161	
ED	.3778	.3561	
E(L=0)	-1.5773	-1.7284	-1.176
EU 63 5 P			
EO	-.6852	-.8805	
EM	-.1000	-.0989	
ED	-.0010	-.0009	
ESO	-.0409	-.0407	
E(J=L-1/2)	-.8680	-1.0617	-.880
E(J=L+1/2)	-.7453	-.9396	-----
EU 63 6 S			
EO	-.1417	-.1966	
EM	-.0267	-.0572	
ED	.0154	.0331	
E(L=0)	-.1530	-.2207	-----

GD 64 1 S			
EO	-1730.8566	-1741.4578	
EM	-563.0439	-559.0293	
ED	430.9805	448.1647	
E(L=0)	-1362.9200	-1852.3224	-1847.320
GD 64 2 S			
EO	-256.5979	-275.6531	
EM	-75.4573	-76.8295	
ED	46.3940	48.0185	
E(L=0)	-285.6612	-374.4641	-307.990

190

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

GD 64	2 P			
	EO	-241.4101	-261.7089	
	EM	-12.6174	-12.6658	
	ED	-0.8996	-0.1714	
	ESO	-7.4725	-7.7520	
	E (J=L-1/2)	-269.8721	-290.0501	-291.600
	E (J=L+1/2)	-247.4546	-266.7941	-266.300
GD 64	3 S			
	EO	-53.6829	-60.5138	
	EM	-14.9109	-16.9969	
	ED	8.7998	10.0395	
	E (L=0)	-59.7940	-67.4712	-69.165
GD 64	3 P			
	EO	-47.0168	-54.4227	
	EM	-2.9180	-3.4297	
	ED	-0.0497	-0.0346	
	ESO	-1.3032	-1.5586	
	E (J=L-1/2)	-52.5909	-61.0042	-62.100
	E (J=L+1/2)	-48.6813	-56.3284	-56.800
GD 64	3 D			
	EO	-33.7744	-43.1428	
	EM	-0.6946	-0.9421	
	ED	-0.0517	-0.0215	
	ESO	-0.1696	-0.2332	
	E (J=L-1/2)	-35.0295	-44.8060	-44.800
	E (J=L+1/2)	-34.1815	-43.6400	-43.600
GD 64	4 S			
	EO	-11.7539	-11.8327	
	EM	-3.6430	-4.1105	
	ED	2.1230	2.3857	
	E (L=0)	-13.2739	-13.5575	-13.825
GD 64	4 P			
	EO	-9.3872	-9.4936	
	EM	-0.7104	-0.8252	
	ED	-0.0073	-0.0076	
	ESO	-0.2962	-0.3466	
	E (J=L-1/2)	-10.6973	-11.0196	-10.600
	E (J=L+1/2)	-9.8087	-9.9798	-9.960
GD 64	4 D			
	EO	-5.1731	-5.3595	
	EM	-0.1668	-0.2176	
	ED	-0.0042	-0.0038	
	ESO	-0.0336	-0.0432	
	E (J=L-1/2)	-5.4449	-5.7105	-5.184
	E (J=L+1/2)	-5.2769	-5.4945	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

GD 64 4 F			
EO	-.8427	-.3986	
EM	-.0191	-.0287	
ED	-.0010	-.0010	
ESO	-.0027	-.0042	
E(J=L-1/2)	-.8736	-.4451	-----
E(J=L+1/2)	-.8547	-.4157	-----
GD 64 5 S			
EO	-1.5809	-1.6227	
EM	-.7611	-.6890	
ED	.4416	.3980	
E(L=0)	-1.9004	-1.9137	-1.323
GD 64 5 P			
EO	-.8979	-.9968	
EM	-.1242	-.1135	
ED	-.0012	-.0010	
ESO	-.0508	-.0468	
E(J=L-1/2)	-1.1249	-1.2049	-.770
E(J=L+1/2)	-.9725	-1.0645	-----
GD 64 5 D			
EO	-.0715	-.1770	
EM	-.0030	-.0106	
ED	-.0001	-.0002	
ESO	-.0006	-.0020	
E(J=L-1/2)	-.0764	-.1938	-----
E(J=L+1/2)	-.0734	-.1838	-----
GD 64 6 S			
EO	-.1543	-.2093	
EM	-.0345	-.0663	
ED	.0200	.0383	
E(L=0)	-.1688	-.2373	-----

TB 65 1 S			
EO	-1787.5941	-1797.9785	
EM	-598.7686	-594.6779	
ED	458.4130	476.6657	
E(L=0)	-1927.9497	-1915.9977	-1908.249
TB 65 2 S			
EO	-266.6486	-285.3819	
EM	-80.4608	-81.9201	
ED	49.4814	51.1835	
E(L=0)	-297.6280	-316.1185	-320.190

192

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

TB 65	2 P			
	EO	-251.1364	-271.1664	
	EM	-13.4576	-13.5235	
	ED	-1.0311	-.1803	
	ESO	-7.9645	-8.2456	
	E(J=L-1/2)	-281.5541	-301.3614	-303.400
	E(J=L+1/2)	-257.6606	-276.6246	-276.300
TB 65	3 S			
	EO	-55.9331	-62.6365	
	EM	-16.1480	-18.2224	
	ED	9.5267	10.7575	
	E(L=0)	-62.5544	-70.1014	-72.364
TB 65	3 P			
	EO	-49.1171	-56.4007	
	EM	-3.1763	-3.6878	
	ED	-.0530	-.0366	
	ESO	-1.4159	-1.6683	
	E(J=L-1/2)	-55.1782	-63.4617	-65.900
	E(J=L+1/2)	-50.9305	-58.4568	-59.300
TB 65	3 D			
	EO	-35.6219	-44.8571	
	EM	-.7682	-1.0192	
	ED	-.0579	-.0228	
	ESO	-.1870	-.2511	
	E(J=L-1/2)	-37.0090	-46.6524	-46.900
	E(J=L+1/2)	-36.0740	-45.3969	-45.700
TB 65	4 S			
	EO	-11.7647	-11.9994	
	EM	-3.9403	-4.4009	
	ED	2.2945	2.5525	
	E(L=0)	-13.4105	-13.8478	-14.634
TB 65	4 P			
	EO	-9.3229	-9.5912	
	EM	-.7716	-.8861	
	ED	-.0079	-.0080	
	ESO	-.3206	-.3703	
	E(J=L-1/2)	-10.7436	-11.2259	-11.430
	E(J=L+1/2)	-9.7818	-10.1150	-10.500
TB 65	4 D			
	EO	-4.9745	-5.3260	
	EM	-.1828	-.2349	
	ED	-.0048	-.0041	
	ESO	-.0366	-.0463	
	E(J=L-1/2)	-5.2719	-5.7039	-5.440
	E(J=L+1/2)	-5.0889	-5.4724	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TB 65 4 F			
EO	-.4440	-.1983	
EM	-.0209	-.0297	
ED	-.0012	-.0010	
ESO	-.0029	-.0043	
E(J=L-1/2)	-.4777	-.2462	-.110
E(J=L+1/2)	-.4574	-.2161	-----
TB 65 5 S			
EO	-1.3605	-1.5382	
EM	-.7401	-.6980	
ED	.4291	.4030	
E(L=0)	-1.6715	-1.8332	-1.470
TB 65 5 P			
EO	-.7039	-.9140	
EM	-.1137	-.1120	
ED	-.0011	-.0010	
ESO	-.0464	-.0460	
E(J=L-1/2)	-.9115	-1.1198	-.950
E(J=L+1/2)	-.7723	-.9818	-----
TB 65 6 S			
EO	-.1435	-.2009	
EM	-.0285	-.0629	
ED	.0165	.0363	
E(L=0)	-.1555	-.2275	-----

DY 66 1 S			
EO	-1944.2186	-1858.8214	
EM	-636.7375	-633.3955	
ED	488.6629	506.6875	
E(L=0)	-1992.2932	-1985.5294	-1977.819
DY 66 2 S			
EO	-273.2650	-298.0088	
EM	-85.9703	-87.5827	
ED	52.8577	54.6186	
E(L=0)	-306.3776	-331.0729	-332.664
DY 66 2 P			
EO	-257.6690	-283.6519	
EM	-14.4325	-14.7048	
ED	-1.0707	-.1907	
ESO	-8.5337	-8.8057	
E(J=L-1/2)	-290.2396	-316.1588	-315.500
E(J=L+1/2)	-264.6385	-289.7417	-286.400

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

DY 66 3 S			
EO	-55.3641	-66.2435	
EM	-17.0192	-19.8287	
ED	10.0332	11.6658	
E(L=0)	-62.3501	-74.4064	-75.269
DY 66 3 P			
EO	-48.3462	-59.9349	
EM	-3.3548	-4.0809	
ED	-.0564	-.0395	
ESO	-1.4937	-1.8162	
E(J=L-1/2)	-54.7448	-67.6877	-67.700
E(J=L+1/2)	-50.2637	-62.2391	-61.600
DY 66 3 D			
EO	-34.3050	-48.3477	
EM	-.8133	-1.1866	
ED	-.0621	-.0249	
ESO	-.1983	-.2762	
E(J=L-1/2)	-35.7753	-50.3878	-48.970
E(J=L+1/2)	-34.7838	-49.0068	-47.600
DY 66 4 S			
EO	-11.0199	-12.6861	
EM	-3.9534	-4.8738	
ED	2.3017	2.8194	
E(L=0)	-12.6716	-14.7405	-15.290
DY 66 4 P			
EO	-8.5544	-10.1981	
EM	-.7659	-.9973	
ED	-.0078	-.0089	
ESO	-.3186	-.4122	
E(J=L-1/2)	-9.9653	-12.0287	-12.200
E(J=L+1/2)	-9.0095	-10.7921	-10.800
DY 66 4 D			
EO	-4.1737	-5.7742	
EM	-.1737	-.2759	
ED	-.0044	-.0046	
ESO	-.0350	-.0528	
E(J=L-1/2)	-4.4568	-6.2131	-5.660
E(J=L+1/2)	-4.2818	-5.9491	-----
DY 66 4 F			
EO	-.0313	-.3177	
EM	.0000	-.0396	
ED	.0000	-.0013	
ESO	.0000	-.0056	
E(J=L-1/2)	-.0313	-.3810	-0.147
E(J=L+1/2)	-.0313	-.3418	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

DY 66 5 S			
EO	-1.1507	-1.5937	
EM	-.6739	-.7145	
ED	.3908	.4120	
E(L=0)	-1.4338	-1.8962	-2.316
DY 66 5 P			
EO	-.5441	-.9665	
EM	-.0952	-.1127	
ED	-.0009	-.0010	
ESO	-.0389	-.0460	
E(J=L-1/2)	-.7180	-1.1722	-.950
E(J=L+1/2)	-.6013	-1.0342	-----
DY 66 6 S			
EO	-.1360	-.2470	
EM	-.0262	-.0790	
ED	.0152	.0455	
E(L=0)	-.1470	-.2805	-----

HO 67 1 S			
EO	-1904.3596	-1915.1380	
EM	-575.6944	-671.2531	
ED	518.2990	538.0282	
E(L=0)	-2061.7550	-2048.3629	-2045.110
HO 67 2 S			
EO	-286.1916	-306.0327	
EM	-91.3394	-92.8860	
ED	56.1760	58.0124	
E(L=0)	-321.3550	-340.9063	-345.460
HO 67 2 P			
EO	-270.1548	-291.3023	
EM	-15.3229	-15.3743	
ED	-1.1389	-.1994	
ESO	-9.0599	-9.3668	
E(J=L-1/2)	-304.7364	-325.6096	-327.900
E(J=L+1/2)	-277.5567	-297.5092	-296.800
HO 67 3 S			
EO	-60.2311	-67.5876	
EM	-18.5115	-20.8761	
ED	10.9121	17.3142	
E(L=0)	-67.8305	-76.1495	-78.247

196

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

HO 67	3 P			
	EO	-53.0710	-61.0630	
	EM	-3.6664	-4.2479	
	ED	-.0626	-.0410	
	ESO	-1.6290	-1.9171	
	E(J=L-1/2)	-60.0580	-69.1861	-70.700
	E(J=L+1/2)	-55.1710	-63.4348	-64.010
HO 67	3 D			
	EO	-38.8498	-48.9819	
	EM	-.9033	-1.1869	
	ED	-.0662	-.0258	
	ESO	-.2194	-.2919	
	E(J=L-1/2)	-40.4775	-51.0703	-51.140
	E(J=L+1/2)	-39.3805	-49.6108	-49.700
HO 67	4 S			
	EO	-12.5817	-12.8625	
	EM	-4.5112	-5.0562	
	ED	2.6241	2.9293	
	E(L=0)	-14.4688	-14.9894	-16.032
HO 67	4 P			
	EO	-9.9911	-10.3076	
	EM	-.8894	-1.0256	
	ED	-.0089	-.0091	
	ESO	-.3682	-.4271	
	E(J=L-1/2)	-11.6258	-12.1965	-12.610
	E(J=L+1/2)	-10.5212	-10.9152	-11.250
HO 67	4 D			
	EO	-5.3544	-5.7599	
	EM	-.2139	-.2766	
	ED	-.0055	-.0047	
	ESO	-.0426	-.0543	
	E(J=L-1/2)	-5.7016	-6.2041	-5.920
	E(J=L+1/2)	-5.4886	-5.9326	-----
HO 67	4 F			
	EO	-.4315	-.2098	
	EM	-.0249	-.0372	
	ED	-.0015	-.0013	
	ESO	-.0035	-.0054	
	E(J=L-1/2)	-.4719	-.2699	-.147
	E(J=L+1/2)	-.4474	-.2321	-----
HO 67	5 S			
	EO	-1.4153	-1.6075	
	EM	-.8354	-.7864	
	ED	.4838	.4535	
	E(L=0)	-1.7669	-1.9404	-1.870

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

HO 67 5 P			
EO	-.7214	-.9482	
EM	-.1283	-.1262	
ED	-.0012	-.0011	
ESO	-.0521	-.0516	
E(J=L-1/2)	-.9551	-1.1787	-.730
E(J=L+1/2)	-.7988	-1.0239	-----
HO 67 6 S			
EO	-.1453	-.2051	
EM	-.0304	-.0688	
ED	.0176	.0397	
E(L=0)	-.1581	-.2342	-----

ER 68 1 S			
EO	-1964.1454	-1975.1308	
EM	-716.8197	-712.2215	
ED	550.2140	570.8576	
E(L=0)	-2130.7511	-2116.4947	-2113.790
ER 68 2 S			
EO	-296.2421	-316.6251	
EM	-97.1741	-98.7675	
ED	59.7666	61.6743	
E(L=0)	-333.6496	-353.7183	-358.587
ER 68 2 P			
EO	-279.9424	-301.6279	
EM	-16.3249	-16.3675	
ED	-1.1931	-.2094	
ESO	-9.6481	-9.9681	
E(J=L-1/2)	-316.7566	-338.1410	-340.700
E(J=L+1/2)	-287.8123	-308.2367	-307.300
ER 68 3 S			
EO	-62.4543	-70.1223	
EM	-19.7932	-22.3072	
ED	11.6562	13.1533	
E(L=0)	-70.5913	-79.2762	-81.152
ER 68 3 P			
EO	-55.1208	-62.4507	
EM	-3.9325	-4.5507	
ED	-.0664	-.0433	
ESO	-1.7448	-2.0514	
E(J=L-1/2)	-62.6093	-72.1475	-73.800
E(J=L+1/2)	-57.3749	-65.9933	-66.600

198

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

ER 68	3 D			
	EO	-40.5343	-51.0988	
	EM	-.9773	-1.2780	
	ED	-.0742	-.0274	
	ESO	-.2371	-.3140	
	E(J=L-1/2)	-42.2971	-53.3462	-53.400
	E(J=L+1/2)	-41.1116	-51.7762	-51.800
ER 68	4 S			
	EO	-13.0052	-13.3003	
	EM	-4.8215	-5.4084	
	ED	2.8023	3.1317	
	E(L=0)	-15.0244	-15.5770	-16.510
ER 68	4 P			
	EO	-10.3385	-10.6704	
	EM	-.9534	-1.1010	
	ED	-.0094	-.0096	
	ESO	-.3940	-.4578	
	E(J=L-1/2)	-12.0893	-12.6966	-13.450
	E(J=L+1/2)	-10.9073	-11.3232	-11.800
ER 68	4 D			
	EO	-5.5540	-5.9790	
	EM	-.2310	-.2992	
	ED	-.0055	-.0050	
	ESO	-.0459	-.0586	
	E(J=L-1/2)	-5.9282	-6.4590	-6.510
	E(J=L+1/2)	-5.6987	-6.1660	-6.210
ER 68	4 F			
	EO	-.4279	-.2136	
	EM	-.0271	-.0414	
	ED	-.0016	-.0014	
	ESO	-.0038	-.0060	
	E(J=L-1/2)	-.4718	-.2804	-.147
	E(J=L+1/2)	-.4452	-.2384	-----
ER 68	5 S			
	EO	-1.4438	-1.6421	
	EM	-.8870	-.8331	
	ED	.5132	.4801	
	E(L=0)	-1.8176	-1.9951	-2.200
ER 68	5 P			
	EO	-.7307	-.9646	
	EM	-.1362	-.1336	
	ED	-.0013	-.0011	
	ESO	-.0552	-.0545	
	E(J=L-1/2)	-.9786	-1.2083	-1.060
	E(J=L+1/2)	-.8130	-1.0448	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

ER 68 6 S			
EO	-0.1462	-0.2071	
EM	-0.0314	-0.0719	
ED	0.0182	0.0414	
E(L=0)	-0.1594	-0.2376	-----

TM 69 1 S			
EO	-2324.8770	-2036.0506	
EM	-759.7917	-755.0389	
ED	583.7264	605.1682	
E(L=0)	-2200.9423	-2185.9213	-2183.809
TM 69 2 S			
EO	-306.4846	-327.3947	
EM	-103.2838	-104.9249	
ED	63.5251	65.5074	
E(L=0)	-346.2433	-366.8122	-371.970
TM 69 2 P			
EO	-289.9235	-312.1306	
EM	-17.3752	-17.4084	
ED	-1.2488	-0.2198	
ESO	-10.2644	-10.5979	
E(J=L-1/2)	-329.0763	-350.9546	-358.660
E(J=L+1/2)	-298.2831	-319.1609	-317.990
TM 69 3 S			
EO	-64.7284	-72.6978	
EM	-21.1371	-23.8091	
ED	12.4429	14.0336	
E(L=0)	-73.4226	-82.4733	-84.829
TM 69 3 P			
EO	-57.2209	-65.8787	
EM	-4.2133	-4.8693	
ED	-0.0704	-0.0457	
ESO	-1.8670	-2.1926	
E(J=L-1/2)	-65.2386	-75.1789	-76.850
E(J=L+1/2)	-59.6376	-68.6011	-68.200
TM 69 3 0			
EO	-42.2680	-53.2547	
EM	-1.0559	-1.3742	
ED	-0.0791	-0.0290	
ESO	-0.2558	-0.3373	
E(J=L-1/2)	-44.1704	-50.6698	-55.700
E(J=L+1/2)	-42.8914	-52.9833	-53.970

200

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TM 69	4 S			
	EO	-13.4377	-13.7426	
	EM	-5.1473	-5.7776	
	ED	2.9902	3.3437	
	E(L=0)	-15.5948	-16.1765	-17.350
TM 69	4 P			
	EO	-10.6939	-11.0374	
	EM	-1.0211	-1.1801	
	ED	-.0100	-.0102	
	ESO	-.4212	-.4899	
	E(J=L-1/2)	-12.5674	-13.2075	-14.200
	E(J=L+1/2)	-11.3038	-11.7378	-12.400
TM 69	4 D			
	EO	-5.7591	-6.2005	
	EM	-.2492	-.3232	
	ED	-.0059	-.0053	
	ESO	-.0494	-.0631	
	E(J=L-1/2)	-6.1624	-6.7183	-6.618
	E(J=L+1/2)	-5.9154	-6.4028	-----
TM 69	4 F			
	EO	-.4249	-.2155	
	EM	-.0295	-.0458	
	ED	-.0018	-.0015	
	ESO	-.0041	-.0066	
	E(J=L-1/2)	-.4726	-.2892	-.183
	E(J=L+1/2)	-.4439	-.2430	-----
TM 69	5 S			
	EO'	-1.4724	-1.6769	
	EM	-.9407	-.8817	
	ED	.5441	.5079	
	E(L=0)	-1.8690	-2.0507	-1.940
TM 69	5 P			
	EO	-.7397	-.9811	
	EM	-.1444	-.1414	
	ED	-.0013	-.0012	
	ESO	-.0584	-.0576	
	E(J=L-1/2)	-1.0022	-1.2389	-1.170
	E(J=L+1/2)	-.8270	-1.0661	-----
TM 69	6 S			
	EO	-.1471	-.2091	
	EM	-.0324	-.0751	
	ED	.0188	.0432	
	E(L=0)	-.1607	-.2410	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

