

Übung 6

Ausgabe: Freitag, 19.10.2012
Rückgabe: Freitag, 26.10.2012 vor der Vorlesung (bis 7:45 Uhr)
Besprechung: Mi./Fr./Mo., 31.10./02.11./05.11.2012 in den Übungsgruppen
Verantwortliche: 1. Eduard Miloglyadov / 2. Nina Hentzen

6.1 Lesen Sie Kapitel 2 des Skriptes soweit verteilt und stellen Sie *schriftlich* Fragen, wo Sie Verständnisprobleme haben oder Fehler vermuten.

6.2 * In Gl. (2.149) im Skript wird folgender allgemeiner Ausdruck für die Halbwertszeiten gegeben:

$$t_{1/2} = \frac{2^{m-1} - 1}{c_0^{m-1} k (m - 1)} \quad \text{Gl. (2.149)}$$

wobei m die Reaktionsordnung, k die Geschwindigkeitskonstante und c_0 die Anfangskonzentrationen einer allgemeinen Reaktion m -ter Ordnung mit $c_A^0 = c_B^0 = c_C^0 = \dots = c_0$ bedeuten. Zeigen Sie die Gültigkeit von Gl. (2.149) und führen Sie den Grenzübergang für $m \rightarrow 1$ geschickt aus, so dass die korrekte Formel für $t_{1/2}$ mit $m = 1$ erhalten wird. Diskutieren Sie in eigenen Worten knapp die Anwendung dieser Formel zur empirischen Bestimmung der Reaktionsordnung nach der sogenannten "Halbwertszeitmethode".

6.3* Natürliche Radioaktivität

Zerfall	$t_{1/2} / \text{a}$
${}_{94}^{239}\text{Pu} \rightarrow {}_{92}^{235}\text{U} + \alpha$	$2.41 \cdot 10^4$
${}_{92}^{235}\text{U} \rightarrow {}_{90}^{231}\text{Th} + \alpha$	$7.03 \cdot 10^8$
${}_{92}^{238}\text{U} \rightarrow {}_{90}^{234}\text{Th} + \alpha$	$4.47 \cdot 10^9$
${}_{90}^{232}\text{Th} \rightarrow {}_{88}^{228}\text{Ra} + \alpha$	$1.40 \cdot 10^{10}$
${}_{88}^{226}\text{Ra} \rightarrow {}_{86}^{222}\text{Rn} + \alpha$	1599

Tabelle 1: *Halbwertszeiten radioaktiver Zerfälle [1]. Siehe auch Tabelle 3.1 und Bild 3.13 des Skriptes Allgemeine Chemie.*

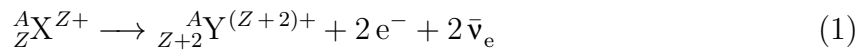
[1] "Table of the Isotopes", in *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 93th Edition (Internet Version 2013), W. M. Haynes and David R. Lide, ed., CRC Press/ Taylor and Francis, Boca Raton, FL. <http://www.hbcpnetbase.com/>

6.3.1 Natürliches Uran besteht aus den Isotopen ${}_{92}^{238}\text{U}$ ($x = 99.3\%$) und ${}_{92}^{235}\text{U}$ ($x = 0.7\%$), wobei die relative Häufigkeit in der Erdkruste als Molenbruch in Prozent in Klammern angegeben ist. Nehmen Sie an, dass Uran in einer Supernovaexplosion zur Zeit t (t ist negativ; heute: $t = 0$ per Definition) gebildet wurde, wobei ${}_{92}^{238}\text{U} : {}_{92}^{235}\text{U}$ im Verhältnis 1:1 entstand. Wann fand die Supernova statt? (Berechnung von t in Jahren; die Halbwertszeiten wurden in Tabelle 1 angegeben).

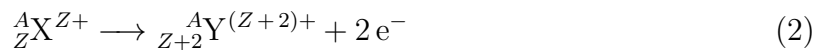
6.3.2 Wie ändert sich die in 6.3.1 berechnete Zeit, wenn man annimmt, dass zum Zeitpunkt t ${}_{92}^{235}\text{U}$, ${}_{92}^{238}\text{U}$ und auch ${}_{94}^{239}\text{Pu}$ in gleicher Häufigkeit (1:1:1) gebildet wurden?

6.3.3 Warum findet man heute auf der Erde $^{238}_{92}\text{U}$, $^{235}_{92}\text{U}$, $^{232}_{90}\text{Th}$ und $^{226}_{88}\text{Ra}$, nicht aber z.B. $^{239}_{94}\text{Pu}$, wenn diese Elemente alle in beträchtlichem Ausmass von der hypothetischen Supernova zum Zeitpunkt t gebildet wurden?

