Таблица S1. Заселенности и энергии Е0\* (эВ) МО кластера PaO812- (D4h) для rPa-O = 0.2385 нм

(РДВ) и сечения фотоэффекта i\*\*.

\* Величины энергий уменьшены по абсолютной величине (сдвинуты вниз) на 9.93 эВ;

\*\* сечения фотоэффекта i (килобарн на один электрон), полученные в работе [S1];

остальных орбиталей равно 2.

\*\*\*

верхняя заполненная молекулярная орбиталь (1 электрон), число заполнения для всех

-МО

- E0,

эВ

Состав МО

Pa

O

6s

6p1/2

6p3/2

6d3/2

6d5/2

7s

5f5/2

5f7/2

7p1/2

7p3/2

2s

2p1/2

2p3/2

i \*\* 1.10

0.87

1.23

0.64

0.54

0.12

3.58

3.02

0.06

0.08

0.96

0.07

0.07

ВМО

+

227

+

256

+

217

-

286

+

246

-

276

-

247

-

237

+

236

+

207

-

227

-

266

-

256

-

217

-

246

-5.73

-5.40

-5.40

-3.55

-3.22

-2.72

-2.69

-1.66

-1.56

-1.56

-0.71

-0.71

-0.61

-0.17

-0.01

0.43

0.43

0.39

0.40

0.83

0.39

0.39

0.46

0.46

0.88

0.01

0.01

0.15

0.76

0.93

0.06

0.03

0.02

0.73

0.93

0.93

0.89

0.18

0.87

0.05

0.92

0.92

0.02

0.01

0.01

0.05

0.04

0.05

0.04

0.04

0.03

0.03

0.02

0.09

0.02

0.03

0.01

0.04

0.05

0.04

0.04

0.01

0.01

0.06

0.02

0.03

0.12

0.10

0.02

0.04

0.01

0.02

0.05

0.11

0.11

0.04

0.05

0.04

0.06

- \*\*\*

207

-

236

-

197

-

226

-

187

+

226

+

197

+

216

+

187

+

177

+

206

-

216

-

177

-

167

-

206

-

196

+

196

-

157

-

186

-

147

+

167

+

186

+

157

+

147

+

176

0.00

6.01

6.02

6.14

6.14

6.33

6.33

6.35

6.59

6.62

6.62

6.64

6.87

7.10

7.10

7.39

7.91

7.96

7.96

7.97

8.09

8.11

8.12

8.70

8.72

0.01

0.01

0.07

0.07

0.01

0.01

0.01

0.07

0.07

0.07

0.07

0.11

0.05

0.05

0.08

0.08

0.05

0.93

0.03

0.03

0.05

0.01

0.01

0.02

0.02

0.03

0.01

0.01

0.05

0.05

0.01

0.01

0.03

0.03

0.02

0.04

0.01

0.03

0.03

0.02

0.01

0.01

0.01

0.01

0.13

0.26

0.35

0.36

0.15

0.14

0.66

0.05

0.50

0.48

0.79

0.30

0.17

0.08

0.35

0.32

0.19

0.17

0.61

0.56

0.03

0.30

0.28

0.28

0.06

0.76

0.63

0.65

0.64

0.85

0.86

0.34

0.95

0.50

0.52

0.15

0.60

0.77

0.86

0.58

0.62

0.76

0.78

0.34

0.31

0.84

0.57

0.57

0.57

ВВМО

-

176

-

137

-

127

-

166

+

137

+

166

+

127

+

156

-

156

-

117

-

146

+

146

17.34

17.37

21.12

21.14

21.51

21.51

21.51

21.95

22.49

22.49

26.72

43.23

0.01

0.99

0.08

0.90

0.72

0.72

0.20

0.20

0.03

0.03

0.06

0.02

0.02

0.07

0.01

0.01

0.04

0.01

0.01

0.02

0.02

0.20

0.20

0.98

0.88

0.94

0.95

0.95

0.92

0.77

0.76

0.08

0.01

0.02

0.03

0.01

0.01

0.05

0.04

0.01

0.01

0.01

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

S1. *Yarzhemsky V.G., Teterin A.Yu., Teterin Yu.A., Trzhaskovskaya M.B.* // Nuclear Technology &

Radiation Protection. 2012. V. 27*. P.* 103. DOI: 10.2298/NTRP1202103Y