

M. Steffen

ABHANDLUNGEN AUS DER HAMBURGER STERNWARTE
BAND VIII NR. 1

TABELLEN FÜR DIE BERECHNUNG
VON ZUSTANDSSUMMEN

von

G. TRAVING		Hamburger Sternwarte
B. BASCHEK		Institut für Theoretische Physik
H. HOLWEGER		und Sternwarte der Universität Kiel

EIN ALGOL-PROGRAMM FÜR DIE
QUANTITATIVE ANALYSE VON STERNSPEKTREN

von

B. BASCHEK		Institut für Theoretische Physik
H. HOLWEGER		und Sternwarte der Universität Kiel
G. TRAVING		Hamburger Sternwarte

HAMBURG-BERGEDORF 1966

Gedruckt mit Unterstützung der
Joachim Jungius - Gesellschaft der Wissenschaften e. V.
Hamburg

Druck: Brockmann/Offset Hamburg

TABELLEN FÜR DIE BERECHNUNG VON ZUSTANDSSUMMEN
von
G. Traving, B. Baschek und H. Holweger

Diebei der Auswertung optischer Spektren und bei Ionisationsrechnungen auftretende Zustands-
summe Q einer Ionisationsstufe setzt sich aus s Anteilen Q' der zu verschiedenen Elternio-
nen gehörenden Elektronenkonfigurationen zusammen:

$$Q = g_o + \sum_1^s Q' \quad (1)$$

Es ist zweckmäßig, den Grundterm (statistisches Gewicht g_o) getrennt zu behandeln und Q'
aufzuteilen in eine direkte Summe über k Energieterme mit statistischen Gewichten g_j und
Anregungsspannungen χ_j und einen asymptotischen Teil, der näherungsweise wasserstoffähn-
lich von einer effektiven Quantenzahl

$$l = z \cdot \sqrt{\frac{Ry}{\chi_{ion} - \chi_k}} + 1 \quad (2)$$

ab gerechnet wird. Wir schreiben also (siehe (1)):

$$Q' = \sum_{j=1}^k g_j 10^{-\chi_j \Theta} + 2g_{pr} Q_{as}(l, z) \cdot 10^{-\chi_{ion} \Theta} \quad (3)$$

wobei Ry die Rydbergkonstante, Z die effektive Kernladungszahl ($Z=1$ für neutrale Atome),
 χ_{ion} die Ionisationsspannung, g_{pr} das statistische Gewicht des Elternions

$$2g_{pr} = 2(2S+1)(2L+1) \quad (4)$$

sowie Θ die reziproke Temperatur

$$\Theta = \frac{5040}{T} \quad (5)$$

ist. Bezüglich der Berechnung von $Q_{as}(l, z)$ sei auf (1) verwiesen.

Nach B. Schlender und G. Traving (3) kann die Anzahl k der Terme bei der diskreten Sum-
mation wesentlich verringert werden, indem man

$$f(\Theta) = \sum_{j=1}^k g_j 10^{-\chi_j \Theta} \quad (6)$$

im Tschebyscheffschen Sinne durch Einführen von wenigen ($2 \leq m \leq 5$) Ersatztermen mit
Gewichten α_v und Anregungsspannungen γ_v hinreichend genau approximiert:

$$f(\Theta) \approx \varphi(\Theta) = \sum_{v=1}^m \alpha_v 10^{-\gamma_v \Theta} \quad (7)$$

Wir geben in dieser Arbeit Tabellen der α_v und γ_v für die wichtigsten Elemente an.

Die Daten für die "ursprünglichen" Terme g_j, χ_j sind aus Ch. E. Moore's "Atomic Energy Levels" (2) entnommen. Bis zu der effektiven Quantenzahl $l-1$ hin werden fehlende Terme soweit wie möglich ergänzt, zur Hauptsache mit der Annahme, daß sie wasserstoffähnlich sind. +)

Die Berechnung der fiktiven Terme α_v, γ_v erfolgte nach dem bei Schlender und Traving angegebenen Verfahren, welches geringfügig modifiziert wurde: Die Ausgangsnäherung für das Gleichungssystem (3) bei (3) wurde einfach durch Zusammenfassen der Terme bis auf die Zahl m hin gewonnen. Weiterhin wurde die exakte Summe $f(\Theta)$ mit der Näherung $\varphi(\Theta)$ an 80 diskreten Werten Θ verglichen, welche äquidistant in $\log \Theta$ verteilt sind.

