

# 原子的 $X_\alpha$ 波函数

张志杰 赵伊君

原子能出版社

# 原子的 $X_\alpha$ 波函数

张志杰 赵伊君

原子能出版社

## 内 容 简 介

近代尖端技术中,常常需要用到各种材料在高温高压下的性质数据。这时要用物理力学方法,从其微观结构出发进行计算。原子的微观结构由原子波函数描述,因此原子波函数是进行这方面工作的基本数据。此外在量子化学、天体物理等多种学科中,也都会涉及到原子波函数。

本书简要介绍了按照  $X_\alpha$  法计算原子波函数的方法,给出以 FORTRAN 算法语言编成的两种计算程序,它们均可用于计算具有任意电子组态的原子或离子的微观结构。书中还给出由此法算出的原子序数  $Z=2$  到 106 全部基态原子的波函数表。

本书可供应用物理、原子分子和固体物理、物理力学、材料科学、量子化学、天体物理等多方面科技工作者和高年级大学生、研究生参考。

### 原 子 的 $X_\alpha$ 波 函 数

张志杰 赵伊君

原子能出版社出版

(北京2108信箱)

国防科工委印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·新华书店经售

☆

开本  $787 \times 1092^{1/16}$  印张  $23^{3/4}$  字数 573 千字

1983年6月第一版 1983年6月第一次印刷

印数 1—1,900 统一书号: 15175·498

定价: 2.90元

# 目 录

|                      |     |
|----------------------|-----|
| 1. 引言                | 1   |
| 2. 计算方法              | 3   |
| 3. 计算结果              | 6   |
| 4. 计算程序              | 10  |
| (1) 根据能量极小判据计算时的计算程序 | 10  |
| (2) 根据维里定理计算时的计算程序   | 31  |
| 5. 原子波函数表            | 53  |
| (1) He ( $Z=2$ )     | 53  |
| (2) Li ( $Z=3$ )     | 53  |
| (3) Be ( $Z=4$ )     | 55  |
| (4) B ( $Z=5$ )      | 55  |
| (5) C ( $Z=6$ )      | 57  |
| (6) N ( $Z=7$ )      | 59  |
| (7) O ( $Z=8$ )      | 61  |
| (8) F ( $Z=9$ )      | 63  |
| (9) Ne ( $Z=10$ )    | 65  |
| (10) Na ( $Z=11$ )   | 67  |
| (11) Mg ( $Z=12$ )   | 69  |
| (12) Al ( $Z=13$ )   | 71  |
| (13) Si ( $Z=14$ )   | 73  |
| (14) P ( $Z=15$ )    | 75  |
| (15) S ( $Z=16$ )    | 77  |
| (16) Cl ( $Z=17$ )   | 79  |
| (17) Ar ( $Z=18$ )   | 81  |
| (18) K ( $Z=19$ )    | 83  |
| (19) Ca ( $Z=20$ )   | 85  |
| (20) Sc ( $Z=21$ )   | 87  |
| (21) Ti ( $Z=22$ )   | 89  |
| (22) V ( $Z=23$ )    | 91  |
| (23) Cr ( $Z=24$ )   | 93  |
| (24) Mn ( $Z=25$ )   | 95  |
| (25) Fe ( $Z=26$ )   | 97  |
| (26) Co ( $Z=27$ )   | 99  |
| (27) Ni ( $Z=28$ )   | 101 |
| (28) Cu ( $Z=29$ )   | 103 |
| (29) Zn ( $Z=30$ )   | 105 |
| (30) Ga ( $Z=31$ )   | 107 |
| (31) Ge ( $Z=32$ )   | 109 |

|      |    |        |     |
|------|----|--------|-----|
| (32) | As | (Z=33) | 111 |
| (33) | Se | (Z=34) | 113 |
| (34) | Br | (Z=35) | 115 |
| (35) | Kr | (Z=36) | 117 |
| (36) | Rb | (Z=37) | 119 |
| (37) | Sr | (Z=38) | 123 |
| (38) | Y  | (Z=39) | 123 |
| (39) | Zr | (Z=40) | 125 |
| (40) | Nb | (Z=41) | 129 |
| (41) | Mo | (Z=42) | 133 |
| (42) | Tc | (Z=43) | 133 |
| (43) | Ru | (Z=44) | 137 |
| (44) | Rh | (Z=45) | 139 |
| (45) | Pd | (Z=46) | 141 |
| (46) | Ag | (Z=47) | 145 |
| (47) | Cd | (Z=48) | 147 |
| (48) | In | (Z=49) | 149 |
| (49) | Sn | (Z=50) | 153 |
| (50) | Sb | (Z=51) | 155 |
| (51) | Te | (Z=52) | 159 |
| (52) | I  | (Z=53) | 161 |
| (53) | Xe | (Z=54) | 165 |
| (54) | Cs | (Z=55) | 167 |
| (55) | Ba | (Z=56) | 171 |
| (56) | La | (Z=57) | 174 |
| (57) | Ce | (Z=58) | 177 |
| (58) | Pr | (Z=59) | 181 |
| (59) | Nd | (Z=60) | 185 |
| (60) | Pm | (Z=61) | 189 |
| (61) | Sm | (Z=62) | 193 |
| (62) | Eu | (Z=63) | 197 |
| (63) | Gd | (Z=64) | 201 |
| (64) | Tb | (Z=65) | 205 |
| (65) | Dy | (Z=66) | 209 |
| (66) | Ho | (Z=67) | 213 |
| (67) | Er | (Z=68) | 217 |
| (68) | Tm | (Z=69) | 221 |
| (69) | Yb | (Z=70) | 225 |
| (70) | Lu | (Z=71) | 229 |
| (71) | Hf | (Z=72) | 233 |
| (72) | Ta | (Z=73) | 237 |
| (73) | W  | (Z=74) | 241 |
| (74) | Re | (Z=75) | 245 |