YB 70 1 S			
EO	-2086.5169	-2097.9052	
EM	-805.0733	-799.8039	
ED	615.7579	641.0427	
E(L=0)	-2275.8323	-2256.6664	-2255.217
YB 70 2 S			
EO	-316.8909	-338.3449	
EM	-109.6760	-111.3644	
ED	67.4594	69.5155	
E(L=0)	-359.1075	-380.1938	-385.650
YB 70 2 P			
EO	-300.0671	-322.8096	
EM	-18.4749	-18.4981	
ED	-1.3060	-.2304	
ESO	-10.9095	-11.2572	
E(J=L-1/2)	-341.6670	-364.0525	-366.900
E(J=L+1/2)	-308.9385	-330.2809	-328.800
YB 70 3 S			
EO	-67.0361	-75.3113	
EM	-22.5479	-25.3852	
ED	13.2684	14.9570	
E(L=0)	-76.3156	-85.7395	-88.139
YB 70 3 P			
EO	-59.3534	-68.3446	
EM	-4.5087	-5.2042	
ED	-.0747	-.0482	
ESO	-1.9953	-2.3409	
E(J=L-1/2)	-67.9274	-78.2788	-79.900
E(J=L+1/2)	-61.9415	-71.2561	-71.700
YB 70 3 D			
EO	-44.0320	-55.4477	
EM	-1.1390	-1.4756	
ED	-.0842	-.0307	
ESO	-.2757	-.3618	
E(J=L-1/2)	-46.0823	-58.0394	-57.950
E(J=L+1/2)	-44.7038	-56.2304	-56.140
YB 70 4 S			
EO	-13.8709	-14.1889	
EM	-5.4887	-6.1643	
ED	3.1869	3.5657	
E(L=0)	-16.1727	-16.7875	-17.910

202

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

YB 70 4 P			
EO	-11.0492	-11.4079	
EM	-1.0922	-1.2632	
EO	-0.0106	-0.0108	
ESO	-0.4497	-0.5235	
E(J=L-1/2)	-13.0514	-13.7289	-14.560
E(J=L+1/2)	-11.7023	-12.1584	-12.610
YB 70 4 D			
EO	-5.9623	-6.4236	
EM	-0.2684	-0.3484	
EO	-0.0068	-0.0057	
ESO	-0.0531	-0.0679	
E(J=L-1/2)	-6.3968	-6.9814	-7.240
E(J=L+1/2)	-6.1313	-6.6419	-6.760
YB 70 4 F			
EO	-0.4169	-0.2176	
EM	-0.0321	-0.0505	
EO	-0.0020	-0.0017	
ESO	-0.0045	-0.0073	
E(J=L-1/2)	-0.4690	-0.2990	-0.220
E(J=L+1/2)	-0.4375	-0.2479	-----
YB 70 5 S			
EO	-1.4988	-1.7115	
EM	-0.9957	-0.9321	
EO	0.5755	0.5366	
E(L=0)	-1.9190	-2.1070	-1.940
YB 70 5 P			
EO	-0.7469	-0.9973	
EM	-0.1528	-0.1494	
EO	-0.0014	-0.0012	
ESO	-0.0617	-0.0608	
E(J=L-1/2)	-1.0245	-1.2695	-0.840
E(J=L+1/2)	-0.8394	-1.0871	-----
YB 70 6 S			
EO	-0.1479	-0.2112	
EM	-0.0334	-0.0784	
EO	0.0193	0.0451	
E(L=0)	-0.1620	-0.2445	-----

LU 71 1 S			
EO	-2149.5363	-2161.5454	
EM	-852.2363	-846.6203	
EO	552.9009	678.6604	
E(L=0)	-2348.8717	-2329.5053	-2328.097

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

LU 71 2 S			
EO	-326.7852	-349.8397	
EM	-116.5191	-118.1297	
ED	71.5286	73.7352	
E(L=0)	-371.7757	-394.2342	-399.600
LU 71 2 P			
EO	-309.8004	-334.0136	
EM	-19.6666	-19.6383	
ED	-1.4950	-.2416	
ESO	-11.6014	-11.9859	
E(J=L-1/2)	-354.1648	-377.8653	-380.600
E(J=L+1/2)	-319.3606	-341.9076	-339.900
LU 71 3 S			
EO	-69.0866	-78.2799	
EM	-23.8044	-27.0433	
ED	14.0007	15.9301	
E(L=0)	-78.8903	-89.3931	-91.596
LU 71 3 P			
EO	-61.1978	-71.1639	
EM	-4.7699	-5.5572	
ED	-.0792	-.3508	
ESO	-2.1089	-2.5054	
E(J=L-1/2)	-70.2647	-81.7827	-83.250
E(J=L+1/2)	-63.9380	-74.2665	-74.420
LU 71 3 D			
EO	-45.3559	-57.9835	
EM	-1.2091	-1.5821	
ED	-.0897	-.0325	
ESO	-.2928	-.3889	
E(J=L-1/2)	-47.5331	-60.7648	-60.300
E(J=L+1/2)	-46.0691	-58.8203	-58.430
LU 71 4 S			
EO	-14.7781	-14.9201	
EM	-5.7765	-6.5845	
ED	3.3530	3.8074	
E(L=0)	-17.2016	-17.6972	-18.606
LU 71 4 P			
EO	-11.8821	-12.0594	
EM	-1.1515	-1.3543	
ED	-.0109	-.0114	
ESO	-.4740	-.5623	
E(J=L-1/2)	-13.9925	-14.5497	-15.080
E(J=L+1/2)	-12.5705	-12.8628	-13.200

204

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

LU 71 4 D			
EO	-6.6379	-6.9184	
EM	-.2837	-.3768	
ED	-.0072	-.0061	
ESO	-.0563	-.0735	
E(J=L-1/2)	-7.0977	-7.5218	-7.540
E(J=L+1/2)	-6.8162	-7.1543	-7.170
LU 71 4 F			
EO	-.8884	-.4565	
EM	-.0340	-.0587	
ED	-.0021	-.0019	
ESO	-.0048	-.0085	
E(J=L-1/2)	-.9437	-.5511	-.257
E(J=L+1/2)	-.9101	-.4916	-----
LU 71 5 S			
EO	-1.8408	-1.8878	
EM	-1.1606	-1.0277	
ED	.6706	.5914	
E(L=0)	-2.3308	-2.3241	-2.096
LU 71 5 P			
EO	-1.0112	-1.1330	
EM	-.1909	-.1691	
ED	-.0017	-.0014	
ESO	-.0770	-.0688	
E(J=L-1/2)	-1.3578	-1.4411	-1.030
E(J=L+1/2)	-1.1268	-1.2347	-----
LU 71 5 D			
EO	-.0617	-.1626	
EM	-.0011	-.0134	
ED	.0000	-.0002	
ESO	-.0002	-.0025	
E(J=L-1/2)	-.0634	-.1837	-.184
E(J=L+1/2)	-.0624	-.1712	-----
LU 71 6 S			
EO	-.1605	-.2270	
EM	-.0428	-.0921	
ED	.0248	.0530	
E(L=0)	-.1785	-.2661	-----

HF 72 1 S			
EO	-2213.5508	-2225.5427	
EM	-901.2657	-895.3237	
ED	591.3695	717.6923	
E(L=0)	-2423.4470	-2403.1741	-2402.999

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

HF 72 2 S			
EO	-337.5170	-361.4440	
EM	-123.5746	-125.1604	
ED	75.8612	78.1108	
E(L=0)	-385.2304	-408.4936	-414.479
HF 72 2 P			
EO	-320.3215	-345.3448	
EM	-20.8943	-20.8292	
ED	-1.5634	-.2530	
ESO	-12.3196	-12.7084	
E(J=L-1/2)	-367.4184	-391.8438	-394.880
E(J=L+1/2)	-330.4596	-353.7186	-351.600
HF 72 3 S			
EO	-71.5995	-81.3071	
EM	-25.2503	-20.7709	
ED	14.8447	16.9420	
E(L=0)	-82.0051	-93.1360	-95.640
HF 72 3 P			
EO	-63.5201	-74.0411	
EM	-5.0727	-5.9252	
ED	-.0861	-.0535	
ESO	-2.2397	-2.6687	
E(J=L-1/2)	-73.1583	-85.3572	-86.960
E(J=L+1/2)	-66.4392	-77.3511	-77.500
HF 72 3 D			
EO	-47.2375	-60.5805	
EM	-1.2937	-1.6940	
ED	-.1007	-.0343	
ESO	-.3131	-.4161	
E(J=L-1/2)	-49.5712	-63.5571	-63.100
E(J=L+1/2)	-48.0057	-61.4766	-61.110
HF 72 4 S			
EO	-15.6605	-15.6871	
EM	-6.1340	-7.0282	
ED	3.5591	4.0620	
E(L=0)	-18.2354	-18.6533	-19.783
HF 72 4 P			
EO	-12.6838	-12.7457	
EM	-1.2267	-1.4508	
ED	-.0114	-.0121	
ESO	-.5043	-.6014	
E(J=L-1/2)	-14.9305	-15.4114	-16.070
E(J=L+1/2)	-13.4176	-13.6072	-13.970

206

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

HF 72 4 D			
EO	-7.2740	-7.4483	
EM	-.3046	-.4075	
ED	-.0075	-.0065	
ESO	-.0604	-.0794	
E(J=L-1/2)	-7.7673	-8.1005	-8.240
E(J=L+1/2)	-7.4653	-7.7035	-7.870
HF 72 4 F			
EO	-1.2921	-.7273	
EM	-.0372	-.0675	
ED	-.0022	-.0022	
ESO	-.0052	-.0097	
E(J=L-1/2)	-1.3523	-.8358	-.700
E(J=L+1/2)	-1.3159	-.7679	-.660
HF 72 5 S			
EO	-2.1237	-2.0599	
EM	-1.3071	-1.1361	
ED	.7549	.6534	
E(L=0)	-2.6759	-2.5426	-2.390
HF 72 5 P			
EO	-1.2338	-1.2621	
EM	-.2232	-.1913	
ED	-.0019	-.0015	
ESO	-.0899	-.0777	
E(J=L-1/2)	-1.6387	-1.6103	-1.397
E(J=L+1/2)	-1.3690	-1.3772	-1.140
HF 72 5 D			
EO	-.0767	-.1971	
EM	-.0081	-.0184	
ED	-.0002	-.0003	
ESO	-.0015	-.0035	
E(J=L-1/2)	-.0895	-.2263	-.257
E(J=L+1/2)	-.0820	-.2088	-----
HF 72 6 S			
EO	-.1725	-.2377	
EM	-.0538	-.1035	
ED	.0311	.0595	
E(L=0)	-.1952	-.2817	-----

TA 73 1 S			
EO	-2277.9759	-2290.5131	
EM	-951.9939	-946.0915	
ED	730.4228	758.3789	
E(L=0)	-2499.5470	-2478.2257	-2478.967

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TA 73	2 S			
	EO	-349.4461	-373.2624	
	EM	-130.7014	-132.5010	
	ED	80.2460	82.6787	
	E(L=0)	-399.9015	-423.0847	-429.481
TA 73	2 P			
	EO	-331.8678	-356.8910	
	EM	-22.1043	-22.0732	
	ED	-1.6424	-.2648	
	ESO	-13.0313	-13.4630	
	E(J=L-1/2)	-381.6771	-406.1550	-409.478
	E(J=L+1/2)	-342.5832	-365.7660	-363.300
TA 73	3 S			
	EO	-75.1407	-84.4163	
	EM	-26.9618	-30.5797	
	ED	15.8488	18.0011	
	E(L=0)	-86.2537	-96.9949	-99.575
TA 73	3 P			
	EO	-66.8869	-76.9994	
	EM	-5.4307	-6.3111	
	ED	-.0908	-.0562	
	ESO	-2.3955	-2.8398	
	E(J=L-1/2)	-77.1994	-89.0463	-90.800
	E(J=L+1/2)	-70.0129	-80.5269	-80.700
TA 73	3 D			
	EO	-50.2890	-63.2544	
	EM	-1.3952	-1.8114	
	ED	-.1066	-.0362	
	ESO	-.3371	-.4446	
	E(J=L-1/2)	-52.8021	-66.4358	-65.930
	E(J=L+1/2)	-51.1166	-64.2128	-63.800
TA 73	4 S			
	EO	-16.6605	-16.4905	
	EM	-6.6588	-7.4981	
	ED	3.8618	4.3316	
	E(L=0)	-19.4575	-19.6570	-20.812
TA 73	4 P			
	EO	-13.5849	-13.4672	
	EM	-1.3405	-1.5536	
	ED	-.0124	-.0128	
	ESO	-.5499	-.6431	
	E(J=L-1/2)	-16.0376	-16.3198	-17.098
	E(J=L+1/2)	-14.3879	-14.3905	-14.890

208

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TA 73 4 D			
EO	-7.9817	-8.0109	
EM	-.3395	-.4405	
ED	-.0077	-.0069	
ESO	-.0669	-.0856	
E(J=L-1/2)	-8.5296	-8.7151	-8.900
E(J=L+1/2)	-8.1951	-8.2871	-8.460
TA 73 4 F			
EO	-1.7098	-1.0267	
EM	-.0454	-.0770	
ED	-.0027	-.0024	
ESO	-.0063	-.0111	
E(J=L-1/2)	-1.7831	-1.1505	-.990
E(J=L+1/2)	-1.7390	-1.0728	-.920
TA 73 5 S			
EO	-2.2912	-2.2300	
EM	-1.4432	-1.2556	
ED	.8330	.7217	
E(L=0)	-2.9014	-2.7639	-2.611
TA 73 5 P			
EO	-1.3536	-1.3878	
EM	-.2504	-.2157	
ED	-.0021	-.0017	
ESO	-.1006	-.0875	
E(J=L-1/2)	-1.8073	-1.7802	-1.650
E(J=L+1/2)	-1.5055	-1.5177	-1.360
TA 73 5 D			
EO	-.0888	-.2303	
EM	-.0144	-.0238	
ED	-.0003	-.0004	
ESO	-.0027	-.0044	
E(J=L-1/2)	-.1116	-.2677	-.221
E(J=L+1/2)	-.0981	-.2457	-----
TA 73 6 S			
EO	-.1778	-.2462	
EM	-.0590	-.1136	
ED	.0340	.0653	
E(L=0)	-.2028	-.2945	-----

W 74 1 S			
EO	-2343.8458	-2355.7829	
EM	-1005.2020	-998.8035	
ED	771.9720	800.5046	
E(L=0)	-2577.0758	-2554.0818	-2556.480

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

W 74 2 S			
EO	-360.5877	-385.1491	
EM	-138.3947	-140.1216	
ED	84.9709	87.4092	
E(L=0)	-414.0115	-437.8615	-444.888
W 74 2 P			
EO	-342.8008	-368.5116	
EM	-23.4425	-23.3703	
ED	-1.7082	-.2769	
ESO	-13.8138	-14.2019	
E(J=L-1/2)	-395.5791	-420.5626	-424.400
E(J=L+1/2)	-354.1377	-377.9569	-375.000
W 74 3 S			
EO	-77.6573	-87.5477	
EM	-28.5990	-32.4586	
ED	16.8042	19.0985	
E(L=0)	-89.4521	-100.9078	-103.693
W 74 3 P			
EO	-69.2181	-79.9787	
EM	-5.7770	-6.7132	
ED	-.0961	-.0591	
ESO	-2.5452	-3.0078	
E(J=L-1/2)	-80.1816	-92.7666	-94.700
E(J=L+1/2)	-72.5460	-83.7432	-83.900
W 74 3 D			
EO	-52.2010	-65.9621	
EM	-1.4941	-1.9356	
ED	-.1131	-.0382	
ESO	-.3608	-.4730	
E(J=L-1/2)	-54.8906	-69.3549	-68.800
E(J=L+1/2)	-53.0866	-66.9899	-66.800
W 74 4 S			
EO	-17.3727	-17.3449	
EM	-7.0532	-7.9838	
ED	4.0888	4.6092	
E(L=0)	-20.3371	-20.7195	-21.879
W 74 4 P			
EO	-14.2165	-14.2397	
EM	-1.4235	-1.6606	
ED	-.0130	-.0135	
ESO	-.5831	-.6839	
E(J=L-1/2)	-16.8192	-17.2816	-18.090
E(J=L+1/2)	-15.0699	-15.2299	-15.660

210

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

W	74 4 D			
	EO	-8.4500	-8.6231	
	EM	-.3625	-.4753	
	ED	-.0081	-.0074	
	ESO	-.0714	-.0918	
	E(J=L-1/2)	-9.0348	-9.3812	-9.500
	E(J=L+1/2)	-8.6778	-8.9222	-9.050
W	74 4 F			
	EO	-1.9454	-1.3732	
	EM	-.0486	-.0871	
	ED	-.0029	-.0027	
	ESO	-.0068	-.0124	
	E(J=L-1/2)	-2.0241	-1.5126	-1.360
	E(J=L+1/2)	-1.9765	-1.4258	-1.250
W	74 5 S			
	EO	-2.4823	-2.4195	
	EM	-1.5672	-1.3937	
	ED	.9041	.8006	
	E(L=0)	-3.1454	-3.0126	-2.831
W	74 5 P			
	EO	-1.5024	-1.5287	
	EM	-.2763	-.2445	
	ED	-.0023	-.0019	
	ESO	-.1108	-.0987	
	E(J=L-1/2)	-2.0026	-1.9725	-1.720
	E(J=L+1/2)	-1.6702	-1.6764	-1.360
W	74 5 D			
	EO	-.1252	-.2693	
	EM	-.0252	-.0306	
	ED	-.0005	-.0004	
	ESO	-.0047	-.0057	
	E(J=L-1/2)	-.1650	-.3174	-.221
	E(J=L+1/2)	-.1415	-.2889	-----
W	74 6 S			
	EO	-.1864	-.2528	
	EM	-.0688	-.1237	
	ED	.0396	.0710	
	E(L=0)	-.2156	-.3055	-----

RE	75 1 S			
	EO	-2410.6797	-2422.6541	
	EM	-1060.6065	-1053.8254	
	ED	915.4678	844.5747	
	E(L=0)	-2655.8184	-2631.9048	-2634.220

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

RE 75 2 S			
EO	-371.9165	-397.4028	
EM	-146.4278	-148.0975	
ED	89.9031	92.3683	
E(L=0)	-428.4412	-453.1320	-460.380
RE 75 2 P			
EO	-353.9262	-380.5049	
EM	-24.8417	-24.7269	
ED	-1.7750	-.2895	
ESO	-14.6315	-15.0233	
E(J=L-1/2)	-409.8059	-435.5679	-439.430
E(J=L+1/2)	-365.9114	-390.4980	-387.170
RE 75 3 S			
EO	-80.1963	-90.8310	
EM	-30.3163	-34.4378	
ED	17.8062	20.2563	
E(L=0)	-92.7064	-105.0125	-107.760
RE 75 3 P			
EO	-71.5716	-83.1075	
EM	-6.1414	-7.1359	
ED	-.1015	-.0620	
ESO	-2.7026	-3.1945	
E(J=L-1/2)	-83.2197	-96.6944	-98.570
E(J=L+1/2)	-75.1119	-87.1109	-86.990
RE 75 3 D			
EO	-54.1356	-68.8077	
EM	-1.5991	-2.0645	
ED	-.1201	-.0402	
ESO	-.3859	-.5042	
E(J=L-1/2)	-57.0125	-72.4250	-71.630
E(J=L+1/2)	-55.0830	-69.9040	-69.800
RE 75 4 S			
EO	-18.0756	-18.1798	
EM	-7.4634	-8.5169	
ED	4.3233	4.9153	
E(L=0)	-21.2157	-21.7814	-22.970
RE 75 4 P			
EO	-14.8384	-14.9909	
EM	-1.5096	-1.7780	
ED	-.0136	-.0143	
ESO	-.6175	-.7316	
E(J=L-1/2)	-17.5966	-18.2464	-19.040
E(J=L+1/2)	-15.7441	-16.0516	-16.350