Die Approximation (7) gilt für den Bereich

$$0 \leq X \leq 800$$

Die dimensionslose Variable $X = \chi_{ion} \cdot \Theta$ ist zusammen mit $S_v = \gamma_v / \gamma_{ion}$ eingeführt, so daß

$$\alpha_v 10^{-\gamma_v \Theta} = \alpha_v 10^{-S_v X}$$

gilt.

Die Anzahl m der Ersatzterme ist durch die geforderte Genauigkeit festgelegt. In den meisten Fällen wurde der maximale Fehler auf $\max_{\Theta} |f(\Theta) - \varphi(\Theta)| < 10^{-2}$ beschränkt.

Die ursprünglichen Terme sind ohne Tschebyscheff-Approximation direkt übernommen, falls deren Anzahl $k \leq 4$ ist.

Die numerische Durchführung der Berechnung von α_v und γ_v erfolgte auf der elektronischen Rechenanlage X 1 des Kieler Rechenzentrums.

Literatur

- 1 BASCHEK, B., H. HOLWEGGER und G. TRAVING:
Abhandlungen aus der Hamburger Sternwarte VIII, 26 (1966)
- 2 MOORE, Ch. E.: Atomic Energy Levels I - III.
Circ. Nat. Bur. of Standards No. 467 (1949-1958)
- 3 SCHLENDER, B. und G. TRAVING:
Z. Astrophys. 61, 92 (1965)

+) Wir danken Herrn Elbrechter und Herrn Lobemeier für das Ausführen dieser Rechnungen.

Erläuterungen zu der Tabelle

Für die wichtigsten Ionisationsstufen von 37 Elementen sind angegeben:

g_0	statistisches Gewicht des Grundterms	
χ_{ion}	Ionisationsspannung in e V	
$2 \cdot g_{pr}$	2 x statistisches Gewicht des Elternions	
l	effektive Quantenzahl für den asymptotischen Teil der Zustandssumme	
γ_v	Anregungsspannungen	} der Ersatzterme
α_v	statistische Gewichte	

In der letzten Spalte ist jeweils die Genauigkeit der Approximation (7) angegeben, und zwar sind maximale Fehler $> 10^{-3} \cdot g_0$ durch * , $> 10^{-2} \cdot g_0$ durch ** gekennzeichnet. Keine Angabe bedeutet, daß der maximale Fehler $\leq 10^{-3} \cdot g_0$ ist.

Element	g_0	X_{ion}	$2g_{pr}$	1	$\gamma_V [eV]$	α_V	Be I	1	9.320	4	6.0	2.735	9.1849
H I	2	13.595	2	11.0	10.853	20.4976						6.774	32.9263
					13.342	747.5023						8.569	183.8887
H II	1	∞	0	1.0			Be II	2	18.206	2	8.0	3.967	6.0478
												10.750	19.9563
												11.672	88.0437
He I	1	24.580	4	8.0	21.170	28.1703	Be III	1	153.850	4	6.0	123.719	23.1331
					24.125	527.8296						147.167	192.8669
					43.708	22.2809	Be IV	2	217.657	2	8.0	171.066	16.1651
He II	2	54.403	2	12.0	53.542	987.7189	Be V	1	∞	0	1.0	210.558	261.8348
He III	1	∞	0	1.0								0.002	4.0086 *
							B I	2	8.296	2	9.0	3.971	19.6741
												7.882	402.3110
Li I	2	5.390	2	6.0	2.022	8.4915 *	B II	1	25.149	4	6.0	4.720	9.7257 *
					4.604	97.5015						13.477	30.9262
Li II	1	75.619	4	6.0	62.032	23.3299						22.103	186.3466
					72.624	192.6701						23.056	44.1629
Li III	2	122.420	2	8.0	96.149	16.0047	B III	2	37.920	2	6.0	6.000	6.0084
					118.333	247.9952						24.540	23.5767
Li IV	1	∞	0	1.0								32.300	76.4149