|       |                 |             |     |
|-------|-----------------|-------------|-----|
| (75)  | Os              | ( $Z=76$ )  | 249 |
| (76)  | Ir              | ( $Z=77$ )  | 253 |
| (77)  | Pt              | ( $Z=78$ )  | 257 |
| (78)  | Au              | ( $Z=79$ )  | 261 |
| (79)  | Hg              | ( $Z=80$ )  | 265 |
| (80)  | Tl              | ( $Z=81$ )  | 269 |
| (81)  | Pb              | ( $Z=82$ )  | 273 |
| (82)  | Bi              | ( $Z=83$ )  | 277 |
| (83)  | Po              | ( $Z=84$ )  | 281 |
| (84)  | At              | ( $Z=85$ )  | 285 |
| (85)  | Rn              | ( $Z=86$ )  | 289 |
| (86)  | Fr              | ( $Z=87$ )  | 293 |
| (87)  | Ra              | ( $Z=88$ )  | 297 |
| (88)  | Ac              | ( $Z=89$ )  | 301 |
| (89)  | Th              | ( $Z=90$ )  | 305 |
| (90)  | Pa              | ( $Z=91$ )  | 309 |
| (91)  | U               | ( $Z=92$ )  | 313 |
| (92)  | Np              | ( $Z=93$ )  | 317 |
| (93)  | Pu              | ( $Z=94$ )  | 321 |
| (94)  | Am              | ( $Z=95$ )  | 325 |
| (95)  | Cm              | ( $Z=96$ )  | 329 |
| (96)  | Bk              | ( $Z=97$ )  | 333 |
| (97)  | Cf              | ( $Z=98$ )  | 337 |
| (98)  | Es              | ( $Z=99$ )  | 341 |
| (99)  | Fm              | ( $Z=100$ ) | 345 |
| (100) | Md              | ( $Z=101$ ) | 349 |
| (101) | No              | ( $Z=102$ ) | 353 |
| (102) | Lr              | ( $Z=103$ ) | 375 |
| (103) | Rf              | ( $Z=104$ ) | 361 |
| (104) | Ha              | ( $Z=105$ ) | 365 |
| (105) | U <sub>nh</sub> | ( $Z=106$ ) | 369 |
| 参考文献  |                 |             | 373 |

# 1. 引言

解决工程技术问题时，常常需要用到各种材料或介质在不同条件下的宏观性质数据，例如它们的状态方程，热力学函数，辐射吸收系数等。通常这些数据可用实验方法测出。但在近代尖端技术中，面临着材料在高温高压等极端条件下的性质问题。例如宇航技术中飞行器重返大气时遇到的温度可达数千度，核反应时的温度更可高达近亿度，核爆炸时的压力可达数百万、上千万大气压。在实验室内模拟这类高温高压条件很困难，甚至当前还办不到，难以再单纯依靠实验方法获得这类极端条件下的材料性质数据。这时就不能不设法通过理论计算或再灵活地结合一些易于进行的实验，间接计算出所需的材料性质数据。

不论什么材料，都是由大量分子组成的，分子又是由原子组成的。组成材料的各种原子的微观结构，是材料在高温高压等条件下性质发生变化的内因。若想通过理论计算，求出材料在不同环境条件下的宏观性质数据，首先就得了解组成材料的各种原子的微观结构。

研究原子以及多个原子构成的分子和晶体的微观性质，属于原子分子和固体物理范畴。根据它们的微观性质，推算出材料的宏观性质数据，属于物理力学范畴。

物理力学是针对近代工程技术问题，特别是国防尖端技术迫切需要沿着近代力学的发展方向而开拓的力学新领域。自从五十年代钱学森<sup>[1]</sup>最先注意到建立这门新学科的重要性，大力提倡并积极创建以来，已取得不少成就。

随着物理力学的发展，对材料宏观性质与其微观结构之间的了解程度日益加深，不仅能在一定精度上估算出现有材料在不同环境条件下的宏观性质数据，而且可以设想，还有可能利用物理力学方法，设计出具有优异性能的新型材料。例如有可能在不久的将来，利用电子计算机算出具有某些指定特殊性能合金的配方，这将成为材料科学的一个重要突破方向。

开展物理力学研究工作时，首先遇到的问题就是需要具有一定精度的原子微观结构数据。原子的微观结构由它们的波函数描述，因此原子波函数的计算是一项十分重要的基本工作。苟清泉<sup>[2]</sup>注意到这方面工作对发展物理力学的重要性，称其为物理力学的物理基础，大力倡导并主持开展我国的原子结构计算等方面工作。本书就是我们针对物理力学需要，在原子结构计算方面所进行的部分工作结果。

原子结构计算，在量子化学、天体物理以及其它有关学科中，也都有重要意义。我们希望本书中的计算方法和结果，在这些广泛的领域中，也能找到它们的用途。

原子结构的计算，可基于求解非相对论性的 Schrödinger 方程，也可基于求解相对论性的 Dirac 方程。本书限于介绍我们在非相对论性原子结构计算方面的部分工作结果。关于相对论性计算方面的工作，拟以后另行介绍。

早在量子力学发展初期，原子结构计算工作即已开始。基于自洽场方法进行数值计算，是其中的重要方法之一。1957年，Hartree<sup>[3]</sup>总结了早期利用台式机械计算机进行计算时的工作方法和经验。由于原子波函数的计算工作量很大，即使采取种种简化处理法，当时也还未能对整个周期表的全部元素进行广泛计算。

电子计算机的出现，使情况起了变化。1963年，Herman 和 Skillman<sup>[4]</sup>发表了他们利

用电子计算机(用 Hartree-Φok-Slater 法)计算原子序数  $Z=2$  到 103 基态原子的结果和程序。Herman 和 Skillman 的工作推动了基于自洽场方法对整个周期表中全部元素进行广泛数值计算的工作。1967—1968 年, Mann<sup>[5]</sup> 发表了用超 Hartree-Φok 法计算  $Z=1$  到 103 基态原子的结果。1970 年, Carlson 等<sup>[6]</sup> 发表了用相对论性 Hartree-Φok-Slater 法计算  $Z=2$  到 126 基态原子的结果。不过文献[5,6]中没有给出计算程序。

六十年代后期,在利用统计平均交换势的 Hartree-Φok-Slater 法的基础上,又提出了  $X_\alpha$  法<sup>[7]</sup>。这种方法的精确度较高,计算程序较简单,因而近年来获得了广泛应用。我们在工作中感到,  $X_\alpha$  法在物理力学的计算中也是很适用的。

