



HAL
open science

Etude des propriétés électroniques de dimères d'alcalins. Application à la formation de molécules froides.

Sihem Azizi

► **To cite this version:**

Sihem Azizi. Etude des propriétés électroniques de dimères d'alcalins. Application à la formation de molécules froides.. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2006. Français. NNT: . tel-00012184

HAL Id: tel-00012184

<https://theses.hal.science/tel-00012184>

Submitted on 27 Apr 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Orsay
N° d'ordre :

UNIVERSITE PARIS XI
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THESE

présentée pour obtenir

le **TITRE** de **DOCTEUR EN SCIENCES**

par

Sihem AZIZI

Sujet

ETUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES DE DIMERES
D'ALCALINS. APPLICATION A LA FORMATION DE
MOLECULES FROIDES.

Soutenue le 17 janvier 2006 à 14h30 devant la commission d'examen :

Mr.	C. M. DION	<i>Rapporteur</i>
Mr.	O. DULIEU	
Mr.	A. KRALLAFA	
Mme.	A. ROSS	<i>Rapporteur</i>
Mme.	A. WEINER-SUZOR	

*à la mémoire de Mimma,
à ma mère,
à A. Ménia,
à Moh Télémy,
à Moulay-Ahmed, Anas et Issam*

Remerciements

Cette thèse s'est déroulée au Laboratoire Aimé Cotton, je tiens à remercier les deux directeurs qui s'y sont succédé durant cette période, Christian Collieux et Pierre Pillet pour m'y avoir accueillie.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Olivier, mon directeur de thèse. Il a su diriger avec beaucoup de compétence et de patience les travaux de cette thèse. J'ai beaucoup apprécié la richesse de ses idées scientifiques. Merci Olivier.

Que mes deux rapporteurs, Claude M. Dion et Amanda Ross, trouvent ici toute ma reconnaissance d'avoir accepté d'examiner ma thèse malgré les courts délais que je leur ai imposés.

Je remercie également Annick Weiner et Abdelghani Krallafa d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

J'ai appris beaucoup auprès de Claude Dion, notamment sur le plan numérique. Il m'a beaucoup guidé dans mes débuts et a toujours montré une grande disponibilité. Je l'en remercie.

Je dois beaucoup à Eliane Luc avec qui il a été particulièrement agréable de travailler. Sa gentillesse et sa perpétuelle disponibilité m'ont bien souvent permis d'avancer lorsque la situation semblait bloquée. Ses encouragements et conseils durant la délicate période de rédaction ont grandement contribué au bon déroulement de ce travail et m'ont permis de me remotiver dans les moments difficiles.

Je voudrais également adresser mes plus chaleureux remerciements à Mireille Aymar pour l'intérêt qu'elle a toujours eu pour mon travail et au soin particulier qu'elle apportait à la relecture de ma thèse. Je la remercie également pour l'aide qu'elle m'a apporté à la fin.

Aucun mot ne peut traduire les sentiments que j'ai pour Nadia. Son amitié est précieuse, son amitié est un trésor. Rabbi yekhhlik oua yaatik elkheir.

Un grand merci à Françoise Masnou-Seeuws qui m'a chaleureusement accueillie dans son groupe de recherches. Je la remercie pour tous les conseils et commentaires utiles qu'elle toujours su me donner avec bienveillance, et aussi pour son humanisme.

Un grand merci à Paul pour sa bonne humeur, sa jovialité, sa gentillesse et son amitié.

Merci à Christiane pour sa gentillesse, sa disponibilité et son amitié.

Merci au laboratoire Aimé Cotton pour m'avoir procuré le privilège de rencontrer des amis : Mihaela, Nadia, Christiane (Karen), Mourad, Sakina, Philippe, Pascal, Haikel, Rachidi, Michael, et la liste est longue ...

Merci à Sylvie pour sa chaleur et sa bonne humeur.

Enfin, je pense à tous mes amis des deux rives de la méditerranée et à ma famille pour leur soutien et leur dévouement au cours de ces années de travail.

La liste est encore longue, cette page est sans fin.

Merci, merci ...

Table des matières

1	Introduction	9
2	Calcul des courbes de potentiel des ions moléculaires alcalins	17
2.1	Récapitulatif des méthodes utilisées pour les calculs moléculaires des ions	18
2.1.1	Méthode de potentiel modèle à un électron	20
2.1.2	Méthode des pseudopotentiels	22
2.1.3	Les bases	25
2.1.4	Polarisation des cœurs ioniques	26
2.2	Interaction cœur-cœur	27
2.2.1	Effet de volume	28
2.2.2	Terme correctif : dispersion	30
2.3	Description des atomes alcalins	31
2.3.1	Li	32
2.3.2	Na	33
2.3.3	K	34
2.3.4	Rb	36
2.3.5	Cs	37
2.4	Effet des différents termes correctifs sur les courbes de potentiel . . .	38
2.5	Etat moléculaire fondamental des ions moléculaires alcalins	44
2.5.1	Courbes de potentiel de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ des ions moléculaires hétéronucléaires $(AB)^+$	44
2.5.2	Constantes spectroscopiques d'une courbe de potentiel électronique	45
2.5.3	Constantes spectroscopiques de l'état $(1)^2\Sigma_g^+$ des ions moléculaires A_2^+	47
2.5.4	Constantes spectroscopiques de l'état $(1)^2\Sigma^+$ des ions moléculaires $(AB)^+$	50
2.5.5	Article : Model-potential calculations for ground and excited Σ states of Rb_2^+ , Cs_2^+ and $RbCs^+$ ions	53
2.6	Etats moléculaires excités	54
2.6.1	Ions homonucléaires	54
2.6.2	Ions hétéronucléaires	58
2.7	Conclusion	64

3	Photoassociation et formation de molécules froides hétéronucléaires	67
3.1	Les atomes froids	68
3.1.1	Principe de la photoassociation	68
3.1.2	Quelques expériences de photoassociation	72
3.1.3	Difficulté de l'extension aux molécules du refroidissement par laser	77
3.2	Formation de molécules froides	78
3.2.1	Formation de molécules froides par photoassociation	78
3.2.2	Formation de molécules froides par transition Raman	87
3.2.3	Formation de molécules froides par résonance de Feshbach	88
3.3	Modèle simple pour le calcul des taux de photoassociation et formation de molécules froides	88
3.3.1	Théorie de la photoassociation	89
3.3.2	Expression du taux de photoassociation	90
3.3.3	Expression du taux de formation de molécules froides	92
3.4	Méthodes numériques	94
3.4.1	Méthode générale de collocation	96
3.4.2	Méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier	97
3.4.3	Introduction d'une grille à pas variable ("Mapped Fourier Grid Hamiltonian Method" MFGH)	102
3.4.4	Mise en œuvre	109
3.5	Potentiels	109
3.6	Résultats et discussion	117
3.6.1	Définition des taux mis à l'échelle des taux calculés du césium	117
3.6.2	Effet du couplage spin-orbite sur les taux de photoassociation et de formation de molécules de $RbCs$	120
3.6.3	Taux de photoassociation des dimères alcalins hétéronucléaires	126
3.6.4	Calculs de taux de photoassociation semi-classiques menés par Wang et al. [1]	131
3.6.5	Taux de formation de molécules froides hétéronucléaires	135
3.6.6	Comparaison avec l'expérience	141
3.6.7	Distribution vibrationnelle des molécules ultrafroides	143
3.6.8	Article : Prospects for the formation of ultracold ground state polar molecules from mixed alkali atom pairs [2]	145
3.6.9	Conclusion	146
4	Formation de molécules froides de césium	147
4.1	Introduction	147
4.2	Signal moléculaire sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$	151
4.3	Courbes de potentiel de la molécule Cs_2	154
4.4	Constantes rotationnelles	157
4.5	Taux de photoassociation et de formation de molécules froides	161
4.6	Distributions vibrationnelles	164

4.7 Conclusion	165
5 Conclusion	167
A Courbes de potentiel des ions alcalins homonucléaires	171
B Courbes de potentiel des ions alcalins hétéronucléaires	225

Chapitre 1

Introduction

Le mot "contrôle" constitue un concept central des recherches actuelles sur les systèmes quantiques. En effet, le contrôle des degrés de liberté externes ou internes d'un système atomique ou moléculaire ouvre la voie à de nombreux développements comme la manipulation d'atome ou de molécule unique, la préparation d'états quantiques dits "qubits" pour la mise au point de dispositifs d'information quantique, ou encore le suivi et la maîtrise en temps réel de réactions chimiques élémentaires.

De ce point de vue, le refroidissement par laser d'ions [3] ou d'atomes [4] représente une avancée spectaculaire, puisque le mouvement externe de ces systèmes peut être ralenti jusqu'à des vitesses très inférieures à 1 ms^{-1} , correspondant à des températures très inférieures au millikelvin (mK). Les mises en évidence de la condensation de Bose-Einstein sur plusieurs échantillons de bosons froids [5], ou de la dégénérescence quantique d'ensembles de fermions froids [6], constituent probablement les avancées les plus spectaculaires de ces dernières années. Rappelons en particulier que le prix Nobel de physique a été attribué en 2001 à Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle et Carl E. Wieman pour la réalisation de la condensation de Bose-Einstein [7, 8], succédant au prix Nobel 1997, décerné à Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji et William D. Phillips [9] pour le développement de techniques de refroidissement et de piégeage d'atomes par la lumière dans les gaz dilués d'atomes alcalins.

Mais la structure interne complexe des molécules exclut une simple extension du refroidissement laser [10, 11, 12] aux molécules. Comme le suggère la figure 1.1, le refroidissement laser repose sur l'existence d'une transition cyclante dans le système étudié, impliquant un petit nombre de niveaux. C'est le cas notamment pour les atomes alcalins, au contraire des molécules qui possèdent de nombreux niveaux de vibration-rotation. Une exception notable est fournie par la molécule CaH, dont la structure de niveaux, et surtout les probabilités de transition sont telles que le refroidissement laser peut effectivement être envisagé [13].

Une solution à cette situation a été mise en évidence pour la première fois au Laboratoire Aimé Cotton en 1997 [14], reposant sur le phénomène de photoassociation d'atomes froids schématisé en figure 1.2 dans le cas du césium. Une paire d'atomes froids en collision absorbe un photon de fréquence suffisamment décalée vers le rouge

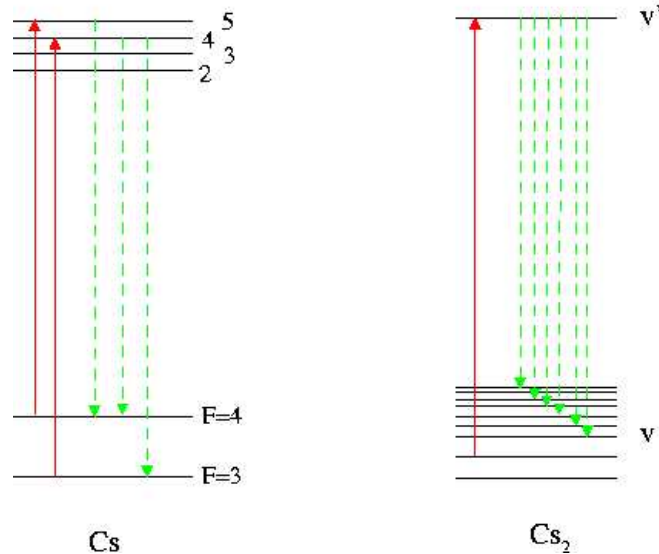


FIG. 1.1 – Schéma simplifié des niveaux de l’atome et de la molécule de césium. Dans le cas atomique, la transition entre les niveaux hyperfins $6s(F = 4) \rightarrow 6p(F = 5)$ assure le refroidissement laser, tandis que la population rejoignant par émission spontanée l’autre niveau hyperfin $6s(F = 3)$ est transférée vers le niveau $6s(F = 4)$ par un laser dit ”repompeur” calé sur la transition $6s(F = 3) \rightarrow 6p(F = 4)$. Au contraire dans le cas moléculaire, la population du niveau excité peut se répartir par émission spontanée dans le grand nombre de niveaux de vibration-rotation (notés v ici) de l’état initial de la molécule, rendant l’action d’un laser ”repompeur” très inefficace.

d’une transition atomique (la transition $6s \rightarrow 6p_{3/2}$ dans le cas présent), pour former une molécule dans un état électronique excité, dans lequel s’établit un mouvement vibrationnel le plus souvent de grande élévation. Le mouvement translationnel de cette molécule excitée est le même que celui de la paire d’atomes initiale : on a donc ainsi formé une molécule froide, mais de durée de vie limitée par l’émission spontanée en général rapide (quelques dizaines de nanosecondes pour les alcalins). Dans certains cas, dont justement celui du césium, l’émission spontanée peut conduire le système vers un niveau lié de la molécule dans son état fondamental, produisant cette fois des molécules translationnellement froides stables, à la température de l’échantillon atomique initial, soit de l’ordre de 100 microkelvins.

Le schéma de photoassociation a été proposé pour la première fois en 1987 par Thorsheim et al. [15] et discuté ensuite dans plusieurs articles [16, 17, 18]. La principale caractéristique du processus de photoassociation entre atomes froids est son caractère résonnant : bien qu’il s’agisse d’une transition libre-lié, la distribution d’énergie cinétique initiale est si faible ($< 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$) que l’état initial peut être assimilé à un état quasi-discret. Une nouvelle méthode de spectroscopie moléculaire à très haute résolution, dite de photoassociation, est ainsi née [19], donnant notamment accès à l’étude des niveaux d’énergie de ces molécules de grande élévation. Une impor-

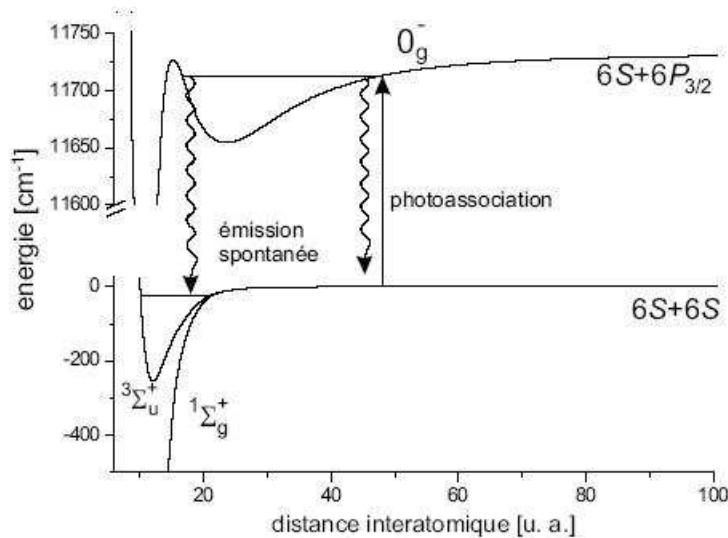


FIG. 1.2 – Principe de la formation de molécules froides *via* la photoassociation d’atomes froids de césium. Après la photoassociation, la désexcitation spontanée peut dissocier la molécule (flèche ondulée de droite) ou mener à un niveau lié d’un état électronique stable (flèche ondulée de gauche).

tante activité expérimentale et théorique s’est alors développée dans ce domaine. Les premières molécules ultra-froides stables formées furent les dimères alcalins homonucléaires [14, 20, 21, 22, 23, 24, 25]. Plusieurs mécanismes ont été identifiés pour l’étape de stabilisation, associés aux propriétés spécifiques des courbes de potentiel des états moléculaires électroniques excités. Ces recherches ont été récemment étendues aux dimères alcalins hétéronucléaires dont plusieurs espèces ont été produites par photoassociation en 2004 : KRb [26, 27], RbCs [28], NaCs [29]. Nous reviendrons un peu plus en détail sur le processus de photoassociation plus loin dans ce mémoire.

La création de gaz d’atomes ultra-froids dégénérés de bosons et de fermions a aussi conduit à des résultats spectaculaires, notamment à la formation de condensats de Bose-Einstein moléculaires [30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42]. La technique employée ne fait pas intervenir d’état moléculaire excité par un photon, mais repose sur l’existence de résonances de Feshbach induite par un champ magnétique externe dans l’ensemble des états hyperfins constituant l’état fondamental moléculaire (figure 1.3). Les molécules formées par photoassociation possèdent des propriétés particulières très éloignées de celles de la liaison chimique habituelle, et leur comportement dans le condensat implique des concepts issus de la physique de la matière condensée (paires de Cooper, supraconductivité). La transition ”BEC-BCS” (Bardeen, Cooper et Schrieffer) entre un condensat et un ensemble de paires de Cooper est associée à une nouvelle forme de superfluidité [43]. Ce résultat a été présenté comme la mise en évidence d’un nouvel état de la matière. Il pourra permettre de

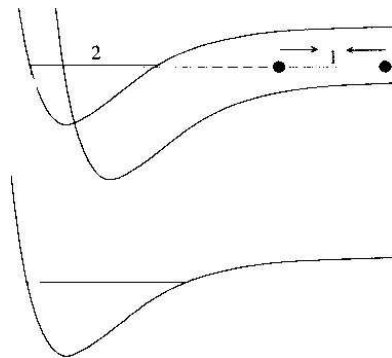


FIG. 1.3 – Schéma général de la formation de molécules par résonance de Feshbach. Deux atomes en collision dans un état excité (1) peuplent une résonance (2) et se désexcitent pour former une molécule stable dans un état fondamental.

comprendre comment on forme des supraconducteurs à haute température.

Parallèlement, de nombreux travaux se sont focalisés sur la mise au point de méthodes directes de ralentissement ou refroidissement de molécules, dans deux directions principales : (i) la technique du décélérateur Stark [44, 45, 46, 47, 48, 49, 50], repose sur l'effet Stark en champ électrostatique fort pour ralentir des molécules polaires (CO, OH, NH, NH₃, ND₃) c'est-à-dire possédant un moment dipolaire électrique permanent ; (ii) le refroidissement par gaz tampon [51, 52, 53, 54, 55] consiste à refroidir des molécules (par exemple CaH) par collision avec un gaz d'hélium dans une enceinte refroidie à la température de l'hélium liquide. Plus récemment encore, de nouvelles idées ont vu le jour comme par exemple l'extraction des molécules lentes présentes dans un jet moléculaire thermique par un guide de champ électrique [56, 57], le ralentissement de molécules de Rydberg par un gradient de champ électrique [58], la création de molécules au repos dans le référentiel du laboratoire, sortant d'un four en rotation animé d'une vitesse exactement opposée à la vitesse des molécules d'un jet [59], ou résultant d'une collision entre jets moléculaires à un angle judicieusement choisi [60]. Le principal avantage de ces méthodes par rapport à l'approche par photoassociation, limitée pendant longtemps aux dimères homonucléaires d'alcalins, est qu'elles élargissent le spectre des espèces moléculaires pouvant être refroidies, notamment vers les espèces hétéronucléaires polaires, qui peuvent être ensuite manipulées par des configurations de champ électrique pour les piéger. Cependant ces méthodes ont jusqu'à présent produit des échantillons moléculaires de température supérieure à quelques millikelvin.

Compte tenu de ce contexte, lorsque ce travail de thèse a débuté, il s'agissait d'explorer, d'un point de vue théorique, d'une part la possibilité de former par photoassociation des molécules froides autres que des dimères alcalins homonucléaires, et d'autre part de rechercher de nouveaux mécanismes de formation de molécules froides à partir des expériences réalisées dans le groupe de P. Pillet au laboratoire.

Cette thèse s'est déroulée sous la direction d'O. Dulieu au sein de la composante théorique du groupe *Atomes et Molécules froids* du laboratoire *Aimé Cotton*. Elle a conduit à la publication de deux articles dans des revues à comité de lecture, insérés dans ce mémoire.

Mon travail s'est notamment concentré sur la prédiction de l'efficacité de la formation de dimères *mixtes* composés de deux atomes alcalins différents, qui, comme nous l'avons vu plus haut, ont depuis été observés en 2004. Outre le fait d'élargir la classe de molécules ultra-froides pouvant être formées par photoassociation, ces systèmes présentent un moment dipolaire électrique permanent qui les rend très sensibles à - et donc manipulables par- un champ électrique externe. Les dimères mixtes d'alcalins sont un exemple de molécules qu'il est maintenant d'usage de désigner par *molécules dipolaires* dans notre communauté.

En effet, les molécules polaires font l'objet d'un nombre croissant de travaux, certains ayant déjà été mentionnés plus haut : la présence d'un effet Stark linéaire lié au moment dipolaire permanent est à la base de la technique de ralentissement mise au point par le groupe de G. Meijer [44, 45, 46]. Cette technique a permis de piéger des radicaux moléculaires d'intérêt "général" : ils ont, en particulier, mesuré la durée de vie moléculaire de OH [61].

Mais d'autres applications sont actuellement en cours d'étude,

- comme la réalisation d'un dispositif de calcul quantique constitué d'un ensemble de molécules polaires piégées dans un réseau optique [62]. Les molécules polaires semblent être un excellent choix pour les qubits à cause de leur forte interaction, mais aussi parce qu'on peut les aligner. Ces molécules sont placées dans les sites d'un réseau optique à une dimension [63]. Vala et al. dans une proposition théorique [64] ont réalisé l'algorithme de Deutsch-Jozsa dans un ensemble de molécules en phase gazeuse (Li_2 dans leur exemple), soumises à l'action d'une séquence de pulses lasers. Les qubits font intervenir des niveaux rovibrationnels des molécules. L'utilisation de molécules froides [65], ayant un état initial bien défini, devrait permettre un meilleur contrôle des processus mis en jeu dans l'exécution de l'algorithme.
- ou la mesure de l'éventuel moment dipolaire de l'électron par une spectroscopie très fine de molécules lourdes et fortement dipolaires ralenties et piégées [48, 66, 49].

Mais examinons plus largement les raisons de l'intérêt croissant suscité par les recherches sur les molécules froides.

En tout premier lieu, le refroidissement et le piégeage d'atomes a vu sa première application moléculaire avec le développement d'une nouvelle spectroscopie dite de photoassociation [19, 4, 17]. La finesse de la distribution en énergie d'un nuage d'atomes froids donne au processus de photoassociation le caractère d'une transition lié-lié, qui conduit à la création de molécules excitées dans des niveaux de vibration proches de la limite de dissociation, de grande extension spatiale. Il s'agit d'un régime qui n'a que très rarement été exploré par la spectroscopie classique (voir en particulier les travaux réalisés dans le groupe de E. Tiemann à Hanovre [67]). Les interactions entre atomes à grande distance ont ainsi pu être explorées avec une grande précision pour

tous les dimères alcalins homonucléaires de lithium [68], sodium [69], potassium [70], rubidium [71], et césium [14], pour quelques dimères mixtes d'alcalins (${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ [72], KRb [27, 26], RbCs [28, 73]), pour le dimère d'hélium [74], d'alcalino-terreux (Ca_2 [75], Sr_2 [76]), ou encore pour le dimère d'ytterbium [77]. L'existence de puits de potentiel moléculaires apparaissant à des distances interatomiques très grandes, prévue par Stwalley *et al* dès 1978 [78] a ainsi pu être prouvée. C'est ce type de puits qui est responsable de l'apparition de molécules froides stables dans l'expérience pionnière du groupe de P. Pillet sur le césium. Un tel puits apparait aussi de manière spectaculaire dans le cas de He_2 [74, 79], à une distance de l'ordre de $150 a_0$ (a_0 est le rayon de Bohr, $1a_0=0.0529177249(24)\text{nm}$). L'interaction de deux atomes alcalins de même nature, l'un dans l'état fondamental, l'autre dans le premier état excité, est directement reliée à la durée de vie de cet état. La spectroscopie de photoassociation a ainsi permis la détermination de cette durée de vie pour tous les atomes alcalins de Li à Cs [80, 81, 82, 83, 84, 85], avec une précision égale voir supérieure à celle des expériences de physique atomique. Une autre avancée importante concerne la détermination des longueurs de diffusion, paramètre caractérisant la nature des collisions élastiques entre atomes dans leur état fondamental, qui jouent un rôle crucial dans la création de condensats de Bose-Einstein [86, 87].

De nouveaux développements voient actuellement le jour. La possibilité d'utiliser des impulsions lasers façonnées est étudiée dans le cadre de la théorie du contrôle optimal [88], afin d'optimiser la formation de molécules froides dans le niveau le plus profond $v = 0$.

Aussi la possibilité de modifier les interactions entre molécules et molécules et atomes ouvre la voie à de nouvelles applications comme le contrôle des réactions chimiques et la synthèse de molécules complexes ultrafroides comme le cas de la molécule Cs_4 [89]. On peut penser à des réactions à basse température dominées essentiellement par l'effet tunnel et des résonances que l'on contrôlerait soit par des impulsions lasers [90, 91] soit par des champs magnétiques [92]. On peut parler dans ces cas de développement d'une "chimie ultra-froide" où la formation des molécules se ferait atome par atome.

Plan du mémoire

Lorsque l'on aborde une étude sur les molécules froides, la toute première étape consiste à explorer les propriétés des molécules impliquées, notamment leur structure électronique. Comme cela a été mentionné plus haut, nous nous sommes concentrés dans ce travail sur les dimères mixtes d'alcalins. Du fait de leur structure électronique simple avec un électron de valence, bien séparé énergétiquement des électrons du cœur, la structure électronique des dimères d'alcalins a fait l'objet d'un certain nombre d'études théoriques, les plus récents provenant du groupe de M. Aubert-Frécon et A. Allouche à Lyon. Une liste de références représentatives sera donnée plus loin dans ce mémoire. Jusque récemment, ces travaux ne concernaient que les systèmes neutres, tandis que peu d'informations étaient disponibles sur les cations correspondants. Au

démarrage de cette thèse, nous avons donc entrepris une étude systématique de ces ions moléculaires, en nous attachant notamment à évaluer la précision des résultats obtenus en fonction des hypothèses retenues. Ce travail, qui est décrit dans le chapitre 2, implique l'utilisation de la chaîne de programmes CIPSI (basée sur le code HONDO) du groupe de chimie quantique de Toulouse, qui nous a été transmis par P. Millié (SPAM Saclay) et F. Spiegelmann (IRSAMC Toulouse). Nous avons en particulier comparé ces résultats pour les ions lourds Rb_2^+ , Cs_2^+ , et RbCs^+ , à ceux d'une approche utilisée auparavant dans la thèse de S. Magnier [93]. Ce travail fait l'objet d'un article paru dans *J. Phys.B* [94]. Nous avons aussi montré que ces ions possèdent des puits de potentiel peu profonds à des distances internucléaires significativement plus grandes que la distance d'équilibre de l'ion dans son état fondamental. Ces puits peuvent être utilisés lors de la détection par photoionisation de molécules ultrafroides neutres qui sont formées dans des niveaux vibrationnels élevés [176]. Dans ce mécanisme, les molécules formées par photoassociation suivie d'émission spontanée subissent une ionisation résonnante à deux photons via un état relais excité. Ces potentiels seront donc utilisés pour compléter l'étude de la photoassociation des dimères d'alcalins en modélisant l'étape de détection par photoionisation.