212

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

RE 75	4 D			
	EO	-8.9078	-9.2100	
	EM	-.3862	-.5134	
	ED	-.0094	-.0079	
	ESO	-.0760	-.0991	
	E(J=L-1/2)	-9.5314	-10.0286	-10.070
	E(J=L+1/2)	-9.1514	-9.5331	-9.560
RE 75	4 F			
	EO	-2.1671	-1.6987	
	EM	-.0518	-.0982	
	ED	-.0031	-.0030	
	ESO	-.0072	-.0140	
	E(J=L-1/2)	-2.2508	-1.8559	-1.730
	E(J=L+1/2)	-2.2004	-1.7579	-1.650
RE 75	5 S			
	EO	-2.6729	-2.5645	
	EM	-1.6942	-1.5233	
	ED	.9767	.8746	
	E(L=0)	-3.3904	-3.2132	-3.050
RE 75	5 P			
	EO	-1.6520	-1.6322	
	EM	-.3027	-.2704	
	ED	-.0025	-.0021	
	ESO	-.1212	-.1089	
	E(J=L-1/2)	-2.1996	-2.1225	-1.690
	E(J=L+1/2)	-1.8360	-1.7958	-1.290
RE 75	5 D			
	EO	-.1742	-.2946	
	EM	-.0347	-.0358	
	ED	-.0007	-.0005	
	ESO	-.0065	-.0066	
	E(J=L-1/2)	-.2291	-.3507	-.150
	E(J=L+1/2)	-.1966	-.3177	-----
RE 75	6 S			
	EO	-.1958	-.2594	
	EM	-.0801	-.1320	
	ED	.0461	.0757	
	E(L=0)	-.2298	-.3157	-----

OS 76	1 S			
	EO	-2478.1035	-2490.4734	
	EM	-1117.9986	-1111.1365	
	ED	860.0178	890.4967	
	E(L=0)	-2736.0843	-2711.1132	-2716.285

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

OS 76	2 S			
	EO	-384.1123	-409.8319	
	EM	-154.6132	-156.4161	
	ED	94.9378	97.5420	
	E(L=0)	-443.7877	-468.7060	-476.842
OS 76	2 P			
	EO	-365.7964	-392.6585	
	EM	-26.2463	-26.1407	
	ED	-1.8627	-3.024	
	ESO	-15.4554	-15.8774	
	E(J=L-1/2)	-424.8162	-450.8564	-455.404
	E(J=L+1/2)	-378.4500	-403.2242	-399.700
OS 76	3 S			
	EO	-83.5403	-94.1614	
	EM	-32.2387	-36.5048	
	ED	18.9181	21.4664	
	E(L=0)	-96.8609	-109.1998	-112.114
OS 76	3 P			
	EO	-74.7373	-86.2859	
	EM	-6.5454	-7.5789	
	ED	-1.067	-1.0651	
	ESO	-2.8775	-3.3898	
	E(J=L-1/2)	-87.1444	-100.7095	-102.660
	E(J=L+1/2)	-78.5119	-90.5401	-90.380
OS 76	3 D			
	EO	-56.9531	-71.6978	
	EM	-1.7155	-2.2002	
	ED	-1.268	-1.0424	
	ESO	-4.134	-5.370	
	E(J=L-1/2)	-60.0356	-75.5514	-74.680
	E(J=L+1/2)	-57.9686	-72.8664	-72.070
OS 76	4 S			
	EO	-18.9889	-19.0707	
	EM	-8.0108	-9.0705	
	ED	4.6383	5.2325	
	E(L=0)	-22.3614	-22.9087	-24.085
OS 76	4 P			
	EO	-15.6573	-15.7970	
	EM	-1.6282	-1.9004	
	ED	-0.0145	-0.0151	
	ESO	-6.6648	-7.7839	
	E(J=L-1/2)	-18.6296	-19.2743	-20.110
	E(J=L+1/2)	-16.6352	-16.9316	-17.250

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

OS 76 4 D			
EO	-9.5406	-9.8500	
EM	-.4221	-.5537	
ED	-.0101	-.0084	
ES0	-.0828	-.1066	
E(J=L-1/2)	-10.2212	-10.7319	-10.660
E(J=L+1/2)	-9.8072	-10.1989	-10.040
OS 76 4 F			
EO	-2.5245	-2.0726	
EM	-.0595	-.1100	
ED	-.0035	-.0033	
ES0	-.0083	-.0156	
E(J=L-1/2)	-2.6207	-2.2483	-1.912
E(J=L+1/2)	-2.5626	-2.1391	-1.839
OS 76 5 S			
EO	-2.8377	-2.7315	
EM	-1.8387	-1.6718	
ED	1.0595	.9594	
E(L=0)	-3.6169	-3.4439	-3.089
OS 76 5 P			
EO	-1.7736	-1.7535	
EM	-.3319	-.3008	
ED	-.0027	-.0023	
ES0	-.1326	-.1210	
E(J=L-1/2)	-2.3734	-2.2986	-2.133
E(J=L+1/2)	-1.9756	-1.9356	-1.690
OS 76 5 D			
EO	-.2075	-.3268	
EM	-.0420	-.0426	
ED	-.0008	-.0006	
ES0	-.0078	-.0078	
E(J=L-1/2)	-.2737	-.3934	----
E(J=L+1/2)	-.2347	-.3544	----
OS 76 6 S			
EO	-.2015	-.2650	
EM	-.0876	-.1406	
ED	.0504	.0806	
E(L=0)	-.2387	-.3250	----

IR 77 1 S			
EO	-2546.5214	-2559.2311	
EM	-1177.7320	-1170.7667	
ED	906.2748	938.2751	
E(L=0)	-2917.9786	-2791.7227	-2798.651

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

POTENCIAL POTENCIAL VALORES
ANALITICO AUTOCONSISTENTE EXPERIMENTALES

```
*****
```

IR 77	2 S			
	EO	-396.3290	-422.4641	
	EM	-163.2052	-165.0801	
	ED	100.2237	102.9299	
	E(L=0)	-459.3105	-484.6143	-493.425
IR 77	2 P			
	EO	-377.7242	-405.0140	
	EM	-27.7258	-27.6144	
	ED	-1.9415	-.3158	
	ESO	-16.3219	-16.7674	
	E(J=L-1/2)	-440.0353	-466.4790	-471.540
	E(J=L+1/2)	-391.0696	-416.1768	-412.400
IR 77	3 S			
	EO	-86.5818	-97.5634	
	EM	-34.2696	-38.6613	
	ED	20.1046	22.7277	
	E(L=0)	-100.7468	-113.4970	-116.710
IR 77	3 P			
	EO	-77.6077	-89.5331	
	EM	-6.9770	-8.0414	
	ED	-.1159	-.0683	
	ESO	-3.0628	-3.5936	
	E(J=L-1/2)	-90.8262	-104.8300	-106.960
	E(J=L+1/2)	-81.6378	-94.0492	-93.800
IR 77	3 D			
	EO	-59.4886	-74.6562	
	EM	-1.8423	-2.3426	
	ED	-.1422	-.0446	
	ESO	-.4433	-.5713	
	E(J=L-1/2)	-62.8030	-78.7573	-77.810
	E(J=L+1/2)	-60.5865	-75.9008	-75.050
IR 77	4 S			
	EO	-19.5756	-19.9876	
	EM	-8.5522	-9.6539	
	ED	4.9494	5.5667	
	E(L=0)	-23.1784	-24.0748	-25.372
IR 77	4 P			
	EO	-16.1544	-16.6279	
	EM	-1.7450	-2.0297	
	ED	-.0154	-.0159	
	ESO	-.7112	-.8329	
	E(J=L-1/2)	-19.3372	-20.3393	-21.220
	E(J=L+1/2)	-17.2036	-17.8436	-18.200

216

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

IR 77	4 D			
	EO	-9.8619	-10.5130	
	EM	-.4568	-.5965	
	ED	-.0108	-.0089	
	ESO	-.0893	-.1147	
	E(J=L-1/2)	-10.5974	-11.4625	-11.470
	E(J=L+1/2)	-10.1509	-10.8890	-10.850
IR 77	4 F			
	EO	-2.5802	-2.4693	
	EM	-.0664	-.1226	
	ED	-.0039	-.0037	
	ESO	-.0092	-.0174	
	E(J=L-1/2)	-2.6873	-2.6652	-2.320
	E(J=L+1/2)	-2.6229	-2.5434	-2.210
IR 77	5 S			
	EO	-2.8411	-2.8983	
	EM	-1.9333	-1.8297	
	ED	1.1133	1.0494	
	E(L=0)	-3.6611	-3.6786	-3.529
IR 77	5 P			
	EO	-1.7541	-1.8744	
	EM	-.3482	-.3331	
	ED	-.0028	-.0025	
	ESO	-.1388	-.1338	
	E(J=L-1/2)	-2.3827	-2.4776	-2.320
	E(J=L+1/2)	-1.9663	-2.0762	-1.880
IR 77	5 D			
	EO	-.1715	-.3592	
	EM	-.0403	-.0499	
	ED	-.0008	-.0007	
	ESO	-.0075	-.0091	
	E(J=L-1/2)	-.2351	-.4371	-.147
	E(J=L+1/2)	-.1976	-.3916	-----
IR 77	6 S			
	EO	-.1976	-.2704	
	EM	-.0843	-.1492	
	ED	.0485	.0855	
	E(L=0)	-.2334	-.3341	-----

PT 78	1 S			
	EO	-2515.8154	-2628.8445	
	EM	-1240.4657	-1232.8237	
	ED	949.3210	988.0346	
	E(L=0)	-2906.9601	-2873.6336	-2882.635

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PT 78 2 S			
EO	-408.9761	-435.1892	
EM	-172.0588	-174.1000	
ED	105.6681	108.5384	
E(L=0)	-475.3668	-500.7508	-510.377
PT 78 2 P			
EO	-390.0322	-417.4482	
EM	-29.2423	-29.1482	
ED	-2.1369	-.3295	
ESO	-17.2074	-17.6934	
E(J=L-1/2)	-455.8262	-482.3127	-488.060
E(J=L+1/2)	-404.2040	-429.2325	-425.200
PT 78 3 S			
EO	-90.1657	-100.9237	
EM	-36.3535	-40.9126	
ED	21.3232	24.0442	
E(L=0)	-105.1960	-117.7921	-121.269
PT 78 3 P			
EO	-81.0100	-92.7386	
EM	-7.4176	-8.5251	
ED	-.1217	-.0715	
ESO	-3.2534	-3.8066	
E(J=L-1/2)	-95.0561	-108.9484	-111.300
E(J=L+1/2)	-85.2959	-97.5286	-97.300
PT 78 3 D			
EO	-62.5381	-77.5715	
EM	-1.9697	-2.4913	
ED	-.1499	-.0469	
ESO	-.4734	-.6072	
E(J=L-1/2)	-66.0779	-81.9313	-80.970
E(J=L+1/2)	-63.7109	-78.8953	-77.990
PT 78 4 S			
EO	-20.6349	-20.8174	
EM	-9.1672	-10.2680	
ED	5.3030	5.9184	
E(L=0)	-24.4991	-25.1670	-26.622
PT 78 4 P			
EO	-17.1169	-17.3709	
EM	-1.8791	-2.1663	
ED	-.0165	-.0168	
ESO	-.7643	-.8878	
E(J=L-1/2)	-20.5411	-21.3296	-22.350
E(J=L+1/2)	-18.2482	-18.6662	-19.680

218

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

PT 78	4 D			
	EO	-10.6336	-11.0868	
	EM	-.4984	-.6420	
	ED	-.0107	-.0095	
	ESO	-.0970	-.1232	
	E(J=L-1/2)	-11.4337	-12.1079	-12.170
	E(J=L+1/2)	-10.9487	-11.4919	-11.550
PT 78	4 F			
	EO	-3.0730	-2.7762	
	EM	-.0761	-.1362	
	ED	-.0043	-.0040	
	ESO	-.0105	-.0193	
	E(J=L-1/2)	-3.1954	-2.9936	-2.720
	E(J=L+1/2)	-3.1219	-2.8585	-2.570
PT 78	5 S			
	EO	-3.0638	-2.9572	
	EM	-2.1115	-1.9905	
	ED	1.2153	1.1411	
	E(L=0)	-3.9600	-3.8066	-3.751
PT 78	5 P			
	EO	-1.9263	-1.8903	
	EM	-.3854	-.3649	
	ED	-.0031	-.0027	
	ESO	-.1533	-.1462	
	E(J=L-1/2)	-2.6214	-2.5503	-2.430
	E(J=L+1/2)	-2.1615	-2.1117	-1.870
PT 78	5 D			
	EO	-.2299	-.3097	
	EM	-.0518	-.0535	
	ED	-.0010	-.0007	
	ESO	-.0096	-.0098	
	E(J=L-1/2)	-.3115	-.3933	-.074
	E(J=L+1/2)	-.2635	-.3443	-----
PT 78	6 S			
	EO	-.2061	-.2504	
	EM	-.0956	-.1344	
	ED	.0550	.0770	
	E(L=0)	-.2467	-.3078	-----

AU 79	1 S			
	EO	-2586.1349	-2699.1160	
	EM	-1304.9897	-1296.7961	
	ED	999.2093	1039.6577	
	E(L=0)	-2991.9153	-2956.2544	-2968.311

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

AU 79 2 S			
EO	-421.8089	-447.9319	
EM	-181.3646	-183.3774	
ED	111.1593	114.3693	
E(L=0)	-492.0142	-516.9400	-527.769
AU 79 2 P			
EO	-402.5408	-429.8847	
EM	-30.8311	-30.6472	
ED	-2.2379	-.3435	
ESO	-18.1384	-18.6560	
E(J=L-1/2)	-471.8866	-498.1874	-504.970
E(J=L+1/2)	-417.4714	-442.2194	-438.200
AU 79 3 S			
EO	-93.7170	-104.3591	
EM	-38.5461	-43.1828	
ED	22.6046	25.3841	
E(L=0)	-109.6585	-122.1578	-125.939
AU 79 3 P			
EO	-84.3827	-96.0072	
EM	-7.8832	-8.9947	
ED	-.1277	-.0742	
ESO	-3.4543	-4.0232	
E(J=L-1/2)	-99.3022	-113.1231	-115.830
E(J=L+1/2)	-88.9393	-101.0535	-100.860
AU 79 3 D			
EO	-65.5645	-80.5157	
EM	-2.1056	-2.6188	
ED	-.1581	-.0491	
ESO	-.5055	-.5438	
E(J=L-1/2)	-69.3447	-85.1150	-84.240
E(J=L+1/2)	-66.8172	-81.8960	-81.120
AU 79 4 S			
EO	-21.6104	-21.8464	
EM	-9.8038	-10.9125	
ED	5.6689	6.2893	
E(L=0)	-25.7453	-26.4696	-27.909
AU 79 4 P			
EO	-17.9967	-18.3087	
EM	-2.0184	-2.3078	
ED	-.0176	-.0177	
ESO	-.8196	-.9459	
E(J=L-1/2)	-21.6719	-22.5260	-23.680
E(J=L+1/2)	-19.2131	-19.6883	-20.080

220

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

AU 79 4 D			
EO	-11.3254	-11.8469	
EM	-.5416	-.6876	
ED	-.0127	-.0101	
ESO	-.1051	-.1322	
E(J=L-1/2)	-12.1950	-12.9412	-12.940
E(J=L+1/2)	-11.6695	-12.2802	-12.280
AU 79 4 F			
EO	-3.4880	-3.2581	
EM	-.0862	-.1487	
ED	-.0049	-.0044	
ESO	-.0119	-.0213	
E(J=L-1/2)	-3.6267	-3.4964	-3.200
E(J=L+1/2)	-3.5434	-3.3473	-3.050
AU 79 5 S			
EO	-3.2398	-3.1008	
EM	-2.2805	-2.1538	
ED	1.3118	1.2341	
E(L=0)	-4.2085	-4.0205	-3.971
AU 79 5 P			
EO	-2.0578	-1.9920	
EM	-.4202	-.3963	
ED	-.0033	-.0029	
ESO	-.1668	-.1586	
E(J=L-1/2)	-2.8149	-2.7084	-2.650
E(J=L+1/2)	-2.3145	-2.2326	-1.990
AU 79 5 D			
EO	-.2711	-.3424	
EM	-.0608	-.0588	
ED	-.0011	-.0008	
ESO	-.0112	-.0107	
E(J=L-1/2)	-.3666	-.4341	-.110
E(J=L+1/2)	-.3106	-.3806	-----
AU 79 6 S			
EO	-.2118	-.2717	
EM	-.1041	-.1510	
ED	.0598	.0864	
E(L=0)	-.2561	-.3363	-----

HG 80 1 S			
EO	-2757.6011	-2771.2228	
EM	-1371.9771	-1364.1908	
ED	1050.7233	1093.2943	
E(L=0)	-3078.8549	-3042.1193	-3055.755

221

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

HG 80	2 S			
	EO	-435.1353	-461.5801	
	EM	-190.9523	-193.2517	
	ED	117.0472	120.4505	
	E(L=0)	-509.0404	-534.3813	-545.640
HG 80	2 P			
	EO	-415.5274	-443.2788	
	EM	-32.4775	-32.4093	
	ED	-2.3337	-.3582	
	ESO	-19.1034	-19.6619	
	E(J=L-1/2)	-488.5454	-515.3701	-522.470
	E(J=L+1/2)	-431.2352	-456.3844	-451.700
HG 80	3 S			
	EO	-97.6821	-108.1851	
	EM	-40.8340	-45.7076	
	ED	23.9420	26.8470	
	E(L=0)	-114.5741	-127.0457	-130.977
HG 80	3 P			
	EO	-88.1671	-99.6875	
	EM	-8.3689	-9.5570	
	ED	-.1299	-.0784	
	ESO	-3.6640	-4.2605	
	E(J=L-1/2)	-103.9939	-117.8439	-120.570
	E(J=L+1/2)	-93.0019	-105.0624	-104.700
HG 80	3 D			
	EO	-69.0009	-83.9318	
	EM	-2.2471	-2.8107	
	ED	-.1662	-.0517	
	ESO	-.5389	-.6841	
	E(J=L-1/2)	-73.0309	-88.8465	-87.698
	E(J=L+1/2)	-70.3364	-85.4260	-84.388
HG 80	4 S			
	EO	-22.8906	-22.8798	
	EM	-10.5083	-11.5928	
	ED	6.0738	6.5767	
	E(L=0)	-27.3251	-27.7959	-29.417
HG 80	4 P			
	EO	-19.1773	-19.2574	
	EM	-2.1740	-2.4623	
	ED	-.0187	-.0186	
	ESO	-.8812	-1.0065	
	E(J=L-1/2)	-23.1324	-23.7513	-24.890
	E(J=L+1/2)	-20.4888	-20.7318	-20.990

222

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

HG 80	4 D			
	EO	-12.3103	-12.6307	
	EM	-.5911	-.7414	
	ED	-.0136	-.0107	
	ESO	-.1143	-.1417	
	E(J=L-1/2)	-13.2579	-13.8079	-13.940
	E(J=L+1/2)	-12.6864	-13.0994	-13.240
HG 80	4 F			
	EO	-4.1906	-3.7851	
	EM	-.0987	-.1661	
	ED	-.0054	-.0047	
	ESO	-.0135	-.0234	
	E(J=L-1/2)	-4.3487	-4.0495	-3.787
	E(J=L+1/2)	-4.2542	-3.8857	-3.640
HG 80	5 S			
	EO	-3.5531	-3.3985	
	EM	-2.5080	-2.3602	
	ED	1.4418	1.3516	
	E(L=0)	-4.6193	-4.4071	-4.412
HG 80	5 P			
	EO	-2.3118	-2.2360	
	EM	-.4695	-.4426	
	ED	-.0037	-.0032	
	ESO	-.1859	-.1768	
	E(J=L-1/2)	-3.1568	-3.0354	-2.978
	E(J=L+1/2)	-2.5991	-2.5050	-2.132
HG 80	5 D			
	EO	-.3875	-.4572	
	EM	-.0772	-.0752	
	ED	-.0014	-.0010	
	ESO	-.0141	-.0137	
	E(J=L-1/2)	-.5084	-.5745	-.257
	E(J=L+1/2)	-.4379	-.5060	-----
HG 80	6 S			
	EO	-.2258	-.2842	
	EM	-.1243	-.1741	
	ED	.0714	.0996	
	E(L=0)	-.2787	-.3587	-----