在按照  $X_\alpha$  法对原子结构的广泛计算工作方面,1970 年, Kmetko<sup>[8]</sup> 根据能量极小判据,对  $Z=2$  到 103 基态原子进行过计算;1972—1974 年, Schwarz<sup>[9]</sup> 根据原子能量与按超 Hartree-Φok 法求出的相等以及维里定理两种判据,对  $Z=1$  到 86 范围内的部分元素进行过计算。文献[8,9]的着眼点在于讨论交换参数  $\alpha$  随原子序数  $Z$  的变化,没有给出计算程序和对原子波函数的计算结果。

为了弥补这方面现有文献的欠缺,本书给出我们编写的计算程序和  $Z=2$  到 106 全部基态原子的计算结果。我们的计算程序用 FORTRAN 算法语言写成,分为两种:根据能量极小判据计算的称为 XALPMI,根据维里定理计算的称为 XALPVT。这两种程序均可用于计算具有任意电子组态的原子或离子的结构。计算时仅需输入原子序数与电子组态,计算过程中所需的其它数据,例如原子能量表达式中的  $3j$  符号值,初次迭代求解时的试探势函数和电子能量本征值等均无需从外部另行输入。

按照  $X_\alpha$  法进行原子结构计算时,既可以引入自旋偏振,也可以不考虑它。当电子组态中含有非闭合壳层时,引入自旋偏振之后,有可能提高计算结果的精确度,但是这样会使计算工作量增大一倍左右。在我们当前给出的两种计算程序中,均未考虑自旋偏振。

## 2. 计算方法

采用 Hartree 原子单位, 即长度以 Bohr 半径

$$a_0 = \hbar^2 / m_e e^2 \quad (1)$$

为单位, 能量以 Rydberg 的二倍

$$2R_y = m_e e^4 / \hbar^2 \quad (2)$$

为单位时, 主量子数为  $n_p$ , 角量子数为  $l_p$  电子的 Schrödinger 径向波函数方程为

$$\frac{d^2 P(n_p l_p | r)}{dr^2} + \left[ 2E_{n_p l_p} - 2V(r) - \frac{l_p(l_p + 1)}{r^2} \right] P(n_p l_p | r) = 0 \quad (3)$$

待求的径向波函数  $P(n_p l_p | r)$  应满足边界条件

$$P(n_p l_p | 0) = P(n_p l_p | \infty) = 0 \quad (4)$$

具有

$$n_p - l_p - 1 \quad (5)$$

个节点, 且满足归一条件

$$\int_0^\infty P^2(n_p l_p | r) dr = 1 \quad (6)$$

按照  $X_\alpha$  法计算, 不考虑自旋偏振, 如果原子序数为  $Z$ , 电子组态为

$$(n_1 l_1)^{N_1} (n_2 l_2)^{N_2} \cdots (n_w l_w)^{N_w} \quad (7)$$

则  $X_\alpha$  势函数为

$$V_{X_\alpha}(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{1}{r} \int_0^r \sigma(t) dt + \int_r^\infty \frac{1}{t} \sigma(t) dt - 3\alpha \left[ \frac{3}{32\pi^2 r^2} \sigma(r) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (8)$$

其中

$$\sigma(r) = \sum_p N_p P^2(n_p l_p | r) \quad (9)$$

式中对  $P$  求和表示对电子组态 (7) 中  $1, 2, \dots, w$  个壳层求和。

(3) 中的势函数  $V(r)$  是有 Latter 尾部修正的  $V_{X_\alpha}(r)$ , 即

$$V(r) = \begin{cases} V_{X_\alpha}(r), & \text{当 } r \leq r_0 \\ -\frac{Z - N + 1}{r}, & \text{当 } r > r_0 \end{cases} \quad (10)$$

其中  $r_0$  由条件

$$V_{X_\alpha}(r_0) = -\frac{Z - N + 1}{r_0} \quad (11)$$

确定, 而

$$N = \sum_p N_p \quad (12)$$

是束缚电子的总个数。中性原子的  $N = Z$ , 离子的  $N \neq Z$ 。

原子的组态平均能量  $E$  为<sup>[10,11]</sup>

$$E = \sum_p N_p I(n_p l_p) + \frac{1}{2} \sum_p N_p (N_p - 1) \left[ F_0(n_p l_p; n_p l_p) - \frac{2l_p + 1}{4l_p + 1} \sum_{k=0}^{l_p} \begin{pmatrix} l_p & k & l_p \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F_k(n_p l_p; n_p l_p) \right] + \frac{1}{2} \sum_p \sum_q N_p N_q \left[ F_0(n_p l_p; n_q l_q) - \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_p & k & l_q \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G_k(n_p l_p; n_q l_q) \right] \quad (13)$$

其中  $I(n_p l_p)$ ,  $F_k(n_p l_p; n_p l_p)$  和  $G_k(n_p l_p; n_q l_q)$  是径向积分, 它们的表达式分别为

$$I(n_p l_p) = E_{n_p l_p} - \int_0^\infty \left[ V(r) + \frac{Z}{r} \right] P^2(n_p l_p | r) dr \quad (14)$$

$$F_k(n_p l_p; n_p l_p) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P^2(n_p l_p | r_1) P^2(n_p l_p | r_2) dr_1 dr_2 \quad (15)$$

$$G_k(n_p l_p; n_q l_q) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P(n_p l_p | r_1) P(n_q l_q | r_2) \times P(n_q l_q | r_1) P(n_p l_p | r_2) dr_1 dr_2 \quad (16)$$

式中  $r_<$  是  $r_1$  和  $r_2$  中较小的一个,  $r_>$  是较大的一个。

(13)中  $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$  是  $3j$  符号, 它们的计算方法可参见文献[11,12]。

原子的平均动能  $E_K$  为<sup>[13]</sup>

$$E_K = \sum_p N_p I_K(n_p l_p) \quad (17)$$

其中径向积分  $I_K(n_p l_p)$  的表达式为

$$I_K(n_p l_p) = E_{n_p l_p} - \int_0^\infty V(r) P^2(n_p l_p | r) dr \quad (18)$$