En parallèle à ces calculs de structure, nous avons réalisé dans le chapitre 3 une étude de la dynamique de la photoassociation et de la formation de molécules froides. Afin de guider les expériences en cours, nous nous sommes attachés à évaluer l'efficacité de ces processus pour toutes les paires mixtes d'alcalins, en la comparant notamment à celle observée pour le césium dans les expériences du groupe de P. Pillet. Notre principal résultat, publié dans un article à *European Physical Journal D* [2], indique que malgré les différences constatées dans les interactions à longue portée, le taux de formation de molécules froides est du même ordre de grandeur pour les différentes paires mixtes d'atomes alcalins. Ce résultat est encourageant, car il ne restreint pas ce type d'étude aux seuls systèmes KRb et RbCs , comme cela avait été suggéré auparavant [1]. Nos calculs s'appuient sur la méthode de grille de Fourier à pas variable, développée dans notre équipe [95, 96, 97], au travers notamment des thèses de V. Kokoouline [98] et K. Willner [99]. Un code robuste a été mis au point par C. Dion lors de son séjour au laboratoire en 2000-2001. Cette approche s'avère très performante lorsqu'il s'agit de calculer les niveaux de vibrations et les fonctions d'onde de systèmes couplés ou perturbés [95, 96], ou encore aux grandes distances interatomiques requises ici.

Dans le dernier chapitre, nous nous sommes focalisés sur certains résultats expérimentaux du groupe de P. Pillet sur la photo-association du césium, qui restent à ce jour inexplicables. Plusieurs raies dans les spectres de photoassociation, relevées dans la thèse de C. Drag [100], présentent des caractéristiques inattendues (notamment leur structure rotationnelle anormalement grande), que l'on a cherché à interpréter par l'excitation d'états électroniques couplés. Nous avons ainsi évalué les taux de photoassociation et de formation de molécules froides pour tous les états moléculaires reliés à l'asymptote $6s + 6p_{1/2}$ de Cs_2 . Nous n'avons malheureusement pas pu identifier l'origine de ces anomalies, mais cela a permis de prouver qu'elles étaient dues à un processus d'excitation plus compliqué, peut-être à plusieurs photons.

Enfin, dans la conclusion, nous proposons quelques perspectives à la fois théoriques et expérimentales, certaines d'entre elles étant déjà à l'étude dans l'équipe.

Chapitre 2

Calcul des courbes de potentiel des ions moléculaires alcalins

La spectroscopie expérimentale reste le moyen le plus utilisé et de très loin le plus précis pour la détermination de la structure des molécules. Cependant les méthodes expérimentales ne sont pas toujours possibles, et l'expérimentateur peut avoir besoin de données préalables pour éviter d'avoir à faire un grand nombre d'expériences préliminaires. C'est dans le but de donner des prédictions théoriques permettant de guider les travaux expérimentaux de spectroscopie moléculaire, que nous abordons dans ce chapitre, l'étude de la structure électronique des ions moléculaires diatomiques d'alcalins, premier pas vers le calcul de la structure électronique des molécules neutres.

Les systèmes alcalins, du fait de leur structure électronique simple, permettant des calculs précis, ont fait l'objet de nombreux travaux tant sur le plan expérimental que sur le plan théorique. Cependant, il n'existe que très peu de travaux sur les ions moléculaires, même si en principe leur structure en fait la première étape du calcul des structures électroniques des systèmes neutres.

L'objectif principal de ce travail théorique consiste en l'obtention de données moléculaires adaptées à l'interprétation des processus collisionnels. Pour cela, nous avons utilisé le programme CIPSI développée par l'équipe de F. Spiegelmann à Toulouse [101] et utilisée, avec succès, par S. Magnier [93] et par le groupe de M. Aubert-Frécon [102, 103, 104, 105]. Nous avons donc cherché à traiter tous les ions moléculaires alcalins, qu'ils soient homonucléaires ou hétéronucléaires, avec la même méthode de calcul et au même niveau de précision.

Cette étude systématique du niveau fondamental et des premiers états excités a nécessité une étude détaillée des différents termes intervenant dans l'expression de l'énergie électronique.

Dans la première partie de ce chapitre nous passons en revue les différentes méthodes utilisées pour les calculs des potentiels des ions moléculaires.

Ensuite, nous comparons nos résultats à ceux issus de la méthode de potentiel modèle utilisée, auparavant dans notre groupe [106, 107, 93]. Cette partie est rédigée sous la forme d'un article (article I), paru dans le Journal of Physics B [94].

Enfin, dans la dernière partie, nous présentons nos résultats concernant les potentiels

électroniques des premiers états excités des ions homonucléaires et hétéronucléaires.

2.1 Récapitulatif des méthodes utilisées pour les calculs moléculaires des ions

Plusieurs méthodes ont été utilisées par les différents auteurs ayant traité ce sujet. On peut les classer en deux catégories principales : les méthodes ab initio et les méthodes utilisant des potentiels effectifs.

Les atomes alcalins sont constitués d'un cœur polarisable à couches fermées et d'un électron actif faiblement lié appelé électron de valence. Compte-tenu de cette description, les ions moléculaires $(AB)^+$ sont assimilables à des systèmes composés de deux cœurs polarisables à couches fermées, notés A^+ et B^+ [108], et d'un électron de valence dont la probabilité de présence près des centres est faible (figure 2.1).

Les noyaux des deux cœurs ioniques étant beaucoup plus lourds que l'électron de valence, leur mouvement peut être négligé en appliquant l'approximation de Born-Oppenheimer. Dans ces conditions, pour une distance interatomique R donnée, nous sommes amenés à résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien d'un électron soumis à l'attraction de deux noyaux et évoluant dans le potentiel moyen créé par les électrons de cœur (c'est-à-dire appartenant aux couches fermées des deux ions A^+ et B^+) beaucoup plus rapides que lui. Sous l'action des champs électriques produits par l'électron de valence et l'autre ion, chaque cœur ionique A^+ et B^+ peut se polariser. Nous supposons que les deux cœurs ioniques A^+ et B^+ restent dans leur état fondamental.

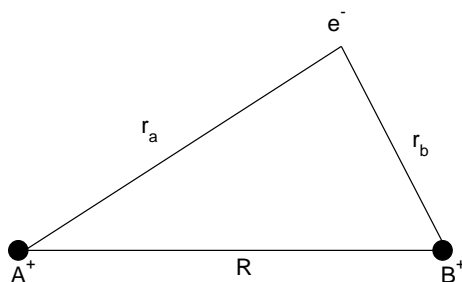


FIG. 2.1 – Représentation du système moléculaire $(AB)^+$

Aussi pour tenir compte de ces effets, nous décrirons toutes les interactions nécessaires au traitement de l'ion moléculaire par des potentiels effectifs.

Dans cette étude, nous sommes conduits à considérer les interactions suivantes :

1. L'interaction de l'électron externe avec chaque cœur ionique, notée respectivement $V(r_a)$ et $V(r_b)$.
2. La polarisation de chaque cœur ionique due à l'effet simultané des champs électriques produits par l'autre cœur ionique et par l'électron de valence, décrite par un terme de polarisation croisée $V_{cpp}(r_a, r_b, R)$
3. L'interaction mutuelle entre les deux cœurs ioniques, définie par $V_{cc}(R)$

L'hamiltonien effectif $h(e)$ pour l'électron externe a alors pour expression :

$$h(e) = T + \mathcal{V}(r_a, r_b, R) \tag{2.1}$$

avec $\mathcal{V}(r_a, r_b, R) = V(r_a) + V(r_b) + V_{cpp}(r_a, r_b, R) + V_{cc}(R)$

où T correspond à l'opérateur énergie cinétique et $\mathcal{V}(r_a, r_b, R)$ au potentiel dans lequel évolue l'électron de valence.

Ces trois types d'interactions seront décrites dans les paragraphes suivants. La séparation électrons de cœur-électrons de valence tire son origine du fait que les énergies de liaison des électrons de cœur sont très supérieures à l'énergie de liaison de l'électron de valence. Cette propriété apparaît dans la loi périodique de Mendelév. Le tableau, qui porte son nom, montre que la régularité des propriétés physico-chimiques des éléments est étroitement liée au nombre d'électrons de valence. Toutes les méthodes empiriques et semi-empiriques utilisées de façon intensive par les quanto-chimistes ne prennent en compte explicitement que les électrons de valence par opposition aux méthodes *ab initio* qui prennent en compte tous les électrons. Les critères essentiels pris en considération dans cette approximation sont d'ordre énergétique, $E_c \gg E_v$ où E_c et E_v représentent respectivement l'énergie des électrons de cœur et des électrons de valence, et spatial $R_c \ll R_v$, où R_c et R_v représentent respectivement les distances moyennes séparant le noyau des électrons du cœur et des électrons de valence. Le nombre d'électrons de valence et la configuration électronique de la couche de valence sera également déterminante.

Stevens et *al.* [109] et Konowalow et *al.* [110] ont réalisé des calculs "tous électrons". Cependant, ces calculs sont assez lourds à cause du nombre d'électrons qui interviennent. De plus la représentation de la polarisation à longue portée exige l'intervention d'un grand nombre de configurations. Aussi les résultats obtenus ne sont pas très satisfaisants. Ainsi que l'ont montré Jeung et *al.* [111], ce défaut peut-être attribué à une mauvaise prise en compte des phénomènes de polarisation de cœur. Cependant, seuls les deux électrons de valence du dimère jouent un rôle actif dans la formation de la pseudo-molécule. Aussi, pour profiter de cette simplicité de nombreux auteurs ont utilisé la notion de pseudopotentiel ou de potentiel modèle. Dans ces méthodes, l'interaction entre un des cœurs ioniques et l'électron est alors représentée par un potentiel effectif, soit totalement attractif (potentiel modèle), soit comportant une partie répulsive (pseudopotentiel). Dans les deux cas : pseudopotentiel et potentiel modèle, le potentiel empirique est ajusté sur le spectre atomique. On obtient de cette

manière un hamiltonien effectif pour l'électron de valence. Cela permet éventuellement de traiter correctement les phénomènes de polarisation des orbitales de cœur. Müller et Meyer [112] considèrent un calcul "tous électrons" dans une première étape. Puis pour traiter le problème moléculaire une interaction de configuration est réalisée, mais réduite aux seuls électrons de valence. Les effets de polarisation sont introduits sous la forme d'opérateurs effectifs de polarisation.

Dans les deux paragraphes qui vont suivre, nous allons présenter de manière quasi-exhaustive les deux méthodes que nous avons utilisées pour le calcul des courbes de potentiels des ions moléculaires alcalins. La première utilise un potentiel modèle de Klapisch alors que la seconde est basée sur un pseudopotentiel. Pour analyser la validité des calculs, nous comparons les résultats obtenus avec la méthode de potentiel modèle à ceux obtenus avec la méthode de pseudopotentiel. Cette comparaison a fait l'objet d'un article [94], que nous nommerons article I. Celui-ci sera discuté dans le paragraphe 2.5.5.

2.1.1 Méthode de potentiel modèle à un électron

Cette méthode a été présentée en détail dans les thèses de A. Henriot [106] et S. Magnier [93]. Dans ce qui suit, nous ne présentons que les points essentiels.

Des potentiels modèles de formes analytiques diverses ont été utilisés pour traiter les ions des dimères alcalins [113, 114, 115]. Comme pour les études menées par Henriot [106] et Magnier *et al.* [93, 116, 117] pour les ions légers Li_2^+ , Na_2^+ et K_2^+ , nous avons utilisé le potentiel modèle (attractif) défini par Klapisch [118] (équation 2.2), ne dépendant pas de l (moment angulaire), pour traiter quelques ions lourds Rb_2^+ , Cs_2^+ et RbCs^+ dans le but de voir si la méthode peut s'étendre à ces systèmes puisque pour leur couplage spin-orbite est très important. De plus, les fonctions d'onde des bas états atomiques nd de ces atomes sont très sensibles aux interactions cœur-cœur.

$$V[r] = \frac{1}{r} - [Z - 1] \frac{e^{-\alpha_1 r} + \alpha_2 r e^{-\alpha_3 r}}{r} \quad (2.2)$$

où les α_i sont des paramètres ajustés sur le spectre expérimental de l'atome alcalin étudié, r est la distance interatomique et Z le numéro atomique des atomes.

Les calculs atomiques et moléculaires sont réalisés en développant les solutions de l'équation de Schrödinger pour une symétrie donnée, sur une base de fonctions de Slater généralisées dans un système de coordonnées elliptiques. La base est optimisée en comparant les énergies atomiques calculées en coordonnées elliptiques aux valeurs expérimentales. Une base de 770 fonctions a été utilisée pour les trois ions Cs_2^+ , Rb_2^+ et RbCs^+ [94].

Les effets de polarisation

Les auteurs ayant employé la méthode de potentiel modèle ont utilisé un développement multipolaire des champs électriques créés au niveau de chaque cœur pour décrire les effets de polarisation de cœur. Comme nous le verrons dans le paragraphe 2.1.2, ces expressions sont similaires à celles obtenues par les auteurs ayant utilisé la

méthode de pseudopotentiel.

Pour décrire l'interaction de l'électron externe avec un cœur ionique, l'interaction coulombienne à grande distance ne suffit pas puisque les phénomènes de polarisation apparaissent. Bottcher et Dalgarno [119] puis l'équipe de McCarroll [113], ont montré que la polarisation du cœur ionique pouvait se traiter asymptotiquement en introduisant pour le potentiel atomique la forme asymptotique :

$$V_{as}[r] = -\frac{1}{r} - \frac{\alpha_d}{2r^4} - \frac{\alpha_q - 6\beta_d}{2r^6} + \dots \quad (2.3)$$

α_d et α_q sont les polarisabilités statiques dipolaires et quadripolaires de cœur. β_d est la polarisabilité dynamique.

Cependant, aux courtes distances, afin d'éviter la divergence du potentiel, on le multiplie par une fonction de coupure f_n de la forme :

$$f_n\left[\frac{r}{\rho}\right] = 1 - \exp\left[-\left(\frac{r}{\rho}\right)^n\right] \quad (2.4)$$

où le rayon de coupure ρ est un paramètre ajustable.

Le potentiel effectif défini par Bottcher et Dalgarno [119] puis modifié par Valiron et al. [113], qui décrit l'interaction de l'électron de valence avec un cœur ionique, a pour forme :

$$V_{as}[r] = -\frac{1}{r} - \frac{\alpha_d f_6\left[\frac{r}{\rho}\right]}{2r^4} - \frac{[\alpha_q - 6\beta_d] f_8\left[\frac{r}{\rho}\right]}{2r^6} \quad (2.5)$$

Lorsque l'électron de valence se rapproche du cœur ionique, les phénomènes d'échange entre les électrons de cœur et ce dernier doivent être considérés. Or le principe de Pauli interdit à l'électron externe d'occuper une orbitale de cœur puisque chez les atomes alcalins tous les électrons internes sont appariés. Dans ce cas, il est alors possible de simuler l'effet de Pauli, en choisissant un potentiel attractif à courte distance : le potentiel modèle.

Lorsque l'électron externe se trouve loin des cœurs espacés d'une distance interatomique suffisamment grande devant leurs propres dimensions, l'interaction simultanée d'un cœur ionique avec l'électron externe et le second cœur, pour les calculs moléculaires, est identique à celle de l'électron de valence avec un cœur ionique. Cependant, les cœurs ioniques se polarisent mutuellement. Bottcher et al. [119] suivis par Valiron et al. [113], ont déterminé la forme asymptotique du potentiel moléculaire $\mathcal{V}[r_a, r_b, R]$ en effectuant jusqu'au second ordre dans le cadre de la théorie des perturbations, un développement multipolaire, centré sur chaque cœur, des potentiels électrostatiques créés par leur distribution de charge respective. Ces auteurs ont obtenu pour expression :

$$\mathcal{V}[r_a, r_b, R] = V_{as}[r_a] + V_{as}[r_b] + V_{cc}[R] + V_{cpp}[r_a, r_b, R] \quad (2.6)$$

où $r_a, r_b, R \rightarrow \infty$

avec :

$$\begin{aligned} - V_{as}[r_a] &= -\frac{1}{r_a} - \frac{\alpha_d^a}{2r_a^4} - \frac{\alpha_d^a - 6\beta_d^a}{2r_a^6} \\ - V_{as}[r_b] &= -\frac{1}{r_b} - \frac{\alpha_d^b}{2r_b^4} - \frac{\alpha_d^b - 6\beta_d^b}{2r_b^6} \end{aligned}$$

Dans notre étude des ions Cs_2^+ , Rb_2^+ et $RbCs^+$, nous n'avons pas introduit les termes $V_{as}[r_a]$ et $V_{as}[r_b]$ qui sont implicitement introduits lors de la minimisation des paramètres α_i , nous avons introduit le terme $V_{cc}[R]$ qui représente le terme de polarisation mutuelle des deux cœurs et $V_{cpp}[r_a, r_b, R]$ qui est le terme de polarisation croisée à trois corps et qui s'écrivent :

$$V_{cc}(R) = \frac{1}{R} - \frac{\alpha_d^a + \alpha_d^b}{2R^4} - \frac{\alpha_q^a + \alpha_q^b}{2R^6} \quad (2.7)$$

$$V_{cpp}[r_a, r_b, R] = [V_{pol}(r_a, r_b, R)]_{A^+} + [V_{pol}(r_a, r_b, R)]_{B^+} \quad (2.8)$$

avec :

$$\begin{aligned} - [V_{pol}(r_a, r_b, R)]_{A^+} &= -\frac{\alpha_d^a P_1[\cos \Theta_a] g_6[\frac{r_a}{\rho}]}{R^2 r_a^2} + \frac{\alpha_q^a P_2[\cos \Theta_a] g_8[\frac{r_a}{\rho}]}{R^2 r_a^2} \\ - [V_{pol}(r_a, r_b, R)]_{B^+} &= -\frac{\alpha_d^b P_1[\cos \Theta_b] g_6[\frac{r_b}{\rho}]}{R^2 r_b^2} + \frac{\alpha_q^b P_2[\cos \Theta_b] g_8[\frac{r_b}{\rho}]}{R^2 r_b^2} \end{aligned}$$

Dans ces expressions P_1 et P_2 correspondent aux polynômes de Legendre de première et de seconde espèce et où la fonction de coupure choisie g_n a pour expression :

$$g_n[\frac{r}{\rho}] = \sqrt{1 - \exp[-(\frac{r}{\rho})^n]} \quad (2.9)$$

qui est différente de la fonction de coupure définie dans l'équation 2.4.

Dans l'équation 2.7 le terme :

$$\frac{\alpha_d^a + \alpha_d^b}{2R^4} \quad (2.10)$$

est une contribution au terme de polarisation V_{cpp} , nous verrons dans le paragraphe 2.4 son importance par rapport à l'énergie électronique.

2.1.2 Méthode des pseudopotentiels

Pseudopotentiel *ab initio* électron de valence-ion atomique

Plusieurs types de pseudopotentiel ont été proposés pour décrire l'interaction d'un électron de valence avec un cœur ionique, et dans notre travail, les atomes alcalins sont traités par une méthode de pseudopotentiel proposée par Barthelat et Durand [120]. Dans cette approche, l'interaction électron de valence-cœur est représentée par un potentiel effectif :

$$V(r) = \sum_{l=0}^2 U_l(r) P(l) \quad (2.11)$$

Dans l'équation (2.11), l représente le moment angulaire de l'orbitale et $P(l)$ correspond à l'opérateur de projection sur le sous-espace défini par les harmoniques sphériques Y_m^l pour un l donné. Les pseudopotentiels sont écrits comme suit :

$$U_l(r) = \sum_{i=1}^2 C_i r^{n_i} e^{-\alpha_i r^2} \quad (2.12)$$

où C , n et α sont ajustés pour reproduire les énergies et les fonctions d'onde des orbitales de valence, pour l'état fondamental, calculées par la méthode Hartree-Fock¹ (HF) qui est basée *sur un modèle à particules indépendantes* [121, 122]. Dans cette méthode la fonction d'onde, du système à N électrons, normée Ψ ($\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$) est écrite sous la forme d'un déterminant de Slater c'est-à-dire comme le produit antisymétrisé (pour tenir compte du principe d'exclusion de Pauli) de fonctions d'onde à un électron φ_i ($i = 1$ à N , N étant le nombre d'électrons) appelées orbitales atomiques (ou états monoélectroniques). Pour une telle fonction l'énergie E :

$$E(\Psi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$$

s'écrit comme une combinaison linéaire d'intégrales radiales monoélectroniques (énergie cinétique + interaction avec le noyau) et biélectroniques (interaction électrostatique directe J + échange K) (l'interaction spin-orbite est négligée ici).

Si l'énergie est minimum $E = E_{min}$ alors les orbitales monoélectroniques sont états propres de l'opérateur monoélectronique de Fock qui dépend des orbitales monoélectroniques apparaissant dans la fonction d'onde optimisée Ψ_{min} et ces orbitales sont elles mêmes solutions des équations de Hartree-Fock. Ces dernières remplacent le problème à N électrons par un problème faisant intervenir l'hamiltonien monoélectronique qui dépend du déterminant de Slater qu'il faut déterminer en résolvant les équations de Hartree-Fock.

La résolution des équations HF ne peut s'effectuer qu'en utilisant un processus itératif SCF (Self Consistent Field : méthode du champ autocohérent). On appelle énergie de HF (ou limite HF) l'énergie totale du système calculée sur une base complète. A l'itération n , les hamiltoniens monoélectroniques utilisés s'expriment à l'aide des N fonctions monoélectroniques obtenues à l'étape $(n - 1)$.

Les énergies monoélectroniques obtenues par le calcul HF sont assez différentes des valeurs expérimentales, les niveaux n'étant pas assez liés. Pour améliorer les énergies obtenues par les calculs *ab initio*, il est indispensable d'introduire des termes effectifs de polarisation de cœur que nous décrivons dans la section 2.1.4.

Pour tous les ions atomiques A^+ , nous décrivons l'interaction entre l'électron de valence et le cœur A^+ par les pseudopotentiels (qui comportent une partie répulsive) à un électron donnés par Durand et Barthelat [120]. Ces pseudopotentiels monoélectroniques ont été déterminés par des calculs *ab initio* permettant de définir un pseudo hamiltonien décrit dans le paragraphe suivant, puis représentés par des fonctions gaussiennes (2.12).

Pseudo-hamiltonien H_{ps}

L'interaction entre un électron de valence et un cœur ionique est décrite par un pseudo-hamiltonien. L'hamiltonien total d'un atome à N électrons et dont le noyau a

¹Par opposition avec la méthode de potentiel modèle, où les coefficients sont ajustés sur le spectre expérimental

une charge Z (en u.a) est :

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\Delta_i}{2} - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.13)$$

où i représente l'électron, et pour un nombre pair d'électrons, l'opérateur de Fock s'écrit :

$$F_{Fock} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (2.14)$$

soit

$$F_{Fock} = \sum_c \varepsilon_c |\varphi_c\rangle \langle \varphi_c| + \sum_v \varepsilon_v |\varphi_v\rangle \langle \varphi_v| + \sum_e \varepsilon_e |\varphi_e\rangle \langle \varphi_e| \quad (2.15)$$

où les indices c , v et e désignent les électrons de cœur c , les électrons de valence apparaissant dans la configuration fondamentale v et dans les états excités e . Les ε_i sont les valeurs propres de l'opérateur F_{Fock} (énergies de Fock) données par :

$$\hat{F}|\varphi_i\rangle = \varepsilon_i |\varphi_i\rangle \quad (2.16)$$

Dans la méthode du pseudopotentiel, N_v électrons de valence tournent autour d'un pseudo-noyau (le cœur) formé par le noyau et les N_c électrons des couches internes (avec $N = N_c + N_v$). Ainsi, les opérateurs H et F sont remplacés par le pseudo-hamiltonien H_{ps} décrivant les électrons de valence seulement et le pseudo-opérateur de Fock F_{ps} :

$$H_{ps} = \sum_{i=1}^{N_v} \left[-\frac{\Delta_i}{2} + U_{ps} \right] + \sum_{i<j}^{N_v} \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.17)$$

et

$$F_{ps} = \sum_{v=1}^{N_v} \varepsilon'_v |\varphi'_v\rangle \langle \varphi'_v| + \sum_{e=1}^{N_e} \varepsilon'_e |\varphi'_e\rangle \langle \varphi'_e| \quad (2.18)$$

où U_{ps} est un pseudopotentiel monoélectronique déterminé par la charge nette Z_c du cœur ($Z_c = N - N_c = N_v$), (avec la charge élémentaire $e = 1$), et qui, à grandes distances du noyau, tend vers la forme coulombienne $-\frac{Z_c}{r}$:

$$U_{ps} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (-Z_c/r) \quad (2.19)$$

Les paramètres du pseudopotentiel *ab initio* monoélectronique U_{ps} sont ajustés pour reproduire les énergies et les orbitales de valence, obtenues par un calcul HF tous électrons, du niveau fondamental. Le pseudopotentiel *ab initio* monoélectronique U_{ps} ainsi déterminé sera représenté par un potentiel effectif. L'opérateur de Fock F_{ps} associé au pseudo-hamiltonien H_{ps} doit reproduire au mieux le spectre de valence :

$$F_{ps}|\varphi'_v\rangle = \varepsilon_v |\varphi'_v\rangle \quad (2.20)$$

φ'_v est appelée pseudo-orbitale de valence.