TL 81	1 S			
	EO	-2839.0304	-2844.7228	
	EM	-1441.9175	-1433.9551	
	ED	1105.7565	1149.3593	
	E(L=0)	-3166.1914	-3129.3186	-3145.031

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TL 81 2 S			
EO	-447.3287	-475.3697	
EM	-201.1814	-203.4459	
ED	123.3162	126.8024	
E(L=0)	-525.1939	-552.0132	-564.319
TL 81 2 P			
EO	-427.5350	-456.7979	
EM	-34.2699	-34.1452	
ED	-2.4138	-.3734	
ESO	-20.1492	-20.7783	
E(J=L-1/2)	-504.5171	-532.8731	-540.455
E(J=L+1/2)	-444.0695	-470.5382	-465.410
TL 81 3 S			
EO	-100.4159	-112.1064	
EM	-42.9925	-48.2725	
ED	25.1980	28.3489	
E(L=0)	-118.2104	-132.0300	-136.199
TL 81 3 P			
EO	-90.6987	-103.4514	
EM	-8.8306	-10.1091	
ED	-.1367	-.0820	
ESO	-3.8626	-4.5178	
E(J=L-1/2)	-107.3912	-122.5781	-125.608
E(J=L+1/2)	-95.8034	-109.1247	-108.700
TL 81 3 D			
EO	-71.0570	-87.4010	
EM	-2.3823	-2.9820	
ED	-.1754	-.0543	
ESO	-.5712	-.7279	
E(J=L-1/2)	-75.3283	-92.6210	-91.370
E(J=L+1/2)	-72.4723	-88.9815	-87.680
TL 81 4 S			
EO	-23.8052	-24.1034	
EM	-11.0181	-12.3110	
ED	6.3664	7.0883	
E(L=0)	-28.4569	-29.3261	-31.108
TL 81 4 P			
EO	-20.0067	-20.3907	
EM	-2.2823	-2.6233	
ED	-.0194	-.0196	
ESO	-.9244	-1.0745	
E(J=L-1/2)	-24.1572	-25.1826	-26.550
E(J=L+1/2)	-21.3840	-21.9591	-22.390

224

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

TL 81 4 D			
EO	-12.9628	-13.5882	
EM	-.6214	-.7958	
ED	-.0142	-.0114	
ESO	-.1202	-.1524	
E(J=L-1/2)	-13.9590	-14.8526	-14.970
E(J=L+1/2)	-13.3580	-14.0906	-14.190
TL 81 4 F			
EO	-4.5859	-4.4716	
EM	-.1024	-.1827	
ED	-.0057	-.0051	
ESO	-.0141	-.0258	
E(J=L-1/2)	-4.7504	-4.7626	-4.490
E(J=L+1/2)	-4.6517	-4.5820	-4.340
TL 81 5 S			
EO	-3.8980	-3.7612	
EM	-2.7086	-2.5687	
ED	1.5566	1.4704	
E(L=0)	-5.0500	-4.8595	-5.038
TL 81 5 P			
EO	-2.6052	-2.5477	
EM	-.5140	-.4878	
ED	-.0039	-.0035	
ESO	-.2033	-.1952	
E(J=L-1/2)	-3.5297	-3.4294	-3.680
E(J=L+1/2)	-2.9198	-2.8438	-2.790
TL 81 5 D			
EO	-.5557	-.6545	
EM	-.0933	-.0904	
ED	-.0017	-.0012	
ESO	-.0171	-.0164	
E(J=L-1/2)	-.7020	-.7953	-.590
E(J=L+1/2)	-.6165	-.7133	-.480
TL 81 6 S			
EO	-.2498	-.3525	
EM	-.1601	-.2308	
ED	.0919	.1320	
E(L=0)	-.3180	-.4513	-----
TL 81 6 P			
EO	-.1248	-.1772	
EM	-.0096	-.0242	
ED	-.0001	-.0002	
ESO	-.0038	-.0097	
E(J=L-1/2)	-.1421	-.2210	-----
E(J=L+1/2)	-.1307	-.1919	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PB 82 1 S			
EO	-2903.5999	-2918.4584	
EM	-1514.4267	-1506.0380	
ED	1162.7143	1207.2338	
E(L=0)	-3255.3123	-3217.2626	-3226.001
PB 82 2 S			
EO	-460.1046	-489.2368	
EM	-211.7781	-213.9794	
ED	129.8163	133.3624	
E(L=0)	-542.0664	-569.8538	-583.219
PB 82 2 P			
EO	-440.1048	-470.3953	
EM	-36.1229	-35.9430	
ED	-2.5092	-.3888	
ESO	-21.2307	-21.8666	
E(J=L-1/2)	-521.1983	-550.4603	-558.900
E(J=L+1/2)	-457.5062	-484.8605	-479.300
PB 82 3 S			
EO	-103.5701	-116.0739	
EM	-45.2820	-50.9284	
ED	26.5312	29.9034	
E(L=0)	-122.3209	-137.3989	-141.604
PB 82 3 P			
EO	-93.6536	-107.2617	
EM	-9.3202	-10.6828	
ED	-.1484	-.0857	
ESO	-4.0718	-4.7706	
E(J=L-1/2)	-111.2658	-127.5714	-130.680
E(J=L+1/2)	-99.0504	-113.2596	-112.770
PB 82 3 D			
EO	-73.5559	-90.9157	
EM	-2.5267	-3.1603	
ED	-.1847	-.0569	
ESO	-.6055	-.7709	
E(J=L-1/2)	-78.0838	-96.4456	-95.090
E(J=L+1/2)	-75.0563	-92.5911	-91.340
PB 82 4 S			
EO	-24.9441	-25.3545	
EM	-11.5972	-13.0603	
ED	5.6976	7.5169	
E(L=0)	-29.8437	-30.8979	-32.873

226

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

PB 82 4 P			
EO	-21.0560	-21.5522	
EM	-2.4067	-2.7917	
ED	-.0202	-.0207	
ESO	-.9739	-1.1421	
E(J=L-1/2)	-25.4307	-26.6488	-28.090
E(J=L+1/2)	-22.5090	-23.2225	-23.720
PB 82 4 D			
EO	-13.8276	-14.5759	
EM	-.6577	-.8532	
ED	-.0150	-.0120	
ESO	-.1272	-.1631	
E(J=L-1/2)	-14.8819	-15.9304	-15.990
E(J=L+1/2)	-14.2459	-15.1149	-15.190
PB 82 4 F			
EO	-5.1807	-5.1895	
EM	-.1083	-.2004	
ED	-.0060	-.0056	
ESO	-.0149	-.0282	
E(J=L-1/2)	-5.3546	-5.5083	-5.260
E(J=L+1/2)	-5.2503	-5.3109	-5.070
PB 82 5 S			
EO	-4.3381	-4.1362	
EM	-2.9486	-2.7910	
ED	1.6937	1.5970	
E(L=0)	-5.5930	-5.3302	-5.442
PB 82 5 P			
EO	-2.9865	-2.8706	
EM	-.5679	-.5363	
ED	-.0043	-.0038	
ESO	-.2244	-.2142	
E(J=L-1/2)	-4.0075	-3.8391	-3.860
E(J=L+1/2)	-3.3343	-3.1965	-3.160
PB 82 5 D			
EO	-.7958	-.8633	
EM	-.1128	-.1067	
ED	-.0020	-.0014	
ESO	-.0206	-.0193	
E(J=L-1/2)	-.9724	-1.0293	-.809
E(J=L+1/2)	-.8694	-.9328	-.735
PB 82 6 S			
EO	-.2875	-.4158	
EM	-.2156	-.2912	
ED	.1237	.1664	
E(L=0)	-.3794	-.5406	-.110

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PB 82 6 P			
EO	-.1352	-.2086	
EM	-.0138	-.0341	
ED	-.0001	-.0002	
ESO	-.0054	-.0136	
E(J=L-1/2)	-.1599	-.2701	-.037
E(J=L+1/2)	-.1437	-.2293	-----

BI 83 1 S			
EO	-2978.2199	-2992.2455	
EM	-1589.6387	-1580.3787	
ED	1221.5598	1266.4572	
E(L=0)	-3346.2988	-3306.1671	-3328.7000
BI 83 2 S			
EO	-473.1268	-503.1866	
EM	-222.8047	-224.8557	
ED	136.5815	140.0883	
E(L=0)	-559.3500	-587.9240	-602.928
BI 83 2 P			
EO	-452.9308	-484.0344	
EM	-38.0536	-37.8082	
ED	-2.5940	-.4045	
ESO	-22.3571	-22.9191	
E(J=L-1/2)	-538.2926	-568.0853	-577.630
E(J=L+1/2)	-471.2213	-499.3280	-493.400
BI 83 3 S			
EO	-106.7831	-120.0830	
EM	-47.6824	-53.6758	
ED	27.9169	31.5022	
E(L=0)	-126.5486	-142.2566	-147.046
BI 83 3 P			
EO	-96.6683	-111.1134	
EM	-9.8346	-11.2774	
ED	-.1559	-.0895	
ESO	-4.2926	-5.0163	
E(J=L-1/2)	-115.2440	-132.5129	-135.940
E(J=L+1/2)	-102.3662	-117.4640	-116.820
BI 83 3 D			
EO	-76.1169	-94.4675	
EM	-2.6793	-2.3455	
ED	-.1948	-.0595	
ESO	-.6418	-.8128	
E(J=L-1/2)	-80.9164	-100.3139	-98.840
E(J=L+1/2)	-77.7074	-96.2469	-94.870

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

BI 83 4 S			
EO	-26.1077	-26.6317	
EM	-12.1921	-13.8398	
ED	7.0388	7.9618	
E(L=0)	-31.2610	-32.5097	-34.528
BI 83 4 P			
EO	-22.1298	-22.7393	
EM	-2.5349	-2.9676	
ED	-.0212	-.0217	
ESO	-1.0245	-1.2088	
E(J=L-1/2)	-26.7349	-28.1462	-29.640
E(J=L+1/2)	-23.6614	-24.5198	-24.970
BI 83 4 D			
EO	-14.7159	-15.5890	
EM	-.6951	-.9134	
ED	-.0157	-.0127	
ESO	-.1344	-.1737	
E(J=L-1/2)	-15.8299	-17.0362	-17.060
E(J=L+1/2)	-15.1579	-16.1677	-16.180
BI 83 4 F			
EO	-5.7927	-5.9373	
EM	-.1143	-.2190	
ED	-.0064	-.0060	
ESO	-.0157	-.0307	
E(J=L-1/2)	-5.9762	-6.2851	-5.990
E(J=L+1/2)	-5.8663	-6.0702	-5.810
BI 83 5 S			
EO	-4.8093	-4.5219	
EM	-3.1967	-3.0276	
ED	1.8355	1.7314	
E(L=0)	-6.1705	-5.8181	-5.883
BI 83 5 P			
EO	-3.3999	-3.2039	
EM	-.6238	-.5885	
ED	-.0046	-.0041	
ESO	-.2461	-.2339	
E(J=L-1/2)	-4.5205	-4.2643	-4.300
E(J=L+1/2)	-3.7822	-3.5626	-3.420
BI 83 5 D			
EO	-1.0741	-1.0830	
EM	-.1325	-.1241	
ED	-.0023	-.0016	
ESO	-.0242	-.0223	
E(J=L-1/2)	-1.2815	-1.2756	-.990
E(J=L+1/2)	-1.1605	-1.1641	-.919

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

BI 83 6 S			
EO	-.3392	-.4765	
EM	-.2889	-.3555	
ED	.1656	.2030	
E(L=0)	-.4625	-.6290	-.294
BI 83 6 P			
EO	-.1513	-.2388	
EM	-.0211	-.0448	
ED	-.0002	-.0003	
ESO	-.0083	-.0177	
E(J=L-1/2)	-.1892	-.3193	-.110
E(J=L+1/2)	-.1643	-.2662	-----

PO 84 1 S			
EO	-3353.8785	-3067.9185	
EM	-1667.6251	-1657.9015	
ED	1282.9557	1328.5692	
E(L=0)	-3438.5479	-3397.2508	-3423.532
PO 84 2 S			
EO	-486.3651	-517.4647	
EM	-234.2785	-236.2102	
ED	143.6186	147.1442	
E(L=0)	-577.0250	-606.5307	-622.858
PO 84 2 P			
EO	-465.9859	-498.0593	
EM	-40.0606	-39.7444	
ED	-2.8468	-.4207	
ESO	-23.5215	-24.0868	
E(J=L-1/2)	-555.9363	-586.3980	-597.300
E(J=L+1/2)	-485.3718	-514.1376	-507.950
PO 84 3 S			
EO	-110.0096	-124.2203	
EM	-50.1854	-56.5517	
ED	29.3719	33.1816	
E(L=0)	-130.8231	-147.5904	-152.561
PO 84 3 P			
EO	-99.6985	-115.0919	
EM	-10.3745	-11.8995	
ED	-.1639	-.0934	
ESO	-4.5239	-5.2892	
E(J=L-1/2)	-119.2847	-137.6632	-141.710
E(J=L+1/2)	-105.7130	-121.7956	-121.420

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

PO 84	3 D			
	EO	-78.6968	-98.1486	
	EM	-2.8410	-3.5397	
	ED	-.2199	-.0623	
	ESO	-.6802	-.8595	
	E(J=L-1/2)	-83.7983	-104.3291	-102.880
	E(J=L+1/2)	-80.3973	-100.0316	-98.660
PO 84	4 S			
	EO	-27.2539	-27.9594	
	EM	-12.8000	-14.6623	
	ED	7.3873	8.4319	
	E(L=0)	-32.6666	-34.1898	-36.587
PO 84	4 P			
	EO	-23.1863	-23.9758	
	EM	-2.6660	-3.1533	
	ED	-.0220	-.0228	
	ESO	-1.0764	-1.2830	
	E(J=L-1/2)	-28.0271	-29.7179	-31.290
	E(J=L+1/2)	-24.7979	-25.8689	-25.920
PO 84	4 D			
	EO	-15.5867	-16.6489	
	EM	-.7332	-.9772	
	ED	-.0150	-.0135	
	ESO	-.1417	-.1855	
	E(J=L-1/2)	-16.7600	-18.1961	-18.390
	E(J=L+1/2)	-16.0515	-17.2686	-17.390
PO 84	4 F			
	EO	-6.3814	-6.7282	
	EM	-.1202	-.2390	
	ED	-.0070	-.0064	
	ESO	-.0165	-.0334	
	E(J=L-1/2)	-6.5746	-7.1072	-6.766
	E(J=L+1/2)	-6.4591	-6.8734	-----
PO 84	5 S			
	EO	-5.2890	-4.9238	
	EM	-3.4461	-3.2806	
	ED	1.9780	1.8752	
	E(L=0)	-6.7571	-6.3292	-6.508
PO 84	5 P			
	EO	-3.8245	-3.5523	
	EM	-.6800	-.6445	
	ED	-.0050	-.0044	
	ESO	-.2680	-.2558	
	E(J=L-1/2)	-5.0455	-4.7128	-4.854
	E(J=L+1/2)	-4.2415	-3.9454	-3.824

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PO 84 5 D			
EO	-1.3731	-1.3165	
EM	-.1517	-.1428	
ED	-.0026	-.0018	
ESO	-.0277	-.0256	
E(J=L-1/2)	-1.6105	-1.5379	-1.140
E(J=L+1/2)	-1.4720	-1.4099	-----
PO 84 6 S			
EO	-.4053	-.5367	
EM	-.3767	-.4244	
ED	.2159	.2422	
E(L=0)	-.5661	-.7189	-.441
PO 84 6 P			
EO	-.1755	-.2691	
EM	-.0326	-.0564	
ED	-.0002	-.0004	
ESO	-.0128	-.0223	
E(J=L-1/2)	-.2339	-.3705	-.184
E(J=L+1/2)	-.1955	-.3036	-----

AT 85 1 S			
EO	-3130.4330	-3144.5489	
EM	-1748.4489	-1738.2544	
ED	1346.3344	1392.9472	
E(L=0)	-3532.5475	-3489.8561	-3520.055
AT 85 2 S			
EO	-499.6918	-531.9913	
EM	-246.2084	-247.9913	
ED	150.9406	154.4645	
E(L=0)	-594.9596	-625.5181	-643.229
AT 85 2 P			
EO	-479.1401	-512.3041	
EM	-42.1547	-41.7578	
ED	-2.9376	-.4375	
ESO	-24.7415	-25.3008	
E(J=L-1/2)	-573.7154	-605.1010	-617.190
E(J=L+1/2)	-499.4909	-529.1986	-522.700
AT 85 3 S			
EO	-113.1431	-128.4422	
EM	-52.7934	-59.5421	
ED	30.8873	34.9275	
E(L=0)	-135.0492	-153.0568	-158.740

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

AT 85 3 P			
EO	-102.6363	-119.1540	
EM	-10.9388	-12.5479	
ED	-.1720	-.0975	
ESO	-4.7654	-5.5735	
E(J=L-1/2)	-123.2779	-142.9464	-147.377
E(J=L+1/2)	-108.9817	-126.2259	-125.900
AT 85 3 D			
EO	-81.1854	-101.9126	
EM	-3.0113	-3.7422	
ED	-.2311	-.0652	
ESO	-.7205	-.9082	
E(J=L-1/2)	-86.5893	-108.4446	-106.970
E(J=L+1/2)	-82.9868	-103.9036	-102.500
AT 85 4 S			
EO	-28.3055	-29.3240	
EM	-13.4092	-15.5238	
ED	7.7362	8.9241	
E(L=0)	-33.9785	-35.9237	-38.315
AT 85 4 P			
EO	-24.1490	-25.2487	
EM	-2.7969	-3.3483	
ED	-.0228	-.0240	
ESO	-1.1282	-1.3608	
E(J=L-1/2)	-29.2251	-31.3426	-32.580
E(J=L+1/2)	-25.8405	-27.2602	-27.200
AT 85 4 D			
EO	-16.3650	-17.7442	
EM	-.7707	-1.0444	
ED	-.0156	-.0142	
ESO	-.1489	-.1980	
E(J=L-1/2)	-17.5980	-19.3968	-19.600
E(J=L+1/2)	-16.8535	-18.4068	-18.640
AT 85 4 F			
EO	-6.8752	-7.5548	
EM	-.1254	-.2601	
ED	-.0071	-.0069	
ESO	-.0173	-.0363	
E(J=L-1/2)	-7.0769	-7.9670	-7.722
E(J=L+1/2)	-6.9558	-7.7129	-----
AT 85 5 S			
EO	-5.7357	-5.3377	
EM	-3.6840	-3.5495	
ED	2.1137	2.0279	
E(L=0)	-7.3060	-6.8593	-7.170

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

AT 85 5 P			
EO	-4.2212	-3.9122	
EM	-.7331	-.7044	
ED	-.0053	-.0048	
ESO	-.2886	-.2791	
E(J=L-1/2)	-5.5368	-5.1796	-5.440
E(J=L+1/2)	-4.6710	-4.3423	-4.230
AT 85 5 D			
EO	-1.6591	-1.5615	
EM	-.1694	-.1629	
ED	-.0029	-.0020	
ESO	-.0309	-.0291	
E(J=L-1/2)	-1.9241	-1.8137	-1.471
E(J=L+1/2)	-1.7696	-1.6682	-----
AT 85 6 S			
EO	-.4797	-.5962	
EM	-.4689	-.4978	
ED	.2686	.2840	
E(L=0)	-.6800	-.8100	-.662
AT 85 6 P			
EO	-.2077	-.2994	
EM	-.0475	-.0690	
ED	-.0003	-.0005	
ESO	-.0186	-.0272	
E(J=L-1/2)	-.2927	-.4233	-.294
E(J=L+1/2)	-.2369	-.3417	-----