B IV	1	259,298	4	5.0	204,371	19,5530	N I	4	14,529	18	6.1	2,554	14,0499 *
					243,028	96,4470						9,169	30,8008
B V	2	340,127	2	6.0	255,201	8,0000						13,651	883,1443
					319,715	100,0000						12,353	10,0000
C I	1	11,256	12	6.0	0,004	8,0158 *						13,784	16,0000
					1,359	5,8833	N II	1	29,593	12	5.0	0,014	8,0462 *
					6,454	33,7521						2,131	6,2669
C II	2	24,376	2	6.0	10,376	595,3432						15,745	17,8696
					0,008	4,0003						24,949	282,8084
					16,546	17,0841						6,376	7,3751 *
					21,614	82,9154						14,246	33,1390
					5,688	15,9808 *						29,465	215,4829
C III	1	47,871	4	6.1	15,801	48,2044	N III	2	47,426	2	6.0	0,022	4,0003
					26,269	435,8093						31,259	19,3533
					6,691	10,0281 *						41,428	80,6462
					25,034	15,7574						7,212	13,0998
					40,975	186,2109						15,228	19,6425
C IV	2	64,476	2	6.0	17,604	15,4127						34,387	94,3035
					36,180	55,9559						46,708	370,9539
					47,133	243,6311						63,626	16,0000
					8,005	6,0057						46,475	38,0000
					40,804	23,5757						49,468	
					54,492	76,4185							
C V	1	391,986	4	4.0	303,772	15,7995							
					354,208	36,2005							

N IV	1	77.450	4	6.0	8.693	10.3289 *	O II	4	35.108	18	6.0	3.472	12.7843
													5.6828
													7.437
													5.6828
													98.0919
													98.0919
													829.4396
													829.4396
													50.9878
													50.9878
N V	2	97.863	2	6.0	9.999	6.0044							199.0120
													199.0120
													2.0000
													2.0000
													6.0000
													6.0000
													10.0000
													10.0000
													10.0000
													10.0000
													30.0000
													30.0000
													50.0000
													50.0000
							O III	1	54.886	12	6.0	0.032	8.0703 *
													8.0703 *
													∞
													∞
O I	5	13.614	8	8.0	0.022	4.0029							5.7144
													5.7144
													84.1156
													84.1156
													529.0927
													529.0927
													5.6609
													5.6609
													28.9355
													28.9355
													111.3620
													111.3620
													494.0413
													494.0413
													45.5249
													45.5249
													134.4751
													134.4751

C IV	2	77.394	2	5.9	0.048	4.0003	F I	4	17.418	18	4.0	0.050	2.0001
					50.089	21.2937						13.317	39.9012
					66.604	78.7058						15.692	122.0986
		87.609	18	5.0	8.954	12.8293			20.009	10	4.0	15.361	10.0000
					18.031	16.2730						17.128	30.0000
O V					57.755	123.6578						18.498	50.0000
					72.594	327.2396	F II	5	34.977	8	5.0	0.048	4.0199
		97.077	6	4.9	68.388	48.7883						2.735	5.5741
					82.397	102.2117						20.079	22.1839
		103.911	18	4.0	31.960	20.0060 *						30.277	190.2179
					76.876	161.9903			39.204	20	4.0	27.548	53.0383
		106.116	10	4.0	75.686	28.4184						32.532	126.9616
					80.388	61.5816			41.368	12	4.0	30.391	31.6894
		113.873	4	6.0	10.747	10.5563						34.707	75.3105
					52.323	13.2950	F III	4	62.646	18	5.0	4.479	13.5014
				94.976	188.1390						12.072	7.9936	
	125.863	12	6.0	27.405	14.6560						31.662	55.7981	
				86.350	129.4922						51.432	298.7039	
				109.917	470.8512			65.774	10	4.0	44.283	26.2496	
											50.964	63.7503	
								69.282	2	3.9	46.193	2.0000	
											50.436	6.0000	
											54.880	10.0000	
								71.882	10	4.0	50.816	28.7150	
											57.479	71.2850	