2.1.3 Les bases

Pour décrire une orbitale atomique $\phi(r)$ centrée sur un ion donné, il y a deux sortes de fonctions de base qui sont d'un usage courant. Le premier type de base est formé d'orbitales de type Slater (STO : Slater Type Orbital) qui sont données par des polynômes de x, y, z multiplié par $\exp(-\zeta r)$ où ζ est une constante déterminant la taille de l'orbitale et r représente la distance de l'électron par rapport au noyau. Le second type de base est formé d'orbitales de type gaussien (GTO : Gaussian Type Orbital). Nous allons comparer entre les deux fonctions dans notre article [94], puisque nous avons utilisés les fonctions gaussiennes dans la méthode de pseudopotentiel et les fonctions de Slater (en coordonnées elliptiques) dans la méthode de potentiel modèle. Puisque dans ce chapitre, nous ne présentons que les résultats obtenus avec la méthode de pseudopotentiel, dans ce qui suit, nous allons présenter les fonctions gaussiennes. Ces fonctions s'écrivent comme des polynômes de x, y, z multiplié par $\exp(-\alpha r^2)$, α , nombre positif, est l'exposant de la gaussienne. De telles fonctions présentent une propriété essentielle : le produit $g_A \cdot g_B$ de deux gaussiennes $g_A(\alpha_A)$ et $g_B(\alpha_B)$ est aussi une gaussienne $g_C(\alpha_C)$.

De ce fait, un des avantages du calcul utilisant des bases gaussiennes est que les intégrales biélectroniques à quatre centres ($g_A g_B | g_C g_D$) se ramènent à des intégrales biélectroniques à deux centres ($g_E | g_F$). Ainsi, le calcul intégral gagne en facilité et en rapidité. Cependant de telles fonctions n'ont pas un comportement physique tout à fait satisfaisant. En effet, contrairement aux STO, les GTO ont un mauvais comportement très près du noyau.

Un inconvénient des bases GTO est que le nombre de fonctions nécessaires pour atteindre l'énergie Hartree-Fock (HF) sur une base GTO est beaucoup plus élevé que sur une base STO. Pour une molécule de taille moyenne, ce nombre, devenant très important conduit à un calcul intégral, qui, bien que simplifié, reste très long. De plus, le temps calcul SCF (diagonalisation de la matrice de Fock) est non négligeable. Deux solutions sont alors envisageables pour diminuer le temps de calcul :

- introduire un procédé d'accélération de convergence.
- utiliser des fonctions de base contractées.

Il est désormais bien établi que, dans un calcul *ab initio* standard, la base utilisée doit-être relativement étendue et comporter des fonctions de polarisation (F.P). De telles fonctions atomiques, dont le nombre quantique secondaire l est supérieur à celui des fonctions de valence, permettent la prise en compte de la déformation des orbitales des atomes lors de la formation de la molécule. Pour une plus grande flexibilité, on peut rajouter les fonctions diffuses (ces gaussiennes ont de très petits exposants qui leur permet de recouvrir l'espace diffus et donc leur décroissance en fonction de la distance au noyau est lente). Elles sont nécessaires afin de donner une description correcte des anions et des liaisons faibles. Elles sont fréquemment utilisées pour le calcul des propriétés telles que les moments dipolaires ou la polarisabilité, habituellement elles sont de type s : ($l = 0$) et p ($l = 1$), et sont nécessaires pour une meilleure description de l'atome. En pratique nous utiliserons des bases de fonctions gaussiennes contractées. Dans une base de fonctions contractées (CGTO : Contracted Gaussian

Type Orbital), chaque fonction ϕ_k est une combinaison linéaire de gaussiennes g_ν .

$$\phi_k = \sum_{\nu} g_{\nu} a_{\nu k} \quad (2.21)$$

$a_{\nu k}$ est le coefficient de contraction de la gaussienne g_ν dans la fonction ϕ_k . Les fonctions g_ν sont appelées gaussiennes primitives et ϕ_k gaussiennes contractées.

Ainsi, si l'on dispose de N primitives, la contraction aura pour effet de diminuer la dimension de la base, et par là-même, celle de la matrice à diagonaliser. Le nombre d'intégrales à calculer n'est pas modifié, mais le nombre d'intégrales à stocker varie considérablement, ce qui permet également un gain en temps calcul non négligeable. Dans notre travail, nous avons utilisé les bases de fonctions gaussiennes contractées utilisées par divers auteurs qui ont étudié les alcalins avec la même approche de pseudopotentiel que nous avons utilisée dans ce travail. Si nous prenons comme exemple l'atome de lithium, la base que nous avons utilisée est celle déterminée par Poteau et al. [123], elle est de la forme $8s7p4d1f/7s5p3d1f$, *i.e* qu'elle possède 8 orbitales primitives s contractées en 7 orbitales s , 7 orbitales primitives p contractées en 5 orbitales p , 4 orbitales primitives d contractées en 3 orbitales d et pas de contraction pour l'orbitale f ; c'est ce qu'on appelle un schéma de contraction.

2.1.4 Polarisation des cœurs ioniques

Comme indiqué dans la section 2.1.2, seule la prise en compte des termes effectifs de polarisation va permettre d'avoir des énergies théoriques en accord avec les valeurs expérimentales.

Dans cette section, nous allons décrire le terme de polarisation des cœurs ioniques tel qu'il est présenté dans la méthode du pseudopotentiel. Si on suppose que tous les effets de polarisation de cœur sont pris en compte par un potentiel de polarisation de cœur effectif, le concept de base de la méthode consiste à l'incorporer dans la procédure *ab initio* selon le formalisme proposé par Müller et al. [124]. A ces potentiels nous avons ajouté le terme de polarisation effectif (equation 2.22). Dans le formalisme du pseudopotentiel que nous utilisons l'énergie du dipôle (cœur ionique-électron de valence) placé dans le champ \mathbf{f}_λ donne le terme de potentiel de polarisation effectif (equation 2.22). Le champ \mathbf{f}_λ est la somme des champs électriques créés par les électrons de valence i et des champs créés par les autres cœurs ioniques $\lambda' \neq \lambda$.

Le potentiel de polarisation effectif s'écrit comme suit :

$$V_{cpp} = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda} \alpha_{\lambda} \mathbf{f}_{\lambda} \cdot \mathbf{f}_{\lambda} \quad (2.22)$$

Où : α_{λ} est la polarisation du cœur ionique λ^+

Une puissance de la méthode de pseudopotentiel que nous utilisons réside dans la fonction de coupure F définie dans [108] dépendante de l qui est introduite dans le champ créé par les électrons de valence. Comme démontré par Müller et al. [124], cette fonction de coupure doit annuler l'effet de pénétration de l'électron de valence

dans le cœur ionique λ considéré². L'expression de \mathbf{f}_λ est donc :

$$\mathbf{f}_\lambda = \sum_i \frac{\mathbf{r}_{i\lambda}}{r_{i\lambda}^3} F(r_{i\lambda}, \rho_\lambda) - \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{\mathbf{R}_{\lambda'\lambda}}{R_{\lambda'\lambda}^3} Z_{\lambda'} \quad (2.23)$$

où Z est la charge du cœur λ' , $r_{i\lambda}$ est le rayon qui joint le cœur λ à l'électron de valence i et $R_{\lambda'\lambda}$ est le rayon qui joint le cœur λ au cœur λ' .

La fonction de coupure dépendante de l a la forme suivante :

$$F_l^c(r_{i\lambda}, \rho_\lambda^l) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-1}^{+1} F_l(r_{i\lambda}, \rho_\lambda^l) |lm\lambda\rangle \langle lm\lambda| \quad (2.24)$$

dans (2.24), $|lm\lambda\rangle$ correspondent aux harmoniques sphériques centrés sur l'atome λ , et la fonction de coupure est écrite comme suit :

$$F_l^c(r_{i\lambda}, \rho_\lambda^l) = \begin{cases} 0 & r_{i\lambda} < \rho_\lambda^l \\ 1 & r_{i\lambda} \geq \rho_\lambda^l \end{cases} \quad (2.25)$$

Dans le cas des ions $(AB)^+$ d'alcalins où il n'y a qu'un électron de valence, le potentiel de polarisation effectif V_{cpp} fait donc apparaître les termes suivants :

1. $-\frac{1}{2}\alpha_A \frac{1}{r_A^4} F(r_A, \rho_A) - \frac{1}{2}\frac{\alpha_B}{r_B^4} F(r_A, \rho_B)$
pour un ion donné, $-\frac{1}{2}\alpha \frac{1}{r^4} F(r, \rho)$ représente la polarisation électronique qui ne dépend que de l'ion considéré. A chaque moment orbital l de l'électron de valence correspond un rayon de coupure ρ^l noté dans la suite $r_c(l)$.
2. $\frac{1}{2} \frac{\vec{R}}{R^3} (\alpha_a \frac{\vec{r}_a}{r_a^2} F(r_a, \rho_a) - \alpha_b \frac{\vec{r}_b}{r_b^2} F(r_b, \rho_b))$ avec $\vec{R} = \vec{BA}$
qui tient, en partie, compte des effets de polarisation croisés.

La polarisation de chaque ion A^+ par l'autre ion B^+ et par l'électron de valence est décrite par un potentiel effectif de polarisation de cœur.

Pour les atomes avec un seul électron de valence, chaque rayon de coupure $r_c(l)$ peut être indépendamment ajusté au potentiel d'ionisation et aux énergies de transition.

Remarque

Dans la méthode du potentiel modèle,

1. Le terme (1) correspond à la partie dipolaire du potentiel asymptotique de l'équation 2.3.
2. Le terme (2) est introduit dans l'équation 2.8.

2.2 Interaction cœur-cœur

Dans ce paragraphe, nous décrirons le terme d'interaction entre deux cœurs ioniques A^+ et B^+ , de charge nette $Z_c(A) = Z_c(B) = 1$. L'interaction coulombienne

²Cet argument est valable aussi pour la méthode de potentiel modèle

cœur-cœur est en première approximation représentée par le terme de répulsion donné par l'équation suivante :

$$\frac{Z_c(A)Z_c(B)}{R} = \frac{1}{R} \quad (2.26)$$

Ce terme qui traduit l'interaction entre deux charges ponctuelles est insuffisant, puisqu'il ne prend pas en compte l'énergie d'induction d'un cœur sous l'influence de la charge de l'autre cœur. Il s'agit d'un effet de volume [125] traduisant la répulsion cœur-cœur entre les deux nuages formés par les électrons des couches complètes de chaque ion et d'un effet de charge ponctuelle. L'effet de volume de l'interaction cœur-cœur est essentiel aux faibles distances internucléaires et ne doit pas être négligé dans le calcul des états moléculaires, en particulier lorsqu'un potentiel effectif de cœur (ECP) de type potentiel modèle ou pseudopotentiel est utilisé. Ce terme de répulsion est essentiel à la partie interne d'une courbe de potentiel, puisque pour comprendre les collisions atomiques ultrafroides qui apparaissent dans les expériences de condensation de Bose-Einstein par exemple, les niveaux vibrationnels d'énergies proches de la limite de dissociation doivent être connus.

2.2.1 Effet de volume

L'énergie de répulsion cœur-cœur est évaluée grâce à un calcul Hartree-Fock. Au départ, le système est constitué des orbitales de A^+ et des orbitales de B^+ , et on calcule l'énergie Hartree-Fock de A^+ et de B^+ . Dans la pratique, une base d'orbitales atomiques est choisie pour chacun des alcalins. Une bonne solution est de choisir un pseudopotentiel où la couche de valence de l'ion est explicitement traitée (pseudopotentiel dit à petit cœur). On détermine les énergies et orbitales moléculaires associées Hartree-Fock de chacun des ions. Dans un deuxième temps, on construit des orbitales moléculaires du super système $(AB)^{++}$ à partir des orbitales des deux cœurs. On obtient ainsi une base d'orbitales moléculaires qui décrit parfaitement le super système pour une distance internucléaire infinie. On initialise un programme Hartree-Fock avec ces orbitales en s'assurant que le premier travail du logiciel que l'on a choisi est d'orthogonaliser ce jeu d'orbitales, on s'arrange pour obtenir l'énergie Hartree-Fock avant toute itération SCF car on ne veut pas tenir compte de la polarisation du cœur. Dans un troisième temps, on essaye d'ajuster l'écart à $\frac{1}{R}$, qui ne devient important qu'à assez petite distance internucléaire par une (ou plusieurs) exponentielles. C'est de cet écart à $\frac{1}{R}$ qu'il faut corriger toutes les courbes de potentiels électroniques obtenues.

Dans la référence [125], Jeung a évalué l'effet de volume dans l'interaction cœur-cœur pour des dimères d'alcalins et pour chaque distance internucléaire R en utilisant la méthode *ab initio* que nous venons de présenter, il recommande de rajouter cette énergie comme un terme de correction aux énergies potentielles. Le calcul *ab initio* a été mené pour quelques dimères neutres d'alcalins (Na_2 , K_2 , Rb_2 , Cs_2 , KRb , KCs et $RbCs$). Nous avons modélisé les valeurs trouvées suivant une loi en $ae^{-(bR)}$, dont les paramètres sont présentés dans la table (2.1). Nous avons essayé de tirer une loi d'échelle en fonction de la masse réduite des espèces considérées, mais les

valeurs sont trop différentes. Nous avons donc utilisé ces valeurs pour les ions hé-

	Cs_2	Rb_2	K_2	Na_2	$RbCs$	KCs	KRb
a	684.749	724.402	13.1491	94.1856	725.121	38438.2	720.125
b	-1.70798	-1.98588	-2.47047	-2.47234	-1.84468	-2.76271	-2.10793

TAB. 2.1 – Valeurs calculées par Jeung [125] pour le potentiel de répulsion cœur-cœur

téronucléaires : $RbCs^+$, KRb^+ , KCs^+ et homonucléaires : Na_2^+ , K_2^+ , Rb_2^+ et Cs_2^+ (puisqu'elles n'étaient disponibles que pour ces systèmes).

De manière similaire, d'autres auteurs ont calculé ce terme de répulsion. Les expressions sont légèrement différentes :

- Spiegelmann et al. [126] pour le calcul de Rb_2 ont choisi d'ajuster le terme de répulsion cœur-cœur représenté par la formule suivante : $E_{rep}^{c-c}(R) = 1.613181e^{-(3.5R)}R^{8.5}$,
- Pavolini et al. [127] dans leur calcul concernant RbCs ont rajouté le terme de répulsion $E_{rep}^{c-c}(R) = 2993e^{-(2.063068R)}$,
- Magnier et al. [128] dans leur calcul sur Na_2 ont rajouté le terme de répulsion $E_{rep}^{c-c}(R) = 566.68e^{-(2.887R)}$,
- Magnier et al. [129] dans leur calcul sur K_2 ont rajouté le terme de répulsion $E_{rep}^{c-c}(R) = 3633.6e^{-(2.35486R)}$,
- Rousseau et al. [103] dans leur calcul sur KRb ont rajouté un terme de répulsion cœur-cœur calculé avec la méthode *ab initio* décrite plus haut, sans donner la forme analytique du terme qu'ils ont calculé.
- Korek et al. [104] ont calculé les courbes de potentiel de $LiCs$, $NaCs$ et KCs et ont rajouté le terme de répulsion estimé avec la même méthode *ab initio* [102].

Remarque

Les valeurs des paramètres a et b du terme de répulsion cœur-cœur calculés par Jeung [125] et par :

- Pavolini et al. [127] dans leur calcul sur RbCs
- Magnier et al. [129] dans leur calcul sur K_2
- Magnier et al. [128] dans leur calcul sur Na_2

sont très différentes. Nous avons comparé ces termes dans la figure 2.2. Nous pouvons noter que dans les cas (b) et (c) de la figure 2.2 correspondant respectivement à Na_2 et RbCs, les deux expressions ont le même comportement à courte distance. Utiliser le terme calculé par Jeung [125] ou ceux calculés par Magnier et al. [129] et par Pavolini et al. [127] revient au même. Par ailleurs, nous avons comparé les deux termes dans le paragraphe 2.4, avec l'exemple de l'ion $RbCs^+$ et les résultats obtenus avec les deux formules (Jeung [125] et Pavolini et al. [127]) sont identiques.

Dans le cas du dimère K_2 (figure 2.2(a)), le comportement des deux termes à courte distance est assez différent, le terme calculé par Jeung est plus répulsif à courte distance ($R=5$ u.a), alors que celui calculé par Magnier et al. [129] est répulsif à $R=8$ u.a. Dans ce cas, nous utiliserons dans le reste des calculs, le terme calculé par Jeung [125] par souci d'uniformiser nos calculs.

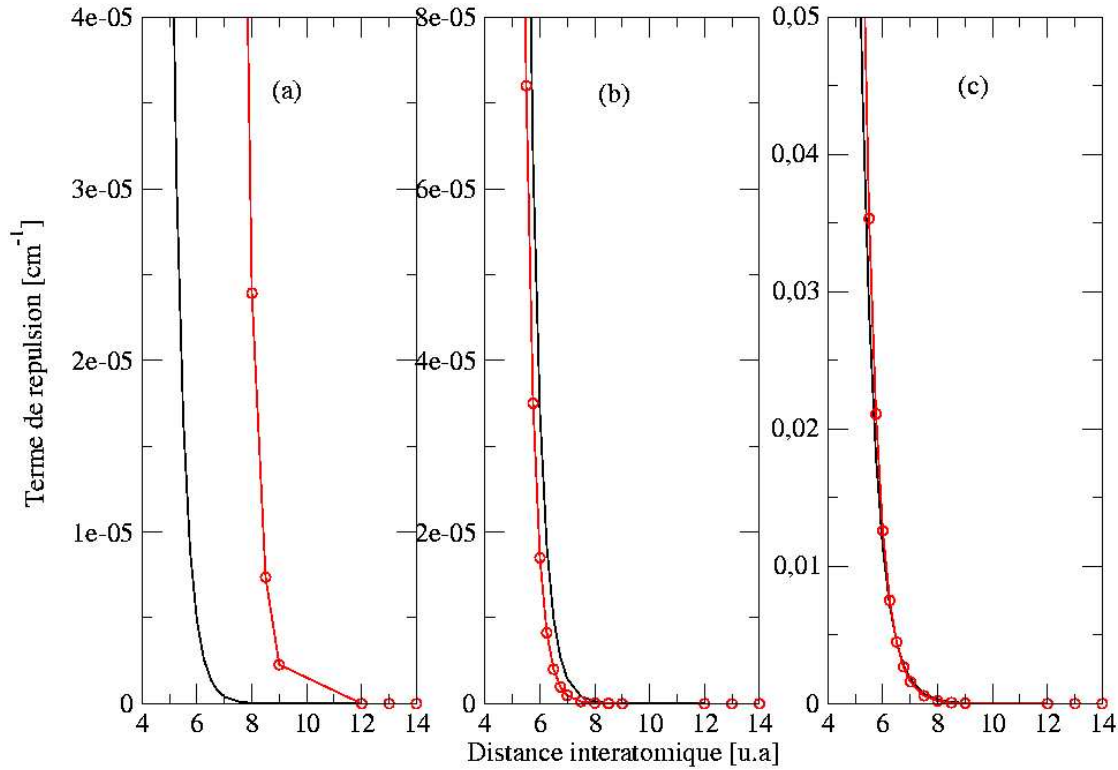


FIG. 2.2 – Schéma représentant le terme de répulsion cœur-cœur pour les dimères K_2 (a), Na_2 (b) et $RbCs$ (c). Pour les trois figures, le terme calculé par Jeung [125] est représenté en traits pleins, alors que ceux calculés par Magnier et al. [129] (K_2 ,(a)), Magnier et al. [128] (Na_2 ,(b)) et Pavolini et al. [127] ($RbCs$,(c)) sont représentés en cercles ouverts.

2.2.2 Terme correctif : dispersion

La plupart des auteurs ayant traité ce sujet, *ie* ayant calculé des courbes de potentiels ont rajouté à l'énergie électronique calculée, selon les alcalins un ou plusieurs termes correctifs en plus du terme de répulsion :

- Pavolini et al. [127] dans leur calcul concernant $RbCs$ ont rajouté en plus du terme de répulsion, un terme de dispersion, attractif, approximé par la formule de London :

$$E_{disp}^{cc}(R) = -\frac{3}{2} \frac{IP(Rb^+)IP(Cs^+)}{IP(Rb^+) + IP(Cs^+)} \frac{\alpha_{Rb^+}\alpha_{Cs^+}}{R^6} \quad (2.27)$$

Où $IP(A^+)$ désigne le potentiel d'ionisation de l'ion A^+ .

- Magnier et al. [128] dans leur calcul sur Na_2 ont rajouté le terme de dispersion (2.27).
- Magnier et al. [129] dans leur calcul sur K_2 ont rajouté en plus du terme de dispersion 2.27 le terme de répulsion $E_{rep}^{c-c}(R) = 3633.6e^{-(2.35486R)}$.

- Allouche et al. [105] ont utilisé les mêmes termes que Pavolini et al. [127] dans leur calcul sur $RbCs$.

Tous les auteurs sus cités ont rajouté le terme de polarisation représenté par l'équation 2.10 qui est compris dans le potentiel effectif de cœur. Ce terme également attractif représente la contribution des cœurs ioniques au terme de polarisation comme décrit au paragraphe 2.1.4. L'importance des termes de répulsion, dispersion et polarisation sera discutée dans le paragraphe 2.4.

2.3 Description des atomes alcalins

Le programme que nous utilisons, pour le calcul des énergies électroniques, dans le cadre de ce travail, est le programme SCF PSHONDO adapté de HONDO [130] par J. P. Daudey pour l'utilisation des pseudopotentiels et du programme d'interaction de configuration CIPSI [101], il nous a été fourni par P. Millié.

Les atomes alcalins possèdent un seul électron de valence dans un niveau nl (l étant le moment orbital). Pour décrire les niveaux d'énergie et les orbitales atomiques de l'électron de valence des atomes alcalins A présent dans les ions moléculaires $(AB)^+$, nous avons utilisé les pseudopotentiels décrits dans la référence [120]. Les orbitales atomiques sont décrites sur une base de fonctions gaussiennes. Nous avons introduit un rayon de coupure $r_c(l)$ différent pour chaque orbitale l .

Pour tenir compte de la polarisation du cœur ionique par l'électron de valence, nous avons ajusté les rayons de coupure $r_c(s)$, $r_c(p)$, $r_c(d)$ et $r_c(f)$ (correspondants respectivement aux moments orbitaux $l = 0, 1, 2$ et 3) de façon à représenter correctement les énergies atomiques expérimentales de Moore [131, 132].

L'énergie des niveaux atomiques f étant insensible aux variations du rayon de coupure $r_c(f)$, nous décrirons celle des niveaux atomiques d et f par le même rayon de coupure (sauf dans le cas du lithium où les niveaux atomiques d et f n'ont pas le même rayon de coupure). Les rayons de coupure obtenus pour les atomes alcalins sont différents. Cette différence s'explique par l'augmentation du nombre d'électrons internes (de cœur) et montre ainsi l'importance de la polarisation du cœur par l'électron de valence.

Pour les atomes avec un électron de valence, les rayons de coupure sont déterminés en fixant la polarisabilité dipolaire expérimentale [133] (lorsque cette dernière est indisponible, nous utiliserons la polarisabilité dipolaire théorique [124]) et en les ajustant sur le spectre expérimental. Les énergies sont ajustées sur le premier niveau de chaque symétrie.

Pour tous les atomes, nous comparerons les énergies atomiques obtenues aux énergies expérimentales tirées des tables de Moore [131, 132]. Les valeurs que nous utilisons correspondent à des moyennes pondérées avec le facteur $(2J+1)$ des énergies des deux niveaux $J = l + 1/2$ et $J = l - 1/2$ donné par les tables de Moore [131, 132], la structure fine atomique est négligée dans ce cas. Pour chaque atome, le potentiel d'ionisation est donné par l'énergie du premier niveau.

2.3.1 Li

Pour décrire l'atome de lithium, nous avons utilisé la base de fonctions gaussiennes, $8s7p4d1f/7s5p3d1f$ déterminée par Poteau et al. [123] et utilisée aussi par Rousseau et al. [102]. Les paramètres sont reportés dans le tableau (2.2).

orbitales s		orbitales p		orbitales d		orbitales f	
exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient
2.464	-0.013829	0.630	0.524330	0.200	1.0	0.010	1.0
1.991	-0.032077	0.240	0.078566	0.070	1.0		
0.582	1.000000	0.098	1.0	0.0022796	0.491521		
0.200	1.000000	0.043	1.0	0.008574	0.549272		
0.070	1.000000	0.020	1.0				
0.031	1.000000	0.010	0.01445				
0.015	1.000000	0.005	0.00657				
0.007	1.000000						

TAB. 2.2 – Base de fonctions gaussiennes du Li

Cette base nous permet de représenter le spectre atomique du lithium jusqu'au niveau atomique 3d.

niveau atomique	$r_c(adjust)[ua]$	$r_c[ua][123]$	$r_c[ua][134]$
s	1.420	1.434	1.425
p	0.979	0.979	0.98
d	0.600	0.600	0.98
f	0.400	0.400	

TAB. 2.3 – rayons de coupure du Li

En utilisant les paramètres de Poteau et al. [123] *ie* même base, mêmes rayons de coupure et même polarisabilité dipolaire, nous n'obtenons pas les mêmes valeurs pour les énergies atomiques des niveaux excités. Nous avons dû donc effectuer un ajustement du rayon de coupure (niveau s, voir les résultats présentés dans le tableau 2.3), puisque même ceux proposés par Rousseau dans sa thèse ne donnaient pas de bons résultats. Le tableau 2.4 montre l'extrême sensibilité des résultats par rapport aux paramètres mis en jeu : rayons de coupure et polarisabilité dipolaire. Finalement, nous avons utilisé, pour les rayons de coupure, les valeurs qui correspondent à la première colonne du tableau 2.3. La polarisabilité dipolaire que nous avons utilisée est celle calculée par Schmidt-Mink et al. [135] et égale à $0.1915 a_0^3$.