当满足维里定理时应有

$$E + E_K = 0 \quad (19)$$

(8)中交换参数  $\alpha$  的值可在 Slater 值 1 与 Gáspár-Kohn-Sham 值 2/3 之间选取。

给定  $\alpha$  的一个值之后, 通过用迭代法联立求解  $w$  个壳层的电子径向波函数方程 (3) 和势函数表达式 (8) — (12), 可求出一组满足条件 (4) — (6), 达到自洽后的径向波函数  $P(n_p l_p | r)$ , 能量本征值  $E_{n_p l_p}$  ( $p=1, 2, \dots, w$ ) 以及势函数  $V(r)$ 。再把它们代入 (13) — (18), 即可求出原子的组态平均能量  $E$  和平均动能  $E_K$ 。显然  $E$  和  $E_K$  均与  $\alpha$  有关。

根据能量极小判据计算时, 就需适当选定  $\alpha$  值, 使得  $E$  达到其极小值。我们<sup>[14]</sup> 利用优选法中黄金分割法来进行这种计算。

根据维里定理计算时, 则要适当选定  $\alpha$  值, 使得  $E$  和  $E_K$  满足 (19)。

初次迭代求解时的试探势函数, 我们取为中性原子的 Thomas-Fermi 势, 无需从外部另行输入。

上述计算方法的详细内容,可参见文献[13,15],本书不再赘述。

我们根据这些计算方法,编制了XALPMI和XALPVT两种计算程序。前者根据能量极小判据进行计算,后者根据维里定理进行计算。

计算时需要输入原子序数 $Z$ 和电子组态(7)。在这些程序中,原子序数由整型数 $NZ$ 表示,电子组态由整型数 $KECS$ 和整型数组 $NLZ(I)$ , $I=1,2,\dots,18$ 表示。 $KECS$ 表示电子组态(7)中的壳层数 $w$ 。 $NLZ$ 是包含四位数(十进制)的数组,其中千位数表示主量子数,百位数表示角量子数,十位数和个位数表示该壳层中的等效电子个数。例如当电子组态为(7)时,有

$$\begin{aligned} KECS &= w \\ NLZ(1) &= 1000n_1 + 100l_1 + N_1 \\ NLZ(2) &= 1000n_2 + 100l_2 + N_2 \\ &\dots\dots\dots \\ NLZ(w) &= 1000n_w + 100l_w + N_w \\ NLZ(w+1) &= 0 \\ NLZ(w+2) &= 0 \\ &\dots\dots\dots \\ NLZ(18) &= 0 \end{aligned}$$

用 $X_\alpha$ 法进行原子结构计算时, $\alpha$ 值的确定过程占用了大部分机时。为了节省计算工作量,近年来正在探讨用理论方法来确定 $\alpha$ 值(可参见文献[13]中§9.2和文献[16,17])。

按照这类方法计算时,要求能够从外部输入 $\alpha$ 值。为此在我们的计算程序中设有选择控制 $KONZ$ 。当 $KONZ=1$ 时,按原来方法计算。当 $KONZ=3$ 时, $\alpha$ 值改由外部输入,这时用实型数 $ARF$ 表示输入的 $\alpha$ 。

### 3. 计算结果

我们分别利用 XALPMI 和 XALPVT 两种计算程序, 在 KONZ=1 的情况下, 对  $Z=2$  到 106 的基态原子结构进行了计算。

计算时所输入的电子组态 (引自文献[18]) 以及主要计算结果由附表给出。表中列举的计算结果包括交换参数  $\alpha$  和原子组态平均能量  $E$  (以  $2R_y$  为单位)。其中用下标  $min$  表示根据能量极小判据, 由 XALPMI 算出的结果; 用下标  $vt$  表示根据维里定理, 由 XALPVT 算出的结果。为了便于进行比较, 表中同时给出 Schwarz<sup>[9]</sup> 根据原子能量与按超 Hartree- $\Phi_{OK}$  法求出的相等而算出的  $\alpha$  值以及 Mann<sup>[5]</sup> 由超 Hartree- $\Phi_{OK}$  法算出的原子能量, 它们均用下标  $HFF$  表示。