F IV	1	87.139	12	5.0	0.058	8.0153 *	Ne II	4	41.071	18	5.0	0.097	2.0007	
					3.434	6.1931						29.878	89.5607	
					14.892	21.7287						37.221	380.4351	
					37.472	48.7780				44.274	10	4.0	31.913	26.4473
					69.883	278.2782							37.551	63.5527
F V		97.852	24	5.0	67.810	178.5560	Ne III	5	63.729	8	3.9	0.092	4.0342	
					83.105	421.4435						3.424	5.6162	
		106.089	20	4.0	72.435	51.7632						24.806	11.5176	
					79.747	95.2368						46.616	72.8273	
	2	114.214	2	5.0	0.098	4.0266 *				68.806	20	4.0	45.643	48.5684
					11.913	17.5284							54.147	131.4315
					31.240	27.4353				71.434	12	4.0	48.359	31.1710
					86.166	49.0023							57.420	76.8290
		126.256	18	5.0	83.085	143.1411	Ne IV	4	97.162	18	5.0	5.453	5.453	14.0482 *
					103.846	306.8586							18.560	13.3077
Ne I		137.373	6	4.0	90.117	14.9231						46.583	52.7897	
					97.030	39.0769						80.101	467.8487	
		145.435	18	4.0	99.602	56.1826				100.917	10	5.0	70.337	54.2196
					106.700	75.8174							85.789	195.7800
		148.250	10	4.0	101.990	22.4437	Ne V	1	126.423	12	4.0	0.135	0.135	8.3813 **
					108.179	49.5563							5.497	7.9725
	1	21.559	8	6.0	17.796	34.5080							26.121	39.3316
					20.730	365.4919							86.665	154.2828
		21.656	4	6.0	17.879	16.5768								
					20.855	183.4231								

Na I	2	5.138	2	7.0	2.400	11.6348 *	Na V	4	138.597	18	5.0	5.930	10.3174
					4.552	158.3593						9.127	5.6967
NA II	1	47.290	8	4.0	34.367	21.0453						94.219	121.0726
					40.566	50.9546						115.690	340.9131
					34.676	10.1389						97.783	63.7918
					40.764	25.8611						12.110	186.2078
Na III	4	71.647	18	4.0	0.170	2.0019						92.769	2.0000
					44.554	38.0569						108.400	16.0000
					57.142	137.9398						28.372	17.9266
					51.689	28.3106						49.002	18.7036
					60.576	61.6893						111.473	91.3687
Na IV	5	98.880	8	5.0	0.152	4.0334 *						110.226	36.8524
					4.260	5.8550						125.690	233.1475
					36.635	18.1786						2.805	10.7445
					83.254	208.9142						6.777	291.5057
					72.561	93.6895						9.254	53.7488
					89.475	406.3095						4.459	6.2270
					75.839	60.4276						9.789	31.1291
					92.582	239.5719						13.137	132.6438
												57.413	40.4379
												71.252	159.5618
												58.010	20.3845
												71.660	79.6154

Mg IV	4	109.294	18	5.0	0.276	2.0007	Al III	2	28.441	2	7.0	6.751	6.3277
					74.440	106.8977						16.681	29.5086
					94.447	343.1010						24.151	134.1634
		113.799	10	5.0	54.472	10.1326	Al IV	1	119.957	8	5.0	83.551	46.3164
					95.858	237.8581						104.787	153.6833
Mg V	5	141.231	8	5.0	0.251	4.1096 *			120.383	4	5.0	84.293	22.9896
					5.370	6.1538						105.171	77.0103
					51.461	22.3636	Al V	4	153.772	18	5.0	0.426	2.0002
					121.819	275.3339						46.012	2.3599
		147.944	20	5.0	101.026	117.0375						107.928	151.2144
					124.652	382.9616						131.729	392.4253
		151.493	12	5.0	104.636	71.4230							
					128.118	228.5765	Si I	1	8.149	12	6.1	0.020	7.9658
												0.752	4.6762
Al I	2	5.984	2	7.0	0.014	4.0009						1.614	1.3512
					3.841	11.7804						5.831	123.2267
					5.420	142.2179	Si II	2	16.339	2	5.9	0.036	4.0000
		10.634	18	4.0	3.727	13.6585 *						8.795	7.4186
					8.833	96.3371						11.208	24.1754
Al II	1	18.823	4	7.0	4.749	10.0807						13.835	60.4060
					11.902	49.5843						5.418	14.4695
					16.719	285.3343			22.894	18	5.0	7.825	11.9721
		25.496	12	4.0	11.310	14.6872						14.440	26.5062
					18.268	59.3122						19.412	269.0521