RN 86 1 S			
EO	-3208.0621	-3222.3111	
EM	-1832.2993	-1821.7400	
ED	1407.1318	1459.9065	
E(L=0)	-3633.2296	-3584.1446	-3618.379
RN 86 2 S			
EO	-514.8060	-546.7460	
EM	-258.2197	-260.2084	
ED	158.1296	162.0554	
E(L=0)	-514.8961	-644.8990	-663.673
RN 86 2 P			
EO	-493.8807	-526.7769	
EM	-44.2184	-43.8466	
ED	-3.0715	-.4546	
ESO	-25.9500	-26.5603	
E(J=L-1/2)	-593.0706	-624.1987	-637.490
E(J=L+1/2)	-515.2206	-544.5178	-537.850

234

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

RN 86	3 S			
	EO	-118.3695	-132.7489	
	EM	-55.6005	-62.6527	
	ED	32.5267	36.7432	
	E(L=0)	-141.4433	-158.6584	-164.806
RN 86	3 P			
	EO	-107.6612	-123.2993	
	EM	-11.5360	-13.2208	
	ED	-.1797	-.1017	
	ESO	-5.0228	-5.8681	
	E(J=L-1/2)	-129.4225	-148.3580	-152.920
	E(J=L+1/2)	-114.3541	-130.7537	-130.090
RN 86	3 D			
	EO	-85.8097	-105.7665	
	EM	-3.1855	-3.9540	
	ED	-.2419	-.0682	
	ESO	-.7617	-.9591	
	E(J=L-1/2)	-91.5222	-112.6660	-111.120
	E(J=L+1/2)	-87.7137	-107.8705	-106.340
RN 86	4 S			
	EO	-30.6775	-30.7232	
	EM	-14.3466	-16.4252	
	ED	8.2749	9.4390	
	E(L=0)	-36.7492	-37.7094	-40.337
RN 86	4 P			
	EO	-26.4108	-26.5555	
	EM	-3.0067	-3.5528	
	ED	-.0242	-.0252	
	ESO	-1.2112	-1.4423	
	E(J=L-1/2)	-31.8641	-33.0181	-34.150
	E(J=L+1/2)	-28.2305	-28.6912	-28.230
RN 86	4 D			
	EO	-18.4072	-18.8726	
	EM	-.8396	-1.1152	
	ED	-.0185	-.0150	
	ESO	-.1617	-.2111	
	E(J=L-1/2)	-19.7504	-20.6361	-20.880
	E(J=L+1/2)	-18.9419	-19.5806	-19.890
RN 86	4 F			
	EO	-8.6115	-8.4137	
	EM	-.1434	-.2827	
	ED	-.0079	-.0074	
	ESO	-.0196	-.0394	
	E(J=L-1/2)	-8.8412	-8.8614	-8.751
	E(J=L+1/2)	-8.7040	-8.5856	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

RN 86 5 S			
EO	-6.7479	-5.7633	
EM	-4.1354	-3.8343	
ED	2.3715	2.1896	
E(L=0)	-8.5118	-7.4080	-7.868
RN 86 5 P			
EO	-5.1429	-4.2831	
EM	-.8380	-.7681	
ED	-.0059	-.0052	
ESO	-.3291	-.3039	
E(J=L-1/2)	-6.6450	-5.6642	-6.030
E(J=L+1/2)	-5.6577	-4.7525	-4.680
RN 86 5 D			
EO	-2.3760	-1.8179	
EM	-.2076	-.1843	
ED	-.0035	-.0023	
ESO	-.0376	-.0329	
E(J=L-1/2)	-2.6999	-2.1032	-1.746
E(J=L+1/2)	-2.5119	-1.9387	-----
RN 86 6 S			
EO	-.6731	-.6556	
EM	-.6718	-.5757	
ED	.3845	.3283	
E(L=0)	-.9604	-.9030	-.956
RN 86 6 P			
EO	-.3121	-.3300	
EM	-.0880	-.0827	
ED	-.0006	-.0005	
ESO	-.0343	-.0325	
E(J=L-1/2)	-.4693	-.4782	-.404
E(J=L+1/2)	-.3664	-.3807	-----

FR 87 1 S			
EO	-3286.6223	-3301.8998	
EM	-1919.3519	-1908.3006	
ED	1476.1510	1529.4826	
E(L=0)	-3729.8232	-3680.7178	-3718.874
FR 87 2 S			
EO	-527.4694	-562.0491	
EM	-271.4004	-272.9616	
ED	166.2119	170.0062	
E(L=0)	-532.6579	-665.0045	-685.368

236

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

FR 87 2 P			
EO	-506.5400	-541.7845	
EM	-46.5636	-46.0238	
ED	-3.1429	-.4725	
ESO	-27.3105	-27.9653	
E(J=L-1/2)	-610.8675	-644.2114	-658.410
E(J=L+1/2)	-528.9360	-560.3155	-552.700
FR 87 3 S			
EO	-120.0981	-137.3387	
EM	-58.3920	-65.9008	
ED	34.1414	38.6431	
E(L=0)	-144.3487	-164.5964	-171.057
FR 87 3 P			
EO	-109.2033	-127.7250	
EM	-12.1519	-13.9254	
ED	-.1964	-.1060	
ESO	-5.2824	-6.1966	
E(J=L-1/2)	-132.1164	-154.1496	-159.107
E(J=L+1/2)	-116.2692	-135.5598	-134.690
FR 87 3 D			
EO	-86.8810	-109.8929	
EM	-3.3797	-4.1744	
ED	-.2550	-.0713	
ESO	-.8077	-1.0154	
E(J=L-1/2)	-92.9388	-117.1848	-115.310
E(J=L+1/2)	-88.9003	-112.1078	-110.300
FR 87 4 S			
EO	-30.7516	-32.3294	
EM	-14.7715	-17.3749	
ED	8.5163	9.9823	
E(L=0)	-37.0068	-39.7220	-42.397
FR 87 4 P			
EO	-26.4101	-28.0674	
EM	-3.0925	-3.7686	
ED	-.0247	-.0264	
ESO	-1.2448	-1.5331	
E(J=L-1/2)	-32.0169	-34.9286	-36.040
E(J=L+1/2)	-28.2825	-30.3293	-29.780
FR 87 4 D			
EO	-19.2442	-20.2021	
EM	-.8577	-1.1901	
ED	-.0190	-.0159	
ESO	-.1654	-.2256	
E(J=L-1/2)	-19.6171	-22.0849	-22.170
E(J=L+1/2)	-18.7901	-20.9569	-21.220

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

FR 87 4 F			
EO	-8.1617	-9.4737	
EM	-.1398	-.3067	
ED	-.0080	-.0079	
ESO	-.0192	-.0429	
E(J=L-1/2)	-8.3863	-9.9599	-9.855
E(J=L+1/2)	-8.2519	-9.6596	-----
FR 87 5 S			
EO	-6.7979	-6.3556	
EM	-4.2267	-4.1389	
ED	2.4233	2.3628	
E(L=0)	-8.6013	-8.1317	-8.604
FR 87 5 P			
EO	-5.1765	-4.8196	
EM	-.8553	-.8367	
ED	-.0060	-.0056	
ESO	-.3359	-.3315	
E(J=L-1/2)	-6.7096	-6.3249	-6.690
E(J=L+1/2)	-5.7019	-5.3304	-5.150
FR 87 5 D			
EO	-2.3801	-2.2380	
EM	-.2104	-.2075	
ED	-.0035	-.0025	
ESO	-.0382	-.0370	
E(J=L-1/2)	-2.7086	-2.5590	-2.133
E(J=L+1/2)	-2.5176	-2.3740	-----
FR 87 6 S			
EO	-.6999	-.8514	
EM	-.7067	-.6790	
ED	.4044	.3870	
E(L=0)	-1.0022	-1.1434	-1.250
FR 87 6 P			
EO	-.3280	-.4844	
EM	-.0946	-.1066	
ED	-.0006	-.0007	
ESO	-.0369	-.0420	
E(J=L-1/2)	-.4970	-.6757	-.552
E(J=L+1/2)	-.3863	-.5497	-----
FR 87 7 S			
EO	-.1126	-.1392	
EM	-.0353	-.0600	
ED	.0202	.0342	
E(L=0)	-.1277	-.1650	-----

238

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

RA 88	1 S			
	EO	-3366.2043	-3381.5927	
	EM	-2009.0435	-1997.5591	
	ED	1546.6839	1601.1755	
	E(L=0)	-3828.5639	-3777.9763	-3821.280
RA 88	2 S			
	EO	-541.7264	-577.3933	
	EM	-284.6626	-286.0869	
	ED	174.3427	178.1802	
	E(L=0)	-552.0463	-685.3000	-707.357
RA 88	2 P			
	EO	-520.6076	-556.8523	
	EM	-48.8849	-48.2680	
	ED	-3.4565	-.4906	
	ESO	-28.6553	-29.3219	
	E(J=L-1/2)	-530.2596	-664.2547	-679.670
	E(J=L+1/2)	-544.2937	-576.2890	-567.890
RA 88	3 S			
	EO	-123.7495	-141.9704	
	EM	-61.3497	-69.2548	
	ED	35.8598	40.6048	
	E(L=0)	-149.2394	-170.6204	-177.308
RA 88	3 P			
	EO	-112.6586	-132.1994	
	EM	-12.7946	-14.6547	
	ED	-.2057	-.1104	
	ESO	-5.5568	-6.5172	
	E(J=L-1/2)	-136.7725	-159.9989	-165.100
	E(J=L+1/2)	-120.1021	-140.4473	-139.430
RA 88	3 D			
	EO	-89.8963	-114.0682	
	EM	-3.5757	-4.4040	
	ED	-.2673	-.0744	
	ESO	-.8541	-1.0707	
	E(J=L-1/2)	-96.3016	-121.7587	-119.430
	E(J=L+1/2)	-92.0311	-116.4052	-114.170
RA 88	4 S			
	EO	-32.1157	-33.9624	
	EM	-15.4891	-18.3606	
	ED	8.9257	10.5451	
	E(L=0)	-38.6791	-41.7779	-44.419

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

RA 88 4 P			
EO	-27.6803	-29.6080	
EM	-3.2477	-3.9932	
ED	-.0256	-.3277	
ESO	-1.3060	-1.6228	
E(J=L-1/2)	-33.5656	-36.8745	-38.900
E(J=L+1/2)	-29.6476	-32.3061	-32.320
RA 88 4 D			
EO	-19.3202	-21.5621	
EM	-.9035	-1.2685	
ED	-.0199	-.3167	
ESO	-.1741	-.2401	
E(J=L-1/2)	-20.7659	-23.5676	-23.390
E(J=L+1/2)	-19.8954	-22.3671	-22.170
RA 88 4 F			
EO	-8.9345	-10.5657	
EM	-.1473	-.3320	
ED	-.0084	-.0085	
ESO	-.0203	-.0463	
E(J=L-1/2)	-9.1714	-11.0914	-11.994
E(J=L+1/2)	-9.0293	-10.7673	-----
RA 88 5 S			
EO	-7.4475	-6.9641	
EM	-4.5278	-4.4597	
ED	2.5945	2.5448	
E(L=0)	-9.3808	-8.8790	-9.340
RA 88 5 P			
EO	-5.7700	-5.3722	
EM	-.9236	-.9091	
ED	-.0064	-.0050	
ESO	-.3623	-.3597	
E(J=L-1/2)	-7.4246	-7.0067	-7.350
E(J=L+1/2)	-6.3377	-5.9276	-5.630
RA 88 5 D			
EO	-2.8509	-2.6747	
EM	-.2337	-.2322	
ED	-.0038	-.0028	
ESO	-.0424	-.0413	
E(J=L-1/2)	-3.2156	-3.0336	-2.500
E(J=L+1/2)	-3.0036	-2.8271	-----
RA 88 6 S			
EO	-.8709	-1.0506	
EM	-.8626	-.7915	
ED	.4934	.4509	
E(L=0)	-1.2401	-1.3912	-1.618

240

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

RA 88 6 P			
EO	-.4401	-.6430	
EM	-.1294	-.1321	
ED	-.0009	-.0009	
ESO	-.0504	-.0519	
E(J=L-1/2)	-.6712	-.8798	-.699
E(J=L+1/2)	-.5200	-.7241	-----
RA 88 7 S			
EO	-.1202	-.1661	
EM	-.0400	-.0881	
ED	.0229	.0502	
E(L=0)	-.1373	-.2040	-----

AC 89 1 S			
EO	-3446.8266	-3462.2181	
EM	-2101.8396	-2089.9091	
ED	1519.3422	1675.1843	
E(L=0)	-3929.3240	-3876.9429	-3925.451
AC 89 2 S			
EO	-556.2465	-592.8971	
EM	-298.4158	-299.6789	
ED	182.7810	186.6246	
E(L=0)	-671.8813	-705.9514	-729.533
AC 89 2 P			
EO	-534.9440	-572.0694	
EM	-51.2997	-50.5971	
ED	-3.5625	-.5091	
ESO	-30.0611	-30.7298	
E(J=L-1/2)	-549.9284	-684.6352	-701.690
E(J=L+1/2)	-559.7451	-592.4458	-583.580
AC 89 3 S			
EO	-127.4941	-146.6336	
EM	-64.4414	-72.7316	
ED	37.6387	42.6291	
E(L=0)	-154.2968	-176.7361	-183.926
AC 89 3 P			
EO	-116.2080	-136.6992	
EM	-13.4658	-15.4110	
ED	-.2152	-.1150	
ESO	-5.8431	-6.8491	
E(J=L-1/2)	-141.5752	-165.9234	-171.200
E(J=L+1/2)	-124.0459	-145.3761	-143.730

241

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

AC 89 3 D			
EO	-93.0083	-118.2641	
EM	-3.7815	-4.6422	
ED	-.2799	-.0777	
ESO	-.9027	-1.1281	
E(J=L-1/2)	-99.7778	-126.3683	-123.910
E(J=L+1/2)	-95.2643	-120.7278	-118.360
AC 89 4 S			
EO	-33.5320	-35.5799	
EM	-16.2276	-19.3886	
ED	9.3481	11.1318	
E(L=0)	-40.4115	-43.8367	-46.661
AC 89 4 P			
EO	-29.0021	-31.1313	
EM	-3.4083	-4.2279	
ED	-.0266	-.0290	
ESO	-1.3692	-1.7164	
E(J=L-1/2)	-35.1754	-38.8210	-39.710
E(J=L+1/2)	-31.0678	-33.6718	-32.720
AC 89 4 D			
EO	-20.4462	-22.9037	
EM	-.9509	-1.3507	
ED	-.0209	-.0176	
ESO	-.1831	-.2553	
E(J=L-1/2)	-21.9673	-25.0379	-24.820
E(J=L+1/2)	-21.0518	-23.7614	-23.490
AC 89 4 F			
EO	-9.7517	-11.6389	
EM	-.1550	-.3586	
ED	-.0089	-.0090	
ESO	-.0214	-.0500	
E(J=L-1/2)	-10.0012	-12.2065	-11.729
E(J=L+1/2)	-9.8514	-11.8565	-----
AC 89 5 S			
EO	-8.1494	-7.5325	
EM	-4.8394	-4.7993	
ED	2.7722	2.7374	
E(L=0)	-10.2166	-9.5944	-10.001
AC 89 5 P			
EO	-6.4161	-5.8843	
EM	-.9946	-.9861	
ED	-.0067	-.0064	
ESO	-.3895	-.3896	
E(J=L-1/2)	-8.1964	-7.6560	-7.900
E(J=L+1/2)	-7.0279	-6.4872	-6.140

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

AC 89 5 D			
EO	-3.3756	-3.0709	
EM	-.2580	-.2586	
ED	-.0042	-.0030	
ESO	-.0468	-.0459	
E(J=L-1/2)	-3.7782	-3.4702	-2.940
E(J=L+1/2)	-3.5442	-3.2407	-----
AC 89 6 S			
EO	-1.0835	-1.1956	
EM	-1.0349	-.9090	
ED	.5917	.5175	
E(L=0)	-1.5267	-1.5871	-----
AC 89 6 P			
EO	-.5932	-.7506	
EM	-.1691	-.1572	
ED	-.0011	-.0010	
ESO	-.0657	-.0617	
E(J=L-1/2)	-.8948	-1.0322	-----
E(J=L+1/2)	-.6977	-.8471	-----
AC 89 6 D			
EO	-.0669	-.1731	
EM	-.0031	-.0186	
ED	.0000	-.0002	
ESO	-.0005	-.0033	
E(J=L-1/2)	-.0715	-.2018	-----
E(J=L+1/2)	-.0690	-.1853	-----
AC 89 7 S			
EO	-.1298	-.1781	
EM	-.0485	-.1027	
ED	.0277	.0585	
E(L=0)	-.1506	-.2223	-----

TH 90 1 S			
EO	-3528.4990	-3543.8176	
EM	-2197.8286	-2185.4185	
ED	1594.9812	1751.7279	
E(L=0)	-4331.3464	-3977.5082	-4031.939
TH 90 2 S			
EO	-570.9664	-608.6240	
EM	-312.7011	-313.7520	
ED	191.5483	195.3679	
E(L=0)	-592.1192	-727.0081	-752.769

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TH 90 2 P			
EO	-549.4989	-587.5037	
EM	-53.8118	-53.0097	
ED	-3.6851	-.5282	
ESO	-31.5225	-32.1882	
E(J=L-1/2)	-670.0408	-705.4180	-724.100
E(J=L+1/2)	-575.4733	-608.8534	-599.400
TH 90 3 S			
EO	-131.1892	-151.3694	
EM	-67.6741	-76.3459	
ED	39.5145	44.7374	
E(L=0)	-159.3488	-182.9779	-191.546
TH 90 3 P			
EO	-119.7130	-141.2753	
EM	-14.1732	-16.1976	
ED	-.2254	-.1197	
ESO	-6.1443	-7.1941	
E(J=L-1/2)	-146.4002	-171.9808	-177.640
E(J=L+1/2)	-127.9673	-150.3985	-148.800
TH 90 3 D			
EO	-96.0877	-122.5384	
EM	-4.0006	-4.8903	
ED	-.3180	-.0810	
ESO	-.9543	-1.1878	
E(J=L-1/2)	-103.2692	-131.0731	-128.400
E(J=L+1/2)	-98.4977	-125.1341	-122.520
TH 90 4 S			
EO	-34.8319	-37.2204	
EM	-16.9838	-20.4630	
ED	9.7803	11.7448	
E(L=0)	-42.0354	-45.9386	-48.905
TH 90 4 P			
EO	-30.2079	-32.6770	
EM	-3.5726	-4.4735	
ED	-.0279	-.0304	
ESO	-1.4331	-1.8142	
E(J=L-1/2)	-36.6746	-40.8093	-42.950
E(J=L+1/2)	-32.3753	-35.3667	-35.600
TH 90 4 D			
EO	-21.4564	-24.2680	
EM	-.9993	-1.4370	
ED	-.0218	-.0185	
ESO	-.1922	-.2712	
E(J=L-1/2)	-23.0541	-26.5371	-26.250
E(J=L+1/2)	-22.0931	-25.1811	-24.890

244

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

TH 90 4 F			
EO	-10.4471	-12.7334	
EM	-.1628	-.3868	
ED	-.0094	-.0096	
ESO	-.0224	-.0538	
E(J=L-1/2)	-10.7089	-13.3450	-12.650
E(J=L+1/2)	-10.5521	-12.9684	-12.320
TH 90 5 S			
EO	-8.7825	-8.1001	
EM	-5.1361	-5.1559	
ED	2.9411	2.9395	
E(L=0)	-10.9775	-10.3165	-10.663
TH 90 5 P			
EO	-6.9986	-6.3955	
EM	-1.0617	-1.0671	
ED	-.0071	-.0069	
ESO	-.4153	-.4210	
E(J=L-1/2)	-8.8980	-8.3115	-8.420
E(J=L+1/2)	-7.6521	-7.0485	-6.690
TH 90 5 D			
EO	-3.8504	-3.4670	
EM	-.2804	-.2866	
ED	-.0045	-.0033	
ESO	-.0508	-.0507	
E(J=L-1/2)	-4.2877	-3.9090	-3.490
E(J=L+1/2)	-4.0337	-3.6555	-3.240
TH 90 6 S			
EO	-1.2938	-1.3311	
EM	-1.1941	-1.0319	
ED	.6823	.5872	
E(L=0)	-1.8056	-1.7758	-2.206
TH 90 6 P			
EO	-.7538	-.8501	
EM	-.2059	-.1832	
ED	-.0013	-.0012	
ESO	-.0799	-.0718	
E(J=L-1/2)	-1.1208	-1.1781	-1.800
E(J=L+1/2)	-.8811	-.9627	-1.580
TH 90 6 D			
EO	-.0867	-.2027	
EM	-.0115	-.0246	
ED	-.0002	-.0003	
ESO	-.0020	-.0043	
E(J=L-1/2)	-.1044	-.2405	-.007
E(J=L+1/2)	-.0944	-.2190	-----