6.4 (freiwillig) Neben den in der Vorlesung erwähnten radioaktiven Zerfällen, die alle recht häufig in vielen Beispielen vorkommen, gibt es auch seltene Zerfälle wie etwa den doppelten β -Zerfall vom Typus



oder



6.4.1 Erläutern Sie die Prozesse (1) und (2) im Rahmen der Erhaltungssätze, die Sie in Kap. 3 PC0 (Allgemeine Chemie) finden.

6.4.2 Als Beispiel für einen doppelten β -Zerfall gibt es die Reaktion von $^{48}_{20}\text{Ca}$. Hierfür wird eine Halbwertszeit von $2 \cdot 10^{19}$ a angegeben. Formulieren Sie die möglichen Reaktionen des doppelten β -Zerfalls mit Berücksichtigung von geeigneten Neutrinos.

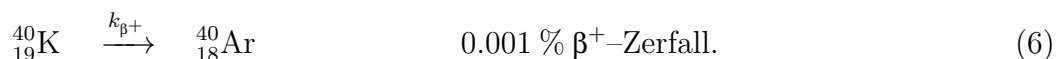
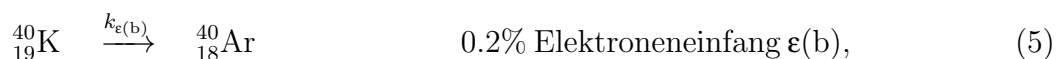
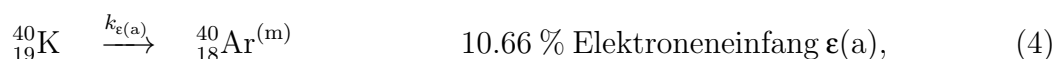
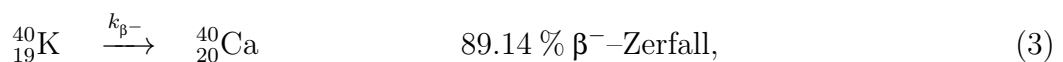
6.4.3 Formulieren Sie den Zerfall von $^{48}_{20}\text{Ca}$ als sequentiellen Prozess von zwei einzelnen β -Zerfällen und äussern Sie sich dazu, ob dieses möglich wäre (Entnehmen Sie die Massen und Spins des Ausgangsstoffes, der Zwischenstufe sowie des Endstoffes aus dem Handbook (www.hbcpnetbase.com) oder aus dem IUPAC Green Book (media.iupac.org/publications/books/gbook/IUPAC-GB3-2ndPrinting-Online-22apr2011.pdf)).

6.4.4 Machen Sie einen Vorschlag, wie man einen so langsamen Zerfall messen könnte.

6.5 Im Skript Kap. 2.5 ist eine Reaktion des Neutroneneinfangs durch $^{238}_{92}\text{U}$ formuliert, wobei $^{239}_{92}\text{U}^*$ entsteht, das durch γ -Zerfall stabilisiert wird. Überlegen Sie sich allfällige Konkurrenzreaktionen für den Zerfall von $^{239}_{92}\text{U}$ und formulieren Sie diese.

6.6 Zerfall von $^{40}_{19}\text{K}$

Im Skript Kapitel 2.7.4 S. 59 sind vier radioaktive Zerfallsreaktionen für $^{40}_{19}\text{K}$ angegeben



Aus Tabellen (z.B. IUPAC Green Book 3rd Edition 2008, 2nd printing) entnimmt man, dass die Häufigkeit in Stoffmengenprozent (Molenbruch) von ^{40}K in der natürlichen Mischung von ^{39}K , ^{40}K und ^{41}K aktuell 0.0117% beträgt (93.2581% für ^{39}K und der Rest für ^{41}K , beide stabil). Die Halbwertszeit $t_{1/2}$ ist $1.248 \cdot 10^9$ a. Ebenfalls finden Sie dort die Atommassen.

6.6.1 Formulieren Sie die vier Reaktionen nochmals explizit im Detail mit allen auftretenden Teilchen. Reduzieren Sie die prozentualen Anteile des β^- -Zerfalls und des Elektreneinfangs $\epsilon(a)$, bei festem Verhältnis so, dass sich total 100 % ergeben und berechnen Sie die Geschwindigkeitskonstanten k_{β^-} , $k_{\epsilon(a)}$, $k_{\epsilon(b)}$, k_{β^+} für die Zerfallsarten (3), (4), (5) und (6) aus der angegebenen Halbwertszeit von ${}^{40}_{19}\text{K}$.

6.6.2* Berechnen Sie anhand der beiliegenden Tabellen (Handbook (www.hbcnetbase.com) oder IUPAC Green Book (media.iupac.org/publications/books/gbook/IUPAC-GB3-2ndPrinting-Online-22apr2011.pdf)) der Atommassen die Massen aller Teilchen in den Reaktionen und die Massendefekte sowie die hier frei werdenden kinetischen Energien und vergleichen Sie mit Bild 2.14.