输入的电子组态及主要计算结果表

| $Z$ | 元素 | 电子组态                                          | $\alpha_{min}$ | $\alpha_{vt}$ | $\alpha_{HFF}$ | $-E_{min}$ | $-E_{vt}$ | $-E_{HFF}$ |
|-----|----|-----------------------------------------------|----------------|---------------|----------------|------------|-----------|------------|
| 2   | He | (1s) <sup>2</sup>                             | 0.99           | 0.9800        | 0.77298        | 2.8593     | 2.85923   | 2.861680   |
| 3   | Li | [He](2s)                                      | 0.82           | 0.7954        | 0.78147        | 7.4319     | 7.43190   | 7.43273    |
| 4   | Be | [He](2s) <sup>2</sup>                         | 0.87           | 0.8170        | 0.76823        | 14.569     | 14.5679   | 14.57303   |
| 5   | B  | [He](2s) <sup>2</sup> (2p)                    | 0.87           | 0.8100        | 0.76531        | 24.520     | 24.5182   | 24.52906   |
| 6   | C  | [He](2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>2</sup>       | 0.86           | 0.7991        | 0.75928        | 37.646     | 37.6436   | 37.65970   |
| 7   | N  | [He](2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>3</sup>       | 0.85           | 0.7892        | 0.75197        | 54.278     | 54.2751   | 54.29615   |
| 8   | O  | [He](2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>4</sup>       | 0.84           | 0.7790        | 0.74477        | 74.747     | 74.7429   | 74.7692    |
| 9   | F  | [He](2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>5</sup>       | 0.82           | 0.7690        | 0.73732        | 99.381     | 99.3773   | 99.4093    |
| 10  | Ne | [He](2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup>       | 0.82           | 0.7600        | 0.73081        | 128.51     | 128.509   | 128.5471   |
| 11  | Na | [Ne](3s)                                      | 0.74           | 0.7350        | 0.73115        | 161.84     | 161.839   | 161.8589   |
| 12  | Mg | [Ne](3s) <sup>2</sup>                         | 0.74           | 0.7360        | 0.72913        | 199.59     | 199.593   | 199.6147   |
| 13  | Al | [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p)                    | 0.76           | 0.7350        | 0.72853        | 241.85     | 241.850   | 241.8767   |
| 14  | Si | [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>2</sup>       | 0.76           | 0.7350        | 0.72751        | 288.80     | 288.802   | 288.8347   |
| 15  | P  | [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>3</sup>       | 0.76           | 0.7340        | 0.72620        | 340.61     | 340.613   | 340.6489   |
| 16  | S  | [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>4</sup>       | 0.76           | 0.7332        | 0.72475        | 397.44     | 397.439   | 397.4786   |
| 17  | Cl | [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>5</sup>       | 0.74           | 0.7323        | 0.72325        | 459.44     | 459.439   | 459.4821   |
| 18  | Ar | [Ne](3s) <sup>2</sup> (3p) <sup>6</sup>       | 0.76           | 0.7312        | 0.72177        | 526.77     | 526.768   | 526.817    |
| 19  | K  | [Ar](4s)                                      | 0.71           | 0.7231        | 0.72117        | 599.13     | 599.129   | 599.165    |
| 20  | Ca | [Ar](4s) <sup>2</sup>                         | 0.71           | 0.7220        | 0.71984        | 676.72     | 676.719   | 676.759    |
| 21  | Sc | [Ar](3d)(4s) <sup>2</sup>                     | 0.71           | 0.7213        | 0.71841        | 759.69     | 759.685   | 759.736    |
| 22  | Ti | [Ar](3d) <sup>2</sup> (4s) <sup>2</sup>       | 0.74           | 0.7200        | 0.71695        | 848.31     | 848.314   | 848.370    |
| 23  | V  | [Ar](3d) <sup>3</sup> (4s) <sup>2</sup>       | 0.74           | 0.7180        | 0.71556        | 942.74     | 942.742   | 942.803    |
| 24  | Cr | [Ar](3d) <sup>5</sup> (4s)                    | 0.73           | 0.7158        | 0.71352        | 1043.1     | 1043.06   | 1043.142   |
| 25  | Mn | [Ar](3d) <sup>5</sup> (4s) <sup>2</sup>       | 0.73           | 0.7150        | 0.71279        | 1149.6     | 1149.55   | 1149.626   |
| 26  | Fe | [Ar](3d) <sup>6</sup> (4s) <sup>2</sup>       | 0.73           | 0.7140        | 0.71151        | 1262.2     | 1262.21   | 1262.291   |
| 27  | Co | [Ar](3d) <sup>7</sup> (4s) <sup>2</sup>       | 0.73           | 0.7125        | 0.71018        | 1381.2     | 1381.22   | 1381.309   |
| 28  | Ni | [Ar](3d) <sup>8</sup> (4s) <sup>2</sup>       | 0.71           | 0.7111        | 0.70896        | 1506.7     | 1506.72   | 1506.816   |
| 29  | Cu | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s)                   | 0.76           | 0.7088        | 0.70697        | 1638.8     | 1638.84   | 1638.964   |
| 30  | Zn | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup>      | 0.74           | 0.7090        | 0.70673        | 1777.7     | 1777.74   | 1777.849   |
| 31  | Ga | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup> (4p) | 0.71           | 0.7085        | 0.70690        | 1923.2     | 1923.15   | 1923.261   |