245

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

TH 90 7 S			
EO	-.1404	-.1872	
EM	-.0609	-.1153	
ED	.0348	.0656	
E(L=0)	-.1665	-.2369	----

PA 91 1 S			
EO	-3509.8168	-3626.0106	
EM	-2297.2781	-2284.1725	
ED	1766.1637	1830.8698	
E(L=0)	-4140.9312	-4079.3133	-4140.412
PA 91 2 S			
EO	-586.1339	-624.1724	
EM	-327.0164	-328.3288	
ED	200.3357	204.4227	
E(L=0)	-712.8146	-748.0785	-776.044
PA 91 2 P			
EO	-564.2916	-602.7684	
EM	-56.2846	-55.5101	
ED	-3.8270	-.5476	
ESO	-32.9684	-33.6988	
E(J=L-1/2)	-590.3400	-726.2237	-746.950
E(J=L+1/2)	-591.4348	-625.1273	-615.280
PA 91 3 S			
EO	-135.5387	-155.7712	
EM	-71.2111	-80.0910	
ED	41.5769	46.9214	
E(L=0)	-165.1729	-186.9408	-197.344
PA 91 3 P			
EO	-123.8766	-145.5114	
EM	-14.9355	-17.0150	
ED	-.2341	-.1245	
ESO	-6.4707	-7.5524	
E(J=L-1/2)	-151.9876	-177.7557	-183.890
E(J=L+1/2)	-132.5755	-155.0985	-153.480
PA 91 3 D			
EO	-99.9053	-126.4764	
EM	-4.2374	-5.1491	
ED	-.3166	-.0845	
ESO	-1.0081	-1.2500	
E(J=L-1/2)	-107.4766	-135.4600	-132.770
E(J=L+1/2)	-102.4361	-129.2100	-126.560

246

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

PA 91	4 S			
	EO	-35.8855	-38.4931	
	EM	-18.0807	-21.5782	
	ED	10.4085	12.3809	
	E(L=0)	-43.5577	-47.6904	-51.000
PA 91	4 P			
	EO	-31.1521	-33.8552	
	EM	-3.8186	-4.7288	
	ED	-.0296	-.0318	
	ESO	-1.5296	-1.9158	
	E(J=L-1/2)	-38.0595	-42.4474	-45.000
	E(J=L+1/2)	-33.4707	-36.7000	-37.020
PA 91	4 D			
	EO	-22.1852	-25.2632	
	EM	-1.0798	-1.5270	
	ED	-.0237	-.0195	
	ESO	-.2070	-.2878	
	E(J=L-1/2)	-23.9097	-27.6731	-27.320
	E(J=L+1/2)	-22.8747	-26.2341	-26.030
PA 91	4 F			
	EO	-10.8544	-13.4551	
	EM	-.1834	-.4162	
	ED	-.0107	-.0102	
	ESO	-.0252	-.0578	
	E(J=L-1/2)	-11.1493	-14.1127	-13.640
	E(J=L+1/2)	-10.9729	-13.7081	-13.230
PA 91	5 S			
	EO	-8.7964	-8.2943	
	EM	-5.4231	-5.5077	
	ED	3.1040	3.1387	
	E(L=0)	-11.1155	-10.6633	-11.398
PA 91	5 P			
	EO	-6.9702	-6.5378	
	EM	-1.1224	-1.1450	
	ED	-.0075	-.0073	
	ESO	-.4382	-.4511	
	E(J=L-1/2)	-8.9765	-8.5923	-8.199
	E(J=L+1/2)	-7.6619	-7.2390	-----
PA 91	5 D			
	EO	-3.7508	-3.5115	
	EM	-.2966	-.3106	
	ED	-.0047	-.0036	
	ESO	-.0535	-.0549	
	E(J=L-1/2)	-4.2126	-3.9904	-3.456
	E(J=L+1/2)	-3.9451	-3.7159	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PA 91 5 F			
EO	-.3190	-.2663	
EM	-.0382	-.0371	
ED	-.0012	-.0008	
ESO	-.0046	-.0045	
E(J=L-1/2)	-.3768	-.3222	-----
E(J=L+1/2)	-.3446	-.2907	-----
PA 91 6 S			
EO	-1.1869	-1.2861	
EM	-1.1830	-1.0488	
ED	.6757	.5965	
E(L=0)	-1.6942	-1.7384	-----
PA 91 6 P			
EO	-.6590	-.8057	
EM	-.1973	-.1825	
ED	-.0013	-.0011	
ESO	-.0764	-.0714	
E(J=L-1/2)	-1.0104	-1.1321	-----
E(J=L+1/2)	-.7812	-.9179	-----
PA 91 6 D			
EO	-.0690	-.1789	
EM	-.0044	-.0216	
ED	-.0001	-.0002	
ESO	-.0008	-.0038	
E(J=L-1/2)	-.0759	-.2121	-----
E(J=L+1/2)	-.0719	-.1931	-----
PA 91 7 S			
EO	-.1342	-.1837	
EM	-.0540	-.1125	
ED	.0308	.0640	
E(L=0)	-.1574	-.2322	-----

U 92 1 S			
EO	-3592.6300	-3709.3369	
EM	-2399.3226	-2386.1923	
ED	1945.0707	1912.4361	
E(L=0)	-4246.8819	-4183.0931	-4250.908
U 92 2 S			
EO	-502.0367	-640.0964	
EM	-341.8905	-343.3974	
ED	209.1987	213.7595	
E(L=0)	-734.7285	-769.7343	-800.056

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

U	92 2 P			
	EO	-579.8189	-618.4068	
	EM	-58.8433	-58.0961	
	ED	-3.9916	-.5675	
	ESO	-34.4644	-35.2612	
	E(J=L-1/2)	-711.5826	-747.5928	-770.270
	E(J=L+1/2)	-608.1894	-641.8092	-631.280
U	92 3 S			
	EO	-140.5129	-160.4152	
	EM	-74.8697	-83.9750	
	ED	43.7096	49.1861	
	E(L=0)	-171.6730	-195.2041	-204.004
U	92 3 P			
	EO	-128.6629	-149.9960	
	EM	-15.7246	-17.8623	
	ED	-.2439	-.1294	
	ESO	-6.8086	-7.9236	
	E(J=L-1/2)	-158.2486	-183.8349	-190.509
	E(J=L+1/2)	-137.8228	-160.0641	-158.260
U	92 3 D			
	EO	-104.3393	-130.6565	
	EM	-4.4682	-5.4177	
	ED	-.3299	-.0880	
	ESO	-1.0638	-1.3146	
	E(J=L-1/2)	-112.3288	-140.1060	-137.080
	E(J=L+1/2)	-107.0098	-133.5330	-130.610
U	92 4 S			
	EO	-37.5022	-39.9578	
	EM	-19.2597	-22.7418	
	ED	11.0835	13.0443	
	E(L=0)	-45.6784	-49.6553	-53.023
U	92 4 P			
	EO	-32.6577	-35.2244	
	EM	-4.0848	-4.9958	
	ED	-.0314	-.0332	
	ESO	-1.6338	-2.0219	
	E(J=L-1/2)	-40.0415	-44.2972	-46.810
	E(J=L+1/2)	-35.1401	-38.2315	-38.430
U	92 4 D			
	EO	-23.4711	-26.4492	
	EM	-1.1683	-1.6214	
	ED	-.0252	-.0205	
	ESO	-.2232	-.3052	
	E(J=L-1/2)	-25.3342	-29.0067	-28.680
	E(J=L+1/2)	-24.2182	-27.4807	-27.140

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

U 92 4 F			
EO	-11.8171	-14.3672	
EM	-.2072	-.4472	
ED	-.0118	-.0109	
ESO	-.0284	-.0621	
E(J=L-1/2)	-12.1497	-15.0737	-14.410
E(J=L+1/2)	-11.9509	-14.6390	-14.010
U 92 5 S			
EO	-9.1938	-8.6562	
EM	-5.8093	-5.8823	
ED	3.3234	3.3508	
E(L=0)	-11.6797	-11.1877	-11.914
U 92 5 P			
EO	-7.3103	-6.8460	
EM	-1.2081	-1.2292	
ED	-.0080	-.0078	
ESO	-.4708	-.4836	
E(J=L-1/2)	-9.4680	-9.0532	-9.560
E(J=L+1/2)	-8.0556	-7.5994	-7.170
U 92 5 D			
EO	-3.9808	-3.7156	
EM	-.3235	-.3381	
ED	-.0051	-.0038	
ESO	-.0581	-.0596	
E(J=L-1/2)	-4.4837	-4.2363	-3.860
E(J=L+1/2)	-4.1932	-3.9393	-3.530
U 92 5 F			
EO	-.3926	-.3091	
EM	-.0445	-.0434	
ED	-.0013	-.0009	
ESO	-.0053	-.0053	
E(J=L-1/2)	-.4596	-.3746	-----
E(J=L+1/2)	-.4225	-.3375	-----
U 92 6 S			
EO	-1.2242	-1.3236	
EM	-1.2625	-1.1159	
ED	.7208	.6344	
E(L=0)	-1.7659	-1.8051	-2.611
U 92 6 P			
EO	-.6783	-.8275	
EM	-.2115	-.1944	
ED	-.0014	-.0012	
ESO	-.0817	-.0759	
E(J=L-1/2)	-1.0546	-1.1749	-1.580
E(J=L+1/2)	-.8095	-.9472	-1.210

250

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

U 92 6 D			
EO	-.0681	-.1801	
EM	-.0043	-.0228	
ED	-.0001	-.0003	
ESO	-.0008	-.0040	
E(J=L-1/2)	-.0749	-.2152	-.147
E(J=L+1/2)	-.0709	-.1952	-----
U 92 7 S			
EO	-.1354	-.1861	
EM	-.0555	-.1172	
ED	.0317	.0666	
E(L=0)	-.1592	-.2367	-----

NP 93 1 S			
EO	-3775.9523	-3793.4230	
EM	-2504.7889	-2491.6362	
ED	1926.3482	1996.9278	
E(L=0)	-4354.3930	-4288.1314	-4363.649
NP 93 2 S			
EO	-617.4982	-656.0336	
EM	-357.2900	-358.9924	
ED	218.6489	223.4437	
E(L=0)	-756.1393	-791.5823	-824.370
NP 93 2 P			
EO	-594.9387	-634.0656	
EM	-61.5103	-60.7725	
ED	-4.1348	-.5879	
ESO	-36.0221	-36.8777	
E(J=L-1/2)	-732.6280	-769.1814	-794.180
E(J=L+1/2)	-624.5617	-658.5483	-647.430
NP 93 3 S			
EO	-144.7444	-164.9294	
EM	-78.6984	-87.9977	
ED	45.9399	51.5310	
E(L=0)	-177.5029	-201.3961	-210.394
NP 93 3 P			
EO	-132.7138	-154.3471	
EM	-16.5547	-18.7418	
ED	-.2537	-.1345	
ESO	-7.1631	-8.3086	
E(J=L-1/2)	-163.8484	-189.8406	-197.304
E(J=L+1/2)	-142.3591	-164.9148	-163.070

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

NP 93 3 D			
EO	-108.0518	-134.6969	
EM	-4.7215	-5.6963	
ED	-.3435	-.0917	
ESO	-1.1230	-1.3815	
E(J=L-1/2)	-116.4858	-144.6294	-141.560
E(J=L+1/2)	-110.8708	-137.7219	-134.720
NP 93 4 S			
EO	-38.3913	-41.2519	
EM	-20.4125	-23.9508	
ED	11.7427	13.7335	
E(L=0)	-47.0611	-51.4692	-55.190
NP 93 4 P			
EO	-33.4405	-36.4234	
EM	-4.3442	-5.2736	
ED	-.0331	-.0347	
ESO	-1.7350	-2.1323	
E(J=L-1/2)	-41.2878	-45.9963	-48.090
E(J=L+1/2)	-36.0828	-39.5994	-39.900
NP 93 4 D			
EO	-24.0446	-27.4634	
EM	-1.2535	-1.7199	
ED	-.0268	-.0215	
ESO	-.2387	-.3233	
E(J=L-1/2)	-26.0410	-30.1747	-30.040
E(J=L+1/2)	-24.8475	-28.5582	-28.420
NP 93 4 F			
EO	-12.0749	-15.1064	
EM	-.2296	-.4796	
ED	-.0134	-.0115	
ESO	-.0314	-.0665	
E(J=L-1/2)	-12.4435	-15.8635	-15.250
E(J=L+1/2)	-12.2237	-15.3980	-14.850
NP 93 5 S			
EO	-9.1122	-8.8346	
EM	-6.0842	-6.2629	
ED	3.4792	3.5662	
E(L=0)	-11.7172	-11.5313	-12.431
NP 93 5 P			
EO	-7.1915	-6.9729	
EM	-1.2655	-1.3138	
ED	-.0083	-.0082	
ESO	-.4923	-.5162	
E(J=L-1/2)	-9.4499	-9.3273	-10.400
E(J=L+1/2)	-7.9730	-7.7787	-7.570

252

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

NP 93	5 D			
	EO	-3.8025	-3.7450	
	EM	-.3378	-.3645	
	ED	-.0052	-.0041	
	ESO	-.0604	-.0641	
	E(J=L-1/2)	-4.3267	-4.3059	-4.070
	E(J=L+1/2)	-4.0247	-3.9854	-3.710
NP 93	5 F			
	EO	-.1866	-.2218	
	EM	-.0434	-.0457	
	ED	-.0013	-.0009	
	ESO	-.0052	-.0055	
	E(J=L-1/2)	-.2521	-.2904	-----
	E(J=L+1/2)	-.2157	-.2519	-----
NP 93	6 S			
	EO	-1.0980	-1.2639	
	EM	-1.2238	-1.1303	
	ED	.6984	.6423	
	E(L=0)	-1.6234	-1.7519	-----
NP 93	6 P			
	EO	-.5728	-.7697	
	EM	-.1957	-.1923	
	ED	-.0012	-.0012	
	ESO	-.0755	-.0750	
	E(J=L-1/2)	-.9207	-1.1132	-----
	E(J=L+1/2)	-.6942	-.8882	-----
NP 93	7 S			
	EO	-.1299	-.1801	
	EM	-.0503	-.1112	
	ED	.0287	.0632	
	E(L=0)	-.1515	-.2281	-----

PU 94	1 S			
	EO	-3360.4927	-3878.6247	
	EM	-2613.6469	-2600.6450	
	ED	2710.6224	2084.5122	
	E(L=0)	-4463.5172	-4394.7574	-4479.142
PU 94	2 S			
	EO	-633.5978	-672.3387	
	EM	-373.1286	-375.1193	
	ED	228.3616	233.4854	
	E(L=0)	-778.3648	-813.9726	-849.447

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PU 94	2 P			
	EO	-510.6669	-650.2976	
	EM	-64.2502	-63.5366	
	ED	-4.3071	-.6087	
	ESO	-37.6234	-38.5465	
	E(J=L-1/2)	-754.4710	-791.3359	-818.700
	E(J=L+1/2)	-541.6008	-675.6964	-663.900
PU 94	3 S			
	EO	-149.6372	-169.6802	
	EM	-82.6229	-92.1697	
	ED	48.2269	53.9691	
	E(L=0)	-184.0332	-207.8808	-218.153
PU 94	3 P			
	EO	-137.4175	-158.9368	
	EM	-17.4033	-19.6533	
	ED	-.2635	-.1397	
	ESO	-7.5259	-8.7076	
	E(J=L-1/2)	-170.1361	-196.1450	-203.920
	E(J=L+1/2)	-147.5584	-170.0222	-167.700
PU 94	3 D			
	EO	-112.4002	-138.9780	
	EM	-4.9785	-5.9862	
	ED	-.3574	-.0954	
	ESO	-1.1830	-1.4511	
	E(J=L-1/2)	-121.2851	-149.4129	-146.120
	E(J=L+1/2)	-115.3701	-142.1574	-138.950
PU 94	4 S			
	EO	-39.8973	-42.7323	
	EM	-21.6620	-25.2107	
	ED	12.4550	14.4516	
	E(L=0)	-49.1043	-53.4914	-57.286
PU 94	4 P			
	EO	-34.8370	-37.8076	
	EM	-4.6259	-5.5637	
	ED	-.0350	-.0363	
	ESO	-1.8451	-2.2475	
	E(J=L-1/2)	-43.1881	-47.9026	-50.630
	E(J=L+1/2)	-37.6528	-41.1601	-41.180
PU 94	4 D			
	EO	-25.2265	-28.6625	
	EM	-1.3477	-1.8231	
	ED	-.0284	-.0225	
	ESO	-.2559	-.3422	
	E(J=L-1/2)	-27.3703	-31.5347	-31.210
	E(J=L+1/2)	-26.0908	-29.8237	-29.800

254

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PU 94	4 F			
	EO	-12.9451	-16.0270	
	EM	-.2555	-.5137	
	ED	-.0146	-.0122	
	ESO	-.0348	-.0711	
	E(J=L-1/2)	-13.3544	-16.8373	-15.516
	E(J=L+1/2)	-13.1108	-16.3396	-----
PU 94	5 S			
	EO	-9.4376	-9.1766	
	EM	-6.4754	-6.6656	
	ED	3.7006	3.7939	
	E(L=0)	-12.2124	-12.0483	-12.942
PU 94	5 P			
	EO	-7.4629	-7.2616	
	EM	-1.3518	-1.4044	
	ED	-.0088	-.0087	
	ESO	-.5249	-.5511	
	E(J=L-1/2)	-9.8733	-9.7769	-10.250
	E(J=L+1/2)	-8.2986	-8.1236	-7.790
PU 94	5 D			
	EO	-3.9717	-3.9310	
	EM	-.3645	-.3941	
	ED	-.0056	-.0044	
	ESO	-.0649	-.0691	
	E(J=L-1/2)	-4.5365	-4.5368	-4.260
	E(J=L+1/2)	-4.2120	-4.1913	-3.860
PU 94	5 F			
	EO	-.2161	-.2525	
	EM	-.0493	-.0524	
	ED	-.0014	-.0010	
	ESO	-.0058	-.0063	
	E(J=L-1/2)	-.2900	-.3311	-----
	E(J=L+1/2)	-.2494	-.2870	-----
PU 94	6 S			
	EO	-1.1121	-1.2923	
	EM	-1.2870	-1.1934	
	ED	.7339	.6779	
	E(L=0)	-1.6652	-1.8078	-----
PU 94	6 P			
	EO	-.5746	-.7843	
	EM	-.2052	-.2031	
	ED	-.0013	-.0012	
	ESO	-.0790	-.0791	
	E(J=L-1/2)	-.9391	-1.1468	-----
	E(J=L+1/2)	-.7021	-.9095	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

PU 94 7 S			
EO	-.1304	-.1819	
EM	-.0511	-.1152	
ED	.0291	.0654	
E(L=0)	-.1524	-.2317	-----

AM 95 1 S			
EO	-3946.0191	-3964.7611	
EM	-2726.0210	-2713.0817	
ED	2097.1703	2174.6193	
E(L=0)	-4574.8698	-4503.2235	-4597.172
AM 95 2 S			
EO	-549.9148	-688.8343	
EM	-389.5050	-391.7742	
ED	238.4127	243.8280	
E(L=0)	-801.0071	-836.7805	-874.120
AM 95 2 P			
EO	-526.6156	-666.3081	
EM	-67.0750	-66.4024	
ED	-4.7796	-.6301	
ESO	-39.2632	-40.2777	
E(J=L-1/2)	-776.9966	-813.8960	-843.640
E(J=L+1/2)	-659.2070	-693.0629	-680.380
AM 95 3 S			
EO	-154.5903	-174.4863	
EM	-86.7117	-96.4787	
ED	50.5854	56.4740	
E(L=0)	-190.7166	-214.4910	-225.029
AM 95 3 P			
EO	-142.1823	-163.5788	
EM	-18.2833	-20.5980	
ED	-.2864	-.1450	
ESO	-7.8992	-9.1208	
E(J=L-1/2)	-176.5504	-202.5634	-209.950
E(J=L+1/2)	-152.8528	-175.2010	-171.600
AM 95 3 D			
EO	-115.8116	-147.3157	
EM	-5.2465	-6.2670	
ED	-.3726	-.0992	
ESO	-1.2456	-1.5233	
E(J=L-1/2)	-126.1675	-154.2718	-150.460
E(J=L+1/2)	-119.9395	-146.6553	-142.920