6.6.3* Was war der Anteil von ${}^{40}\text{K}$ in der Isotopenmischung nach der Erdentstehung vor $4.5 \cdot 10^9$ a unter der Annahme, dass keine anderen Prozesse für die aktuelle Zusammensetzung von Bedeutung sind? Geben Sie die Zusammensetzung der Mischung vor $4.5 \cdot 10^9$ a an.

6.7* Diskutieren Sie die trimolekulare Reaktion scheinbar erster Ordnung



an einem Beispiel. Nennen Sie ein mögliches und *plausibles* A, B und M.

6.7.1 Schreiben Sie das Geschwindigkeitsgesetz mit der wahren und der effektiven Geschwindigkeitskonstanten (k und k_{eff}) nieder und bestimmen Sie deren Dimension und mögliche Einheiten.

6.7.2 Erläutern Sie die Abhängigkeit der Geschwindigkeitskonstanten k_{eff} von den Konzentrationen aller beteiligten Stoffe.

6.8* Untersuchen Sie die Kinetik der trimolekularen Reaktion mit Rückreaktion



Machen Sie zunächst die Annahme, dass diese Reaktion zur Beschreibung der Rekombination ausreicht. Diskutieren Sie eine reale Situation, wo diese Approximation sinnvoll ist.

6.8.1 Formulieren Sie die stöchiometrische Gleichung und das Geschwindigkeitsgesetz zur Reaktion (8) mit Rückreaktion.

6.8.2 Geben Sie die Dimension und mögliche Einheiten der Geschwindigkeitskonstanten k_a and k_b an.

6.8.3 Formulieren Sie das Geschwindigkeitsgesetz zur Reaktion (8) mit Rückreaktion als Funktion der Umsatzvariablen $x = (c_i - c_i^0)/\nu_i$.

6.8.4 Integrieren Sie das Geschwindigkeitsgesetz aus der Aufgabe 6.8.3, indem Sie Ihren Ansatz auf die Form

$$\frac{dx}{dt} = A(x - a)(x - b)(x - c) \quad (9)$$

bringen. Die Symbole $a = x_e$, $b = y_e$ und $c = z_e$ bezeichnen hier die Nullstellen eines Polynoms dritten Grades. Die Integration kann mit einer Partialbruchzerlegung durchgeführt

werden. Sie können aber auch Integraltabellen verwenden. Im Allgemeinen gilt [1]

$$\int \frac{dx}{(x-a)(x-b)(x-c)} = \frac{\ln(x-a)}{(a-b)(a-c)} + \frac{\ln(x-b)}{(b-c)(b-a)} + \frac{\ln(x-c)}{(c-a)(c-b)}. \quad (10)$$

[1] I.N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig, *Taschenbuch der Mathematik*, Thun und Frankfurt am Main **2000** (5. Auflage).

6.8.5 Formulieren Sie eine trimolekulare Reaktion mit Rückreaktion, welche zu (8) bei der Bildung von H_2 von Bedeutung sein könnte (wenn zum Beispiel gilt $[\text{H}_2]/[\text{H}] \gg 1$). Wie lautet dann das Geschwindigkeitsgesetz zum *gesamten* Mechanismus (inklusive (8))?

6.8.6 Äussern Sie sich allgemein zur Wahrscheinlichkeit, dass eine Reaktion in der Gasphase über einen trimolekularen Mechanismus und über einen Alternativmechanismus aus einer Abfolge bimolekularer Elementarreaktionen abläuft. Warum ist aber für die Bildung von H_2 ein trimolekularer Mechanismus wahrscheinlicher als eine Abfolge von bimolekularen Reaktionsschritten?

6.9 Lesen Sie zur Wiederholung und Ergänzung Teil A des verteilten alten Thermodynamikskriptes (insbesondere Kap. 2 mit einfachster kinetischer Gastheorie, Kap. 3 einfache Grundlagen zu Energie und spezifischen Wärmen, Zahl der Freiheitsgrade von Molekülen, Kap. 5 und Kap. 7 zur Entropie). Stellen Sie Fragen (schriftlich!), wo Sie Verständnisprobleme haben oder Fehler vermuten.

Version vom 24. Oktober 2012

6.3 PROPERTIES OF NUCLIDES

The table contains the following properties of naturally occurring and some unstable nuclides:

Column

- 1 Z is the atomic number (number of protons) of the nuclide.
- 2 Symbol of the element.
- 3 A is the mass number of the nuclide. The asterisk * denotes an unstable nuclide (for elements without naturally occurring isotopes it is the most stable nuclide) and the # sign a nuclide of sufficiently long lifetime (greater than 10^5 years) [144] to enable the determination of its isotopic abundance.
- 4 The atomic mass is given in unified atomic mass units, $1 \text{ u} = m_{\text{a}}(^{12}\text{C})/12$, together with the standard errors in parentheses and applicable to the last digits quoted. The data were extracted from a more extensive list of the AME2003 atomic mass evaluation [145,146].
- 5 Representative isotopic compositions are given as amount-of-substance fractions (mole fractions), x , of the corresponding atoms in percents. According to the opinion of CAWIA, they represent the isotopic composition of chemicals or materials most commonly encountered in the laboratory. They may not, therefore, correspond to the most abundant natural material [138]. It must be stressed that those values should be used to determine the average properties of chemicals or materials of unspecified natural terrestrial origin, though no actual sample having the exact composition listed may be available. The values listed here are from the 2001 CAWIA review as given in column 9 of ref. [147] as representative isotopic composition. This reference uses the *Atomic Mass Evaluation 1993* [148,149]. There is an inconsistency in this Table because column 4 uses the most recent masses AME2003 [145,146], whereas column 5 is based on previous atomic masses [148,149]. When precise work is to be undertaken, such as assessment of individual properties, samples with more precisely known isotopic abundances (such as listed in column 8 of ref. [147]) should be obtained or suitable measurements should be made. The uncertainties given in parentheses are applicable to the last digits quoted and cover the range of probable variations in the materials as well as experimental errors. For additional data and background information on ranges of isotope-abundance variations in natural and anthropogenic material, see [149,150].
- 6 I is the nuclear spin quantum number. A plus sign indicates positive parity and a minus sign indicates negative parity. Parentheses denotes uncertain values; all values have been taken from the NUBASE evaluation [144].
- 7 Under magnetic moment the maximum z -component expectation value of the magnetic dipole moment, m , in nuclear magnetons is given. The positive or negative sign implies that the orientation of the magnetic dipole with respect to the angular momentum corresponds to the rotation of a positive or negative charge, respectively. The data were extracted from the compilation by N. J. Stone [151]. An asterisk * indicates that more than one value is given in the original compilation; ** indicates that an older value exists with a higher stated precision. The absence of a plus or minus sign means that the sign has not been determined by the experimenter.
- 8 Under quadrupole moment, the electric quadrupole moment area (see Section 2.5, notes 14 and 15 on p. 23 and 24) is given in units of square femtometres, $1 \text{ fm}^2 = 10^{-30} \text{ m}^2$, although most of the tables quote them in barn (b), $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2 = 100 \text{ fm}^2$. The positive sign implies a prolate nucleus, the negative sign an oblate nucleus. The data are taken from N. J. Stone [151]. An asterisk * indicates that more than one value is given in the original compilation; ** indicates that an older value exists with a higher stated precision. The absence of a plus or minus sign means that the sign has not been determined by the experimenter.

Aus IUPAC Green Book 3rd Edition 2008 (2nd printing)
Kopie für Vorlesungszwecke (PC II Chemische Reaktionskinetik)