续表

| Z  | 元素 | 电子组态                                                       | $\alpha_{min}$ | $\alpha_{vt}$ | $\alpha_{HHF}$ | $-E_{min}$ | $-E_{vt}$ | $-E_{HHF}$ |
|----|----|------------------------------------------------------------|----------------|---------------|----------------|------------|-----------|------------|
| 32 | Ge | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup> (4p) <sup>2</sup> | 0.74           | 0.7085        | 0.70684        | 2075.2     | 2075.23   | 2075.341   |
| 33 | As | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup> (4p) <sup>3</sup> | 0.71           | 0.7085        | 0.70665        | 2234.1     | 2234.05   | 2234.173   |
| 34 | Se | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup> (4p) <sup>4</sup> | 0.71           | 0.7085        | 0.70638        | 2399.7     | 2399.72   | 2399.843   |
| 35 | Br | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup> (4p) <sup>5</sup> | 0.71           | 0.7085        | 0.70606        | 2572.3     | 2572.31   | 2572.441   |
| 36 | Kr | [Ar](3d) <sup>10</sup> (4s) <sup>2</sup> (4p) <sup>6</sup> | 0.74           | 0.7084        | 0.70574        | 2751.9     | 2751.92   | 2752.055   |
| 37 | Rb | [Kr](5s)                                                   | 0.70           | 0.7060        | 0.70553        | 2938.2     | 2938.24   | 2938.358   |
| 38 | Sr | [Kr](5s) <sup>2</sup>                                      | 0.69           | 0.7059        | 0.70504        | 3131.4     | 3131.42   | 3131.546   |
| 39 | Y  | [Kr](4d)(5s) <sup>2</sup>                                  | 0.74           | 0.7054        | 0.70465        | 3331.5     | 3331.54   | 3331.685   |
| 40 | Zr | [Kr](4d) <sup>2</sup> (5s) <sup>2</sup>                    | 0.74           | 0.7053        | 0.70424        | 3538.8     | 3538.83   | 3538.969   |
| 41 | Nb | [Kr](4d) <sup>4</sup> (5s)                                 | 0.71           | 0.7050        | 0.70383        | 3753.3     | 3753.34   | 3753.492   |
| 42 | Mo | [Kr](4d) <sup>5</sup> (5s)                                 | 0.69           | 0.7044        | 0.70341        | 3975.2     | 3975.20   | 3975.369   |
| 43 | Tc | [Kr](4d) <sup>5</sup> (5s) <sup>2</sup>                    | 0.74           | 0.7041        | 0.70299        | 4204.4     | 4204.44   | 4204.607   |
| 44 | Ru | [Kr](4d) <sup>7</sup> (5s)                                 | 0.71           | 0.7040        | 0.70253        | 4441.3     | 4441.28   | 4441.457   |
| 45 | Rh | [Kr](4d) <sup>8</sup> (5s)                                 | 0.71           | 0.7031        | 0.70217        | 4685.6     | 4685.64   | 4685.837   |
| 46 | Pd | [Kr](4d) <sup>10</sup>                                     | 0.76           | 0.7030        | 0.70158        | 4937.7     | 4937.69   | 4937.922   |
| 47 | Ag | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s)                                | 0.71           | 0.7030        | 0.70145        | 5197.5     | 5197.49   | 5197.70    |
| 48 | Cd | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup>                   | 0.74           | 0.7025        | 0.70114        | 5464.9     | 5464.93   | 5465.13    |
| 49 | In | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup> (5p)              | 0.74           | 0.7020        | 0.70102        | 5740.0     | 5739.96   | 5740.17    |
| 50 | Sn | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup> (5p) <sup>2</sup> | 0.73           | 0.7020        |                | 6022.7     | 6022.70   | 6022.91    |
| 51 | Sb | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup> (5p) <sup>3</sup> | 0.71           | 0.7020        |                | 6313.2     | 6313.20   | 6313.43    |
| 52 | Te | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup> (5p) <sup>4</sup> | 0.74           | 0.7016        |                | 6611.5     | 6611.50   | 6611.77    |
| 53 | I  | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup> (5p) <sup>5</sup> | 0.74           | 0.7013        |                | 6917.7     | 6917.73   | 6917.98    |
| 54 | Xe | [Kr](4d) <sup>10</sup> (5s) <sup>2</sup> (5p) <sup>6</sup> | 0.74           | 0.7012        | 0.69984        | 7231.9     | 7231.88   | 7232.14    |
| 55 | Cs | [Xe](6s)                                                   | 0.74           | 0.7000        | 0.69961        | 7553.7     | 7553.69   | 7553.99    |
| 56 | Ba | [Xe](6s) <sup>2</sup>                                      | 0.74           | 0.7000        | 0.69927        | 7883.3     | 7883.29   | 7883.55    |
| 57 | La | [Xe](5d)(6s) <sup>2</sup>                                  | 0.71           | 0.7000        | 0.69898        | 8220.8     | 8220.80   | 8221.07    |
| 58 | Ce | [Xe](4f)(5d)(6s) <sup>2</sup>                              | 0.74           | 0.6990        | 0.69845        | 8566.5     | 8566.54   | 8566.85    |
| 59 | Pr | [Xe](4f) <sup>3</sup> (6s) <sup>2</sup>                    | 0.74           | 0.6980        | 0.69765        | 8920.7     | 8920.75   | 8921.07    |
| 60 | Nd | [Xe](4f) <sup>4</sup> (6s) <sup>2</sup>                    | 0.79           | 0.6974        |                | 9283.4     | 9283.37   | 9283.70    |
| 61 | Pm | [Xe](4f) <sup>5</sup> (6s) <sup>2</sup>                    | 0.79           | 0.6970        |                | 9654.5     | 9654.53   | 9654.87    |
| 62 | Sm | [Xe](4f) <sup>6</sup> (6s) <sup>2</sup>                    | 0.79           | 0.6965        |                | 10034      | 10034.3   | 10034.63   |
| 63 | Eu | [Xe](4f) <sup>7</sup> (6s) <sup>2</sup>                    | 0.71           | 0.6961        | 0.69575        | 10423      | 10422.7   | 10423.08   |
| 64 | Gd | [Xe](4f) <sup>7</sup> (5d)(6s) <sup>2</sup>                | 0.79           | 0.6960        | 0.69566        | 10820      | 10819.8   | 10820.13   |
| 65 | Tb | [Xe](4f) <sup>9</sup> (6s) <sup>2</sup>                    | 0.79           | 0.6954        | 0.69525        | 11226      | 11225.9   | 11226.31   |
| 66 | Dy | [Xe](4f) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup>                   | 0.79           | 0.6950        | 0.69453        | 11641      | 11640.8   | 11641.23   |
| 67 | Ho | [Xe](4f) <sup>11</sup> (6s) <sup>2</sup>                   | 0.73           | 0.6944        |                | 12065      | 12064.7   | 12065.14   |
| 68 | Er | [Xe](4f) <sup>12</sup> (6s) <sup>2</sup>                   | 0.70           | 0.6940        |                | 12498      | 12497.7   | 12498.09   |
| 69 | Tm | [Xe](4f) <sup>13</sup> (6s) <sup>2</sup>                   | 0.69           | 0.6940        |                | 12940      | 12939.8   | 12940.17   |
| 70 | Yb | [Xe](4f) <sup>14</sup> (6s) <sup>2</sup>                   | 0.79           | 0.6934        | 0.69317        | 13391      | 13391.0   | 13391.46   |
| 71 | Lu | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d)(6s) <sup>2</sup>               | 0.74           | 0.6940        | 0.69324        | 13851      | 13851.4   | 13851.81   |
| 72 | Hf | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>2</sup> (6s) <sup>2</sup> | 0.71           | 0.6940        |                | 14321      | 14320.8   | 14321.23   |
| 73 | Ta | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>3</sup> (6s) <sup>2</sup> | 0.71           | 0.6940        |                | 14799      | 14799.3   | 14799.76   |
| 74 | W  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>4</sup> (6s) <sup>2</sup> | 0.69           | 0.6940        |                | 15287      | 15287.0   | 15287.45   |
| 75 | Re | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>5</sup> (6s) <sup>2</sup> | 0.74           | 0.6940        |                | 15784      | 15783.9   | 15784.37   |
| 76 | Os | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>6</sup> (6s) <sup>2</sup> | 0.70           | 0.6934        |                | 16290      | 16290.0   | 16290.55   |
| 77 | Ir | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>7</sup> (6s) <sup>2</sup> | 0.70           | 0.6934        | 0.69310        | 16806      | 16805.5   | 16806.05   |
| 78 | Pt | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>9</sup> (6s)              | 0.71           | 0.6940        | 0.69306        | 17331      | 17330.6   | 17331.07   |