Remarque

Poteau et al. [123] ont considéré les transitions à partir du niveau 2s dont l'énergie est mise à 0, mais ne précisent pas la vraie valeur de ce niveau. Comme les écarts dans

notre calcul entre niveaux sont en accords avec les leurs, nous pensons que l'écart de 6 cm^{-1} est dû à ce problème de référence (voir tableau 2.4).

Niveau atomique	Energies expérimentales		Energies calculées			
	[131, 132]	[123]	[135]	notre calcul avec r_c [134]	notre calcul avec r_c [123]	notre calcul avec r_c (ajusté)
2s	43487	43487	43487	43487	43487	43487
2p	28583	28583	28563	28584	28588	28583
3s	16281	16275	16278	16276	16279	16275
3p	12562	12560	12553	12562	12565	12560
3d	12204	12196		12198	12201	12196

TAB. 2.4 – Représentation de l'atome de lithium : Energies de liaison des premiers niveaux atomiques du Li en cm^{-1}

Ces valeurs (base d'orbitales gaussiennes, polarisabilité dipolaire et rayons de coupure) permettent de reproduire le spectre expérimental du lithium tiré des Tables de Moore [131, 132], avec des écarts absolus inférieurs à 6 cm^{-1} pour les premiers niveaux atomiques.

2.3.2 Na

Pour décrire l'atome de sodium, nous avons utilisé la base de fonctions gaussiennes $7s6p5d2f/5s4p4d2f$ déterminée par S. Magnier [128] à partir de celle calculée par Jeung [136].

Les paramètres sont reportés dans le tableau (2.5). Cette base nous permet de repré-

orbitales s		orbitales p		orbitales d		orbitales f	
exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient
2.83570	0.0070430	0.43100	-0.01778	0.292	0.01454	0.015	1.0
0.49318	-0.187100	0.09276	0.20030	0.06361	0.123	0.005	1.0
0.072085	0.3679	0.03562	1.0	0.02273	1.0		
0.036061	1.0	0.01447	1.0	0.0088852	1.0		
0.016674	1.0	0.0058	1.0	0.00352	1.0		
0.00693	1.0	0.0023	1.0				
0.00287	1.0						

TAB. 2.5 – Base de fonctions gaussiennes du Na

senter le spectre atomique du sodium jusqu'au niveau atomique 4d.

Dans le tableau (2.6) nous donnons les rayons de coupure utilisés par S. Magnier [128] et ceux que nous utiliserons dans la suite de nos calculs (le rayon de coupure du niveau s a été légèrement ajusté).

niveau atomique	$r_c(adjust)[ua]$	$r_c[128][ua]$
s	1.422	1.420
p	1.625	1.625
d	1.500	1.500
f	1.500	1.500

TAB. 2.6 – rayons de coupure du Na

Dans la référence [128] Magnier et al. ont comparé entre deux méthodes de calcul, la méthode de pseudopotentiel (PP) que nous utilisons dans cette section, et la méthode de potentiel modèle (PM) que nous avons utilisée pour le calcul des potentiels électroniques des ions lourds [94]. Les résultats qu'ils ont obtenus sont donnés dans le tableau 2.7. Nous avons à notre tour calculé les énergies atomiques des premiers niveaux de l'atome de sodium en prenant les mêmes paramètres : même polarisabilité dipolaire expérimentale $0.9947 a_0^3$ [112] et mêmes rayons de coupure. Nous obtenons une différence de 3 cm^{-1} pour le niveau 3s et 1 cm^{-1} pour le niveau 3p. Nous décidons alors d'effectuer un léger ajustement du rayon de coupure (voir tableau 2.6). Ces valeurs (base d'orbitales gaussiennes, polarisabilité dipolaire et rayons de coupure) permettent de reproduire le spectre expérimental du lithium tiré des Tables de Moore [131, 132], avec des écarts absolus inférieurs à 7 cm^{-1} pour les premiers niveaux atomiques.

Niveau atomique	Energies expérimentales	Energies calculées				
	[131, 132]	[128] (PP)	[128] (PM)	notre calcul avec r_c [128] et α [112]	notre calcul avec r_c [128] et α [137]	notre calcul avec α [112] et r_c (ajusté)
3s	41449	41449	41450	41452	41455	41450
3p	24482	24482	24476	24483	24484	24483
4s	15712	15690	15730	15690	15691	15690
3d	12277	12277	12285	12277	12277	12277
4p	11179	11177	11198	11178	11178	11178
5s	8249	8238	8259	8238	8238	8238
4d	6901	6893	6913	6887		6888

TAB. 2.7 – Représentation de l'atome de sodium : Energies de liaison des premiers niveaux atomiques du Na en cm^{-1}

2.3.3 K

Pour décrire l'atome de potassium, nous avons utilisé la base de fonctions gaussiennes $7s5p7d2f/6s5p5d2f$ déterminée par S. Magnier [129], et construite à partir de celle définie par Jeung et Ross [138] en ajoutant les fonctions diffuses nécessaires pour la description des états hautement excités. Les paramètres sont reportés dans le

tableau (2.8). Cette base nous permet de représenter le spectre atomique du potas-

orbitales s		orbitales p		orbitales d		orbitales f	
exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient
0.93120	0.02463	0.13300	1.0	1.2550	0.02754	0.015	1.0
0.26760	-0.2628	0.05128	1.0	0.4432	0.05391	0.005	1.0
0.04170	1.0	0.01642	1.0	0.1090	0.10830		
0.02815	1.0	0.00520	1.0	0.02994	1.0		
0.01448	1.0	0.00220	1.0	0.01013	1.0		
0.00550	1.0			0.0037	1.0		
0.00260	1.0			0.0018	1.0		

TAB. 2.8 – Base de fonctions gaussiennes du K

sium jusqu'au niveau atomique 5d.

Nous avons utilisé la polarisabilité dipolaire théorique égale à $5.354 a_0^3$ [112]. Les rayons de coupure que nous avons utilisé sont déterminés par S. Magnier dans la référence [93] présentés dans le tableau (2.9).

niveau atomique	r_c [ua] [93]
s	2.067
p	1.905
d	1.96
f	1.96

TAB. 2.9 – rayons de coupure du K

Niveau atomique	Energies expérimentales	Energies calculées	
	[131, 132]	[93]	notre calcul
4s	35010	35009	35009
4p	21986	21986	21986
5s	13983	13991	13991
3d	13475	13474	13474
5p	10296	10259	10259
4d	7613	7592	7592

TAB. 2.10 – Représentation de l'atome de potassium : Energies des premiers niveaux atomiques du K en cm^{-1}

Les résultats que nous obtenons sont identiques à ceux calculés par S. Magnier [93]. Ces valeurs permettent de reproduire le spectre expérimental du potassium tiré des Tables de Moore [131, 132], avec des écarts absolus inférieurs à 9 cm^{-1} pour les premiers niveaux atomiques, voir le tableau (2.10).

2.3.4 Rb

Pour décrire l'atome de rubidium, nous avons utilisé la base de fonctions gaussiennes $7s4p5d1f/6s4p4d1f$ déterminée par Ross et al. [139], étendue par Pavolini et al. [127] et utilisée par la suite par Foucraut [108]. Les paramètres sont reportés dans le tableau (2.11) Cette base nous permet de représenter le spectre atomique du

orbitales s		orbitales p		orbitales d		orbitales f	
exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient
1.292561	-0.065450	0.128	1.0	0.408807	0.0943	0.2	1.0
0.824992	0.037862	0.040097	1.0	0.096036	0.1846		
0.234682	1.0	0.014261	1.0	0.026807	1.0		
0.032072	1.0	0.004850	1.0	0.009551	1.0		
0.013962	1.0			0.004	1.0		
0.005750	1.0						
0.002500	1.0						

TAB. 2.11 – Base de fonctions gaussiennes du Rb

rubidium jusqu'au niveau atomique 7s.

Dans le tableau suivant (2.12), nous représentons les rayons de coupure utilisés par différents auteurs.

Dans le tableau 2.13, nous comparons les énergies des premiers niveaux atomiques

niveau atomique	$r_c[ua][108]$	$r_c[ua][103]$	$r_c[ua][105]$
s	2.53	2.513	2.5213
p	2.25	2.279	2.279
d	2.51	2.511	2.511
f	2.51	2.511	2.511

TAB. 2.12 – rayons de coupure du Rb

obtenus par différents auteurs, ainsi que notre calcul avec les valeurs expérimentales. Dans la référence [127], Pavolini et al. ont inclu des contributions cœur-valence (CV) dans un schéma de perturbation du second ordre, quasi-dégénéré (QDPT-CV) et non dégénéré (ND-CV). Leurs calculs sont présentés dans le tableau 2.13 pour comparaison.

Nous avons utilisé la polarisabilité dipolaire expérimentale égale à $9.245 a_0^3$ [133] utilisée par Foucraut [108], Rousseau et al. [103] et Allouche et al. [105], alors que Pavolini et al. [127] ont utilisé la valeur de $8.173 a_0^3$, valeur qui d'après eux représente mieux le potentiel d'ionisation de l'atome neutre. Une autre valeur théorique pour la polarisabilité dipolaire a été déterminée par Coker [140], elle est égale à $9.151 a_0^3$. Et nous avons utilisé les rayons de coupure optimisés par Allouche et al. [105].

Nos résultats sont identiques à ceux obtenus par Allouche et al. [105]. Ces valeurs nous permettent de reproduire le spectre expérimental du rubidium tiré des Tables de Moore [131, 132] avec exactitude pour les premiers niveaux atomiques et avec des écarts absolus inférieurs à 35 cm^{-1} pour les niveaux supérieurs.

Niveau atomique	Energies expérimentales	Energies calculées				
	[131, 132]	[108]	[127] QDPT-CV	[127] ND-CV	[105]	notre calcul
5s	33691	33673	33813	33681	33691	33691
5p	20954	20963	20861	20833	20954	20954
4d	14336	14337	14452	14214	14336	14336
6s	13557	13585	13655	13725	13590	13590
6p	9924	9895	9863	9891	9892	9892
5d	7989	7982	8015	8153	7982	7982

TAB. 2.13 – Représentation de l’atome de rubidium : Energies de liaison des premiers niveaux atomiques du Rb en cm^{-1} (les rayons de coupure sont donnés en ua)

2.3.5 Cs

Pour décrire l’atome de césium, nous avons utilisé la base de fonctions gaussiennes $6s4p5d1f/5s4p4d1f$ déterminée par Pavolini et al. [127] et utilisée aussi par Foucraut et al. [108], Korek et al. [104] et Allouche et al. [105]. Les paramètres sont reportés dans le tableau 2.14. Cette base nous permet de représenter le spectre atomique du césium jusqu’au niveau atomique 8s.

orbitales s		orbitales p		orbitales d		orbitales f	
exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient	exposant	coefficient
0.328926	0.411589	0.120000	1.0	0.196894	0.189650	0.10	1.0
0.241529	-0.682422	0.065	1.0	0.067471	0.22724		
0.050502	1.0	0.0162	1.0	0.027948	1.0		
0.029302	1.0	0.00443	1.0	0.010712	1.0		
0.013282	1.0			0.003	1.0		
0.005280							
0.003	1.0						

TAB. 2.14 – Base de fonctions gaussiennes du Cs

niveau atomique	$r_c[\text{ua}][108]$	$r_c[\text{ua}][105]$	$r_c[\text{ua}][104]$
s	2.69	2.6915	2.6910
p	1.85	1.8505	1.8505
d	2.81	2.8070	2.8070
f	2.81	2.8070	2.8070

TAB. 2.15 – rayons de coupure du Cs

Nous avons utilisé la polarisabilité dipolaire expérimentale égale à $15.117 a_0^3$ [133] utilisée par Foucraut et al. [108], Allouche et al. [105] et Korek et al. [104], alors

que Pavolini et al. [127] ont utilisé la valeur de $15.920 a_0^3$. Les rayons de coupure déterminés par Foucrault [108] ont été optimisés par Allouche et al. [105]. Korek et al. [104] ont ensuite ajusté le rayon de coupure du premier niveau.

Niveau atomique	Energies expérimentales	Energies calculées					
	[131, 132]	[127] QDPT-CV	[127] ND-CV	[108]	[105]	notre calcul $r_c[105]$	notre calcul $r_c[104]$
6s	31407	31585	31398	31409	31406	31406	31409
6p	19859	19690	19646	19859	19859	19859	19859
5d	16849	17413	17224	16858	16867	16867	16858
7s	12872	12921	13014	12870	12869	12870	12871
7p	9521	9379	9423	9452	9452	9452	9452
8s	7089	7058	7150	7052	7052	7052	7052

TAB. 2.16 – Représentation de l'atome de césium : Energies de liaison des premiers niveaux atomiques du Cs en cm^{-1}

Au vu des résultats listés dans le tableau 2.16, nous avons choisi d'utiliser pour le reste de nos calculs les rayons de coupure de Korek et al. [104] et la polarisabilité dipolaire de Wilson [133]. Ces valeurs permettent de reproduire le spectre expérimental du césium tiré des Tables de Moore [131, 132] avec des écarts absolus inférieurs à 9 cm^{-1} pour les premiers niveaux atomiques, et 70 cm^{-1} pour les derniers niveaux atomiques.

2.4 Effet des différents termes correctifs sur les courbes de potentiel

Nous avons pris l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ de l'ion $RbCs^+$ comme exemple et avons, dans la figure 2.3, représenté les différents termes correctifs ainsi que l'énergie électronique de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ de l'ion $RbCs^+$. A courte distance interatomique le terme d'attraction due à la dispersion 2.27 diverge, nous pouvons remarquer que le terme de répulsion calculé soit par Pavolini ou Jeung est plus répulsif à courte distance interatomique que le terme $1/R$.

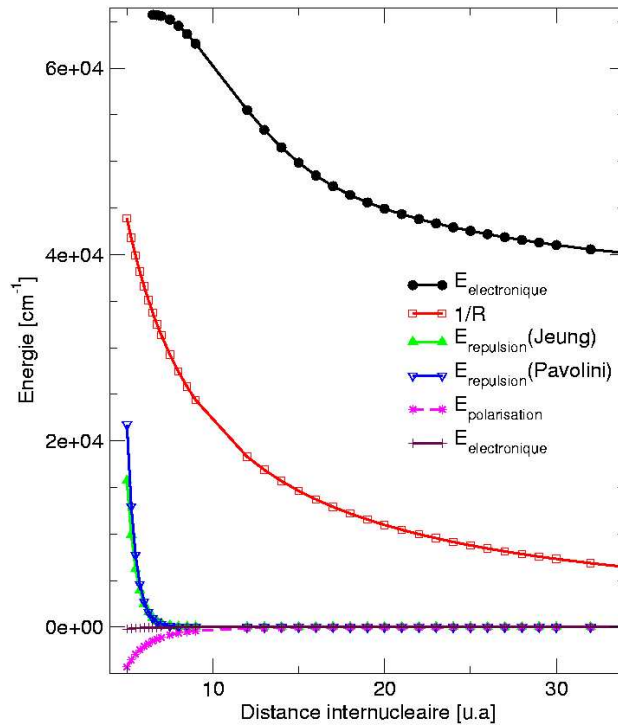


FIG. 2.3 – Schéma représentant les différentes contributions.

Nous avons essayé d'estimer l'apport des différents termes correctifs, pour cela nous avons divisé l'énergie électronique obtenue par les différents termes, le résultat est donné en pourcentage par rapport à l'énergie électronique. Nous l'avons reporté sur la figure 2.4.

Aux distances interatomiques 5, 10, 20 et 40 $u.a$:

- la correction $1/R$ 2.4 (a) représente respectivement 65%, 37%, 24% et 14% de l'énergie électronique calculée grâce au programme Hondo.
- la correction du terme de répulsion 2.4 (b) représente respectivement 23%, $5 \cdot 10^{-2}$ %, $6 \cdot 10^{-2}$ % et $6 \cdot 10^{-2}$ % de l'énergie électronique.
- la correction du terme de polarisation 2.4 (c) représente respectivement 7%, $5 \cdot 10^{-1}$ %, $5 \cdot 10^{-2}$ % et $5 \cdot 10^{-3}$ % de l'énergie électronique.
- la correction du terme d'attraction 2.4 (d) représente respectivement 0.4%, $7 \cdot 10^{-3}$ %, $2 \cdot 10^{-3}$ % et $6 \cdot 10^{-4}$ % de l'énergie électronique.

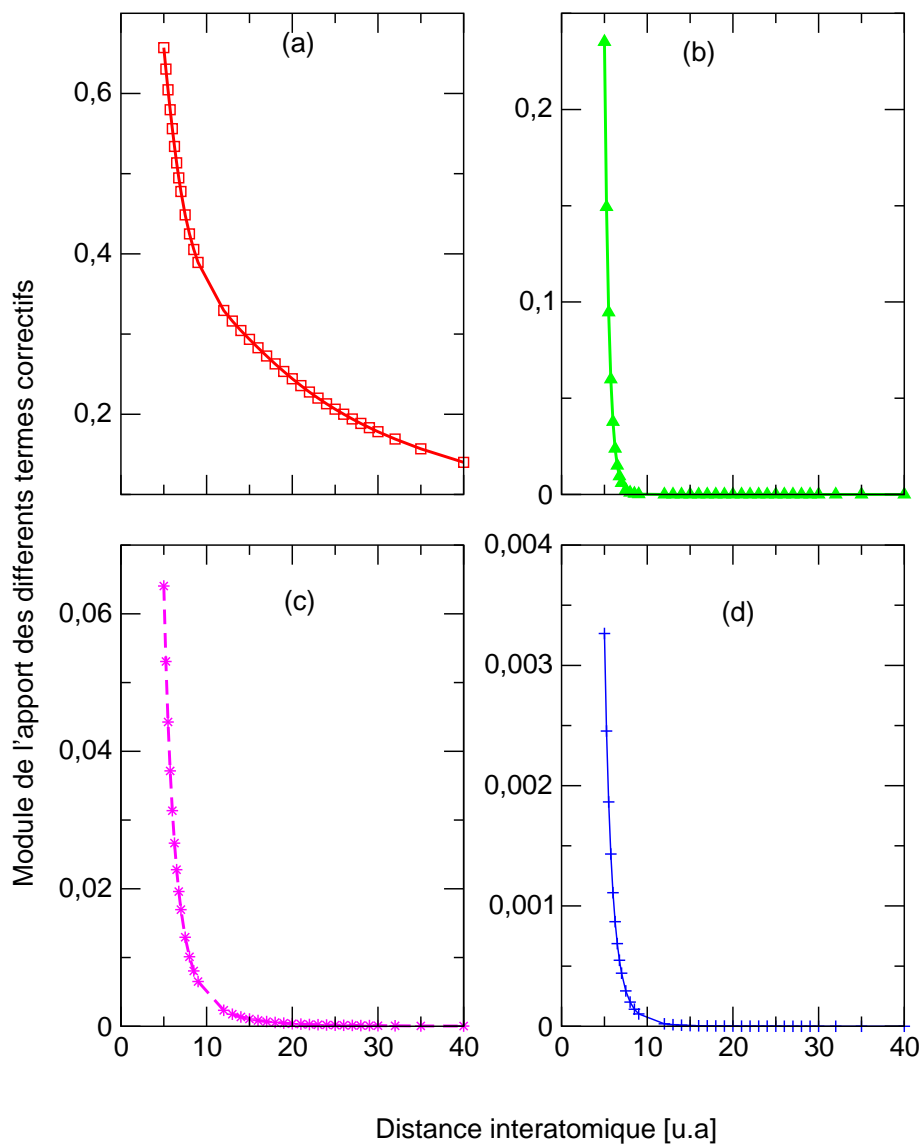


FIG. 2.4 – Schéma représentant le module des rapports des différentes contributions ((a) : terme $1/R$, (b) : terme de répulsion, (c) : terme de polarisation et (d) : terme d'attraction) et de l'énergie électronique en fonction de la distance interatomique.

Nous avons représenté sur la figure 2.5 les courbes de potentiel que nous obtenons lorsque nous rajoutons les différentes contributions.

Les corrections prises en compte sont respectivement pour les différentes courbes :

- courbe (1) le terme d’attraction dû à la dispersion.
- courbe (2) le terme de polarisation qui est inclus dans le potentiel effectif de cœur.
- courbes (3) et (4) le terme de répulsion cœur-cœur dû à l’effet de volume calculé respectivement par Jeung [125] courbe (3) et par Pavolini et al. [127] courbe (4).
- courbes (5) et (6) les trois termes : dispersion, polarisation et répulsion non coulombienne dans les modèles respectifs de Jeung (5) et Pavolini (6).

Important

Dans tout ce qui va suivre, nous prenons comme référence les résultats provenant des calculs des courbes (5) et (6).

Pour chacune de ces courbes de potentiel, nous avons déterminé :

- la distance à l’équilibre R_e
- l’énergie de dissociation D_e
- la constante de vibration à l’équilibre ω_e

Ces constantes sont présentées dans la table (2.17).

Les autres lignes présentent les valeurs publiées par d’autres auteurs ([141, 142, 143, 115, 144]). Nous pouvons remarquer :

- que la prise en compte des seuls termes énergie électronique plus répulsion coulombienne $1/R$ ne permet pas de reproduire avec précision le puits de potentiel de l’état fondamental. Cette courbe n’est donc pas représentée.
- L’addition du seul terme de dispersion représenté par l’équation (2.27), voir courbe (1) n’a que très peu d’influence sur la profondeur du puits qui est alors sous-estimée de 320 cm^{-1} . La distance d’équilibre R_e se trouve décalée de 0.2 u.a. (par rapport à la distance à l’équilibre calculée dans les courbes (5) et (6) que nous prenons comme référence). Cependant la forme du mur, à petite distance interatomique, est assez bonne puisqu’elle présente un aspect répulsif.
- Par contre l’addition du seul terme de polarisation (2.10) courbe (2) diminue fortement la profondeur du puits qui n’est sous-estimé que de 30 cm^{-1} , et R_e est décalée de 0.02 u.a.. Cependant la forme du mur, est mauvaise puisqu’elle présente un aspect attractif à courte distance interatomique.
- Courbes (3) et (4) : Si maintenant, on ajoute à l’énergie calculée et $1/R$, le terme de répulsion calculé respectivement par Jeung [125] et Pavolini et al. [127], la profondeur du puits est sous-estimée de 360 cm^{-1} , et la distance à l’équilibre est décalée de 0.2 u.a.. Cependant le mur présente un aspect répulsif à courte distance.
- Courbes (5) et (6). Nous décidons alors de mettre toutes les contributions : polarisation (2.10), dispersion (2.27) et répulsion calculée respectivement par Jeung [125] (courbe (5)) et Pavolini et al. [127] (courbe (6)). Le puits est très

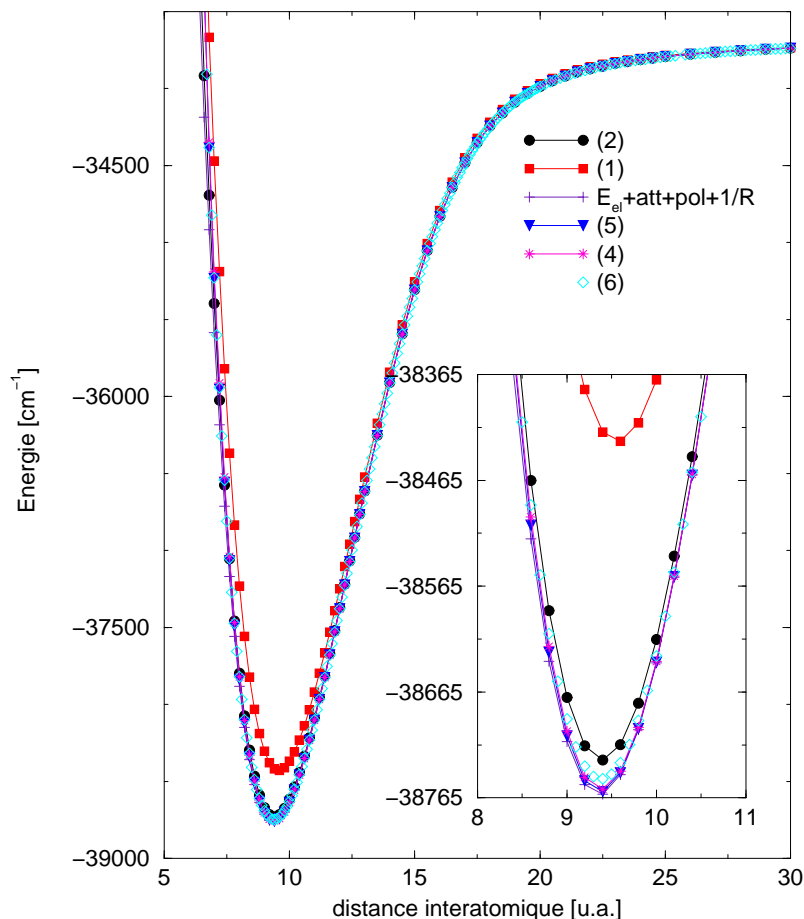


FIG. 2.5 – Effet des termes des termes correctifs sur l'énergie électronique de l'ion $RbCs^+$, (1) : correspond à l'énergie électronique plus le terme d'attraction, (2) : correspond à l'énergie électronique plus le terme de polarisation, (3) : correspond à l'énergie électronique plus le terme de répulsion calculé par Jeung [125], (4) : correspond à l'énergie électronique plus le terme de répulsion calculé par Pavolini et al. [127], (5) et (6) : correspondent à l'énergie électronique plus les trois termes (attraction, polarisation, et répulsion suivant Jeung pour (5) et suivant Pavolini et al. pour (6)). Le terme $1/R$ a été rajouté à toutes les courbes.

profond, et en particulier cela donne une forme répulsive correcte à petite distance.