Si III	1	33.459	4	5.0	6.572	9.1793	P III	2	30.156	2	7.0	0.074	4.0021
					11.449	4.8766						7.674	20.7985
					18.424	29.1442						16.639	62.4194
					25.457	52.7998						25.118	200.7786
					15.682	13.2674	P IV	1	51.354	4	8.6	8.992	11.7414 *
					27.010	36.0417						24.473	63.5124
					34.599	180.6910						40.704	179.7420
Si IV	2	45.130	2	7.0	9.042	6.4839	P V	2	65.007	2	8.0	11.464	6.8835 *
					24.101	27.6851						33.732	32.7777
					37.445	135.8301						55.455	228.3366
Si V	1	166.725	8	4.9	115.608	36.9821							
					142.257	163.0176	SI	5	10.357	8	6.0	0.053	3.9615 *
					118.377	19.1161						1.121	5.0780
					143.084	80.8837						5.812	15.0944
												9.425	362.8588
P I	4	10.474	18	5.0	1.514	13.5211 *						8.936	51.5995
					5.575	22.2130						11.277	268.4002
					9.247	353.2583						9.600	12.0000
					8.076	10.0000						12.551	276.0000
					10.735	150.0000	SI II	4	23.405	18	5.0	1.892	11.4377
P II	1	19.720	12	5.0	0.043	8.0241 **						3.646	5.5126
					1.212	5.8085						13.550	141.0009
					8.545	51.7542						19.376	254.0478
					15.525	252.4002						16.253	33.0518
												21.062	126.9479

S III	1	35.047	12	3.5	0.043	4.0707 **	CI II	5	23,798	8	5.0	0.092	3.9064
		0.123			0.0637							0.581	0.3993
		1.590			5.7245							1.620	5.3570
		13.712			144.6376							13.121	60.3424
		22.050			106.4909							19.787	119.9913
S IV	2	47.292	2	5.0	0.118	4.0011			26,041	20	5.0	16.365	138.1567
		9.545			19.2813							21.988	278.8418
		18.179			27.5990				27,501	12	5.0	18.065	102.3681
		31.441			35.1179							23.594	158.6314
		57.681	18	14.4	30.664	94.7454 *	CI III	4	39,904	18	5.0	2.358	12.6089
					56.150	283.2486						5.708	5.9527
S V	1	72.474	4	5.0	10.704	10.5474 *						19.084	110.5635
					27.075	28.7137						30.683	262.8715
					50.599	65.7378			41,610	10	5.0	24.880	69.2035
		85.701	12	4.0	43.034	24.0000						33.229	100.7960
							CI IV	1	53,450	12	5.0	0.102	7.3458 **
												1.391	5.6638
CI I	4	13.014	18	6.0	0.110	2.0007						14.709	44.1256
					9.919	62.5048						36.968	202.7846
					12.280	669.4942						0.185	4.0037
		14.458	10	5.0	11.017	29.0259	CI V	2	67,801	2	5.2	11.783	21.8663
					13.532	130.9740						25.653	40.5363
												44.698	57.5919

Ar I	1	15.755	8	6.0	12.638	43.6623	K I	2	4.339	2	7.0	1.871	12.9782 *
					14.958	324.3375						3.713	148.6673
		15.933	4	6.0	12.833	20.8298						18.172	6.3493
					15.139	163.1701	K II	1	31.810	8	5.0	21.185	66.3444
Ar II	4	27.619	18	5.1	0.178	2.0026			32.079	4	5.0	27.705	101.6553
					17.522	137.4515						2.059	4.0001
		29.355	10	5.0	23.584	258.5445						23.709	13.4465
					20.464	62.8129						28.542	46.5534
		40.899	8	5.0	25.150	149.1867	K III	4	45.738	18	6.0	0.273	2.0171 *
Ar III	5				0.151	4.0495 *						26.709	116.4767
					1.561	14.4466						39.640	713.4965
		42.407	20	5.0	17.399	46.8234			47.768	10	6.0	31.220	63.5907
					30.871	124.6651						41.865	396.4079
		59.793	18	5.0	24.684	151.9828			50.515	2	5.0	29.955	2.0000
Ar IV	4				33.978	268.0157						37.557	10.0000
					27.091	101.1302						42.862	30.0000
		59.793	18	5.0	36.481	150.8691	K IV	5	60.897	8	6.0	0.228	4.0702 *
					2.810	13.3718 *						2.274	5.7791
					8.877	8.6528						21.703	52.6795
		75.002	12	4.0	24.351	60.4614						50.191	327.4539
Ar V	1				44.489	285.5072			63.890	20	5.0	32.145	62.8604 *
					0.144	6.7655 **						49.262	357.1331
					1.160	4.7684						34.155	55.9337
					10.210	12.8631						51.718	196.0646
					27.178	54.5260							