续表

| Z   | 元素  | 电子组态                                                                          | $\alpha_{min}$ | $\alpha_{vt}$ | $\alpha_{HHF}$ | $-E_{min}$ | $-E_{vt}$ | $-E_{HHF}$ |
|-----|-----|-------------------------------------------------------------------------------|----------------|---------------|----------------|------------|-----------|------------|
| 79  | Au  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s)                                | 0.71           | 0.6940        | 0.69301        | 17865      | 17864.9   | 17865.41   |
| 80  | Hg  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup>                   | 0.73           | 0.6934        | 0.69290        | 18408      | 18408.4   | 18408.99   |
| 81  | Tl  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup> (6p)              | 0.74           | 0.6930        | 0.69289        | 18961      | 18961.3   | 18961.83   |
| 82  | Pb  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup> (6p) <sup>2</sup> | 0.74           | 0.6934        |                | 19523      | 19523.4   | 19523.99   |
| 83  | Bi  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup> (6p) <sup>3</sup> | 0.74           | 0.6931        |                | 20095      | 20095.0   | 20095.53   |
| 84  | Po  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup> (6p) <sup>4</sup> | 0.68           | 0.6931        |                | 20676      | 20675.9   | 20676.49   |
| 85  | At  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup> (6p) <sup>5</sup> | 0.68           | 0.6931        |                | 21266      | 21266.3   | 21266.89   |
| 86  | Rn  | [Xe](4f) <sup>14</sup> (5d) <sup>10</sup> (6s) <sup>2</sup> (6p) <sup>6</sup> | 0.68           | 0.6931        | 0.69248        | 21866      | 21866.2   | 21866.78   |
| 87  | Fr  | [Rn](7s)                                                                      | 0.71           | 0.6926        |                | 22475      | 22475.3   | 22475.87   |
| 88  | Ra  | [Rn](7s) <sup>2</sup>                                                         | 0.68           | 0.6926        |                | 23094      | 23093.7   | 23094.31   |
| 89  | Ac  | [Rn](6d)(7s) <sup>2</sup>                                                     | 0.73           | 0.6926        |                | 23722      | 23721.6   | 23722.20   |
| 90  | Th  | [Rn](6d) <sup>2</sup> (7s) <sup>2</sup>                                       | 0.71           | 0.6926        |                | 24359      | 24359.0   | 24359.61   |
| 91  | Pa  | [Rn](5f) <sup>2</sup> (6d)(7s) <sup>2</sup>                                   | 0.76           | 0.6922        |                | 25006      | 25006.4   | 25007.06   |
| 92  | U   | [Rn](5f) <sup>3</sup> (6d)(7s) <sup>2</sup>                                   | 0.76           | 0.6920        |                | 25664      | 25663.5   | 25664.22   |
| 93  | Np  | [Rn](5f) <sup>4</sup> (6d)(7s) <sup>2</sup>                                   | 0.76           | 0.6920        |                | 26331      | 26330.6   | 26331.27   |
| 94  | Pu  | [Rn](5f) <sup>6</sup> (7s) <sup>2</sup>                                       | 0.76           | 0.6920        |                | 27008      | 27007.8   | 27008.48   |
| 95  | Am  | [Rn](5f) <sup>7</sup> (7s) <sup>2</sup>                                       | 0.76           | 0.6920        |                | 27695      | 27694.8   | 27695.53   |
| 96  | Cm  | [Rn](5f) <sup>7</sup> (6d)(7s) <sup>2</sup>                                   | 0.76           | 0.6920        |                | 28392      | 28391.6   | 28392.36   |
| 97  | Bk  | [Rn](5f) <sup>9</sup> (7s) <sup>2</sup>                                       | 0.77           | 0.6914        |                | 29099      | 29099.0   | 29099.87   |
| 98  | Cf  | [Rn](5f) <sup>10</sup> (7s) <sup>2</sup>                                      | 0.77           | 0.6910        |                | 29816      | 29816.4   | 29817.25   |
| 99  | Es  | [Rn](5f) <sup>11</sup> (7s) <sup>2</sup>                                      | 0.74           | 0.6900        |                | 30544      | 30543.8   | 30544.87   |
| 100 | Fm  | [Rn](5f) <sup>12</sup> (7s) <sup>2</sup>                                      | 0.74           | 0.6900        |                | 31282      | 31281.6   | 31282.75   |
| 101 | Md  | [Rn](5f) <sup>13</sup> (7s) <sup>2</sup>                                      | 0.74           | 0.6900        |                | 32030      | 32029.8   | 32030.99   |
| 102 | No  | [Rn](5f) <sup>14</sup> (7s) <sup>2</sup>                                      | 0.74           | 0.6900        |                | 32788      | 32788.3   | 32789.53   |
| 103 | Lr  | [Rn](5f) <sup>14</sup> (6d)(7s) <sup>2</sup>                                  | 0.74           | 0.6900        |                | 33557      | 33556.7   | 33557.97   |
| 104 | Rf  | [Rn](5f) <sup>14</sup> (6d) <sup>2</sup> (7s) <sup>2</sup>                    | 0.73           | 0.6910        |                | 34336      | 34335.5   |            |
| 105 | Ha  | [Rn](5f) <sup>14</sup> (6d) <sup>3</sup> (7s) <sup>2</sup>                    | 0.71           | 0.6900        |                | 35124      | 35124.2   |            |
| 106 | Unh | [Rn](5f) <sup>14</sup> (6d) <sup>4</sup> (7s) <sup>2</sup>                    | 0.71           | 0.6900        |                | 35923      | 35923.3   |            |

由表可见, 所求出的  $\alpha_{min}$  和  $\alpha_{vt}$  值均在 1—2/3 之间, 没有出现 Kmetko<sup>[9]</sup> 在计算  $Z=2$  时曾得出的  $\alpha_{min}=1.004$  的不合理现象。

由于原子的组态平均能量  $E$  随交换参数  $\alpha$  的变化不够显著, 所以在各收敛判据相同的条件下, 根据能量极小判据求出的结果比起根据维里定理求出的精确程度较低。