Nous remarquons une grande disparité entre les valeurs théoriques calculées par différents auteurs [142, 143, 115]. Cependant, nos résultats sont en bon accord avec les résultats récents obtenus par le groupe de M. Aubert-Frécon [145]. Nous avons représenté dans la figure 2.6, le potentiel de l'état fondamental de l'ion $RbCs^+$. Un bon accord existe entre nos résultats et les leurs, seule la profondeur du puits est décalée de 17 cm^{-1} par rapport à notre calcul. Cette différence est due au terme de répulsion, nous n'avons pas utilisé la même expression pour le calculer.

Source	$D_e[cm^{-1}]$	$R_e[ua]$	$\omega_e(cm^{-1})$
(1)	4677.42	9.56	39.87
(2)	5000	9.38	40.68
(3)	4677.42	9.60	40.21
(4)	4677.42	9.60	40.05
(5)	5024	9.36	40.77
(6)	5024	9.36	40.76
Théorie Allouche et al. [145]	5041	9.4	
Théorie Patil et al. [115]	5761.55	9.1	
Théorie Valance [143]	3147.06	9.2	
Théorie Bellomonte et al. [142]	5648.58	8.73	
Théorie von Szentpály et al. [144]	4828.44	9.4	

TAB. 2.17 – Constantes spectroscopiques calculées de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ du dimère $RbCs^+$; (1) : correspond à l'énergie électronique plus le terme d'attraction plus $1/R$, (2) : correspond à l'énergie électronique plus le terme de polarisation plus $1/R$, (3) : correspond à l'énergie électronique plus le terme de répulsion calculé par Jeung [125] plus $1/R$, (4) : correspond à l'énergie électronique plus le terme de répulsion calculé par Pavolini et al. [127] plus $1/R$, (5) et (6) : correspondent à l'énergie électronique plus les trois termes (attraction, polarisation, et répulsion suivant Jeung pour (5) et suivant Pavolini et al. pour (6)) plus $1/R$.

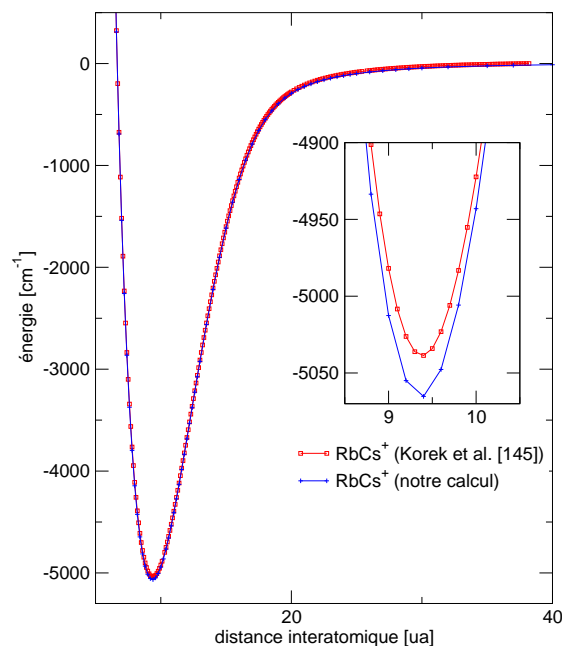


FIG. 2.6 – Schéma représentant le potentiel de l'état $(1)^2\Sigma^+$ de l'ion $RbCs^+$. (en carré : le potentiel calculé par Allouche et al. [145], en + : notre calcul)

Remarque

Notre choix de considérer tous les termes de répulsion cœur-cœur est guidé par les calculs que nous avons effectués sur les ions alcalins (paragraphes 2.5.3 et 2.5.4) et où l'accord avec les valeurs expérimentales est bon.

2.5 Etat moléculaire fondamental des ions moléculaires alcalins

Pour une distance internucléaire R fixée, les énergies électroniques des états Σ , Π , Δ et Φ sont obtenues à partir d'un calcul itératif self consistant (SCF) pour le système $(AB)^+$ dans la zone des distances internucléaires R allant de 5 à 100 u.a. avec pas de 0.2 u.a..

Ce calcul est initialisé à partir des orbitales moléculaires représentant une distance internucléaire infinie pour l'ion moléculaire $(AB)^+$. Ces orbitales sont construites à partir des orbitales atomiques déterminées, pour chaque cœur ionique, par la méthode de pseudopotentiel 2.1.2 et décrites sur une base de fonctions gaussiennes 2.1.3. et bien sûr les effets de polarisation sont inclus.

Comme nous l'avons mentionné dans le paragraphe précédent, nous avons calculés les énergies électroniques des ions moléculaires alcalins avec le programme SCF PSHONDO [101].

2.5.1 Courbes de potentiel de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ des ions moléculaires hétéronucléaires $(AB)^+$

Si maintenant, on compare entre eux les potentiels des ions hétéronucléaires, correspondants à l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$, voir figure (2.7), on peut remarquer trois catégories : la première est constituée par l'ion formée par les atomes les plus légers (Na et Li) $NaLi^+$, on remarque aussi que R_e a la valeur la plus faible et que le puits est très profond. La seconde catégorie est constituée par les ions formés par les atomes légers (Na ou Li) et lourds (K, Rb ou Cs). Leurs distances à l'équilibre sont plus grandes que celle de $NaLi^+$ les puits ont des profondeurs plus petites que celle de la première catégorie. La dernière catégorie est constituée par les ions formés des atomes lourds, ces ions ont des distances à l'équilibre très grandes et la profondeur de leurs puits est intermédiaire entre celles des deux premières catégories. Nous pensons que ceci est dû aux effets de polarisation et de pénétration des cœurs.

Nous avons représenté sur le graphe 2.8 les états $(1)^2\Sigma^+$ et $(2)^2\Sigma^+$ de l'ion moléculaire hétéronucléaire $(AB)^+$, et les états $(1)^2\Sigma_g^+$ et $(1)^2\Sigma_u^+$ des ions moléculaires homonucléaires correspondants A_2^+ et B_2^+ .

Si on compare les profondeurs des puits, nous pouvons remarquer que l'ion K_2^+ possède le puits le plus profond, alors que l'ion hétéronucléaire KRb^+ possède le puits le moins profond. On peut noter aussi que l'état $(2)^2\Sigma_g^+$ possède un petit puits de

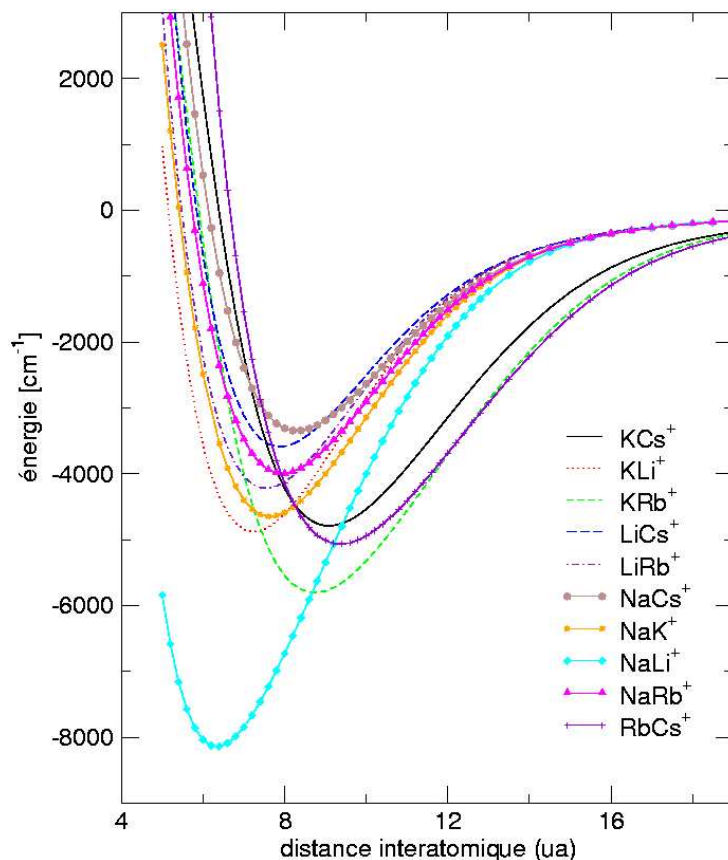


FIG. 2.7 – Courbes de potentiel des ions moléculaires hétéronucléaires correspondant à l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$

potentiel. Dans les sections suivantes, nous verrons les caractéristiques de ces courbes de potentiels.

2.5.2 Constantes spectroscopiques d'une courbe de potentiel électronique

L'information sur une courbe de potentiel est contenue dans la totalité de ses niveaux vibrationnels liés et des points tournants correspondants. Cette information peut-être présentée de manière synthétique par un ensemble de paramètres extraits de ces niveaux et appelés coefficients de Dunham à partir desquels on peut déduire les constantes spectroscopiques (notons que nous n'avons pas effectué le calcul des coefficients de Dunham) :

- R_e qui est la distance internucléaire d'équilibre,
- ω_e qui est la fréquence de vibration classique au fond du puits de potentiel,
- et D_e qui est la profondeur du puits de potentiel.

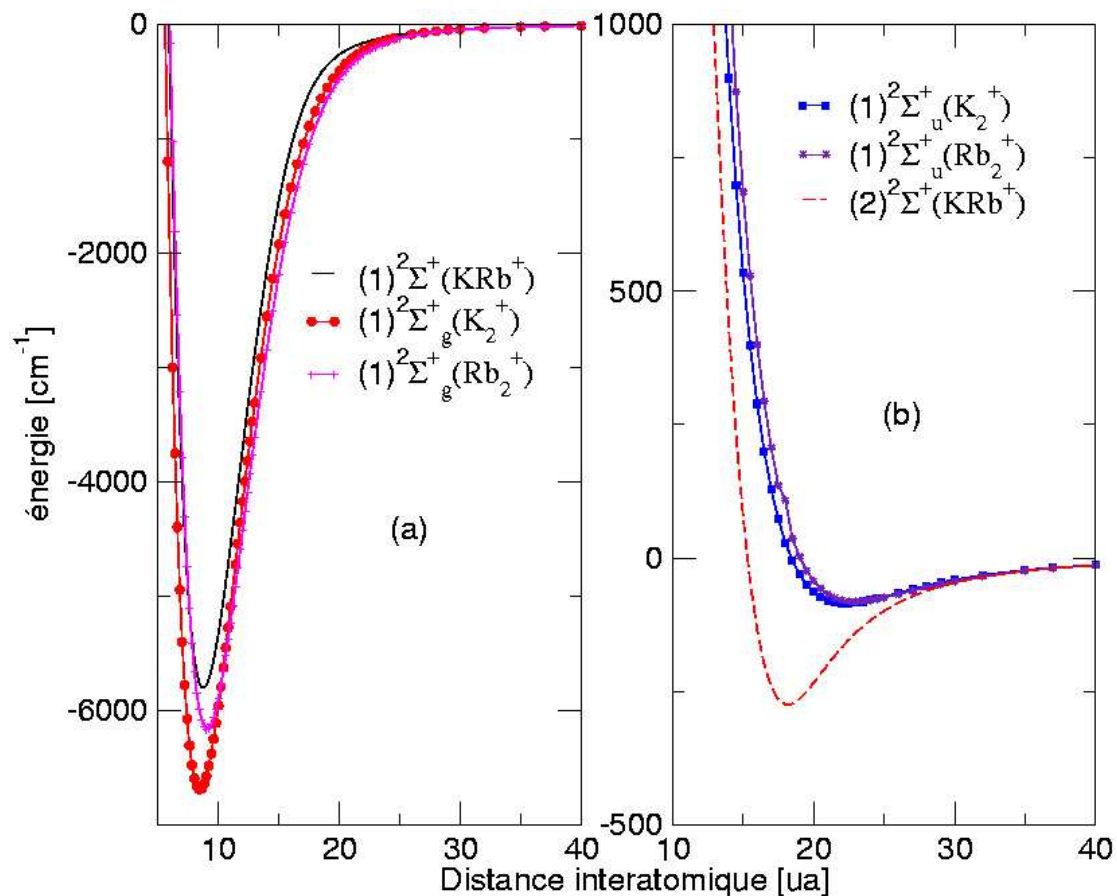


FIG. 2.8 – Courbes de potentiel adiabatiques de l'ion moléculaire KRb^+ dans (a) nous avons représenté les potentiels attractifs des états $(1)^2\Sigma^+$, et du premier état $(1)^2\Sigma_g^+$ des ions homonucléaires correspondants K_2^+ et Rb_2^+ et dans (b) nous avons représenté les potentiels répulsifs des états $(2)^2\Sigma_g^+$ et du premier état $(1)^2\Sigma_u^+$ des ions homonucléaires correspondants K_2^+ et Rb_2^+ .

Ces constantes ont été déterminées pour les états fondamentaux grâce à la méthode itérative de Numérov-Cooley. La profondeur du puits D_e et la distance interatomique au fond du puits R_e sont données par la courbe de potentiel. La fréquence de vibration ω_e est quant à elle déterminée par un fit parabolique du fond du puits de potentiel. Nous verrons dans les deux sections qui suivent qu'en général nous obtenons un très bon accord avec les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques publiées par d'autres groupes. Le désaccord peut provenir de la façon avec laquelle les effets cœur-cœur ont été appréhendés et de la diversité des méthodes utilisées pour calculer les énergies électroniques.

Nous avons regroupé les constantes spectroscopiques associées à l'état $(1)X^2\Sigma_g^+$ des ions moléculaires homonucléaires dans les tableaux (2.18-2.22) et à l'état $(1)^2\Sigma^+$ des ions moléculaires hétéronucléaires dans les tableaux (2.23-2.28).

Quand cela était possible, nous les avons comparés avec des données existantes (théoriques et/ou expérimentales).

Les résultats obtenus par A. Henriet [146] et S. Magnier [147] sont issus de calculs utilisant la même méthode de potentiel modèle que celle que nous avons utilisée pour les ions Rb_2^+ , Cs_2^+ et $RbCs^+$ [94].

Remarque

Nous avons utilisé la même méthode de pseudopotentiel pour calculer les énergies électroniques des ions moléculaires que le groupe de Lyon (M. Aubert-Frécon, A. R. Allouche et al.), mais eux ont utilisé un autre code [148] pour le calcul des constantes spectroscopiques. Les différences entre nos valeurs proviennent peut-être de là, cependant elles n'excèdent pas 1%.

2.5.3 Constantes spectroscopiques de l'état $(1)^2\Sigma_g^+$ des ions moléculaires A_2^+

Li_2^+

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	10483.87	5.84	262.5
Expérience Bernheim et al. [149]	10403.22		262.2
Expérience McGeoch et al. [150]	10806.45	5.72	263.5
Expérience Mathew et al. [151]	10248.13		
Théorie Müller et al. [112]	10403.22	5.85	265.5
Théorie Schmidt-Mink et al. [135]	10403.22	5.85	263.7
Théorie Konowalow et al. [152]	10322.58	5.89	
Théorie Fuentealba et al. [153]	10483.87	5.83	268.0
Théorie Henriet et al. [146]	10322.58	5.82	283.0
Théorie Magnier et al. [147]	10403.22	5.89	263.0
Théorie Patil et al. [115]	7867.66	6.4	

TAB. 2.18 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)X^2\Sigma_g^+$ du dimère Li_2^+

Nous sommes parvenus à un bon accord avec les données spectroscopiques du groupe expérimental de Bernheim ([149]). De plus, nous obtenons des résultats proches de ceux des méthodes théoriques *ab initio* [112] et [135]. L'ion moléculaire Li_2^+ se trouve ainsi, sauf pour la position d'équilibre de l'état fondamental, aussi bien représenté par la méthode de pseudopotentiel que par la méthode de potentiel modèle [147]. On note aussi une divergence sur la constante ω_e qui augmente surtout dans le calcul d'Henriet et al. [146] qui a utilisé la méthode de potentiel modèle, mais S. Magnier [93] qui a amélioré la précision des résultats d'Henriet en utilisant la même méthode a trouvé des résultats comparables aux nôtres.

Na_2^+

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	7903.22	6.78	120.4
Expérience Bordas et al. [154]	7975±2	6.80	120.8
Expérience Martin et al. [155]			120.8
Expérience Carlson et al. [156]	7940.29	6.80	
Théorie Müller et al. [112]	7959.68	6.80	120.7
Théorie [153]	7983.87	6.78	119.0
Théorie [157]	7903.22		120.6
Théorie Bähring et al. [158]	7983.87	6.79	121.0
Théorie Henriët et al. [107]	7951.61	6.80	124.0
Théorie Magnier et al. [93]	7973.31	6.74	120.0
Théorie Almazor et al. [159]	7976.9	6.73	120.5
Théorie Patil et al. [115]	7730.48	6.8	

TAB. 2.19 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)X^2\Sigma_g^+$ du dimère Na_2^+

L'accord est bon avec toutes les données dont nous disposons, qu'elles soient expérimentales ou théoriques. L'ion moléculaire Na_2^+ est très bien représenté par la méthode de pseudopotentiel que nous utilisons, ainsi que par la méthode potentiel modèle [93] et [159], sauf pour la position d'équilibre de l'état fondamental, on note un léger décalage par rapport à la valeur que nous obtenons qui est plus faible de 1 % que la nôtre (remarque déjà constatée par S. Magnier dans la référence [93]). Nos résultats sont comparables aux valeurs expérimentales.

 K_2^+

Les résultats obtenus pour l'ion moléculaire K_2^+ sont présentés dans la table (2.20). L'énergie de dissociation que nous calculons est surévaluée de 22 cm^{-1} par rapport aux données expérimentales du groupe de Broyer [161] et du travail expérimental récent de Stwalley [162]. Pour la position d'équilibre, la valeur que nous trouvons est surévaluée de 0.13 u.a. par rapport à la valeur mesurée par le groupe de Broyer [161]. L'accord est moins bon avec les données spectroscopiques expérimentales du groupe de Leutwyler [160], mais les travaux sont assez anciens. Comme le montrent les valeurs du tableau (2.20), le meilleur accord est trouvé avec le travail le plus récent qui est celui de Magnier et al. [117] qui ont utilisé la méthode de potentiel modèle que nous avons décrite dans le paragraphe 2.1.1, cependant la valeur de R_e que nous calculons est supérieur de 0.14 u.a.

 Rb_2^+

Ces calculs ont été réalisés par Jraj et al. [164]. A titre de vérification, nous les avons refait et nous retrouvons les mêmes valeurs.

Source	$D_e [cm^{-1}]$	$R_e [ua]$	$\omega_e (cm^{-1})$
Notre calcul	6692	8.44	73.55
Expérience Leutwyler et al. [160]	6444	8.31	72.50
Expérience Broyer et al. [161]	6670	8.31	73.40
Expérience Stwalley et al. [162]	6669.90±0.5		
Théorie Müller et al. [112]	6589	8.53	73.70
Théorie Fuentealba et al. [153]	6939.68	8.30	72.40
Théorie Henriët et al. [146]	6690	8.47	73.70
Théorie Ilyabaev et al. [163]	6460	8.39	75.00
Théorie Magnier et al. [129]	6638	8.48	72.00
Théorie Magnier et al. [117]	6685.	8.30	73.20
Théorie Patil et al. [115]	7125.28	8.30	

TAB. 2.20 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)X^2\Sigma_g^+$ du dimère K_2^+ .

Source	$D_e [cm^{-1}]$	$R_e [ua]$	$\omega_e (cm^{-1})$
Notre calcul	6129.03	9.04	45.9
Expérience Beckel et al. [165]	5887.09		
Théorie Silberbach et al. [166]	6374.82	9.10	44.5
Théorie von Szentpály et al. [144]	6129.03	9.03	47.0
Théorie Jraj et al. [164]	6167	9.06	45.9
Théorie Patil et al. [115]	6980.03	8.7	

TAB. 2.21 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)X^2\Sigma_g^+$ du dimère Rb_2^+ .

Le seul travail expérimental concernant l'ion moléculaire Rb_2^+ , à notre connaissance, a donné une valeur de D_e beaucoup plus petite que celle que nous avons calculée (table 2.21). Nous obtenons un bon accord avec les valeurs théoriques obtenues par [144] alors que l'accord est moins bon avec les valeurs théoriques de [166].

Cs_2^+

L'ion moléculaire Cs_2^+ a fait l'objet de quelques études expérimentales et théoriques (voir table 2.22), et les valeurs que nous obtenons ne sont pas en très bon accord avec les résultats obtenus par les autres groupes. Cependant, nous obtenons un excellent accord avec les valeurs calculées par l'équipe d'A. R. Allouche [167]. Notons cependant l'importante dispersion entre les différents résultats théoriques. Si nous comparons la valeur de la fréquence harmonique au fond du puits, ω_e , calculée pour cet état (35.2 cm^{-1}) avec celle calculée pour l'état $(1)^1\Sigma_u^+$ du dimère neutre (33.7 cm^{-1}), pouvons noter qu'elles sont très voisines.

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	5967.74	9.72	35.2
Expérience Marr et al. [168]	4919.35	8.39	
Expérience Huber et al. [169]	5483.87		
Théorie Silberbach et al. [166]	6290.32	10.12	32.4
Théorie von Szentpály et al. [144]	5645.16	9.88	47.0
Théorie Moullet et al. [170]	6052.05	8.5	36.0
Théorie Patil et al. [115]	6697.60	9.5	
Théorie Oldenburg et al. [171]	5161.29	9.31	34.0
Théorie Jraj et al. [167]	5970	9.73	35.2

TAB. 2.22 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)X^2\Sigma_g^+$ du dimère Cs_2^+ .

Dans cette section, nous avons calculé les constantes spectroscopiques relatives à l'état fondamental $(1)X^2\Sigma_g^+$ de tous les ions homonucléaires alcalins, avec la même méthode. Nous avons comparé nos résultats avec des résultats expérimentaux et théoriques, l'accord est en général satisfaisant.

2.5.4 Constantes spectroscopiques de l'état $(1)^2\Sigma^+$ des ions moléculaires $(AB)^+$

NaLi⁺

Pour ce qui est de l'ion moléculaire *NaLi*⁺ (table 2.23), l'accord obtenu entre les données spectroscopiques expérimentales ([169]) et théoriques ([112], [144] et [116]) est excellent. Seules les valeurs obtenues par Bertoncini et al. [172] sont très différentes des nôtres, mais il s'agit d'un travail assez ancien que nous avons cité à titre indicatif.

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	8064.51	6.34	192.6
Expérience Huber et al. [169]	7983.87		
Théorie Müller et al. [112]	7504.54	6.37	193.0
Théorie Bertoncini et al. [172]	7338.70	6.50	186.6
Théorie von Szentpály et al. [144]	8145.16	6.33	190.0
Théorie Magnier et al. [116]	7983.87	6.34	192.0
Théorie Patil et al. [115]	6818.64	6.64	

TAB. 2.23 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ du dimère *NaLi*⁺

KLi⁺

A notre connaissance, aucun travail expérimental n'a été effectué sur l'ion moléculaire *KLi*⁺ (voir table 2.24), et la comparaison avec les seuls travaux théoriques existants, montre un assez bon accord pour ce qui concerne les constantes D_e et ω_e , alors que la position à l'équilibre est plus petite dans notre calcul.

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	4838.70	7.24	153.4
Théorie Müller et al. [112]	4809.36	7.34	154.1
Théorie von Szentpály et al. [144]	4838.70	7.25	156.0
Théorie Patil et al. [115]	3929.80	7.4	

TAB. 2.24 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ du dimère *KLi*⁺

NaK⁺

Pour l'ion moléculaire *NaK*⁺ (table 2.25), la comparaison avec l'expérience montre un bon accord pour D_e qui est la seule donnée disponible. La valeur que nous obtenons pour la constante ω_e est supérieure aux résultats théoriques de ([112] et [144]). La constante R_e que nous avons obtenue reste toujours plus faible que celles des autres auteurs.

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	4596.77	7.64	92.7
Expérience Leutwyler et al. [173]	4645.16		
Théorie Müller et al. [112]	4599.56	7.71	91.9
Théorie von Szentpály et al. [144]	4596.77	7.67	91.0
Théorie Patil et al. [115]	4607.63	7.6	

TAB. 2.25 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ du dimère *NaK*⁺

KRb⁺ et *KCs*⁺

Les calculs sur les ions moléculaires *KCs*⁺ et *KRb*⁺ (tables 2.27 et 2.26 respectivement) ont été effectués par le groupe de M. Aubert-Frécon ([174] et [175]), qui utilise la même méthode de pseudopotentiel que nous et donc le même code de calcul. Les résultats que nous obtenons pour ω_e et R_e sont sensiblement différents des leurs, nos valeurs sont inférieures aux leurs. Patil et al. [115] qui utilisent une autre méthode de potentiel modèle, trouvent des valeurs pour R_e légèrement plus petites que les nôtres, alors que les valeurs de D_e sont supérieures aux nôtres.

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	5725.80	8.74	60.5
Théorie Korek et al. [175]		8.923	67.5
Théorie Patil et al. [115]	6407.10	8.5	

TAB. 2.26 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ du dimère KRb^+

Source	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Notre calcul	4758.06	9.080	54.7
Théorie Korek et al. [174]		9.131	55.5
Théorie Patil et al. [115]	5253.18	8.9	

TAB. 2.27 – constantes spectroscopiques de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ du dimère KCs^+

$LiRb^+$, $LiCs^+$, $NaRb^+$ et $NaCs^+$

Pour les ions moléculaires suivants : $LiRb^+$, $LiCs^+$, $NaRb^+$ et $NaCs^+$, nous ne possédons que les valeurs calculées par Patil et al. [115] avec une méthode de potentiel modèle. Nous avons regroupé nos résultats dans un même tableau (2.28).