<i>Z</i>	<i>Symbol</i>	<i>A</i>	<i>Atomic mass, m_a/u</i>	<i>Isotopic composition, 100 x</i>	<i>Nuclear spin, I</i>	<i>Magnetic moment, m/μ_N</i>	<i>Quadrupole moment, Q/fm²</i>	
1	H	1	1.007 825 032 07(10)	99.9885(70)	1/2+	+2.792 847 34(3)	+0.286(2)*	
		(D)	2	2.014 101 777 8(4)	0.0115(70)	1+		+0.857 438 228(9)
		(T)	3*	3.016 049 277 7(25)		1/2+		+2.978 962 44(4)
2	He	3	3.016 029 319 1(26)	0.000 134(3)	1/2+	-2.127 497 72(3)		
		4	4.002 603 254 15(6)	99.999 866(3)	0+	0		
3	Li	6	6.015 122 795(16)	7.59(4)	1+	+0.822 047 3(6)*	-0.082(2)*	
		7	7.016 004 55(8)	92.41(4)	3/2-	+3.256 427(2)*	-4.06(8)*	
4	Be	9	9.012 182 2(4)	100	3/2-	-1.177 432(3)*	+5.29(4)*	
5	B	10	10.012 937 0(4)	19.9(7)	3+	+1.800 644 78(6)	+8.47(6)	
		11	11.009 305 4(4)	80.1(7)	3/2-	+2.688 648 9(10)	+4.07(3)	
6	C	12	12 (by definition)	98.93(8)	0+	0		
		13	13.003 354 837 8(10)	1.07(8)	1/2-	+0.702 411 8(14)		
		14*	14.003 241 989(4)		0+	0		
7	N	14	14.003 074 004 8(6)	99.636(20)	1+	+0.403 761 00(6)	+2.001(10)*	
		15	15.000 108 898 2(7)	0.364(20)	1/2-	-0.283 188 84(5)		
8	O	16	15.994 914 619 56(16)	99.757(16)	0+	0	-2.578*	
		17	16.999 131 70(12)	0.038(1)	5/2+	-1.893 79(9)		
		18	17.999 161 0(7)	0.205(14)	0+	0		
9	F	19	18.998 403 22(7)	100	1/2+	+2.628 868(8)		
10	Ne	20	19.992 440 175 4(19)	90.48(3)	0+	0	+10.3(8)	
		21	20.993 846 68(4)	0.27(1)	3/2+	-0.661 797(5)		
		22	21.991 385 114(19)	9.25(3)	0+	0		
11	Na	23	22.989 769 280 9(29)	100	3/2+	+2.217 655 6(6)*	+10.45(10)*	
12	Mg	24	23.985 041 700(14)	78.99(4)	0+	0	+19.9(2)*	
		25	24.985 836 92(3)	10.00(1)	5/2+	-0.855 45(8)		
		26	25.982 592 929(30)	11.01(3)	0+	0		
13	Al	27	26.981 538 63(12)	100	5/2+	+3.641 506 9(7)	+14.66(10)*	
14	Si	28	27.976 926 532 5(19)	92.223(19)	0+	0		
		29	28.976 494 700(22)	4.685(8)	1/2+	-0.555 29(3)		
		30	29.973 770 17(3)	3.092(11)	0+	0		
15	P	31	30.973 761 63(20)	100	1/2+	+1.131 60(3)		
16	S	32	31.972 071 00(15)	94.99(26)	0+	0	-6.4(10)*	
		33	32.971 458 76(15)	0.75(2)	3/2+	+0.643 821 2(14)		
		34	33.967 866 90(12)	4.25(24)	0+	0		
		36	35.967 080 76(20)	0.01(1)	0+	0		
17	Cl	35	34.968 852 68(4)	75.76(10)	3/2+	+0.821 874 3(4)	8.50(11)*	
		37	36.965 902 59(5)	24.24(10)	3/2+	+0.684 123 6(4)	-6.44(7)*	
18	Ar	36	35.967 545 106(29)	0.3365(30)	0+	0		
		38	37.962 732 4(4)	0.0632(5)	0+	0		
		40	39.962 383 122 5(29)	99.6003(30)	0+	0		
19	K	39	38.963 706 68(20)	93.2581(44)	3/2+	+0.391 47(3)**	+5.85	
		40#	39.963 998 48(21)	0.0117(1)	4-	-1.298 100(3)	-7.3(1)*	
		41	40.961 825 76(21)	6.7302(44)	3/2+	+0.214 870 1(2)**	+7.11(7)*	

Aus IUPAC Green Book 3rd Edition 2008 (2nd printing)
Kopie für Vorlesungszwecke (PC II Chemische Reaktionskinetik)

<i>Z</i>	<i>Symbol</i>	<i>A</i>	<i>Atomic mass,</i> <i>m_a/u</i>	<i>Isotopic</i> <i>composition,</i> 100 <i>x</i>	<i>Nuclear</i> <i>spin,</i> <i>I</i>	<i>Magnetic</i> <i>moment,</i> <i>m/μ_N</i>	<i>Quadrupole</i> <i>moment,</i> <i>Q/fm²</i>
20	Ca	40	39.962 590 98(22)	96.941(156)	0+	0	
		42	41.958 618 01(27)	0.647(23)	0+	0	
		43	42.958 766 6(3)	0.135(10)	7/2−	−1.317 643(7)*	−5.5(1)**
		44	43.955 481 8(4)	2.086(110)	0+	0	
		46	45.953 692 6(24)	0.004(3)	0+	0	
		48#	47.952 534(4)	0.187(21)	0+	0	
21	Sc	45	44.955 911 9(9)	100	7/2−	+4.756 487(2)	−15.6(3)*
22	Ti	46	45.952 631 6(9)	8.25(3)	0+	0	
		47	46.951 763 1(9)	7.44(2)	5/2−	−0.788 48(1)	+30.0(20)*
		48	47.947 946 3(9)	73.72(3)	0+	0	
		49	48.947 870 0(9)	5.41(2)	7/2−	−1.104 17(1)	24.7(11)*
		50	49.944 791 2(9)	5.18(2)	0+	0	
23	V	50#	49.947 158 5(11)	0.250(4)	6+	+3.345 688 9(14)	21.0(40)*
		51	50.943 959 5(11)	99.750(4)	7/2−	+5.148 705 7(2)	−4.3(5)*
24	Cr	50	49.946 044 2(11)	4.345(13)	0+	0	
		52	51.940 507 5(8)	83.789(18)	0+	0	
		53	52.940 649 4(8)	9.501(17)	3/2−	−0.474 54(3)	−15.0(50)*
		54	53.938 880 4(8)	2.365(7)	0+	0	
25	Mn	55	54.938 045 1(7)	100	5/2−	+3.468 717 90(9)	+33.0(10)*
26	Fe	54	53.939 610 5(7)	5.845(35)	0+	0	
		56	55.934 937 5(7)	91.754(36)	0+	0	
		57	56.935 394 0(7)	2.119(10)	1/2−	+0.090 623 00(9)*	
		58	57.933 275 6(8)	0.282(4)	0+	0	
27	Co	59	58.933 195 0(7)	100	7/2−	+4.627(9)	+41.0(10)*
28	Ni	58	57.935 342 9(7)	68.0769(89)	0+	0	
		60	59.930 786 4(7)	26.2231(77)	0+	0	
		61	60.931 056 0(7)	1.1399(6)	3/2−	−0.750 02(4)	+16.2(15)
		62	61.928 345 1(6)	3.6345(17)	0+	0	
		64	63.927 966 0(7)	0.9256(9)	0+	0	
29	Cu	63	62.929 597 5(6)	69.15(15)	3/2−	2.227 345 6(14)*	−21.1(4)*
		65	64.927 789 5(7)	30.85(15)	3/2−	2.381 61(19)*	−19.5(4)
30	Zn	64	63.929 142 2(7)	48.268(321)	0+	0	
		66	65.926 033 4(10)	27.975(77)	0+	0	
		67	66.927 127 3(10)	4.102(21)	5/2−	+0.875 204 9(11)*	+15.0(15)
		68	67.924 844 2(10)	19.024(123)	0+	0	
		70	69.925 319 3(21)	0.631(9)	0+	0	
31	Ga	69	68.925 573 6(13)	60.108(9)	3/2−	+2.016 59(5)	+16.50(8)*
		71	70.924 701 3(11)	39.892(9)	3/2−	+2.562 27(2)	+10.40(8)*
32	Ge	70	69.924 247 4(11)	20.38(18)	0+	0	
		72	71.922 075 8(18)	27.31(26)	0+	0	
		73	72.923 458 9(18)	7.76(8)	9/2+	−0.879 467 7(2)	−17.0(30)
		74	73.921 177 8(18)	36.72(15)	0+	0	
		76#	75.921 402 6(18)	7.83(7)	0+	0	
33	As	75	74.921 596 5(20)	100	3/2−	+1.439 48(7)	+30.0(50)**