详细的计算结果见第 5 节原子波函数表。为了节省篇幅, 该表只给出根据维里定理, 由 XALPVT 算出的较为精确的结果。

表中  $Z$  为原子序数; ARF 为交换参数  $\alpha$ ;  $E$  为原子的组态平均能量; NLZ 表示电子组态; EK 为电子的能量本征值  $E_{npl}$ ; I 是计算网格点编号 (参见 [4, 5, 13]), 表中每逢五个格点打印一次; R 为径向坐标  $r$ ; RV 为径向坐标与势函数的乘积  $rV(r)$ ; BOHS 为径向波函数  $P(npl|r)$ 。例如对于  $Z=3$  有:

$$Z=3 \quad \text{ARF}=.7954 \quad E=-.743190+001$$

$$\text{NLZ}=1002 \quad 2001$$

$$\text{EK}=-.1964+001 \quad -.1975+000$$

$$\text{I} \quad \text{R} \quad \text{RV} \quad \text{BOHS}$$

|     |          |          |        |         |
|-----|----------|----------|--------|---------|
| 1   | .00000   | -3.00000 | .00000 | .00000  |
| 6   | .00767   | -2.97755 | .06974 | .01210  |
| 11  | .01535   | -2.95453 | .13632 | .02365  |
| 16  | .02302   | -2.93102 | .19983 | .03466  |
| 21  | .03069   | -2.90710 | .26040 | .04515  |
| :   | :        | :        | :      | :       |
| 341 | 23.51089 | -1.00000 | .00000 | -.00005 |
| 346 | 25.47525 | -1.00000 | .00000 | -.00002 |
| 351 | 27.43961 | -1.00000 | .00000 | -.00001 |
| 356 | 29.40396 | -1.00000 | .00000 | .00000  |
| 361 | 31.36832 | -1.00000 | .00000 | .00000  |

它们表示:

$$\alpha = .7954$$

$$E = -.74319 \times 10^1$$

$$E_{1s} = -.1964 \times 10^1$$

$$E_{2s} = -.1975$$

且  $rV(r)$ ,  $P(1s|r)$ ,  $P(2s|r)$  与  $r$  的对应关系为

| $r$      | $rV(r)$  | $P(1s r)$ | $P(2s r)$ |
|----------|----------|-----------|-----------|
| .00000   | -3.00000 | .00000    | .00000    |
| .00767   | -2.97755 | .06974    | .01210    |
| .01535   | -2.95453 | .13632    | .02365    |
| .02302   | -2.93102 | .19983    | .03466    |
| .03069   | -2.90710 | .26040    | .04515    |
| :        | :        | :         | :         |
| 23.51089 | -1.00000 | .00000    | -.00005   |
| 25.47525 | -1.00000 | .00000    | -.00002   |
| 27.43961 | -1.00000 | .00000    | -.00001   |
| 29.40396 | -1.00000 | .00000    | .00000    |
| 31.36832 | -1.00000 | .00000    | .00000    |

余可类推。

## 4. 计算程序

### (1) 根据能量极小判据计算时的计算程序

```
1      PROGRAM XALPMI
2  C    ATOMIC STRUCTURE CALCULATION PROGRAM
3  C    USING X-ALPHA METHODE
4  C    ALPHA IS DETERMINED BY MINIMIZING
5  C    THE CONFIGURATION AVERAGE ENERGY
6      REAL*8 RV(441),R(441),GBHS(441),QQ(441),
7      1EKC(18),BOHS(18,441),ZJBH(441),
8      2XJ(441),RV1(441),Z,C,DR,H,ZBL1,ZBL2,ARF,
9      3B1,BSGM,A2,B2,ZNLE,ARF1,
10     4ARF2,ARF3,ARF4,E2,E3,ANN,DZHS,E,A1,ASGM
11     DIMENSION IZHS(25),NLZ(18),ZJUS(18)
12     COMMON R,GBHS,QQ,NLZ,ZJUS,EKC
13     COMMON /SUSHU/IZHS/RVCO/RV/BXY/BOHS
14     DATA MWGD,MAXI/441,175/
15     DATA ARF,ZXIA,PIPEI/0.666D0,5E-4,1E-5/
16 1    READ(5,*,ERR=80)NZ,KECS,KONZ,(NLZ(I),I=1,
17     118)
18     IF(KONZ.LT.2) GOTO 100
19     READ(5,*) ARF
20 100  NYOU=1
21     NBLO=MWGD/40
22     ARF1=1.D0
23     ARF4=2.D0/3.D0
24     Z=NZ
25     DELT=0.0
26     C=0.88534138D0/Z** (1./3.)
27     WW=0
28     DZHS=0
29     DO 2 I=1,KECS
30     ANN=NLZ(I)/1000
31     LL=NLZ(I)/100
32     ZJUS(I)=NLZ(I)-100*LL
33     DZHS=DZHS+ZJUS(I)/(ANN*ANN)
```

```

34 2   WW=WW+ZJUS(I)
35     TEIO=Z+1.-WW
36     MESW=MWGD
37     DO 3 I=1,KECS
38     ANN=NLZ(I)/1000
39     B56=0.225158D-1
40     EKCI)=-0.27223653D1★B56★★(1./3.)★
41     1Z★★(7./3.)/(ANN★ANN★DZHS)
42 3   CONTINUE
43     I=1
44     KON=1
45     R(1)=0
46     RV(1)=-Z
47     DX=0.0025
48     DR=DX★C
49     H=DR
50     X=0
51     DO 73 J=1,NBLO
52     DO 72 K=1,40
53     I=I+1
54     R(I)=R(I-1)+H
55     IF(KON.GE.2) GOTO 71
56     X=X+DX
57     ZBL1=1.+0.02747★X★★0.5+1.24★X-0.1486★X★★1.5+
58     10.2302★X★★2+0.007298★X★★2.5+0.006944★X★★3
59     ZBL2=Z/ZBL1
60     IF(ZBL2.LE.TEIO) GOTO 71
61     RV(I)=-ZBL2
62     GOTO 72
63 71   RV(I)=-TEIO
64     KON=2
65 72   CONTINUE
66     DX=DX+DX
67     H=H+H
68 73   CONTINUE
69     IF(KONZ.GT.2) GOTO 4011
70     B55=5.
71     B5=SQRT(B55)
72 74   ARF2=ARF4+(B5-1.)/2.★(ARF1-ARF4)

```