Ion	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})	D_e [cm^{-1}] [115]	R_e [ua] [115]
$LiRb^+$	4193.54	7.54	139.65	3437.56	7.6
$LiCs^+$	3548.38	7.88	128.97	2662.90	8.0
$NaRb^+$	3629.03	7.94	77.75	4066.98	7.8
$NaCs^+$	4354.83	8.30	69.86	3211.62	8.2

TAB. 2.28 – constantes spectroscopiques calculées de l'état fondamental $(1)^2\Sigma^+$ pour les dimères hétéronucléaires

Conclusion

Nous avons dans les deux sections précédentes, effectué une étude spectroscopique systématique de l'état fondamental des ions moléculaires alcalins homo et hétéronucléaires. Ils se trouvent décrits avec une bonne précision. Nous retrouvons des distances d'équilibre R_e et des énergies de dissociation D_e dans l'ensemble comparables aux valeurs expérimentales et aux valeurs théoriques.

La méthode de pseudopotentiel se trouve aussi bien adaptée à la description des dimères d'ions moléculaires d'alcalins composés d'un gros cœur qu'à la représentation de ceux constitués d'un petit cœur, conclusion à laquelle avait aussi abouti S. Magnier dans sa thèse [93].

2.5.5 Article : Model-potential calculations for ground and excited Σ states of Rb_2^+ , Cs_2^+ and $RbCs^+$ ions

Dans la section 2.1, nous avons présenté les deux principales méthodes de calcul des courbes de potentiels, et dans les paragraphes précédents, nous avons calculé ces courbes pour tous les ions moléculaires alcalins avec la méthode des pseudopotentiels [120].

Dans la suite du travail initié par S. Magnier [93], qui avait effectué une comparaison entre les deux méthodes sur l'ion Na_2^+ , nous avons voulu, à notre tour, effectuer la comparaison des deux méthodes sur des ions plus lourds, nous avons donc calculé les courbes de potentiel des états Σ du fondamental et excités des ions moléculaires Rb_2^+ , Cs_2^+ et $RbCs^+$ avec la méthode de potentiel modèle.

Ce travail a fait l'objet d'une publication dans *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*. L'article figure à la fin de cette section. Nous y rappelons les principes des deux méthodes (paragraphes 2 et 3). Les résultats obtenus ainsi que la comparaison entre les deux méthodes sont décrits en détail dans le paragraphe 4. Un très bon accord entre les résultats obtenus avec les deux méthodes est obtenu sauf pour les courbes associées avec une asymptote mettant en jeu le niveau $5s$ du césium. Pour améliorer ces résultats, il faudrait utiliser un potentiel dépendant du moment orbital l de l'électron au lieu de l'équation 2.2.

Model-potential calculations for ground and excited Σ states of Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ ions

M Aymar, S Azizi and O Dulieu

Laboratoire Aimé Cotton, CNRS II, Bâtiment 505, 91405 Orsay Cedex, France

Received 18 July 2003

Published 21 November 2003

Online at stacks.iop.org/JPhysB/36/4799

Abstract

A model-potential approach successfully employed in the past for describing potential curves of light alkali dimers is extended to calculate potential curves of Σ symmetry for the heavy molecular ions Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ . The results are in agreement with those calculated using a pseudopotential method, except for the $\text{Cs}^+ + \text{Cs}(5d)$ dissociation limit. The limits of the present model-potential calculations and the ways of improving them are carefully analysed.

(Some figures in this article are in colour only in the electronic version)

1. Introduction

Due to spectacular development of the cooling and trapping of alkali atoms, the spectroscopy of alkali dimers has received considerable attention during the last twenty years, with a recent interest in the photoassociative (PA) spectroscopy of cold alkali atoms (Stwalley and Wang 1999), and more recently for cold molecule formation (Bahns *et al* 2000, Dulieu and Masnou-Seeuws 2003). In PA experiments, a pair of ultracold atoms absorbs a photon detuned from the atomic transition, to form an excited molecule generally in a high-lying vibrational level. Such molecules sometimes stabilize themselves by spontaneous emission to form long-lived ultracold molecules. Ultracold PA experiments have been mainly achieved for homonuclear alkali dimers from Li_2 to Cs_2 . PA of dimers involving different alkali atoms (Wang and Stwalley 1998) is not yet achieved, except for a first indication where NaCs^+ ions have been detected in a mixed Na/Cs cold atom trap (Shaffer *et al* 1999).

The detection of molecular ions resulting from the autoionization of ultracold photoassociated molecules (Lett *et al* 1993, Blangé *et al* 1997) or from two-photon resonant ionization of stable ultracold molecules (Fioretti *et al* 1998, Nikolov *et al* 1999, Gabbanini *et al* 2000) is a powerful tool for the investigation of PA and cold molecule formation processes. Alkali dimer cations are also prototype systems for many studies and the database 'DiRef' (Bernath and McLeod 2001) can help the interested reader with an extensive bibliographic overview. Among these papers, we can quote, for example, the theoretical investigation of Rabi oscillations between molecular dissociative states (Magnier *et al* 1999a) or collision studies at kiloelectronvolt energies (Fayetou *et al* 1998).

These activities have stimulated theoretical developments for computing adiabatic potential curves and transition moments for all internuclear distances. Most calculations have been carried out in the framework of effective potential methods, which are well known to be efficient tools for calculating the structure and properties of alkali atoms with a single valence electron in the field of a closed-shell core. Two main categories of effective potentials are identified: model potentials are attractive at short electronic distances r and their first eigenstates correspond to core orbitals. In contrast, pseudopotentials are repulsive at short distances and thus support valence orbitals without a node in the core region.

Our goal in the present paper is to compute adiabatic potential curves for the heavy homonuclear alkali ions Rb_2^+ and Cs_2^+ , and for the heteronuclear ion RbCs^+ , using the model potential approach previously used to model some homonuclear dimer cations (Bottcher and Dalgarno 1974, Nemukhin and Stepanov 1979, Patil and Tang 2000). Most molecular calculations used the Klapisch model potential (1969). They concern neutral molecules like Na_2 (Henriet-Scavennec 1983, Magnier 1993, Magnier *et al* 1993), Li_2 and K_2 (Henriet *et al* 1984) and their cations (Henriet 1985, Henriet and Masnou-Seeuws 1983, Magnier and Masnou-Seeuws 1996, Magnier *et al* 1999b). It is worthwhile noting that the Klapisch model potential has been efficient in calculating multiphoton ionization cross sections of the heavy alkali atoms K and Cs (Aymar and Crance 1981, 1982). Klapisch model potentials have been used to describe the heavy alkaline-earth ions, allowing the study of complicated spectra of heavy alkaline-earth atoms using an approach combining multichannel quantum defect theory and the R -matrix method. In this approach, the accuracy of the results for neutral atoms critically depends on the quality of the description of alkaline-earth ions (Aymar *et al* 1996).

We will prove that the method developed for light dimers can be used for molecular calculations involving heavier alkali atoms. We will check how model potential calculations can compete with pseudopotential calculations, following a similar study carried out for Na_2 by Magnier *et al* (1993). The extension to heavier dimers raises some problems: first, the wavefunctions of the lowest nd states of the atoms are known to be very sensitive to electron–core interactions; second, the spin–orbit coupling becomes large and this issue will be addressed in a forthcoming paper. Furthermore, in the present formulation with model potential, calculations for dimers are performed by configuration interaction techniques using antisymmetrized products of molecular ionic orbitals. The accuracy of energies for neutral species is expected to critically depend on that of the ions and they will be checked against pseudopotential calculations for Σ electronic states.

Some molecular calculations for the ions of interest here have been previously performed by different authors. Nemukhin and Stepanov (1979) and Patil and Tang (2000) used model potentials. Hellman-type pseudopotentials have been used by Valance (1978) and Bellomonte *et al* (1974) while more complicated pseudopotentials, including eventually spin–orbit and core polarization effects, were used by Silberbach *et al* (1986), von Szenpály (1982), von Szenpály *et al* (1982), Johann *et al* (1996), Korek and Allouche (2001). Potential curves are available in several papers (Valance 1978, Helm *et al* 1983, Nemukhin and Stepanov 1979, Silberbach *et al* 1986, von Szenpály *et al* 1982, Moullet *et al* 1989, Johann *et al* 1996, Korek and Allouche 2001). The Cs_2^+ ground state potential curve is also displayed by Spies (1989). Except in the paper of Korek and Allouche (2001), potential curves concern only the ground and low-lying states. Most of the above-quoted papers also display tables of spectroscopic constants. Atomic units are used throughout the paper except for energies, also given sometimes in cm^{-1} .

2. Model potential calculations

Our computations using the Klapisch model potential follow previous work carried out for light alkali dimers (Henriet-Scavennec 1983, Henriet *et al* 1984, Magnier 1993, Magnier

et al 1993) and their cations (Henriet 1985, Henriet and Masnou-Seeuws 1983, Magnier and Masnou-Seeuws 1996, Magnier *et al* 1999b). We recall the main steps here.

The molecular ion A_2^+ is modelled by one active electron moving in the field of two alkali ions A^+ and B^+ at a distance R . The electronic wavefunction $\Psi(r_A, r_B, R)$ is a solution of the Schrödinger equation:

$$[T + V(r_A) + V(r_B) + V_{\text{cc}}(R) + V_{\text{pol}}(r_A, r_B, R)]\Psi(r_A, r_B, R) = E(R)\Psi(r_A, r_B, R) \quad (1)$$

where T is the kinetic energy operator and r_A and r_B are the distances of the electron relative to the two cores. The interaction of the electron with each ionic core is described by the model potential $V(r)$ (Klapisch 1969), independent of the orbital angular momentum of the electron:

$$V(r) = -\frac{1 + (Z - 1)\exp(-b_1r) + b_2r\exp(-b_3r)}{r}. \quad (2)$$

In this expression, Z is the nuclear charge and b_i are empirical parameters fitted to known spin-orbit averaged energies of valence states of the alkali atoms. $V(r)$ is attractive at short r and supports eigenvalues corresponding to the valence and core electrons. However, the wavefunctions associated with core states are orthogonal to those describing valence states. The polarization of the core induced by the valence electron is often introduced by adding to $V(r)$ a term $V_{\text{pol}}^{(0)}$, depending on the dipole polarizability α_d of the ion:

$$V_{\text{pol}}^{(0)} = -\alpha_d/2r^4 f(r/r_c) \quad (3)$$

where $f(r/r_c)$ is a cut-off function necessary to avoid divergence at short distances r . However, this term has not been introduced explicitly here, as core polarization effects are expected to be taken into account in an effective way during the optimization procedure of $V(r)$ (Henriet-Scavennec 1983, Henriet 1985).

Neglecting overlap and exchange effects, the core-core interaction is written as

$$V_{\text{cc}}(R) = \frac{1}{R} - \frac{\alpha_d^A + \alpha_d^B}{2R^4} - \frac{\alpha_q^A + \alpha_q^B}{2R^6} \quad (4)$$

where α_d and α_q are, respectively, the dipole and quadrupole polarizabilities of the A^+ and B^+ ions. A core-core interaction repulsive at short distances could be introduced using, for instance, the formulation of Pavolini *et al* (1989) or Jeung (1997). For the purpose of comparison of our results with pseudopotential calculations described in the next section, this term is not necessary. The validity range of the present results is then restricted to interatomic distances larger than 5 au.

In the literature, various formulations have been used to account for three-body core polarization effects. Our formulation follows that of Bottcher and Dalgarno (1974), while other possibilities are proposed by Johann *et al* (1996) or by Patil and Tang (2000). Following Bottcher and Dalgarno (1974) the dipole and quadrupole interactions are expressed as

$$\begin{aligned} V_{\text{pol}}^d(r_A, r_B, R) &= \frac{\alpha_d^A P_1(\cos\theta_A)[f_6(\frac{r_A}{r_c})]}{r_A^2 R^2} + \frac{\alpha_d^B P_1(\cos\theta_B)[f_6(\frac{r_B}{r_c})]}{r_B^2 R^2} \\ V_{\text{pol}}^q(r_A, r_B, R) &= \frac{\alpha_q^A P_2(\cos\theta_A)[f_8(\frac{r_A}{r_c})]}{r_A^3 R^3} + \frac{\alpha_q^B P_2(\cos\theta_B)[f_8(\frac{r_B}{r_c})]}{r_B^3 R^3}. \end{aligned} \quad (5)$$

In equations (5), θ_A and θ_B are the angles between the two vectors \vec{r}_A and \vec{r}_B and the internuclear axis, P_1 and P_2 are Legendre polynomials of first and second order and $f_n(x) = \sqrt{1 - \exp[-x^n]}$ is a cut-off function depending on a cut-off radius r_c necessary to avoid divergence at short distances r_A and r_B . The choice of the value for r_c will be addressed later.

Table 1. Semiempirical parameters describing the model potential and dipole and quadrupole polarizabilities of the A^+ ions (in au).

	b_1	b_2	b_3	α_d	α_q	r_c
Rb	3.3319	6.4068	1.1379	9.245	35.41	3
Cs	2.9921	2.9029	0.6401	15.17	86.40	3

Under these conditions, the solution Ψ_{Λ_p} of the Schrödinger equation for a given molecular symmetry Λ (with parity $p = g, u$ for the homonuclear systems) is expanded in terms of generalized Slater orbitals in prolate spheroidal coordinates ($\lambda = (r_A + r_B)/R$ varying from 1 to ∞ , $\mu = (r_A - r_B)/R$ varying from -1 to $+1$ and ϕ varying from 0 to 2π) on both centres, depending on the projection $m = \pm\Lambda$ of the orbital momentum on the internuclear axis:

$$\Psi_{\Lambda_p} = \sum_{k=1}^{n_c} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^{N_k} c_{ij} [f_i^{j,k}(\lambda, \mu, \phi)]. \quad (6)$$

In equation (6), n_c is the number of couples of coefficients (α_k, n_k) , where α_k corresponds to the Slater exponent, n_k is an integer number, $i = 1$ for centre A^+ and $i = 2$ for centre B^+ and $N_k = (n_k - m)^2$. For a given symmetry Λ , we define for each couple (α_k, n_k) a set of $N_k R$ -dependent basis functions $f_i^{j,k}$ by

$$f_i^{j,k}(\lambda, \mu, \phi) = [(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)]^{|m|/2} \lambda^{p_j} \mu^{q_j} \exp[-\alpha_k R(\lambda + \epsilon_i \mu)/2] \exp(im\phi) \quad (7)$$

with $\epsilon_1 = +1$ and $\epsilon_2 = -1$ and the exponents p_j and q_j varying from 0 to $n_k - m - 1$. Note that, among the couples of coefficients (α_k, n_k) , some of them describe the core electrons.

The electronic energies of the molecular ions are determined by solving the generalized eigensystem with eigenvalue E and eigenvector X :

$$HX = E\Omega X \quad (8)$$

using the procedure detailed by Magnier (1993). Ω is the overlap matrix which accounts for the non-orthogonality of the Slater basis.

For the numerical calculations performed in the present work, the parameters b_i of the Klapisch potential, displayed in table 1, are fitted on known spin-orbit averaged energies of the valence states of the alkali atoms, with s, p, d, f and g symmetries (Moore 1952, 1958). More precisely, for Rb, 25 energy levels from 5s to 10d were reproduced with a rms deviation of 7.3×10^{-5} au (16 cm^{-1}) and 28 energy levels of Cs from 6s to 11d were adjusted with a rms deviation of 1.7×10^{-4} au (37 cm^{-1}). We use the experimental values for dipole polarizabilities (Coker 1976), and theoretical values for quadrupole polarizabilities (Johnson *et al* 1983), due to the lack of experimental data (table 1).

The use of empirical effective polarization potentials sets up the unavoidable problem of the choice of the cut-off radius (equation (5)). In previous calculations using a Klapisch model potential (Klapisch 1969) for light alkali dimer cations, the cut-off radius has been fitted to the experimental value of the well depth of the ground state of the molecular ion. However, the use of molecular data to fit an atomic parameter is not very satisfactory. Weisheit (1973) has studied the photoabsorption by ground levels of alkali atoms using spin-orbit and polarization potentials. A cut-off parameter r_c adjusted to various observables allowed the author to reproduce many observables sensitive to the spin-orbit interaction. However, the cut-off radius critically depends on the exact form of both the polarization potential and the cut-off function and thus it was not possible to use Weisheit's values. So we have chosen the arbitrary value $r_c = 3$ au. This value corresponds to the magnitude of the atomic core

Table 2. Basis set of generalized Slater functions for $m = 0$, used for Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ ions.

α_k	$n_k - 1$
19.8	2
11.5	2
10.0	2
8.2	2
3.4	4
2.28	4
1.0	5
0.55	6
0.43	5
0.35	6
0.27	6
0.25	6
0.20	6
0.17	5
0.15	4
0.13	4
0.11	5
0.09	5

extension or, in other words, to the magnitude of the distance where the two cores interact very strongly due to their mutual overlap. The basis set is optimized with this fixed value.

The optimization of the basis is performed by computing atomic energies in prolate spheroidal coordinates, with a single charged centre and with $r_c = 3$ au. Spurious energy values occur in solving equation (8) when the basis set is too large. Thus, the Rb basis was found superior to various bases specific to Cs to describe Cs and, after some experimentation, a unique set of 770 basis functions involving 18 couples of $(\alpha_k, n_k - 1)$ values is selected to calculate the potential curves of Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ ions (table 2). The precision of the atomic calculations in prolate spheroidal coordinates is very similar to that in spherical coordinates, even yielding accurate energies for h , i and j states which were not introduced in the fitting optimization of $V(r)$. We have also checked that the atomic energies of Rb and Cs are almost independent of R during this optimization stage, apart from the nd states whose energies slightly depend on R .

3. Approach based on pseudopotentials

A great deal of calculations have been conducted for homonuclear and heteronuclear dimers using theoretical methods developed by quantum chemistry theorists. Various packages based on the HONDO program developed by the Laboratoire de Physique Quantique de Toulouse (France) have been used to treat the heavy dimers Rb_2 (Foucrault *et al* 1992, Spiegelmann *et al* 1989), Cs_2 (Foucrault *et al* 1992) and RbCs (Pavolini *et al* 1989, Allouche *et al* 2000, Fahs *et al* 2002). We follow the same procedure, and, as these approaches are well documented, we only mention the main differences of these calculations with respect to those performed with our model-potential calculations.

First, calculations performed using quantum chemistry methods employed Gaussian basis sets of the orbital instead of generalized Slater orbitals. In this work we utilize the Gaussian basis sets given by Pavolini *et al* (1989).

Second, the pseudopotential from Durand and Barthelat (Durand and Barthelat 1975, Barthelat and Durand 1978) is used to represent the core–electron interaction. In contrast

Table 3. Semi-empirical cut-off parameters ρ_ℓ introduced in the pseudopotential approach (in au).

	s	p	d	f
Rb	2.521	2.279	2.511	2.511
Cs	2.690	1.850	2.810	2.810

Table 4. Influence of the r_c cut-off value in the model potential calculation on the energy of the Cs_2^+ ground state $E(A)$ and on the agreement with the pseudopotential $E(B)$ calculation.

r_c (au)	$E(A)$ (au)	$E(A) - E(B)$ (cm^{-1})
3	-0.168 6027	375
4	-0.199 0773	271
5	-0.169 8104	110
6	-0.170 5485	51

with our Klapisch model potential (1969), this pseudopotential is ℓ -dependent (ℓ being the orbital angular momentum of the electron), leading to a ℓ -dependent Hamiltonian. In contrast with the previous section and following Foucault *et al* (1992), we introduce a semi-empirical dipole core polarization potential $V_{\text{pol}}^{(0)}$ (equation (3)) using experimental values for dipole polarizabilities (Coker 1976), and including an ℓ -dependent cut-off radius ρ_ℓ . The cut-off radii are adjusted (see table 3) to reproduce the experimental atomic energies (Moore 1952, 1958) of the two lowest s, p and d levels.

4. Results and discussion

In the following, the model potential method and the pseudopotential method will be referred to as ‘method A’ and ‘method B’, respectively. Calculations of method A are carried out including dipole and quadrupole core polarization terms of equations (5). The contribution of quadrupole terms is found to be almost negligible for $R \geq 10$ au.

We checked the influence of the arbitrary choice for r_c on the model potential calculations for Cs_2^+ . As expected, choosing a lower value (say, $r_c = 2$ au) yields non-converged results, as the cut-off functions are not efficient enough to compensate for the divergence of polarization terms. The energy of the ground state potential around its equilibrium distance is decreasing when r_c is increased from 3 to 6 au (see table 4), while the excited energies are almost unchanged. The agreement with the pseudopotential calculations seems to be improved around $r_c = 6$ au. However, it cannot be a satisfactory criterion for our calculations and we keep in the following the fixed value $r_c = 3$ au.

The energies of the molecular asymptotes concerned in this work are recalled in table 5, as calculated by method A. It clearly appears that the agreement between theoretical and experimental energies is better for Rb than for Cs. The ways of improving the description of Cs will be addressed in the conclusion. It is not surprising that results obtained with the ℓ -independent model potential including only three parameters are poorer than those calculated with an *ab initio* pseudopotential incorporating an empirical ℓ -dependent core polarization potential.

Figures 1–3 display the eight lowest adiabatic potential curves of $^2\Sigma^+$ symmetry (the spin index will be omitted in the following) for the Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ ions, obtained by both A and B methods. The agreement between the results of methods A and B is very good for Rb_2^+ , the two sets of curves often being almost superimposed. Similar behaviour holds for Cs_2^+ despite the large differences obtained by method A for the 6p and 7s energy levels, compared to

Table 5. Calculated energies of the dissociation limits considered in the present work, compared to the experimental values from Moore (1952, 1958). Labels for the molecular states are also displayed.

	Label	Asymptote	I_{th} (au)	$I_{\text{th}} - I_{\text{exp}}$ (cm^{-1})
Rb_2^+	$1\Sigma_g^+, 1\Sigma_u^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Rb}(5s)$	-0.153 48	8
	$2\Sigma_g^+, 2\Sigma_u^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Rb}(5p)$	-0.095 26	-45
	$3\Sigma_g^+, 3\Sigma_u^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Rb}(4d)$	-0.062 17	-22
	$4\Sigma_g^+, 4\Sigma_u^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Rb}(6s)$	-0.061 43	15
Cs_2^+	$1\Sigma_g^+, 1\Sigma_u^+$	$\text{Cs}^+ + \text{Cs}(6)$	-0.142 91	-41
	$2\Sigma_g^+, 2\Sigma_u^+$	$\text{Cs}^+ + \text{Cs}(6p)$	-0.090 95	103
	$3\Sigma_g^+, 3\Sigma_u^+$	$\text{Cs}^+ + \text{Cs}(5d)$	-0.076 90	29
	$4\Sigma_g^+, 4\Sigma_u^+$	$\text{Cs}^+ + \text{Cs}(7s)$	-0.058 22	-91
RbCs^+	$1\Sigma^+$	$\text{Rb}(5s) + \text{Cs}^+$	-0.153 48	8
	$2\Sigma^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Cs}(6s)$	-0.142 91	-41
	$3\Sigma^+$	$\text{Rb}(5p) + \text{Cs}^+$	-0.095 26	-45
	$4\Sigma^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Cs}(6p)$	-0.090 95	103
	$5\Sigma^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Cs}(5d)$	-0.076 90	29
	$6\Sigma^+$	$\text{Rb}(4d) + \text{Cs}^+$	-0.062 17	-22
	$7\Sigma^+$	$\text{Rb}(6s) + \text{Cs}^+$	-0.061 43	15
	$8\Sigma^+$	$\text{Rb}^+ + \text{Cs}(7s)$	-0.058 22	-91

experiment. An exception concerns the fifth and sixth curves associated with the $\text{Cs}^+ + \text{Cs}(5d)$ asymptote. For these curves, part of the R dependence of the differences between the results of both methods is probably due to the R dependence of nd atomic states during the optimization of the basis used in method A. One of the largest deviations between the two methods is obtained for the $X\ 2\Sigma_g^+$ ground state at short distances: around the equilibrium distance, it reaches $\sim 0.001\ 56$ au ($\sim 340\ \text{cm}^{-1}$) for Rb_2^+ and ~ 0.0017 au ($\sim 375\ \text{cm}^{-1}$) for Cs_2^+ . As for the light alkali cations, the $2\Sigma_g^+$ also displays a well in both ions, with a similar depth in both methods. Its minimum occurs at $R \sim 16.5$ au with a depth of $0.014\ 72$ au ($\sim 3230\ \text{cm}^{-1}$) in Rb_2^+ and $R \sim 17.2$ au with a depth of $0.014\ 48$ au ($\sim 3180\ \text{cm}^{-1}$) for Cs_2^+ . Similar minima are also visible in the curves obtained by Valance (1978). From the papers of Henriet (1985) and Magnier and Masnou-Seeuws (1996), similar minima occur for Na_2^+ and K_2^+ located around ~ 14 and 16 au.

An interesting common characteristic of both Rb_2^+ and Cs_2^+ ions is the presence of a small minimum in the $1\Sigma_u^+$ curve dissociating into the ground state asymptote. It corresponds actually to a long-range potential well (located around 23 and 25.25 au, with well depth of about 3.8×10^{-4} au ($\sim 85\ \text{cm}^{-1}$) and 3.2×10^{-4} au ($\sim 70\ \text{cm}^{-1}$) for Rb_2^+ and Cs_2^+ , respectively, which is due to the competition between attractive electrostatic interactions and repulsive exchange interactions. Such wells could be useful for the detection through ionization of neutral ultracold molecules which are formed in the highest vibrational levels (see, for instance, Dion *et al* 2002). A similar well is also obtained in Na_2^+ around 20 au, with a similar depth (Magnier and Masnou-Seeuws 1996).