K V	4	82.799	18	3.6	3.043	10.9275	Sc I	4	6.538	30	4.9	0.021	6.0014	
					5.479	5.5398						2.056	83.1958	
					20.547	43.2761						3.551	67.3666	
					30.680	76.2560						5.465	329.4354	
			85.150	10	4.0	36.275	42.0000			7.147	42	4.9	1.535	44.0793
Ca I					47.345	18.0000						3.797	169.9969	
												6.203	533.9195	
	1	6.111	4	5.9	2.050	18.2366			8.042	18	5.0	2.389	34.1642	
					3.349	27.5012							4.858	124.8475
					5.321	149.2617							7.141	228.9879
Ca II		7.808	20	6.0	4.873	94.5242 *	Sc II	3	12.891	20	5.0	0.011	11.9979 *	
					7.017	705.4711						0.430	16.9260	
	2	11.868	2	7.0	1.769	11.8706 *						1.156	28.4778	
					5.109	14.0710							3.711	82.0418
					9.524	106.0547							8.863	234.5360
Ca III	1	51.207	8	5.0	27.271	57.2414	Sc III	4	24.752	2	6.0	0.025	6.0042	
					41.561	110.7567						3.499	2.7101	
Ca IV		51.596	4	4.9	29.172	29.8121						10.463	13.9801	
					42.140	54.1874						18.606	65.3039	
	4	67.181	18	5.0	0.394	2.0184 *	Sc IV	1	74.090	12	4.6	41.779	12.0000	
Sc V					28.930	97.5784						57.217	12.0000	
					52.618	282.3939						0.539	2.0051	
		69.536	10	4.3	38.593	209.1871			91.847	18	3.8	24.442	2.9621	
				49.646	252.8129							51.079	29.0306	

Ti I	5	6.818	56	5.0	0.021	7.0887	Ti III	5	28.137	20	5.0	0.041	16.1691
					0.048	8.9186						1.375	22.3550
					1.029	17.5633						4.768	24.1646
					2.183	206.6832						10.985	83.5128
					4.109	438.5735						19.769	222.7963
					5.785	654.1721	Ti IV	4	43.236	2	6.0	0.048	6.0020
		6.953	56	4.7	0.846	38.0462						11.577	4.6177
					1.792	69.6271						24.531	25.2636
					3.836	364.2845						36.489	52.1162
					5.787	832.0408	Ti V	1	100.083	12	4.8	54.436	12.0000
		7.411	28	5.0	2.561	98.8562						75.373	8.0000
					4.869	57.9934							
					6.340	442.1498							
Ti II	4	13.635	42	5.0	0.023	19.7843 *							
					0.124	32.0637	VI	4	6.738	50	5.0	0.026	15.2627 **
					0.774	37.0895						0.145	23.9869
					1.810	110.6682						0.718	51.3053
					4.980	288.4946						2.586	570.3384
					9.585	521.8837						5.458	1650.9417
		14.685	10	5.0	1.082	10.0000			7.101	70	5.0	2.171	162.2829
					4.928	34.0000						4.153	298.8303
					11.279	120.0000						6.097	908.8852

V II	1	14.205	56	5.0	0.009	23.6736 **	Cr I	7	6.763	12	5.0	0.993	30.1842
					0.366	37.1624						3.070	79.2847
					1.504	86.8011						5.673	149.5293
					5.294	300.7440			8.285	60	5.0	3.339	215.3696
					10.126	864.5880						4.801	119.1974
		15.670	72	5.0	1.796	57.8961						7.198	741.4321
					2.353	79.4605			9.221	40	5.0	2.829	184.9946 *
					6.068	214.9007						4.990	1352.5038
					12.269	864.7425						7.643	784.4637
		16.277	64	5.0	2.560	61.8508	Cr II	6	16.493	50	5.0	1.645	46.6191 *
					3.674	64.0845						3.727	160.1361
					6.593	192.8298						7.181	488.0449
V III	4	29.748	42	5.0	12.880	718.2349						12.299	657.1928
					0.045	23.8116 **			18.662	18	5.0	2.902	47.1742
					1.684	68.2495						4.273	267.0275
					8.162	135.0613						8.569	441.1324
					21.262	536.7632						14.912	150.6650
V IV	5	48.464	20	5.0	0.065	15.9543 *	Cr III	1	30.950	56	5.0	0.047	24.3768 **
					1.746	22.5542						2.556	122.8359
					15.158	71.4921						9.441	285.5092
					33.141	248.9544						21.198	794.1654
V V	4	65.198	2	11.2	0.077	6.0006	Cr IV	4	49.580	42	5.0	0.078	24.2296 **
					21.229	5.8785						2.242	75.0258
					44.134	50.5077						15.638	172.9452
					60.203	97.6129						32.725	543.6511