IONIZATION ENERGIES OF ATOMS AND ATOMIC IONS

The ionization energies (often called ionization potentials) of neutral and partially ionized atoms are listed in this table. Data were obtained from the compilations cited below, supplemented by results from the recent research literature. Values for the first and second ionization energies come from Reference 6. All values are given in electron volts (eV).

Following the traditional spectroscopic notation, columns are headed I, II, III, etc. up to VIII, where I indicates the neutral atom, II the singly ionized atom, III the doubly ionized atom, etc. The first section of the table includes spectra I to VIII of all the elements through rutherfordium; subsequent sections cover higher spectra (ionization stages) for those elements for which data are available.

References

1. Moore, C. E., *Ionization Potentials and Ionization Limits Derived from the Analysis of Optical Spectra*, Natl. Stand. Ref. Data Ser. — Natl. Bur. Stand. (U.S.) No. 34, 1970.
2. Martin, W. C., Zalubas, R., and Hagan, L., *Atomic Energy Levels — The Rare Earth Elements*, Natl. Stand. Ref. Data Ser. — Natl. Bur. Stand. (U.S.), No. 60, 1978.
3. Sugar, J. and Corliss, C., *Atomic Energy Levels of the Iron Period Elements: Potassium through Nickel*, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, Vol.14, Suppl. 2, 1985.
4. References to papers in *J. Phys. Chem. Ref. Data*, in the period 1973–91 covering other elements may be found in the cumulative index to that journal.
5. Martin, W.C., and Wiese, W.L., in *Atomic, Molecular, and Optical Physics Handbook*, Drake, G.W.F., Ed., AIP Press, New York, 1996.
6. Sansonetti, J. E., Martin, W. C., and Young, S. L., *Handbook of Basic Atomic Spectroscopic Data* (version 1.1), NIST Physical Data web site <<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook>> (October 2004); *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 34, 1559, 2005.