As expected, the situation for RbCs^+ is very similar to the homonuclear case with good agreement between the two methods, except for the state correlated to the $\text{Rb}^+ + \text{Cs}(5d)$ dissociation limit. The ground state well depth also differs by about $\sim 0.001\ 84$ au ($\sim 400\ \text{cm}^{-1}$) between the A and B methods. It is worthwhile noting that the well of the $2\Sigma^+$ potential correlated to the $\text{Rb}^+ + \text{Cs}(6s)$ similar to the Σ_u^+ potential of homonuclear dimers is now located at shorter distances than for the homonuclear ions (~ 18 au) and is significantly deeper ($\sim 0.001\ 73$ au $\sim 380\ \text{cm}^{-1}$). Valance (1978) found a deeper well at

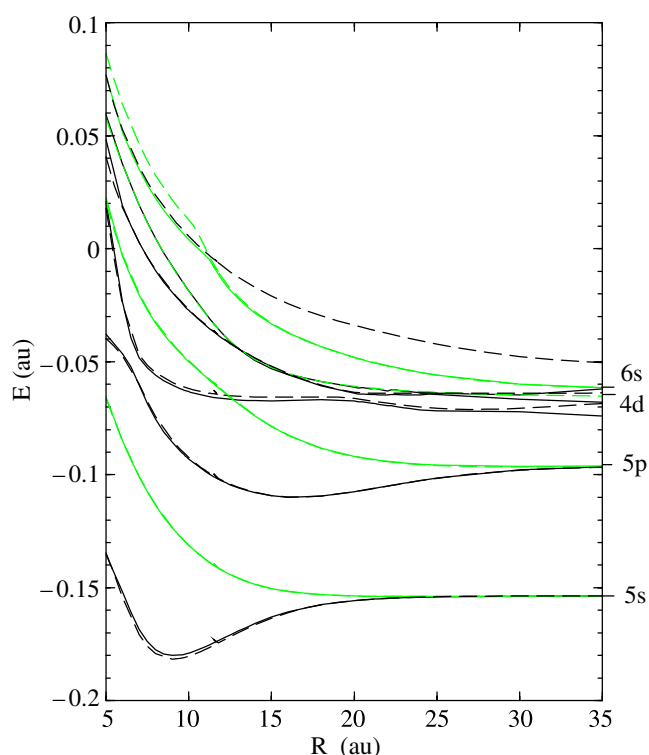


Figure 1. Adiabatic potential curves of gerade (in black) and ungerade (in green, or grey in the black and white version) obtained with either model potential (full curves) or pseudopotential (broken curves) for the eight (model potential) or nine (pseudopotential) lowest $^2\Sigma^+$ states of Rb_2^+ . Asymptotic limits calculated by the model potential approach are also specified.

(~ 0.0027 au ~ 600 cm^{-1}) at $R = 16$ au. The $3\Sigma^+$ state, correlated to $\text{Rb}(5p) + \text{Cs}^+$, presents a minimum at $R \sim 17$ au with a well depth of ~ 0.0155 au $\sim (3400$ $\text{cm}^{-1})$. Valance (1978) obtained the minimum at $R \sim 18$ au with a 0.0045 au (~ 990 cm^{-1}) well depth. Results of Korek and Allouche (2001) are almost identical with those of method B for $R > 7$ au as they used the same method. Deviations below $R < 7$ au are due to the inclusion of a core–core repulsive potential (Pavolini *et al* 1989) in their work.

The topology of real crossings (between gerade and ungerade curves) and avoided crossings between curves of the same symmetry looks the same for both Rb_2^+ and Cs_2^+ ions, even if they are located at slightly different distances. In both ions there are crossings between $3\Sigma_g^+$ and $2\Sigma_u^+$ states, between $4\Sigma_g^+$ and $3\Sigma_u^+$ states and between $5\Sigma_g^+$ and $4\Sigma_u^+$ states.

In the Li_2^+ , Na_2^+ and K_2^+ cations, such patterns have been analysed in terms of the effective quantum numbers of the valence orbitals $n^* = 2[V_{\text{cc}}(R) - E(R)]^{-1/2}$ (Müller and Jungen 1978, Henriët 1985, Henriët and Masnou-Seeuws 1983) as manifestations of the departure of $V(R)$ from the Coulombic potential of H_2^+ ions. However, the variation of the effective quantum n^* in Rb_2^+ and Cs_2^+ as functions of the internuclear distance looks more complicated than the one observed in light cations and their analysis is beyond the scope of the present paper.

As the g/u symmetry does not hold for RbCs^+ , the crossings between gerade and ungerade curves appear now as avoided crossings, similar to the one visible around 14 au between the $4\Sigma^+$ and the $5\Sigma^+$ curves. Such a pattern could be interesting in the framework of the study of Rabi oscillations between dissociative states (Magnier *et al* 1999a), as the sudden change in

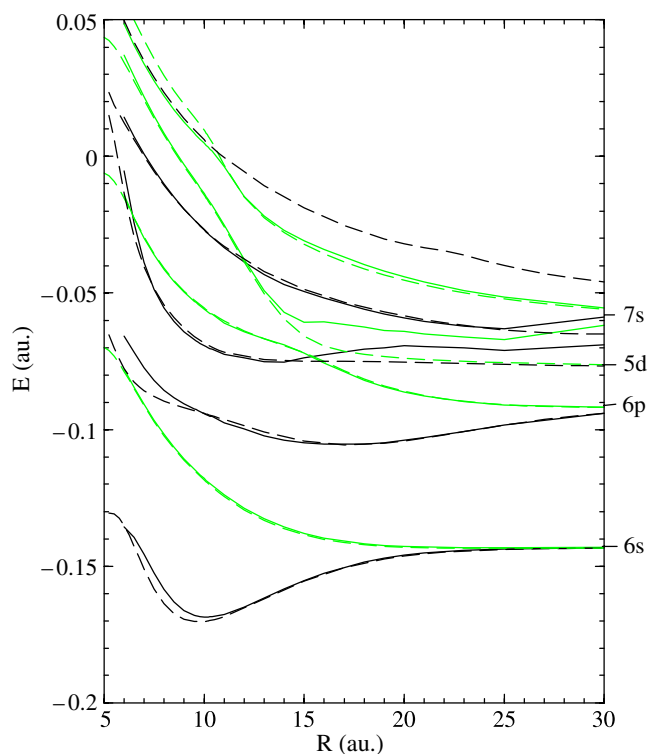


Figure 2. Same as figure 1 for Cs_2^+ .

this region of the electronic wavefunction, and then of the dipole transition moment, should be visible in the time-dependent analysis of the process.

In figures 4 and 5, we compare our results for the three lowest Σ^+ states of Rb_2^+ and C_2^+ with other published work (Valance 1978, Nemukhin and Stepanov 1979, Johann *et al* 1996, Spies 1989). In general, the differences between the results of methods A and B are much smaller than the one observed with these works, except for the Cs_2^+ ground state curve of Spies (1989).

The curves obtained for each ion by Valance (1978) for the $1\Sigma_{\text{g}}^+$ and $2\Sigma_{\text{g}}^+$ states are higher than our curves while the energy of the $1\Sigma_{\text{u}}^+$ state is slightly lower. The energy of the $2\Sigma_{\text{u}}^+$ state (not displayed in figures 4 and 5) is much higher than our value. Compared to all the other results, including ours, the wells of the ground states obtained by Nemukhin and Stepanov (1979) occur at smaller R values. The values obtained for other states are closer to those of Valance (1978) than to ours. Note that the two parameters involved in the model potential used by Nemukhin and Stepanov (1979) were adjusted on molecular data for alkali molecular ions. The ground well depths obtained by Johann *et al* (1996) are lower than in other calculations. According to the authors this could be due to a lack of convergence of their perturbative calculations, limited to second order, in the generalized Heitler–London theory. For the other states, here again the curves obtained by Johann *et al* (1996) are closer to those obtained by Valance (1978) or Nemukhin and Stepanov (1979) than to ours.

Table 6 displays calculated dissociation energies of Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ ions and equilibrium distances in the ground state, compared with published theoretical and experimental values. Our values obtained with either method A or B agree correctly with previous results. In particular, our values obtained with the Klapisch model potential (1969)

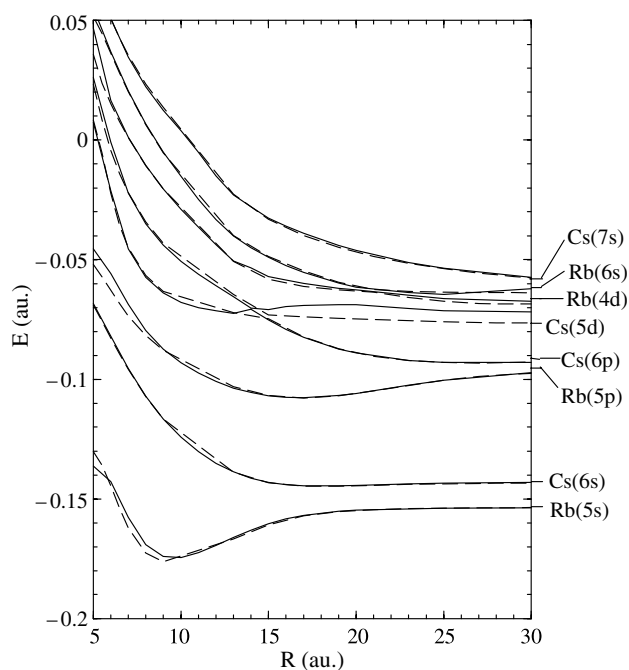


Figure 3. Adiabatic potential curves obtained with either model potential (full curves) or pseudopotential method (broken curves) for the eight lowest $^2\Sigma^+$ states of RbCs^+ . Asymptotic limits calculated by the model potential approach are also specified.

are closer to other values than those obtained by Patil and Tang (2000). Those authors included only the $-1/r$ repulsion for the electron core interaction instead of our $V(r)$ in equation (2); the core polarization terms are similar to those given by equation (5). There exists a large dispersion between the results obtained using different kinds of pseudopotentials.

5. Conclusion

Adiabatic potential curves associated with dimer cations Rb_2^+ , Cs_2^+ and RbCs^+ are computed for the lowest eight $^2\Sigma_{g,u}$ states using either the Klapisch model potential (Klapisch 1969) or an approach based on pseudopotentials, with the aim of analysing the abilities and limits of the Klapisch model potentials for handling heavy molecular systems with one valence electron. Good agreement was found between the results of both methods except for curves associated with an asymptote involving the 5d level of Cs.

The Klapisch model potential seems superior to model potentials employed by Nemukhin and Stepanov (1979) or Patil and Tang (2000). However, it is clear that our calculations should be improved, along the following lines:

- (1) The main deficiency of our treatment of heavy ions is related to the use of a ℓ -independent potential. Indeed, while a ℓ -independent potential (equation (2)) was shown to give accurate energy levels for ions as heavy as Sr^+ , more sophisticated ℓ -dependent potentials were needed to describe Ba^+ adequately (Aymar *et al* 1996). The implementation of the ℓ dependence in our approach should improve the description of Cs_2^+ .

As a check, we performed a molecular calculation using a model potential optimized on nd atomic levels of Cs. Curves correlated with $\text{Cs}^+ + \text{Cs}(5d)$ are slightly improved while, as expected, very poor results are obtained for states correlated with $\text{Cs}^+ + \text{Cs}(6s)$ and $\text{Cs}^+ + \text{Cs}(6p)$.

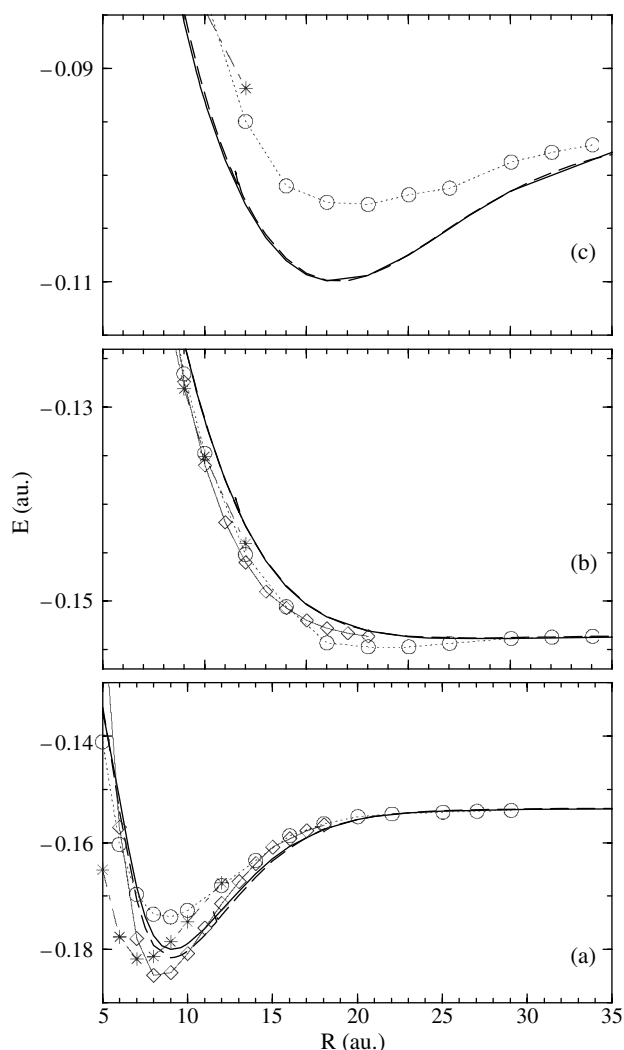


Figure 4. Comparison of the results obtained in the present work (a) for the $1\Sigma_g^+$ ground state, (b) for the $1\Sigma_u^+$ state and (c) for the $2\Sigma_g^+$ state of Rb_2^+ with other calculations. The symbols are: method A (full), method B (long-broken); Valance (1978) (triangle down); Nemukhin and Stepanov (1979) (star); Johann *et al* (1996) (diamond).

- (2) The explicit introduction $V_{\text{pol}}^{(0)} = -\alpha_d/2r^4 f(r/r_c)$ in the model potential should be carefully checked for Cs.
- (3) Relativistic effects are expected to be significant only for the Cs_2^+ ion. Part of these effects can be accounted for by including explicitly spin-orbit terms in the one-electron radial equation used to empirically determine the model potential. j -dependent energies (with j the total orbital momentum) are thus determined and the parameters of the model potential are fitted to known spin-orbit splitting energy levels. Such a kind of model potential has been successfully used to calculate two-photon ionization cross sections of Cs (Aymar and Crance 1982) and to describe Ba^+ and Ra^+ ions (Aymar *et al* 1996).
- (4) For heavy systems, a large part of the R -dependent basis functions defined in equation (6) is used to describe core electrons. In order to reduce the basis sets while retaining the

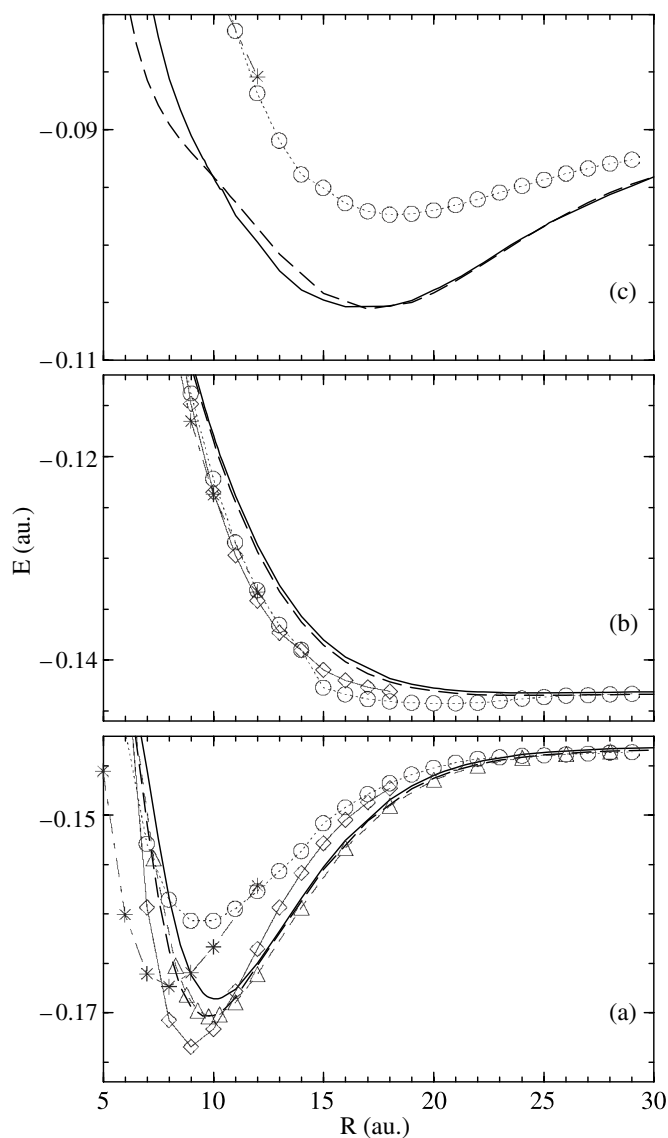


Figure 5. Same as figure 4 for Cs_2^+ except for the additional result of Spies (1989) (triangle up).

description in terms of generalized Slater orbitals in prolate spheroidal coordinates, a possibility is to construct an empirical effective pseudopotential from known energy levels, rather than from *ab initio* wavefunctions, as done in quantum chemistry. Such a kind of pseudopotential for Ba^+ has been used in combination with configuration-interaction calculations for investigating bound and autoionizing states in barium (Féret and Pascale 1998).

Acknowledgments

The authors wish to express their gratitude to P Millié and F Spiegelmann for providing to us the quantum chemistry package developed in Toulouse. Stimulating discussions with F Masnou-Seeuws are also gratefully acknowledged. The Laboratoire 'Aimé Cotton' is associated with

Table 6. Dissociation energies D_e and equilibrium distances R_e for the ground states of the molecular ions (in au).

D_e	R_e	References
Rb_2^+		
0.0265	9.2	This work, method A
0.0281	9.0	This work, method B
0.031	8.4	Bellomonte <i>et al</i> (1974)
0.024	8.5	Valance (1978)
0.027		von Szenpály (1982)
0.027	9.3	von Szenpály <i>et al</i> (1982)
0.029	9.1	Silberbach <i>et al</i> (1986)
0.0267	8.94	Jeung <i>et al</i> (1982)
0.0288	8.94	Krauss and Stevens (1990)
0.0318	8.7	Patil and Tang (2000)
0.026 ± 0.002		Shafi <i>et al</i> (1972)
0.0275 ± 0.003		Wagner and Isenor (1984)
Cs_2^+		
0.025 69	10.1	This work, method A
0.027 40	9.5	This work, method B
0.031	8.4	Bellomonte <i>et al</i> (1974)
0.0206	9.25	Valance (1978)
0.024		von Szenpály (1982)
0.026	9.88	von Szenpály <i>et al</i> (1982)
0.029	10.1	Silberbach <i>et al</i> (1986)
0.0267	8.91	Krauss and Stevens (1990)
0.0305	9.5	Patil and Tang (2000)
0.028 ± 0.002		Shafi <i>et al</i> (1972)
0.025 ± 0.003		Wagner and Isenor (1984)
0.022 ± 0.002		Helm and Möller (1983)
0.0231 ± 0.005		Oldenburg <i>et al</i> (2000)
RbCs^+		
0.0212	9.6	This work, method A
0.0231	9.5	This work, method B
0.026	8.73	Bellomonte <i>et al</i> (1974)
0.0143	9.2	Valance (1978)
0.022	9.4	von Szenpály <i>et al</i> (1982)
0.0262	9.1	Patil and Tang (2000)

the Université Paris-Sud. This work was performed in the framework of the European Research Training Network ‘Cold Molecules’, contract no. HPRN-2002-0290.

Note added in proof. The photoassociation of the heteronuclear molecule RbCs has recently been achieved for the first time by Kerman *et al* (2003).

References

- Allouche A R, Korek M, Fakherdinn K, Chaalan A, Dagher M, Taher F and Aubert-Frécon M 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** 2307
- Aymar M and Crance M 1981 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 3585
- Aymar M and Crance M 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 719
- Aymar M, Greene C H and Luc-Koenig E 1996 *Rev. Mod. Phys.* **68** 1015
- Bahns J T, Gould P L and Stwalley W C 2000 *Adv. At. Mol. Phys.* **42** 71

- Barthelat J-C and Durand Ph 1978 *Gaz. Chim. Ital.* **108** 225
- Bellomonte L, Cavaliere P and Ferrante G 1974 *J. Phys. Chem.* **61** 3225
- Bernath P F and McLeod S 2001 *J. Mol. Spectrosc.* **207** 287
- Blangé J J, Zijlstra J M, Amelink A, Urbain X, Rudolph H, Van der Straten P, Beijerinck H C W and Heideman H G M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 3089
- Bottcher C and Dalgarno A 1974 *Proc. R. Soc.* **340** 187
- Coker H 1976 *J. Phys. Chem.* **80** 2078
- Dion C M, Dulieu O, Comparat D, de Souza Melo W, Vanhaecke N, Pillet P, Beuc R, Milosevic S and Pichler G 2002 *Eur. Phys. J. D* **18** 365
- Dulieu O and Masnou-Seeuws F 2003 *J. Opt. Soc. Am. B* **20** 1083
- Durand Ph and Barthelat J-C 1975 *Theor. Chim. Acta* **38** 283
- Fahs H, Allouche A R, Korek M and Aubert-Frécon M 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 1501
- Fayeton J A, Barat M, Brenot J C, Dunet H, Picard Y J, Saalman U and Schmidt R 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1058
- Féret L and Pascale J 1998 *Phys. Rev. A* **58** 3585
- Fioretti A, Comparat D, Crubellier A, Dulieu O, Masnou-Seeuws F and Pillet P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4402
- Foucrault M, Millié Ph and Daudey J-P 1992 *J. Phys. Chem.* **96** 1257
- Gabbanini C, Fioretti A, Lucchesini A, Gozzini S and Mazzoni M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2814
- Helm H, Cosby P C and Huestis D L 1983 *J. Phys. Chem.* **78** 6451
- Helm H and Möller 1983 *Phys. Rev. A* **27** 2493
- Henriet A 1985 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 3085
- Henriet A, Aubert-Frécon M, Le Sech C and Masnou-Seeuws F 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 3417
- Henriet A and Masnou-Seeuws F 1983 *Chem. Phys. Lett.* **101** 535
- Henriet-Scavennec A 1983 *Thesis* Université Paris-Sud, France
- Jeung G H 1997 *J. Mol. Spectrosc.* **182** 113
- Jeung G H, Malrieux J P and Daudey J-P 1982 *J. Phys. Chem.* **77** 3571
- Johann Ch, Kleinekathöfer U, Tang K T and Toennies J P 1996 *Phys. Chem. Lett.* **257** 651
- Johnson W R, Kolb D and Huang K-N 1983 *At. Data Nucl. Data Tables* **28** 334
- Kerman *et al* 2003 *Preprint* physics/0308020
- Klapisch M 1969 *Thesis* Université Paris-Sud, France
- Korek M and Allouche A R 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 3689
- Krauss M and Stevens W J 1990 *J. Phys. Chem.* **93** 4236
- Lett P D, Helmerson K, Phillips W D, Ratliff L P, Rolston S L and Wagshul M E 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2200
- Magnier S 1993 *Thesis* Université Paris-Sud, France
- Magnier S and Masnou-Seeuws F 1996 *Mol. Phys.* **89** 711
- Magnier S, Millié Ph, Dulieu O and Masnou-Seeuws F 1993 *J. Phys. Chem.* **98** 7113
- Magnier S, Persico M and Rahman N 1999a *Phys. Rev. Lett.* **83** 2159
- Magnier S, Rousseau S, Allouche A R, Hadinger G and Aubert-Frécon M 1999b *Chem. Phys.* **246** 57
- Moore C E 1952 *Atomic Energy Levels* NBS Circular no 467, vol 2 (Washington, DC: US Government Printing Office)
- Moore C E 1958 *Atomic Energy Levels* NBS Circular no 467, vol 3 (Washington, DC: US Government Printing Office)
- Moulet I, Andreoni W and Giannozzi P 1989 *J. Phys. Chem.* **90** 7306
- Müller W and Jungen M 1978 *Chem. Phys. Lett.* **40** 199
- Nemukhin A V and Stepanov N F 1979 *Chem. Phys. Lett.* **60** 421
- Nikolov A N, Eyler E E, Wang X T, Li J, Wang H, Stwalley W C and Gould P L 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 703
- Oldenburg A L, John P C and Eden J G 2000 *J. Phys. Chem.* **113** 11009
- Patil S H and Tang K T 2000 *J. Phys. Chem.* **113** 676
- Pavolini D, Gustavsson T, Spiegelmann F and Daudey J-P 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 1721
- Shaffer J P, Chalupczak W and Bigelow N P 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1124
- Shafi M, Beckel C L and Engelke R 1972 *J. Mol. Spectrosc.* **42** 578
- Silberbach H, Schwerdtfeger P, Stoll H and Preuss H 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 501
- Spiegelmann F, Pavolini D and Daudey J-P 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2465
- Spies N 1989 *PhD Dissertation* Universität Kaiserslautern, Germany
- Stwalley W C and Wang H 1999 *J. Mol. Spectrosc.* **195** 194
- Valance A 1978 *J. Phys. Chem.* **69** 355
- von Szenpály L 1982 *Chem. Phys. Lett.* **88** 321
- von Szenpály L, Fuentealba P, Preuss H and Stoll H 1982 *Chem. Phys. Lett.* **93** 555
- Wagner G S and Isenor N R 1984 *Can. J. Phys.* **63** 976
- Wang H and Stwalley W C 1998 *J. Phys. Chem.* **108** 5767
- Weisheit J C 1973 *Phys. Rev. A* **5** 1621

2.6 Etats moléculaires excités

Les effets de spin-orbite deviennent non négligeables lorsque Z augmente, cependant dans cette étude, nous ne les avons pas pris en considération.