Cr V	5	73.093	20	5.2	0.103	15.9819 *	Mn III	6	33.690	50	5.0	3.531	70.1925
					2.146	17.6800						6.967	72.3372
					26.153	95.2003						15.222	213.9512
					49.381	225.0947						25.069	539.5165
Cr VI	4	90.595	2	4.9	0.119	6.0008	Mn IV	1	53.001	56	5.0	0.071	24.2373 **
					32.711	6.8734						2.896	93.5415
					58.117	15.1253						20.725	456.6167
												37.383	506.5484
							Mn V	4	76.006	42	5.0	0.126	24.7687 **
Mn I	6	7.432	14	6.0	2.527	53.9107						2.660	66.9896
					4.204	81.3931						28.528	264.1853
					6.602	546.6945						53.413	484.0161
					4.155	144.1893 *	Mn VI	5	109.002	20	3.7	0.117	12.3142 *
					7.321	407.8029						0.350	4.3050
					2.285	45.6177 *						2.539	22.2424
					5.631	298.4423						40.301	60.1198
					8.448	2410.9335							
Mn II	7	15.636	12	7.0	1.496	22.6382							
					3.839	93.8419							
					7.751	183.9367							
					13.484	907.5765							
					3.681	137.0409							
					6.054	168.6783							
					9.934	329.0287							
					14.936	773.2513							

Co II	9	17.052	56	5.0	0.135	11.2593 *	Ni II	6	18.147	42	9.0	0.191	4.1421
					0.517	38.2239						1.235	37.3781
					1.606	22.9964						3.358	25.9712
					6.772	261.3486						8.429	333.3397
					12.622	637.1485						17.096	311.1633
		18.958	24	5.0	2.512	23.0233		18	20.233	18	5.0	3.472	33.1031
					4.348	41.6599						9.065	184.1854
					8.253	264.6460						16.556	136.7072
Co III	10	33.491	50	5.0	15.377	181.6699	Ni III	9	35.161	56	5.0	0.194	11.1915 *
					0.132	16.0356 *						1.305	5.4174
					0.863	7.8633						5.813	53.6793
					3.086	70.3158						14.172	460.6781
					11.789	423.3512						26.169	380.0056
Co IV	20	53.001	12	3.0	23.263	742.3553	Ni IV	28	56.025	50	3.0		
Ni I	9	7.633	20	5.4	0.026	7.1268						4.212	11.0549 *
					0.137	12.4486	Cu I	2	7.724	2	8.0	7.227	238.9423
					0.315	11.9953						1.493	10.3077 *
					1.778	10.0546			10.532	30	6.0	5.859	126.2990
					4.029	114.1658						9.709	1073.3876
					6.621	391.2064						7.081	30.0000
		8.793	56	5.0	2.249	26.3908		10	10.980	10	5.0	9.362	50.0000
					4.042	213.8081						10.130	60.0000
					7.621	938.7927							

Cu II	1	20.286	20	7.0	2.865	19.2984	Zn II	2	17.959	2	8.0	6.113	6.1902							
														8.260	50.5974	12.964	38.9317			
														14.431	240.2021	16.444	204.8780			
Cu III	6	36.826	42	5.0	0.337	4.0155	Zn III	1	39.701	20	5.0	10.291	24.6904 *							
														8.520	70.3264	20.689	106.7491			
														16.925	313.1213	32.077	439.5586			
Cu IV	21	61.975	56	2.9	28.342	536.5331	Zn IV	10	65.074	42	2.8	0.102	4.0002							
														8.840	484.0042	1.854	2.0966			
														10.247	18.5863	4.531	34.9646			
Zn I	1	17.503	8	5.0	16.620	123.4134	Ga I	2	5.997	2	10.0	5.793	496.9385							
														11.175	3.0000	11.982	18	5.0	5.126	16.4913 *
														16.321	189.0000	11.014	229.5019			
Zn II	1	9.391	4	8.0	4.546	15.9880 *	Ga II	1	20.509	4	7.0	6.102	10.1998							
														8.840	484.0042	13.989	58.6050			
														10.247	18.5863	18.438	244.1949			
Zn III	1	17.166	12	5.0	11.175	3.0000	Ga III	2	30.702	2	6.0	8.239	6.0724							
														16.321	189.0000	18.899	23.0304			
														16.321	189.0000	25.142	50.8971			