Neutral Atoms to +7 Ions

Z	Element	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	H	13.598443							
2	He	24.587387	54.417760						
3	Li	5.391719	75.6400	122.45429					
4	Be	9.32270	18.21114	153.89661	217.71865				
5	B	8.29802	25.1548	37.93064	259.37521	340.22580			
6	C	11.26030	24.3833	47.8878	64.4939	392.087	489.99334		
7	N	14.5341	29.6013	47.44924	77.4735	97.8902	552.0718	667.046	
8	O	13.61805	35.1211	54.9355	77.41353	113.8990	138.1197	739.29	871.4101
9	F	17.4228	34.9708	62.7084	87.1398	114.2428	157.1651	185.186	953.9112
10	Ne	21.56454	40.96296	63.45	97.12	126.21	157.93	207.2759	239.0989
11	Na	5.139076	47.2864	71.6200	98.91	138.40	172.18	208.50	264.25
12	Mg	7.646235	15.03527	80.1437	109.2655	141.27	186.76	225.02	265.96
13	Al	5.985768	18.82855	28.44765	119.992	153.825	190.49	241.76	284.66
14	Si	8.15168	16.34584	33.49302	45.14181	166.767	205.27	246.5	303.54
15	P	10.48669	19.7695	30.2027	51.4439	65.0251	220.421	263.57	309.60
16	S	10.36001	23.33788	34.79	47.222	72.5945	88.0530	280.948	328.75
17	Cl	12.96763	23.8136	39.61	53.4652	67.8	97.03	114.1958	348.28
18	Ar	15.759610	27.62966	40.74	59.81	75.02	91.009	124.323	143.460
19	K	4.3406633	31.63	45.806	60.91	82.66	99.4	117.56	154.88
20	Ca	6.11316	11.87172	50.9131	67.27	84.50	108.78	127.2	147.24
21	Sc	6.56149	12.79977	24.75666	73.4894	91.65	110.68	138.0	158.1
22	Ti	6.82812	13.5755	27.4917	43.2672	99.30	119.53	140.8	170.4
23	V	6.74619	14.618	29.311	46.709	65.2817	128.13	150.6	173.4
24	Cr	6.76651	16.4857	30.96	49.16	69.46	90.6349	160.18	184.7
25	Mn	7.43402	15.6400	33.668	51.2	72.4	95.6	119.203	194.5
26	Fe	7.9024	16.1877	30.652	54.8	75.0	99.1	124.98	151.06
27	Co	7.88101	17.084	33.50	51.3	79.5	102.0	128.9	157.8
28	Ni	7.6398	18.16884	35.19	54.9	76.06	108	133	162
29	Cu	7.72638	20.2924	36.841	57.38	79.8	103	139	166
30	Zn	9.394199	17.96439	39.723	59.4	82.6	108	134	174
31	Ga	5.999301	20.51515	30.7258	63.241	86.01	112.7	140.9	169.9
32	Ge	7.89943	15.93461	34.2241	45.7131	93.5			
33	As	9.7886	18.5892	28.351	50.13	62.63	127.6		
34	Se	9.75239	21.19	30.8204	42.9450	68.3	81.7	155.4	
35	Br	11.8138	21.591	36	47.3	59.7	88.6	103.0	192.8
36	Kr	13.99961	24.35984	36.950	52.5	64.7	78.5	111.0	125.802
37	Rb	4.177128	27.2895	40	52.6	71.0	84.4	99.2	136
38	Sr	5.69485	11.0301	42.89	57	71.6	90.8	106	122.3
39	Y	6.2173	12.224	20.52	60.597	77.0	93.0	116	129
40	Zr	6.63390	13.1	22.99	34.34	80.348			
41	Nb	6.75885	14.0	25.04	38.3	50.55	102.057	125	

Z	Element	Neutral Atoms to +7 Ions							
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
42	Mo	7.09243	16.16	27.13	46.4	54.49	68.8276	125.664	143.6
43	Tc	7.28	15.26	29.54					
44	Ru	7.36050	16.76	28.47					
45	Rh	7.45890	18.08	31.06					
46	Pd	8.3369	19.43	32.93					
47	Ag	7.57623	21.47746	34.83					
48	Cd	8.99382	16.90831	37.48					
49	In	5.78636	18.8703	28.03	54				
50	Sn	7.34392	14.6322	30.50260	40.73502	72.28			
51	Sb	8.60839	16.63	25.3	44.2	56	108		
52	Te	9.0096	18.6	27.96	37.41	58.75	70.7	137	
53	I	10.45126	19.1313	33					
54	Xe	12.12984	20.9750	32.1230					
55	Cs	3.893905	23.15744						
56	Ba	5.211664	10.00383						
57	La	5.5769	11.059	19.1773	49.95	61.6			
58	Ce	5.5387	10.85	20.198	36.758	65.55	77.6		
59	Pr	5.473	10.55	21.624	38.98	57.53			
60	Nd	5.5250	10.72	22.1	40.4				
61	Pm	5.582	10.90	22.3	41.1				
62	Sm	5.6437	11.07	23.4	41.4				
63	Eu	5.67038	11.25	24.92	42.7				
64	Gd	6.14980	12.09	20.63	44.0				
65	Tb	5.8638	11.52	21.91	39.79				
66	Dy	5.9389	11.67	22.8	41.47				
67	Ho	6.0215	11.80	22.84	42.5				
68	Er	6.1077	11.93	22.74	42.7				
69	Tm	6.18431	12.05	23.68	42.7				
70	Yb	6.25416	12.176	25.05	43.56				
71	Lu	5.42586	13.9	20.9594	45.25	66.8			
72	Hf	6.82507	15	23.3	33.33				
73	Ta	7.54957							
74	W	7.86403	16.1						
75	Re	7.83352							
76	Os	8.43823							
77	Ir	8.96702							
78	Pt	8.9588	18.563						
79	Au	9.22553	20.20						
80	Hg	10.4375	18.7568	34.2					
81	Tl	6.108194	20.4283	29.83					
82	Pb	7.41663	15.03248	31.9373	42.32	68.8			
83	Bi	7.2855	16.703	25.56	45.3	56.0	88.3		
84	Po	8.414							
85	At								
86	Rn	10.7485							
87	Fr	4.072741							
88	Ra	5.278423	10.14715						
89	Ac	5.17	11.75						
90	Th	6.3067	11.9	20.0	28.8				
91	Pa	5.89							
92	U	6.1941	10.6						
93	Np	6.2657							
94	Pu	6.0260	11.2						
95	Am	5.9738							
96	Cm	5.9914							
97	Bk	6.1979							
98	Cf	6.2817	11.8						
99	Es	6.42	12.0						
100	Fm	6.50							
101	Md	6.58							
102	No	6.65							
103	Lr	4.9							
104	Rf	6.0							

