

Errata

Berechnung der Röntgen- und Auger-Linien des Methans  
mit Hilfe des Pseudo-Neon-Modells

Theoret. chim. Acta (Berl.) 2, 14—21 (1964)

Von

HERMANN HARTMANN und TAE-KJU HA

Die Formel für 3  $d_0$ -Elektronen in (2) heißt

$$\varphi_{3d_0} = n_6 r^2 Z_3^2 \exp\left(-\frac{Z_3 r}{3}\right) (3 \cos^2 \theta - 1) .$$

In Gleichung (3) sind

$$n_6 = 1/81 \sqrt{\frac{Z_3^3}{6\pi}} \quad \text{und} \quad n_6^R = 2/81 \sqrt{\frac{2Z_3^3}{15}} .$$

Gleichung (22) heißt richtig

$$\varepsilon_0 = -\alpha^2 - \frac{\delta^2 (5 - 7 \beta \delta + 3 \beta^2 \delta^2)}{A} - 3 \delta^2 .$$

Eine erneuerte Minimisierung gibt folgende

Tabelle 1

für Ne	für CH <sub>4</sub>
$\alpha = 9,714$	$\alpha = 5,699$
$\delta = 3,035$	$\delta = 1,388$
	$R = 1,990$ a. E.
$\varepsilon_0 = -132,3072$ a. E.	$\varepsilon_0 = -40,5990$ a. E.
$\varepsilon_1 = -51,4862$ a. E.	$\varepsilon_1 = -20,6452$ a. E.
$\varepsilon_2 = 56,4367$ a. E.	$\varepsilon_2 = 26,8201$ a. E.
	$\varepsilon_3 = -18,7077$ a. E.
	$\varepsilon_4 = 13,9067$ a. E.
$E = -127,3567$ a. E.	$E = -39,2251$ a. E.

Die Röntgenionisierung führt zum Term  $[(1s)^1 (2s)^2 (2p)^6, 2S]$ , der mit den Parametern  $\alpha = 10,125$ ,  $\delta = 3,495$  für  $\text{Ne}^+$  und  $\alpha = 6,061$ ,  $\delta = 1,669$  für  $\text{CH}_4^+$  die Energiewerte in Tab. 2 liefert.

Tabelle 2

	$E_{\text{ber.}}$	$E_{\text{exp.}}$	$E_{\text{ber.}} - E_{\text{exp.}}$
Ne <sup>0</sup> [(1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> , <sup>1</sup> S]	-127,3567	-129,5	2,14
Ne <sup>+</sup> [(1s) <sup>1</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> , <sup>2</sup> S]	- 95,7213	—	—
CH <sub>4</sub> <sup>0</sup> [(1s) <sup>2</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> , <sup>1</sup> S]	- 39,2251	- 40,522	1,297
CH <sub>4</sub> <sup>+</sup> [(1s) <sup>1</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> , <sup>2</sup> S]	- 28,6440	—	—
$\Delta E_{\text{Ne}}$	31,6354	31,9	-0,2646
	= 860,8 eV	= 868,0 eV	= -7,2 eV
$\Delta E_{\text{CH}_4}$	10,5811	10,6221	-0,041
	= 287,9 eV	= 289,0 eV	= -1,1 eV

Tabelle 3

Konfiguration	Ne		CH <sub>4</sub>	
	Energie	Z	Energie	Z
[(1s) <sup>1</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> ( $\overline{3p}$ ) <sup>1</sup> ]	- 96,250	6,734	- 29,357	3,078
[(1s) <sup>1</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> ( $\overline{4p}$ ) <sup>1</sup> ]	- 95,911	6,828	- 28,990	3,172
[(1s) <sup>1</sup> (2s) <sup>2</sup> (2p) <sup>6</sup> ( $\overline{3d}$ ) <sup>1</sup> ]	—	—	- 29,031	3,244

mit  $Z = 2\delta$ .

Tabelle 4

- $E[(1s)^1 (2s)^2 (2p)^6] = - 28,6440$  a. E.  
 A)  $E[(1s)^2 (2s)^0 (2p)^6] = - 37,3219$  a. E.  
 B)  $E[(1s)^2 (2s)^1 (2p)^5] = - 37,6285$  a. E.  
 C)  $E[(1s)^2 (2s)^2 (2p)^4] = - 38,0020$  a. E.

Aus Tab. 4 entnehmen wir:

$$\begin{aligned} \Delta E_A &= 8,6779 \text{ a. E.} = 236,13 \text{ eV,} \\ \Delta E_B &= 8,9845 \text{ a. E.} = 244,47 \text{ eV,} \\ \Delta E_C &= 9,3580 \text{ a. E.} = 254,63 \text{ eV.} \end{aligned}$$

(Eingegangen am 19. November 1964)