256

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

AM 95 4 S			
EO	-41.4157	-44.2244	
EM	-22.9574	-26.5203	
ED	13.1957	15.1977	
E(L=0)	-51.1774	-55.5470	-59.456
AM 95 4 P			
EO	-36.2463	-39.2031	
EM	-4.9195	-5.8656	
ED	-.0369	-.0378	
ESO	-1.9596	-2.3672	
E(J=L-1/2)	-45.1219	-49.8409	-51.918
E(J=L+1/2)	-39.2431	-42.7393	-41.770
AM 95 4 D			
EO	-26.4225	-29.8723	
EM	-1.4463	-1.9307	
ED	-.0307	-.0236	
ESO	-.2738	-.3619	
E(J=L-1/2)	-28.7209	-32.9123	-32.320
E(J=L+1/2)	-27.3519	-31.1028	-30.445
AM 95 4 F			
EO	-13.8330	-16.9614	
EM	-.2831	-.5495	
ED	-.0158	-.0129	
ESO	-.0385	-.0760	
E(J=L-1/2)	-14.2859	-17.8278	-16.179
E(J=L+1/2)	-14.0164	-17.2958	-----
AM 95 5 S			
EO	-9.7627	-9.5136	
EM	-6.8804	-7.0832	
ED	3.9305	4.0301	
E(L=0)	-12.7126	-12.5667	-13.494
AM 95 5 P			
EO	-7.7341	-7.5459	
EM	-1.4417	-1.4985	
ED	-.0093	-.0092	
ESO	-.5588	-.5872	
E(J=L-1/2)	-10.3027	-10.2280	-10.663
E(J=L+1/2)	-8.6263	-8.4664	-8.089
AM 95 5 D			
EO	-4.1410	-4.1132	
EM	-.3926	-.4249	
ED	-.0059	-.0047	
ESO	-.0696	-.0743	
E(J=L-1/2)	-4.7483	-4.7657	-4.256
E(J=L+1/2)	-4.4003	-4.3942	-3.787

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

AM 95 5 F			
EO	-.2459	-.2823	
EM	-.0555	-.0594	
ED	-.0016	-.0012	
ESO	-.0065	-.0071	
E(J=L-1/2)	-.3290	-.7713	----
E(J=L+1/2)	-.2835	-.3216	----
AM 95 6 S			
EO	-1.1251	-1.3189	
EM	-1.3510	-1.2565	
ED	.7701	.7134	
E(L=0)	-1.7060	-1.8620	----
AM 95 6 P			
EO	-.5755	-.7977	
EM	-.2148	-.2137	
ED	-.0013	-.0013	
ESO	-.0826	-.0831	
E(J=L-1/2)	-.9568	-1.1789	----
E(J=L+1/2)	-.7090	-.9296	----
AM 95 7 S			
EO	-.1309	-.1836	
EM	-.0520	-.1192	
ED	.0296	.0676	
E(L=0)	-.1533	-.2352	----

CM 96 1 S			
EO	-4033.1479	-4052.0411	
EM	-2842.4620	-2829.1172	
ED	2188.6747	2267.6107	
E(L=0)	-4686.9352	-4613.5476	-4714.577
CM 96 2 S			
EO	-565.8663	-705.7247	
EM	-406.8049	-408.9705	
ED	249.0180	254.5061	
E(L=0)	-823.6532	-860.1891	-899.380
CM 96 2 P			
EO	-542.3572	-682.9127	
EM	-70.1123	-69.3583	
ED	-4.9410	-.6521	
ESO	-41.0306	-42.7623	
E(J=L-1/2)	-799.4717	-837.0477	-874.340
E(J=L+1/2)	-676.3799	-710.8638	-696.045

258

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CM 96 3 S			
EO	-158.8749	-179.5626	
EM	-90.7221	-100.9390	
ED	52.9122	59.0729	
E(L=0)	-196.6848	-221.4287	-231.206
CM 96 3 P			
EO	-146.2666	-168.4895	
EM	-19.1616	-21.5753	
ED	-.2989	-.1505	
ESO	-8.2727	-9.5482	
E(J=L-1/2)	-182.2725	-209.3117	-216.756
E(J=L+1/2)	-157.4544	-180.6671	-176.380
CM 96 3 D			
EO	-120.4557	-147.9188	
EM	-5.5191	-6.5985	
ED	-.3883	-.1032	
ESO	-1.3097	-1.5981	
E(J=L-1/2)	-130.2922	-159.4148	-155.424
E(J=L+1/2)	-123.7437	-151.4243	-146.011
CM 96 4 S			
EO	-42.9873	-45.9350	
EM	-24.0014	-27.8827	
ED	13.7918	15.9737	
E(L=0)	-53.1969	-57.8440	-60.412
CM 96 4 P			
EO	-37.7158	-40.8172	
EM	-5.1514	-6.1799	
ED	-.0383	-.0395	
ESO	-2.0502	-2.4917	
E(J=L-1/2)	-47.0059	-52.0200	-52.948
E(J=L+1/2)	-40.8553	-44.5449	-42.432
CM 96 4 D			
EO	-27.6804	-31.2999	
EM	-1.5188	-2.0432	
ED	-.0321	-.0247	
ESO	-.2873	-.3825	
E(J=L-1/2)	-30.0932	-34.5153	-----
E(J=L+1/2)	-28.6567	-32.6028	-----
CM 96 4 F			
EO	-14.7555	-18.1153	
EM	-.2981	-.5873	
ED	-.0167	-.0136	
ESO	-.0405	-.0811	
E(J=L-1/2)	-15.2323	-19.0406	-----
E(J=L+1/2)	-14.9488	-18.4729	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CM 96	5 S			
	EO	-10.4739	-10.0462	
	EM	-7.2953	-7.5276	
	ED	4.1661	4.2213	
	E(L=0)	-13.6031	-13.2925	-14.046
CM 96	5 P			
	EO	-8.3884	-8.0237	
	EM	-1.5368	-1.5999	
	ED	-0.0100	-0.0097	
	ESO	-0.5951	-0.6262	
	E(J=L-1/2)	-11.1254	-10.8857	-----
	E(J=L+1/2)	-9.3401	-9.0071	-----
CM 96	5 D			
	EO	-4.6757	-4.4829	
	EM	-0.4251	-0.4596	
	ED	-0.0064	-0.0050	
	ESO	-0.0753	-0.0802	
	E(J=L-1/2)	-5.3331	-5.1881	-----
	E(J=L+1/2)	-4.9566	-4.7871	-----
CM 96	5 F			
	EO	-0.5676	-0.4640	
	EM	-0.0668	-0.0713	
	ED	-0.0019	-0.0014	
	ESO	-0.0079	-0.0085	
	E(J=L-1/2)	-0.6679	-0.5707	-----
	E(J=L+1/2)	-0.6126	-0.5112	-----
CM 96	6 S			
	EO	-1.3291	-1.4505	
	EM	-1.5541	-1.3821	
	ED	0.8856	0.7844	
	E(L=0)	-1.9976	-2.0482	-----
CM 96	6 P			
	EO	-0.7250	-0.8982	
	EM	-0.2619	-0.2410	
	ED	-0.0016	-0.0014	
	ESO	-0.1006	-0.0936	
	E(J=L-1/2)	-1.1897	-1.3278	-----
	E(J=L+1/2)	-0.8879	-1.0470	-----
CM 96	6 D			
	EO	-0.0643	-0.1805	
	EM	-0.0032	-0.0268	
	ED	0.0000	-0.0003	
	ESO	-0.0006	-0.0046	
	E(J=L-1/2)	-0.0693	-0.2214	-----
	E(J=L+1/2)	-0.0663	-0.1984	-----

260

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTAL

CM 96 7 S			
EO	-.1387	-.1945	
EM	-.0606	-.1360	
ED	.0345	.0772	
E(L=0)	-.1648	-.2533	-----

BK 97 1 S			
EO	-4120.0209	-4139.9139	
EM	-2961.6191	-2948.8363	
ED	2279.2694	2363.5598	
E(L=0)	-4802.3706	-4725.1904	-4838.490
BK 97 2 S			
EO	-583.1993	-722.4426	
EM	-423.9084	-426.7472	
ED	259.5091	265.5446	
E(L=0)	-847.5986	-883.6452	-929.348
BK 97 2 P			
EO	-659.1720	-699.3502	
EM	-73.0323	-72.4139	
ED	-5.1462	-.6744	
ESO	-42.7422	-43.9078	
E(J=L-1/2)	-822.8349	-860.2541	-896.623
E(J=L+1/2)	-694.6083	-728.5307	-715.240
BK 97 3 S			
EO	-164.6845	-184.2885	
EM	-95.3178	-105.5632	
ED	55.5965	61.7667	
E(L=0)	-204.4058	-228.0850	-241.060
BK 97 3 P			
EO	-151.9017	-173.0536	
EM	-20.1499	-22.5897	
ED	-.3090	-.1561	
ESO	-8.6955	-9.9915	
E(J=L-1/2)	-189.7516	-215.7824	-226.022
E(J=L+1/2)	-163.6651	-185.8079	-183.001
BK 97 3 D			
EO	-125.8294	-152.1806	
EM	-5.8161	-6.9230	
ED	-.4216	-.1073	
ESO	-1.3786	-1.6760	
E(J=L-1/2)	-136.2029	-164.2389	-160.535
E(J=L+1/2)	-129.3099	-155.8589	-151.930

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

BK 97 4 S			
EO	-44.4997	-47.2532	
EM	-25.7011	-29.2972	
ED	14.7636	16.7791	
E(L=0)	-55.4372	-59.7713	-64.530
BK 97 4 P			
EO	-39.1131	-42.0383	
EM	-5.5435	-6.5073	
ED	-.0409	-.0412	
ESO	-2.2025	-2.6213	
E(J=L-1/2)	-49.1025	-52.8294	-57.140
E(J=L+1/2)	-42.4950	-45.9655	-45.410
BK 97 4 D			
EO	-28.8662	-32.3338	
EM	-1.6574	-2.1605	
ED	-.0343	-.0258	
ESO	-.3121	-.4040	
E(J=L-1/2)	-31.4942	-35.7321	-----
E(J=L+1/2)	-29.9337	-33.7121	-----
BK 97 4 F			
EO	-15.6695	-18.8700	
EM	-.3436	-.6266	
ED	-.0193	-.0144	
ESO	-.0465	-.0865	
E(J=L-1/2)	-16.2184	-19.8570	-----
E(J=L+1/2)	-15.8929	-19.2515	-----
BK 97 5 S			
EO	-10.4190	-10.1798	
EM	-7.7379	-7.9637	
ED	4.4166	4.5276	
E(L=0)	-13.7403	-13.6159	-14.634
BK 97 5 P			
EO	-8.2825	-8.1065	
EM	-1.6327	-1.6974	
ED	-.0104	-.0102	
ESO	-.6305	-.5635	
E(J=L-1/2)	-11.1866	-11.1411	-----
E(J=L+1/2)	-9.2951	-9.1506	-----
BK 97 5 D			
EO	-4.4855	-4.4708	
EM	-.4528	-.4903	
ED	-.0067	-.0053	
ESO	-.0797	-.0854	
E(J=L-1/2)	-5.1841	-5.2226	-----
E(J=L+1/2)	-4.7856	-4.7956	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

BK 97	5 F			
	EO	-.3100	-.3402	
	EM	-.0694	-.0745	
	ED	-.0019	-.0014	
	ESO	-.0081	-.0089	
	E(J=L-1/2)	-.4137	-.4517	-----
	E(J=L+1/2)	-.3570	-.3894	-----
BK 97	6 S			
	EO	-1.1500	-1.3696	
	EM	-1.4837	-1.3844	
	ED	.8450	.7854	
	E(L=0)	-1.7887	-1.9686	-----
BK 97	6 P			
	EO	-.5764	-.8229	
	EM	-.2345	-.2351	
	ED	-.0015	-.0014	
	ESO	-.0898	-.0912	
	E(J=L-1/2)	-.9920	-1.2418	-----
	E(J=L+1/2)	-.7226	-.9682	-----
BK 97	7 S			
	EO	-.1320	-.1870	
	EM	-.0539	-.1274	
	ED	.0307	.0726	
	E(L=0)	-.1552	-.2418	-----

CF 98	1 S			
	EO	-4209.4816	-4228.8673	
	EM	-3086.0821	-3072.1453	
	ED	2367.0523	2462.1046	
	E(L=0)	-4927.5114	-4838.9080	-4999.173
CF 98	2 S			
	EO	-700.1550	-739.5044	
	EM	-441.9576	-445.0819	
	ED	270.5841	276.9267	
	E(L=0)	-871.5285	-907.6596	-960.050
CF 98	2 P			
	EO	-575.7672	-716.1264	
	EM	-76.1603	-75.5701	
	ED	-5.3220	-.6973	
	ESO	-44.5684	-45.8118	
	E(J=L-1/2)	-846.3863	-884.0174	-928.428
	E(J=L+1/2)	-712.6811	-746.5820	-732.815

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CF 98 3 S			
EO	-169.8184	-189.2642	
EM	-99.8552	-110.3296	
ED	59.2380	64.5428	
E(L=0)	-211.4356	-235.0510	-248.341
CF 98 3 P			
EO	-156.8489	-177.8626	
EM	-21.1361	-27.6360	
ED	-0.3203	-0.1619	
ESO	-9.1158	-10.4485	
E(J=L-1/2)	-196.5369	-222.5575	-233.817
E(J=L+1/2)	-169.1895	-191.2120	-187.855
CF 98 3 D			
EO	-130.4276	-156.6781	
EM	-6.1181	-7.2579	
ED	-0.4378	-0.1115	
ESO	-1.4490	-1.7562	
E(J=L-1/2)	-141.3305	-169.3161	-165.352
E(J=L+1/2)	-134.0855	-160.5351	-156.380
CF 98 4 S			
EO	-45.0617	-48.7885	
EM	-27.1508	-30.7618	
ED	15.5917	17.5129	
E(L=0)	-57.6208	-61.9374	-65.854
CF 98 4 P			
EO	-40.5668	-43.4754	
EM	-5.8738	-6.8464	
ED	-0.0435	-0.0429	
ESO	-2.3299	-2.7555	
E(J=L-1/2)	-51.1439	-55.8757	-59.419
E(J=L+1/2)	-44.1542	-47.6092	-47.028
CF 98 4 D			
EO	-30.1098	-33.5835	
EM	-1.7701	-2.2822	
ED	-0.0363	-0.0270	
ESO	-0.3325	-0.4262	
E(J=L-1/2)	-32.9137	-37.1713	-----
E(J=L+1/2)	-31.2512	-35.0403	-----
CF 98 4 F			
EO	-16.6133	-19.8457	
EM	-0.3765	-0.6680	
ED	-0.0207	-0.0152	
ESO	-0.0509	-0.0921	
E(J=L-1/2)	-17.2141	-20.8973	-----
E(J=L+1/2)	-16.8578	-20.2526	-----

264

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

CF 98 5 S			
EO	-10.7485	-10.5103	
EM	-8.1904	-8.4298	
ED	4.6729	4.7908	
E(L=0)	-14.2660	-14.1493	-15.406
CF 98 5 P			
EO	-8.5581	-8.3837	
EM	-1.7340	-1.8030	
ED	-.0109	-.0107	
ESO	-.6685	-.7039	
E(J=L-1/2)	-11.6400	-11.6052	-----
E(J=L+1/2)	-9.6345	-9.4935	-----
CF 98 5 D			
EO	-4.6592	-4.6467	
EM	-.4849	-.5253	
ED	-.0071	-.0056	
ESO	-.0850	-.0913	
E(J=L-1/2)	-5.4062	-5.4515	-----
E(J=L+1/2)	-4.9812	-4.9950	-----
CF 98 5 F			
EO	-.3432	-.3672	
EM	-.0770	-.0827	
ED	-.0021	-.0016	
ESO	-.0089	-.0098	
E(J=L-1/2)	-.4579	-.4907	-----
E(J=L+1/2)	-.3956	-.4221	-----
CF 98 6 S			
EO	-1.1616	-1.3924	
EM	-1.5520	-1.4488	
ED	.8835	.8216	
E(L=0)	-1.8301	-2.0196	-----
CF 98 6 P			
EO	-.5762	-.8336	
EM	-.2445	-.2457	
ED	-.0015	-.0014	
ESO	-.0935	-.0952	
E(J=L-1/2)	-1.0092	-1.2711	-----
E(J=L+1/2)	-.7287	-.9855	-----
CF 98 7 S			
EO	-.1325	-.1884	
EM	-.0549	-.1315	
ED	.0312	.0746	
E(L=0)	-.1562	-.2453	-----

265

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

E 99	1 S			
	EO	-4297.9174	-4318.7805	
	EM	-3213.3426	-3199.6912	
	ED	2465.4867	2564.5818	
	E(L=0)	-5045.7733	-4953.8899	-5128.969
E 99	2 S			
	EO	-717.3218	-756.7920	
	EM	-460.6925	-463.9863	
	ED	281.6956	288.6290	
	E(L=0)	-896.3187	-932.1493	-989.098
E 99	2 P			
	EO	-592.5759	-733.1342	
	EM	-79.3909	-78.8266	
	ED	-5.5279	-7.207	
	ESO	-46.4542	-47.7771	
	E(J=L-1/2)	-970.4031	-908.2357	-956.741
	E(J=L+1/2)	-731.0405	-764.9044	-750.464
E 99	3 S			
	EO	-175.0125	-194.3123	
	EM	-104.5536	-115.2637	
	ED	60.9726	67.4162	
	E(L=0)	-218.5935	-242.1598	-256.540
E 99	3 P			
	EO	-161.8569	-182.7443	
	EM	-22.1583	-24.7202	
	ED	-.3321	-.1678	
	ESO	-9.5512	-10.9219	
	E(J=L-1/2)	-203.4497	-229.4761	-241.722
	E(J=L+1/2)	-174.7961	-196.7104	-193.113
E 99	3 D			
	EO	-135.0878	-161.2521	
	EM	-6.4321	-7.6047	
	ED	-.4542	-.1157	
	ESO	-1.5221	-1.8394	
	E(J=L-1/2)	-146.5404	-174.4907	-170.242
	E(J=L+1/2)	-138.9299	-165.2937	-160.830
E 99	4 S			
	EO	-47.6387	-50.3415	
	EM	-28.6544	-32.2847	
	ED	16.4502	18.4796	
	E(L=0)	-59.8429	-64.1466	-68.685

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

		POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

E	99 4 P			
	EO	-42.0357	-44.9307	
	EM	-6.2174	-7.1993	
	ED	-0.0457	-0.0447	
	ESO	-2.4632	-2.8950	
	E(J=L-1/2)	-53.2252	-57.9647	-61.773
	E(J=L+1/2)	-45.8356	-49.2797	-48.572
E	99 4 D			
	EO	-31.3695	-34.8499	
	EM	-1.8877	-2.4094	
	ED	-0.0382	-0.0282	
	ESO	-0.3537	-0.4494	
	E(J=L-1/2)	-34.3565	-38.6357	----
	E(J=L+1/2)	-32.5880	-36.3887	----
E	99 4 F			
	EO	-17.5753	-20.8341	
	EM	-0.4114	-0.7111	
	ED	-0.0222	-0.0160	
	ESO	-0.0554	-0.0979	
	E(J=L-1/2)	-18.2305	-21.9528	----
	E(J=L+1/2)	-17.8427	-21.2675	----
E	99 5 S			
	EO	-11.0799	-10.8393	
	EM	-8.6595	-8.9111	
	ED	4.9385	5.0625	
	E(L=0)	-14.8009	-14.6879	-15.995
E	99 5 P			
	EO	-8.8356	-8.6603	
	EM	-1.8393	-1.9122	
	ED	-0.0115	-0.0113	
	ESO	-0.7079	-0.7456	
	E(J=L-1/2)	-12.1022	-12.0750	----
	E(J=L+1/2)	-9.9785	-9.8382	----
E	99 5 D			
	EO	-4.8345	-4.8216	
	EM	-0.5186	-0.5616	
	ED	-0.0075	-0.0059	
	ESO	-0.0906	-0.0974	
	E(J=L-1/2)	-5.6324	-5.6813	----
	E(J=L+1/2)	-5.1794	-5.1943	----
E	99 5 F			
	EO	-0.3775	-0.3941	
	EM	-0.0851	-0.0912	
	ED	-0.0023	-0.0017	
	ESO	-0.0098	-0.0108	
	E(J=L-1/2)	-0.5041	-0.5302	----
	E(J=L+1/2)	-0.4355	-0.4546	----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