+8 Ions to +15 Ions									
Z	Element	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI
9	F	1103.1176							
10	Ne	1195.8286	1362.1995						
11	Na	299.864	1465.121	1648.702					
12	Mg	328.06	367.50	1761.805	1962.6650				
13	Al	330.13	398.75	442.00	2085.98	2304.1410			
14	Si	351.12	401.37	476.36	523.42	2437.63	2673.182		
15	P	372.13	424.4	479.46	560.8	611.74	2816.91	3069.842	
16	S	379.55	447.5	504.8	564.44	652.2	707.01	3223.78	3494.1892
17	Cl	400.06	455.63	529.28	591.99	656.71	749.76	809.40	3658.521
18	Ar	422.45	478.69	538.96	618.26	686.10	755.74	854.77	918.03
19	K	175.8174	503.8	564.7	629.4	714.6	786.6	861.1	968
20	Ca	188.54	211.275	591.9	657.2	726.6	817.6	894.5	974
21	Sc	180.03	225.18	249.798	687.36	756.7	830.8	927.5	1009
22	Ti	192.1	215.92	265.07	291.500	787.84	863.1	941.9	1044
23	V	205.8	230.5	255.7	308.1	336.277	896.0	976	1060
24	Cr	209.3	244.4	270.8	298.0	354.8	384.168	1010.6	1097
25	Mn	221.8	248.3	286.0	314.4	343.6	403.0	435.163	1134.7
26	Fe	233.6	262.1	290.2	330.8	361.0	392.2	457	489.256
27	Co	186.13	275.4	305	336	379	411	444	511.96
28	Ni	193	224.6	321.0	352	384	430	464	499
29	Cu	199	232	265.3	369	401	435	484	520
30	Zn	203	238	274	310.8	419.7	454	490	542
31	Ga	210.8	244.0	280.7	319.2	357.2	471.2	508.8	548.3
36	Kr	230.85	268.2	308	350	391	447	492	541
37	Rb	150	277.1						
38	Sr	162	177	324.1					
39	Y	146.2	191	206	374.0				
42	Mo	164.12	186.4	209.3	230.28	279.1	302.60	544.0	570

+16 Ions to +23 Ions									
Z	Element	XVII	XVIII	XIX	XX	XXI	XXII	XXIII	XXIV
17	Cl	3946.2960							
18	Ar	4120.8857	4426.2296						
19	K	1033.4	4610.8	4934.046					
20	Ca	1087	1157.8	5128.8	5469.864				
21	Sc	1094	1213	1287.97	5674.8	6033.712			
22	Ti	1131	1221	1346	1425.4	6249.0	6625.82		
23	V	1168	1260	1355	1486	1569.6	6851.3	7246.12	
24	Cr	1185	1299	1396	1496	1634	1721.4	7481.7	7894.81
25	Mn	1224	1317	1437	1539	1644	1788	1879.9	8140.6
26	Fe	1266	1358	1456	1582	1689	1799	1950	2023
27	Co	546.58	1397.2	1504.6	1603	1735	1846	1962	2119
28	Ni	571.08	607.06	1541	1648	1756	1894	2011	2131
29	Cu	557	633	670.588	1697	1804	1916	2060	2182
30	Zn	579	619	698	738	1856			
36	Kr	592	641	786	833	884	937	998	1051
42	Mo	636	702	767	833	902	968	1020	1082

+24 Ions to +29 Ions							
Z	Element	XXV	XXVI	XXVII	XXVIII	XXIX	XXX
25	Mn	8571.94					
26	Fe	8828	9277.69				
27	Co	2219.0	9544.1	10012.12			
28	Ni	2295	2399.2	10288.8	10775.40		
29	Cu	2308	2478	2587.5	11062.38	11567.617	
36	Kr	1151	1205.3	2928	3070	3227	3381
42	Mo	1263	1323	1387	1449	1535	1601