Ga IV	1	64.157	20	5.0	18.801	19.9887	Sr II	2	11.027	2	9.0	0.675	6.2762
					28.656	59.9442						2.044	13.7844
					50.560	240.0671						6.735	36.0151
												9.792	313.9210
Kr I	1	13.996	8	10.0	11.409	81.1676	Sr III	1	43.001	12	2.7		
					13.690	2054.8318	Sr IV	4	57.017	18	6.0	1.232	2.0349 *
					12.064	39.4009						26.142	129.4944
					14.369	968.5989						47.993	408.4637
Kr II	4	24.565	18	8.0	0.675	2.0215 *							
					15.518	243.4888	Y I	4	6.377	2	6.0	0.066	6.0310 *
					22.940	2038.4851						1.620	102.0874
					18.636	139.2137						3.139	230.6864
					24.293	590.7840						5.015	349.1883
					20.502	19.7365	Y II	1	12.233	20	6.0	0.133	13.3733 **
					26.753	126.2633						0.447	10.2739
Kr III	5	36.940	8	5.5	0.617	4.5228 *						1.509	43.5888
					2.202	5.4786						4.379	88.0471
					19.856	296.9358						9.715	397.7009
					29.183	569.0524						2.999	9.2791
Sr I	1	5.693	4	9.0	2.015	24.3150						7.394	25.5740
					3.777	47.4338	Y III	4	20.514	2	4.9	0.090	6.0039
					5.348	668.2505						0.936	2.0213
					4.429	89.4004						5.454	6.6309
					6.964	425.5987						11.911	25.3433

Y IV	1	76.105	12	2.7			Zr IV	4	34.330	2	5.7	0.155	6.0011
Y V	4	76.849	18	4.0	1.500	2.0055						4.962	2.3714
					25.920	35.2320						11.822	8.3077
					36.347	96.7617						20.015	25.3194
Zr I	5	6.835	56	6.0	0.084	11.6004 *	Nb I	2	6.881	50	6.4	0.030	10.0963 **
					0.401	24.5594						0.150	37.7286
					1.170	111.5330						1.006	136.3014
					2.864	570.8658						2.643	781.4263
					5.852	1185.4027						4.916	1696.3149
Zr II	4	14.028	42	6.0	0.068	17.7876 **	Nb II	1	14.316	56	3.8	0.032	7.8059 **
					0.448	53.6729						0.171	27.8039
					3.200	148.5349						0.858	107.7304
					11.169	875.6878						2.305	299.2145
					15.398	26.8482 *	Nb III	4	25.038	42	3.7	0.069	7.7070 *
					1.728	101.3551						0.206	16.1724
					5.735	155.2734						3.198	27.1630
					11.943	316.4934						8.348	84.9473
Zr III	5	22.980	20	6.0	0.102	11.7757 *	Nb IV	5	38.251	20	6.0	0.168	13.3087 *
					0.401	9.5110						0.537	19.1380
					1.655	34.7245						2.454	12.0353
					7.737	100.9139						11.863	94.7100
					17.096	477.0311						28.177	412.7579

Nb V	4	49.580	2	6.0	0.232	6.0010
					10.404	3.3714
					22.652	20.3125
					34.952	40.3147
Nb VI	1	102.848	12	5.0	41.390	15.4391 *
					69.575	28.5593

Ba I	1	5.210	4	7.0	1.236	24.6641 *
					2.641	18.8480
					4.639	208.4858
		5.874	20	7.0	2.939	69.3690
					4.529	205.0097
					5.461	443.6212
Ba II	2	10.001	2	17.0	0.654	9.8234
					2.523	6.0628
					6.575	83.3893
					9.413	270.7233
Ba III	1	37.001	12	2.8		
Ba IV	4	61.975	12	3.4	2.210	2.0004
					19.594	66.4811
					24.341	45.5185