E 99 6 S			
EO	-1.1728	-1.4152	
EM	-1.6220	-1.5142	
ED	.9230	.8584	
E(L=0)	-1.8718	-2.0710	-----
E 99 6 P			
EO	-.5757	-.8443	
EM	-.2546	-.2566	
ED	-.0015	-.0015	
ESO	-.0972	-.0992	
E(J=L-1/2)	-1.0262	-1.3008	-----
E(J=L+1/2)	-.7346	-1.0032	-----
E 99 7 S			
EO	-.1330	-.1899	
EM	-.0560	-.1358	
ED	.0318	.0769	
E(L=0)	-.1572	-.2488	-----

FM 100 1 S			
EO	-4388.3300	-4409.6519	
EM	-3344.5048	-3330.7313	
ED	2566.3607	2669.3026	
E(L=0)	-5166.4741	-5071.0806	-5261.339
FM 100 2 S			
EO	-734.7010	-774.2741	
EM	-479.9284	-483.5132	
ED	293.4942	300.7487	
E(L=0)	-921.1352	-957.0386	-1018.513
FM 100 2 P			
EO	-709.5993	-750.3329	
EM	-82.7262	-82.1890	
ED	-5.7102	-.7446	
ESO	-48.4008	-49.8057	
E(J=L-1/2)	-894.8373	-932.8779	-985.789
E(J=L+1/2)	-749.6349	-783.4608	-768.481
FM 100 3 S			
EO	-180.2881	-199.4195	
EM	-109.4170	-120.3640	
ED	63.8035	70.3859	
E(L=0)	-225.8816	-249.3976	-264.924

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

FM 100 3 P			
EO	-166.9268	-187.6872	
EM	-23.2182	-25.8412	
ED	-.3447	-.1738	
ESO	-10.0023	-11.4111	
E(J=L-1/2)	-210.4943	-236.5244	-249.775
E(J=L+1/2)	-180.4874	-202.2911	-198.445
FM 100 3 D			
EO	-139.8111	-165.8856	
EM	-6.7584	-7.9644	
ED	-.4723	-.1201	
ESO	-1.5981	-1.9256	
E(J=L-1/2)	-151.8361	-179.7469	-175.243
E(J=L+1/2)	-143.8456	-170.1189	-165.389
FM 100 4 S			
EO	-49.2315	-51.9097	
EM	-30.2133	-33.8637	
ED	17.3399	19.3780	
E(L=0)	-62.1049	-66.3954	-71.222
FM 100 4 P			
EO	-43.5207	-46.4007	
EM	-6.5744	-7.5660	
ED	-.0480	-.0465	
ESO	-2.6014	-3.0398	
E(J=L-1/2)	-55.3459	-60.0928	-64.236
E(J=L+1/2)	-47.5417	-50.9734	-50.227
FM 100 4 D			
EO	-32.6458	-36.1307	
EM	-2.0104	-2.5420	
ED	-.0411	-.0295	
ESO	-.3757	-.4736	
E(J=L-1/2)	-35.8244	-40.1230	-----
E(J=L+1/2)	-33.9459	-37.7550	-----
FM 100 4 F			
EO	-18.5557	-21.8360	
EM	-.4482	-.7562	
ED	-.0251	-.0168	
ESO	-.0603	-.1040	
E(J=L-1/2)	-19.2702	-23.0250	-----
E(J=L+1/2)	-18.8481	-22.2970	-----
FM 100 5 S			
EO	-11.4136	-11.1673	
EM	-9.1458	-9.4096	
ED	5.2138	5.3437	
E(L=0)	-15.3456	-15.2332	-16.693

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

FM 100 5 P			
EO	-9.1152	-8.9353	
EM	-1.9487	-2.0254	
ED	-.0121	-.0118	
ESO	-.7488	-.7889	
E(J=L-1/2)	-12.5736	-12.5503	----
E(J=L+1/2)	-10.3272	-10.1836	----
FM 100 5 D			
EO	-5.0117	-4.9953	
EM	-.5538	-.5993	
ED	-.0079	-.0063	
ESO	-.0965	-.1038	
E(J=L-1/2)	-5.8629	-5.9123	----
E(J=L+1/2)	-5.3804	-5.3933	----
FM 100 5 F			
EO	-.4131	-.4205	
EM	-.0937	-.1002	
ED	-.0025	-.0019	
ESO	-.0108	-.0118	
E(J=L-1/2)	-.5525	-.5698	----
E(J=L+1/2)	-.4769	-.4872	----
FM 100 6 S			
EO	-1.1837	-1.4375	
EM	-1.6936	-1.5805	
ED	.9633	.8956	
E(L=0)	-1.9140	-2.1224	----
FM 100 6 P			
EO	-.5750	-.8546	
EM	-.2649	-.2675	
ED	-.0016	-.0015	
ESO	-.1009	-.1033	
E(J=L-1/2)	-1.0433	-1.3302	----
E(J=L+1/2)	-.7406	-1.0203	----
FM 100 7 S			
EO	-.1335	-.1913	
EM	-.0571	-.1401	
ED	.0324	.0794	
E(L=0)	-.1582	-.2520	----

MV 101 1 S			
EO	-4479.8102	-4501.6794	
EM	-3479.7327	-3466.3007	
ED	2571.3195	2778.2818	
E(L=0)	-5288.2233	-5189.6982	-5397.0118

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALE

MV 101 2 S			
EO	-752.1821	-791.9725	
EM	-499.8445	-503.6714	
ED	305.7025	313.2983	
E(L=0)	-946.3241	-982.3456	-1049.032
MV 101 2 P			
EO	-726.7541	-767.7333	
EM	-86.1891	-85.6494	
ED	-5.9187	-.7690	
ESO	-50.4204	-51.8923	
E(J=L-1/2)	-919.7027	-957.9363	-1015.204
E(J=L+1/2)	-768.4415	-802.2594	-786.498
MV 101 3 S			
EO	-185.4282	-204.5945	
EM	-114.4260	-125.6335	
ED	66.7166	73.4628	
E(L=0)	-233.1376	-256.7652	-273.601
MV 101 3 P			
EO	-171.9013	-192.6955	
EM	-24.3129	-27.0024	
ED	-.3572	-.1800	
ESO	-10.4677	-11.9180	
E(J=L-1/2)	-217.5068	-243.7139	-258.085
E(J=L+1/2)	-186.1037	-207.9599	-203.923
MV 101 3 D			
EO	-144.4302	-170.5857	
EM	-7.0976	-8.3371	
ED	-.4897	-.1247	
ESO	-1.6771	-2.0149	
E(J=L-1/2)	-157.0488	-185.0922	-180.281
E(J=L+1/2)	-148.6633	-175.0177	-169.948
MV 101 4 S			
EO	-50.7796	-53.4947	
EM	-31.7872	-35.5011	
ED	18.2337	20.3096	
E(L=0)	-64.3331	-68.6862	-73.907
MV 101 4 P			
EO	-44.9617	-47.8872	
EM	-6.9335	-7.9467	
ED	-.0502	-.0484	
ESO	-2.7404	-3.1901	
E(J=L-1/2)	-57.4262	-62.2625	-66.760
E(J=L+1/2)	-49.2050	-52.6922	-51.845

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

MV 101 4 D			
EO	-33.8774	-37.4274	
EM	-2.1335	-2.6797	
ED	-.0432	-.0308	
ESO	-.3979	-.4987	
E (J=L-1/2)	-37.2478	-41.6340	-----
E (J=L+1/2)	-35.2583	-39.1405	-----
MV 101 4 F			
EO	-19.4826	-22.8523	
EM	-.4845	-.8032	
ED	-.0267	-.0176	
ESO	-.0651	-.1104	
E (J=L-1/2)	-20.2542	-24.1147	-----
E (J=L+1/2)	-19.7985	-23.3419	-----
MV 101 5 S			
EO	-11.7535	-11.4945	
EM	-9.6375	-9.9255	
ED	5.4910	5.6348	
E (L=0)	-15.9000	-15.7852	-17.355
MV 101 5 P			
EO	-9.4021	-9.2095	
EM	-2.0591	-2.1429	
ED	-.0127	-.0124	
ESO	-.7901	-.8337	
E (J=L-1/2)	-13.0541	-13.0322	-----
E (J=L+1/2)	-10.6838	-10.5311	-----
MV 101 5 D			
EO	-5.1976	-5.1683	
EM	-.5894	-.6385	
ED	-.0084	-.0066	
ESO	-.1024	-.1103	
E (J=L-1/2)	-6.1026	-6.1443	-----
E (J=L+1/2)	-5.5906	-5.5928	-----
MV 101 5 F			
EO	-.4579	-.4466	
EM	-.1025	-.1097	
ED	-.0027	-.0020	
ESO	-.0118	-.0129	
E (J=L-1/2)	-.6103	-.6099	-----
E (J=L+1/2)	-.5277	-.5196	-----
MV 101 6 S			
EO	-1.2026	-1.4592	
EM	-1.7735	-1.6478	
ED	1.0082	.9334	
E (L=0)	-1.9679	-2.1736	-----

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTA

MV 101 6 P			
EO	-.5803	-.8645	
EM	-.2773	-.2785	
ED	-.0017	-.0016	
ESO	-.1055	-.1075	
E(J=L-1/2)	-1.0703	-1.3596	-----
E(J=L+1/2)	-.7538	-1.0371	-----
MV 101 7 S			
EO	-.1343	-.1928	
EM	-.0585	-.1445	
ED	.0333	.0818	
E(L=0)	-.1595	-.2555	-----

NO 102 1 S			
EO	-4572.0635	-4594.4642	
EM	-3618.8445	-3605.6299	
ED	2778.1537	2889.9378	
E(L=0)	-5412.7543	-5310.1562	-5535.271
NO 102 2 S			
EO	-770.0834	-809.8528	
EM	-520.2314	-524.4323	
ED	318.2120	326.1839	
E(L=0)	-972.1028	-1008.1012	-1080.286
NO 102 2 P			
EO	-744.2759	-785.3297	
EM	-89.7194	-89.2263	
ED	-6.1136	-.7940	
ESO	-52.4815	-54.0497	
E(J=L-1/2)	-945.0719	-983.4494	-1045.723
E(J=L+1/2)	-787.6274	-821.3003	-804.515
NO 102 3 S			
EO	-190.9601	-209.8245	
EM	-119.6741	-131.0610	
ED	69.7362	76.6133	
E(L=0)	-240.8980	-264.2722	-282.205
NO 102 3 P			
EO	-177.2483	-197.7572	
EM	-25.4520	-28.1996	
ED	-.3702	-.1864	
ESO	-10.9523	-12.4400	
E(J=L-1/2)	-224.9751	-251.0232	-266.395
E(J=L+1/2)	-192.1182	-213.7032	-209.145

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO
Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTALES

NO 102 3 D			
EO	-149.4421	-175.3393	
EM	-7.4484	-8.7224	
ED	-5.5335	-1.1293	
ESO	-1.7586	-2.1072	
E(J=L-1/2)	-162.6998	-190.5126	-185.208
E(J=L+1/2)	-153.9068	-179.9766	-174.324
NO 102 4 S			
EO	-52.4652	-55.0960	
EM	-33.5078	-37.1972	
ED	19.2151	21.2742	
E(L=0)	-66.7579	-71.0190	-76.407
NO 102 4 P			
EO	-46.5390	-49.3890	
EM	-7.3296	-8.3417	
ED	-0.0526	-0.0503	
ESO	-2.8934	-3.3459	
E(J=L-1/2)	-59.7080	-64.4728	-68.979
E(J=L+1/2)	-51.0278	-54.4351	-53.242
NO 102 4 D			
EO	-35.2486	-38.7394	
EM	-2.2716	-2.8229	
ED	-0.0455	-0.0321	
ESO	-0.4226	-0.5247	
E(J=L-1/2)	-38.8335	-43.1685	-----
E(J=L+1/2)	-36.7205	-40.5450	-----
NO 102 4 F			
EO	-20.5709	-23.8826	
EM	-0.5278	-0.8523	
ED	-0.0285	-0.0185	
ESO	-0.0707	-0.1170	
E(J=L-1/2)	-21.4100	-25.2214	-----
E(J=L+1/2)	-20.9151	-24.4024	-----
NO 102 5 S			
EO	-12.0886	-11.8215	
EM	-10.1732	-10.4592	
ED	5.7939	5.9357	
E(L=0)	-16.4679	-16.3450	-17.796
NO 102 5 P			
EO	-9.6818	-9.4835	
EM	-2.1803	-2.2645	
ED	-0.0137	-0.0120	
ESO	-0.8353	-0.8800	
E(J=L-1/2)	-13.5464	-13.5210	-----
E(J=L+1/2)	-11.0405	-10.8810	-----

274

ENERGIAS DE ENLACE SEGUN POTENCIAL ANALITICO Y SEGUN POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

	POTENCIAL ANALITICO	POTENCIAL AUTOCONSISTENTE	VALORES EXPERIMENTA

NO 102 5 D			
EO	-5.3728	-5.3407	
EM	-.6289	-.6793	
ED	-.0088	-.0070	
ESO	-.1088	-.1172	
E(J=L-1/2)	-6.3369	-6.3786	-----
E(J=L+1/2)	-5.7929	-5.7926	-----
NO 102 5 F			
EO	-.4886	-.4721	
EM	-.1126	-.1196	
ED	-.0030	-.0022	
ESO	-.0129	-.0140	
E(J=L-1/2)	-.6558	-.6499	-----
E(J=L+1/2)	-.5655	-.5519	-----
NO 102 6 S			
EO	-1.2054	-1.4805	
EM	-1.8427	-1.7160	
ED	1.0471	.9717	
E(L=0)	-2.0010	-2.2248	-----
NO 102 6 P			
EO	-.5732	-.8741	
EM	-.2861	-.2896	
ED	-.0017	-.0016	
ESO	-.1086	-.1116	
E(J=L-1/2)	-1.0782	-1.3885	-----
E(J=L+1/2)	-.7524	-1.0537	-----
NO 102 7 S			
EO	-.1346	-.1942	
EM	-.0595	-.1489	
ED	.0338	.0843	
E(L=0)	-.1603	-.2588	-----

A P E N D I C E
=====

BREVE DESCRIPCION DE LOS PROGRAMAS DE CALCULO
UTILIZADOS

Se describen en este apéndice, muy brevemente, los programas utilizados para la realización de los cálculos de los dos métodos de integración seguidos.

Debido a que estos programas se han obtenido - mediante modificaciones del programa "ORBITALES" -- la comprensión de los mismos requiere un conccimien to previo de éste según se dá en la referencia (1), y, consecuentemente, las descripciones que siguen - están totalmente apoyadas en las que figuran en la mencionada referencia.

A.1 INTEGRACION CON EL POTENCIAL ANALITICO

El programa "ORBITALES" halla la solución $P(r)$ de la ecuación de ondas

$$\frac{d^2P}{dr^2} = f(r) \cdot P(r)$$

para un autovalor E y con la condición $\int_0^{\infty} P^2(r)dr = 1$

En el programa intervienen diversos índices indicadores de la fase en que se encuentra el proceso de cálculo. De ellos, el I1 adquiere los siguientes significados en función de los valores que va tomando:

I1 = 1 Identifica los primeros tanteos de E durante los cuales los cálculos se realizan con una precisión inferior a la deseada

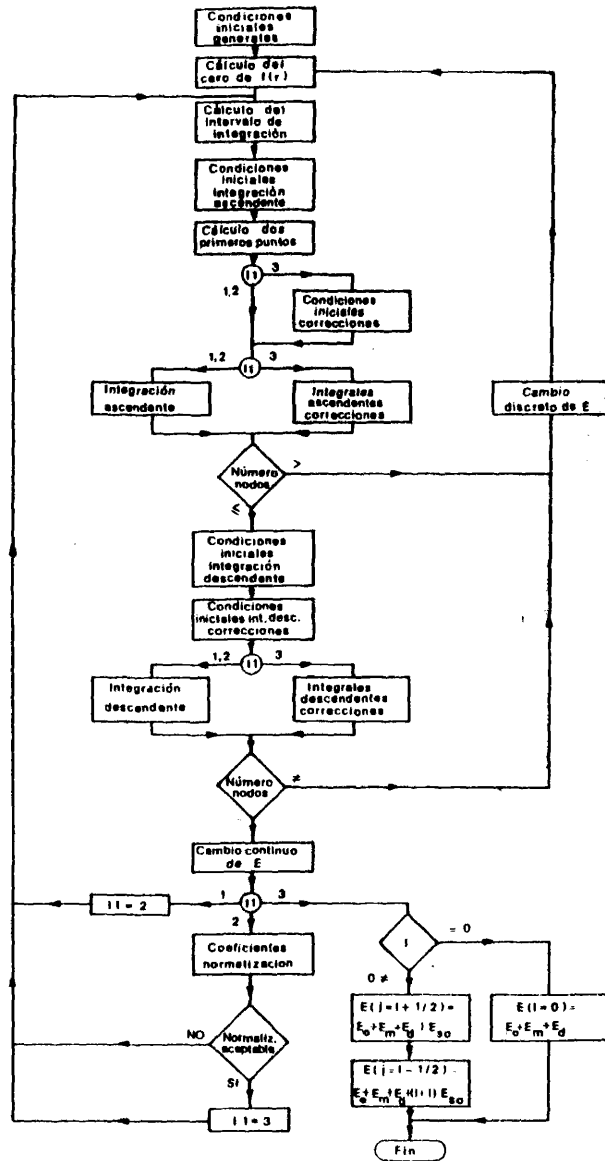
I1 = 2 Fase en que se llevan los cálculos con la precisión pedida

I1 = 3 Se conoce ya el autovalor E y los parámetros que intervienen en la normalización. Se repite el cálculo con el fin de realizar salidas de resultados y algunas interpolaciones necesarias para cálculos posteriores.

Aprovechando el significado de este índice, se ha confeccionado una nueva versión del programa ORBITALES en la que se han introducido las modificaciones necesarias para que cuando I1 = 3 se puedan realizar, paralelamente a los cálculos que se efectúan normalmente por el programa primitivo, aquéllos que conducen a determinar los valores de los términos (5.11), (5.12) y (5.13) que constituyen las correcciones relativistas.

La marcha general de estos cálculos se puede observar en el diagrama A.1.1 que figura en la página siguiente.

DIAGRAMA A. 1.1



A.2 INTEGRACION CON EL POTENCIAL AUTOCONSISTENTE

Existe una versión del programa "ORBITALES" que realiza los tres primeros pasos del proceso de cálculo descrito en el capítulo 6 (autoconsistencia del potencial). El índice INP sirve para indicar, si conserva su valor $INP = 1$, que el proceso de autoconsistencia ha terminado.

Las modificaciones efectuadas para llevar a cabo el cálculo de las correcciones relativistas han consistido en dimensionar las variables precisas, con objeto de guardar los autovalores de las energías propias, introduciendo al final del programa el cálculo de cada uno de los términos que constituyen las mencionadas correcciones.

En el proceso de determinación de la autoconsistencia del potencial se ha encontrado que en algunos átomos (Cr-24, Ge-32, In-49, Dy-66, W-74, Au-79) era difícil conseguirla siguiendo únicamente el procedimiento previsto en el programa original, por lo que ha sido necesario introducir una modificación, usual en este tipo de cálculos, que ha permitido acelerar el proceso y asegurar la autoconsistencia deseada.

En el diagrama A.2.1 siguiente se puede seguir, a grandes rasgos, el proceso general de cálculo.

B I B L I O G R A F I A
=====

(1) J. YUNTA CARRETERO, E. RODRIGUEZ MAYQUEZ

"ORBITALES. Programa para el cálculo de funciones de onda para un potencial central analítico"
JEN 264. Madrid, 1974

[Handwritten signature]

Carlos Sánchez

[Handwritten signature]

[Circular stamp or signature]