2.6.1 Ions homonucléaires

Nous avons représenté sur les figures (2.9-2.11), les courbes de potentiels correspondant aux deux premiers états ${}^2\Sigma_g^+$ (le premier état correspond, bien entendu, à l'état fondamental), ${}^2\Sigma_u^+$ et au premier état ${}^2\Pi_g$ et ${}^2\Pi_u$ de tous les ions moléculaires homonucléaires. Il existe deux limites de dissociation correspondant à $A^+ + A(ns)$ et $A^+ + A(np)$. Les états $(1) {}^2\Sigma_g^+$ et $(1) {}^2\Sigma_u^+$ ont la même limite de dissociation : la plus basse *ie* $A^+ + A(ns)$ alors qu'à la deuxième limite de dissociation, lui correspondent les états $(2) {}^2\Sigma_g^+$, $(2) {}^2\Sigma_u^+$, $(1) {}^2\Pi_g$ et $(1) {}^2\Pi_u$. Les états $(1) {}^2\Sigma_g^+$, $(2) {}^2\Sigma_g^+$ et $(1) {}^2\Pi_u$ sont attractifs alors que les états $(1) {}^2\Sigma_u^+$, $(1) {}^2\Pi_g$ et $(2) {}^2\Sigma_u^+$ possèdent de petits puits de potentiel pour tous les dimères homonucléaires étudiés. Les écarts entre les deux limites de dissociation diminuent lorsque le numéro atomique augmente, il est de 0.77 u.a. pour l'ion moléculaire Na_2^+ , de 0.06 u.a. pour K_2^+ , et il diminue progressivement, jusqu'à atteindre la valeur de 0.053 u.a. pour l'ion moléculaire Cs_2^+ . Des deux états attractifs $(2) {}^2\Sigma_g^+$ et $(1) {}^2\Pi_u$, l'état $(1) {}^2\Pi_u$ est celui qui a le R_e le plus faible. Pour un même état et pour les différents dimères, on remarque que R_e augmente quand le numéro atomique Z augmente.

Nous retrouvons le même comportement des orbitales liantes et antiliantes que dans le cas de H_2^+ , sauf que dans le cas des ions moléculaires alcalins homonucléaires, nous pouvons noter la présence de petits puits qui sont liés aux effets de polarisation.

Les courbes de potentiels des ions moléculaires alcalins homonucléaires dont les valeurs sont regroupées dans l'annexe (I), présentent des structures riches en croisements et croisements évités. Ces nombreux croisements évités inexistant pour le système H_2^+ , montrent que le potentiel perçu par l'électron dans la région du cœur ne correspond pas à celui de deux charges ponctuelles. En fait, il s'agit d'un potentiel coulombien écranté et modifié par les phénomènes de polarisation.

Citons à titre d'exemple le croisement évité entre les états $(3) {}^2\Sigma_g^+$ et $(4) {}^2\Sigma_g^+$ des ions K_2^+ et Rb_2^+ avec une différence d'énergie entre les deux états ~ 550 [cm^{-1}] pour l'ion Rb_2^+ et ~ 250 [cm^{-1}] pour l'ion K_2^+ . Ces croisements évités se situent à $R \sim 20$ u.a. pour Rb_2^+ et $R \sim 18.2$ u.a. pour K_2^+ .

On remarque aussi une légère déformation des courbes de potentiel lorsque le numéro atomique augmente (par exemple pour le Cs_2^+), ceci est dû au faible écart d'énergie entre les niveaux atomiques $6p$ $5d$ du Cs_2^+ , alors que l'écart est plus grand entre les niveaux $3p$ $3d$ si on considère l'ion moléculaire Na_2^+ . Cette déformation est due à la présence d'un croisement évité entre les états $(1) {}^2\Pi_g$ et $(1) {}^2\Delta_u$ à $R \sim 8.3$ u.a..

L'état $(3) {}^2\Sigma_g^+$ des ions K_2^+ et Rb_2^+ possède une structure en double puits, le puits interne est petit de l'ordre de 124 [cm^{-1}] alors que le puits externe est 10 fois plus grand 1250 [cm^{-1}] pour l'ion Rb_2^+ .

Pour donner une vision synthétique de nos résultats systématiques, nous avons choisi

de donner les constantes spectroscopiques des états $(2)^2\Sigma_g^+$, $(3)^2\Sigma_g^+$, $(4)^2\Sigma_g^+$, $(1)^2\Sigma_u^+$, $(2)^2\Sigma_u^+$ et $(3)^2\Sigma_u^+$ des ions moléculaires alcalins homonucléaires :

Ion	état $(2)^2\Sigma_g^+$		
	$D_e [cm^{-1}]$	$R_e [ua]$	$\omega_e [cm^{-1}]$
Li_2^+	2429.80	12.78	77.9
Na_2^+	3377.46	14.08	43.5
K_2^+	3044.11	15.99	28.3
Rb_2^+	3227.34	17.28	98.8
Cs_2^+	3308.00	17.32	13.7

TAB. 2.29 – Constantes spectroscopiques de l'état adiabatique $(2)^2\Sigma_g^+$ des dimères homonucléaires

Ion	état $(3)^2\Sigma_g^+$			état $(4)^2\Sigma_g^+$		
	$D_e [cm^{-1}]$	$R_e [ua]$	$\omega_e (cm^{-1})$	$D_e [cm^{-1}]$	$R_e [ua]$	$\omega_e (cm^{-1})$
Li_2^+	27.52	20.88	55.1	12.17	30.50	24.3
Na_2^+	12.57	23.58	24.58	5.41	31.40	10.9
K_2^+	8.36	26.29	16.74	10.92	19.03	20.9
Rb_2^+				2.9	22.14	6.23
Cs_2^+	4.41	94.21	8.85	3.38	29.70	6.76

TAB. 2.30 – Constantes spectroscopiques des états adiabatiques $(3)^2\Sigma_g^+$ et $(4)^2\Sigma_g^+$ des dimères homonucléaires

Ion	état $(1)^2\Sigma_u^+$		
	$D_e [cm^{-1}]$	$R_e [ua]$	$\omega_e (cm^{-1})$
Li_2^+	73.89	18.79	16.4
Na_2^+	73.57	19.86	8.01
K_2^+	85.13	22.24	6.1
Rb_2^+	81.44	22.90	3.6
Cs_2^+	82.46	24.22	3.1

TAB. 2.31 – Constantes spectroscopiques de l'état adiabatique $(1)^2\Sigma_u^+$ des dimères homonucléaires

Une caractéristique intéressante et commune à tous les ions homonucléaires, est la présence d'un petit puits de potentiel dans la courbe de potentiel de l'état $(1)^2\Sigma_u^+$ qui se dissocie vers l'asymptote de l'état fondamental. Il correspond à des puits de potentiel "longue distance" (localisés entre 18.8 et 24.2 u.a.) avec des profondeurs comprises entre 74 et 82 cm^{-1} . Ces puits "longue distance" sont dûs à la compétition entre interactions électrostatiques attractives et les interactions d'échange répulsives. Ces puits peuvent être utilisés lors de la détection par ionisation de molécules ultrafroides neutres qui sont formées dans des niveaux vibrationnels hauts [176].

Ion	état $(2)^2\Sigma_u^+$			état $(3)^2\Sigma_u^+$		
	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
Li_2^+	119.83	25.04	11.7	5.42	36.82	10.8
Na_2^+	251.14	27.38	85.03	2.26	39.82	4.4
K_2^+	201.14	29.31	6.02	2.04	42.54	4.13
Rb_2^+	219.65	30.22	3.99	0.77	43.84	1.57
Cs_2^+	293.57	30.62	3.6	0.05	66.61	0.12

TAB. 2.32 – Constantes spectroscopiques des états adiabatiques $(2)^2\Sigma_u^+$ et $(3)^2\Sigma_u^+$ des dimères homonucléaires

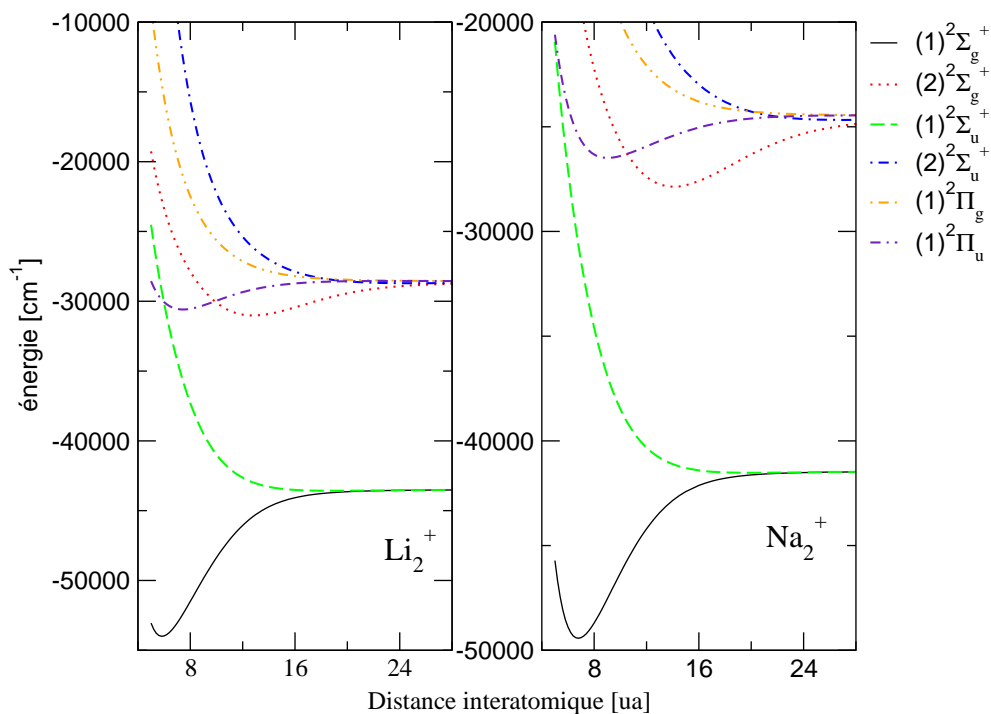


FIG. 2.9 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires Li_2^+ et Na_2^+ correspondant aux deux premiers états $^2\Sigma_g^+$, $^2\Sigma_u^+$, et au premier état $^2\Pi_g$ et $^2\Pi_u$.

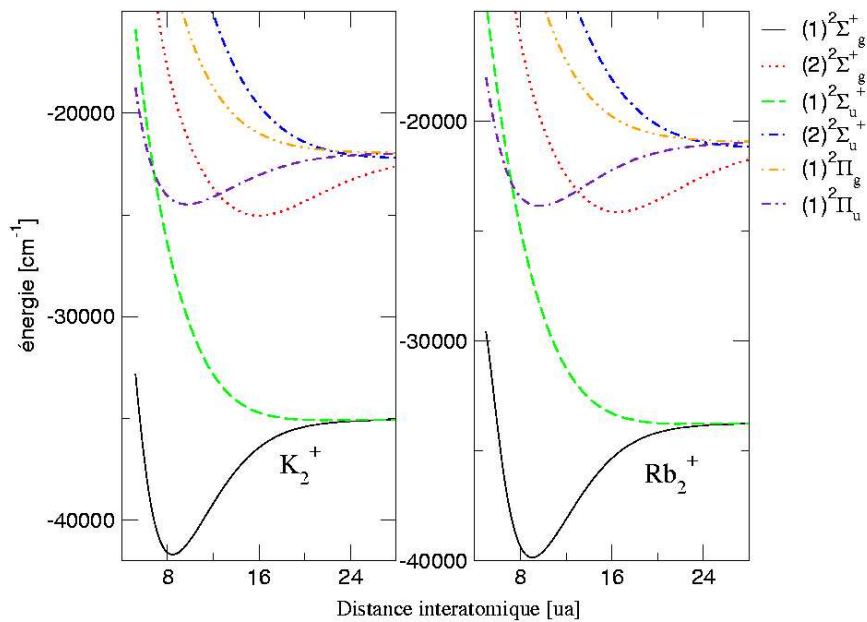


FIG. 2.10 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires K_2^+ et Rb_2^+ correspondant aux deux premiers états $^2\Sigma_g^+$, $^2\Sigma_u^+$, et au premier état $^2\Pi_g$ et $^2\Pi_u$

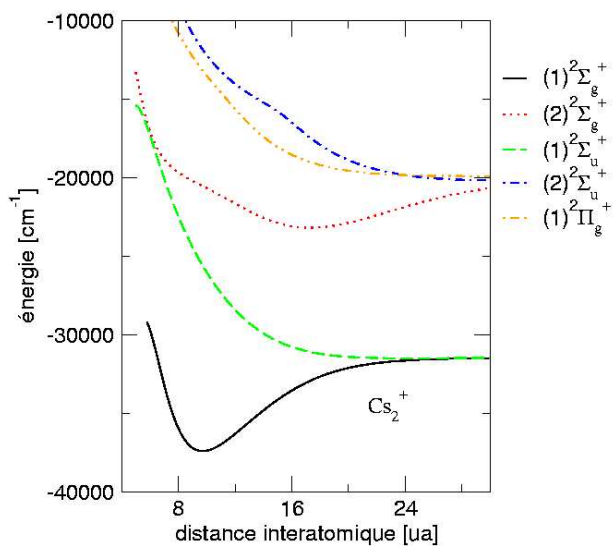


FIG. 2.11 – Courbes de potentiel adiabatique de l'ion moléculaire Cs_2^+ correspondant aux deux premiers états $^2\Sigma_g^+$, $^2\Sigma_u^+$, et au premier état $^2\Pi_g$ et $^2\Pi_u$

2.6.2 Ions hétéronucléaires

Les courbes de potentiel des ions hétéronucléaires ont la même topologie que les ions homonucléaires, comme on peut le constater sur les figures (2.12-2.16), où nous avons représenté les quatre premiers états $^2\Sigma^+$ et les deux premiers états $^2\Pi$ de tous les ions moléculaires alcalins hétéronucléaires.

Signalons tout d'abord, que pour les systèmes hétéronucléaires composés des alcalins A et B , il existe quatre limites de dissociation possibles, qui sont $A(ns) + B^+$, $A^+ + B(ns)$, $A^+ + B(np)$ et $A(np) + B^+$, dont la position relative dépend des deux atomes considérés.

- à la première limite asymptotique correspondent l'état fondamental : $(1)^2\Sigma^+$,
- la seconde limite de dissociation, lui correspond l'état : $(2)^2\Sigma^+$,
- la troisième limite de dissociation, lui correspondent deux états qui sont : $(3)^2\Sigma^+$ et $(1)^2\Pi$,
- la quatrième limite de dissociation, lui correspondent aussi deux états : $(4)^2\Sigma^+$ et $(2)^2\Pi$.

On remarque que l'écart entre les deux limites de dissociation $A^+ + B(np)$ et $A(np) + B^+$ diminue lorsque le numéro atomique des deux atomes augmente : si on considère les deux atomes les plus lourds Rb et Cs , l'écart est évalué à 0.005 u.a., alors qu'il est égal à 0.019 u.a. si on considère les deux plus légers Na et Li , il est légèrement plus grand 0.04 u.a. si on considère les deux atomes externes Li et Cs .

Les valeurs courbes de potentiels adiabatiques des ions moléculaires hétéronucléaires sont regroupées dans l'annexe (II).

De nombreux croisements sont observés parmi les états $^2\Sigma^+$ et $^2\Pi$ à petite et grande valeur internucléaire respectivement.

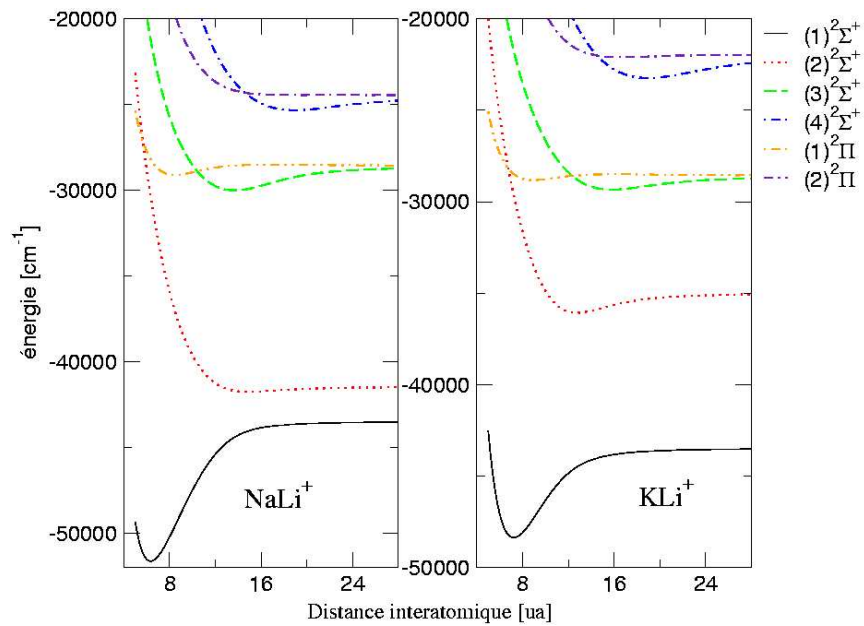


FIG. 2.12 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires $NaLi^+$ et KLi^+ correspondant aux quatre premiers états $^2\Sigma^+$ et aux deux premiers états $^2\Pi$

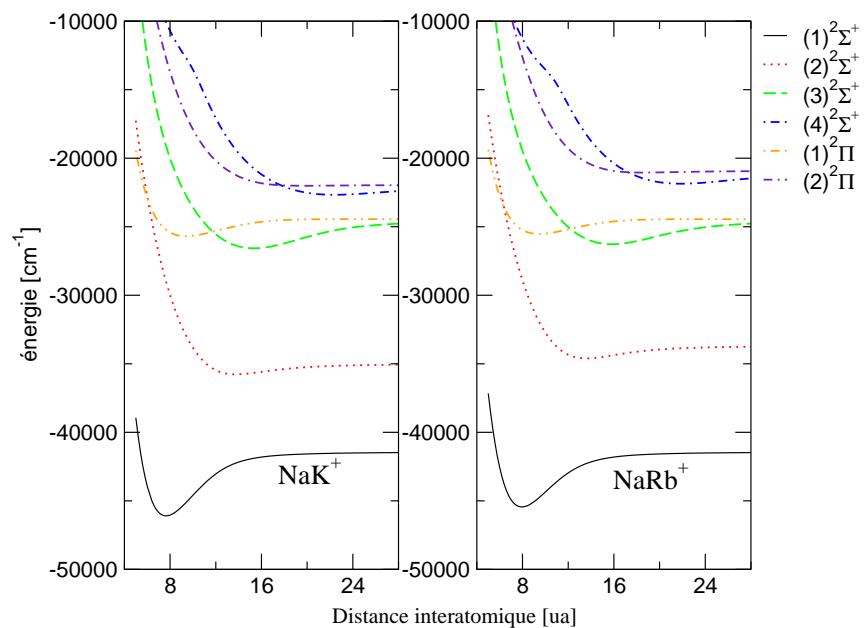


FIG. 2.13 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires NaK^+ et $NaRb^+$ correspondant aux quatre premiers états $^2\Sigma^+$ et aux deux premiers états $^2\Pi$

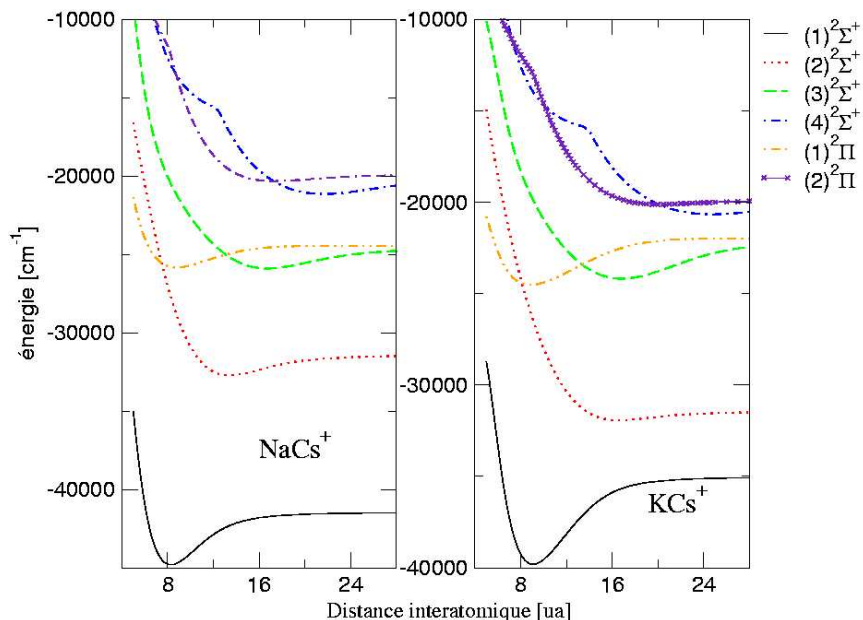


FIG. 2.14 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires $NaCs^+$ et KCs^+ correspondant aux quatre premiers états $^2\Sigma^+$ et aux deux premiers états $^2\Pi$.

Dans les tableaux 2.33-2.34, nous avons regroupés les distances à l'équilibre R_e , les énergies électroniques au fond du puits D_e et les fréquences classiques ω_e (cm^{-1}) des états $(2)^2\Sigma^+$, $(3)^2\Sigma^+$ et $(4)^2\Sigma^+$.

Il est intéressant de noter que les états $(2)^2\Sigma^+$ possèdent des puits plus profonds que les états $(1)^2\Sigma_u^+$ (si on veut faire l'analogie entre le premier état excité dans les dimères homonucléaires et hétéronucléaires), ils sont aussi situés à plus courte distance $12 < R < 18$ u.a.. Les ions constitués d'un atome léger (Li ou Na) et d'atome lourd (K, Rb ou Cs) possèdent des profondeurs de puits qui "augmentent" avec la masse de l'atome lourd ($NaLi^+ \sim 300$ cm^{-1}) ($LiCs^+ \sim 1981$ cm^{-1}). Les distances à l'équilibre des puits sont comprises entre 12 et 18 u.a..

Les états $(3)^2\Sigma^+$ possèdent des puits profonds. L'ion $LiCs^+$ qui dans l'état $(1)^2\Sigma^+$ avait le puits le plus profond, possède pour l'état $(2)^2\Sigma^+$ le puits le moins profond (~ 431 cm^{-1}) situé à grande distance distance (~ 18.4 [ua]), alors que l'ion KRb^+ , plus lourd qui possédait le puits le moins profond (~ 275 cm^{-1}) situé à grande distance (~ 18.1 [ua]), possède pour cet état le puits le plus profond (~ 2630 cm^{-1}) situé à (~ 16.3 u.a.). On peut noter que pour ces états, les distances à l'équilibre des puits sont comprises entre 14 et 19 u.a..

La tendance s'inverse une seconde fois pour les états adiabatiques $(4)^2\Sigma^+$. Les puits qui étaient peu profonds dans l'état $(3)^2\Sigma^+$, deviennent plus profonds dans l'état $(4)^2\Sigma^+$. On peut noter que l'ion KLi^+ possède pour cet état le puits le plus profond (~ 5386 cm^{-1}) situé à (~ 18.9 u.a.), alors que l'ion KRb^+ possède pour cet état le puits le moins profond (~ 476 cm^{-1}) corrigé à très grande distance (~ 26 u.a.)

Ion	état (2) ² Σ ⁺			état (3) ² Σ ⁺		
	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})	D_e [cm^{-1}]	R_e u.a.	ω_e (cm^{-1})
<i>NaLi</i> ⁺	300.53	14.86	36.5	1414.27	13.69	56.3
<i>KLi</i> ⁺	1059.77	12.76	16.8	751.49	15.80	39.3
<i>LiRb</i> ⁺	1306.53	12.60	63.0	618.99	16.62	34.2
<i>LiCs</i> ⁺	1981.55	12.34	68.4	431.74	18.46	27.5
<i>NaK</i> ⁺	760.754	13.76	33.3	2088.77	15.34	33.7
<i>NaRb</i> ⁺	919.355	13.60	32.3	1790.75	15.82	29.0
<i>NaCs</i> ⁺	1309.34	13.40	34.0	1408.96	16.72	24.7
<i>KRb</i> ⁺	275.54	18.16	13.3	2630.42	16.30	23.4
<i>KCs</i> ⁺	517.70	16.56	17.0	2191.99	16.84	20.8
<i>RbCs</i> ⁺	381.22	17.84	10.8	2657.61	16.96	16.1

TAB. 2.33 – Constantes spectroscopiques des états adiabatiques (2)²Σ⁺ et (3)²Σ⁺ des dimères hétéronucléaires

Ion	état (4) ² Σ ⁺		
	D_e [cm^{-1}]	R_e u.a.	ω_e (cm^{-1})
<i>NaLi</i> ⁺	840.03	18.94	37.4
<i>KLi</i> ⁺	5386.53	18.98	39.6
<i>LiRb</i> ⁺	1382.12	19.08	39.9
<i>LiCs</i> ⁺	1924.34	19.30	39.5
<i>NaK</i> ⁺	678.36	22.34	18.0
<i>NaRb</i> ⁺	902.69	21.88	18.4
<i>NaCs</i> ⁺	1276.90	21.64	18.8
<i>KRb</i> ⁺	476.589	26.00	10.1
<i>KCs</i> ⁺	797.66	24.72	11.8
<i>RbCs</i> ⁺	586.26	26.84	7.4

TAB. 2.34 – Constantes spectroscopiques de l'état adiabatique (4)²Σ⁺ des dimères hétéronucléaires.

Tous les états que nous avons passés en revue sont des états attractifs et possèdent pour la plupart des puits profonds. Ce changement par rapport aux dimères homonucléaires est dû à la levée de dégénérescence des niveaux atomiques. Toutes les orbitales sont liantes dans ce cas.

Les états (2)²Π possèdent des puits profonds situés à courte distance (entre ~ 8 et ~ 10 u.a.)

Les états (2)²Π possèdent des puits plus ou moins profonds situés à grande distance (entre ~ 15 et ~ 23 u.a.), on peut noter que les ions KRb⁺ et NaK⁺ possèdent des puits très peu profonds (~ 16 et ~ 26 cm⁻¹ respectivement), ils ne vont avoir qu'un petit nombre de niveaux. L'ion *LiCs*⁺ possède le puits le plus profond, alors que les ions *NaLi*⁺ et *RbCs*⁺ ne possèdent pas de puits.

Les états (3)²Π possèdent pour la plupart des puits plus ou moins profonds compris entre (~ 550 et ~ 2648 cm⁻¹) situés à grande distance (entre ~ 20 et ~ 50 [ua]). L'ion

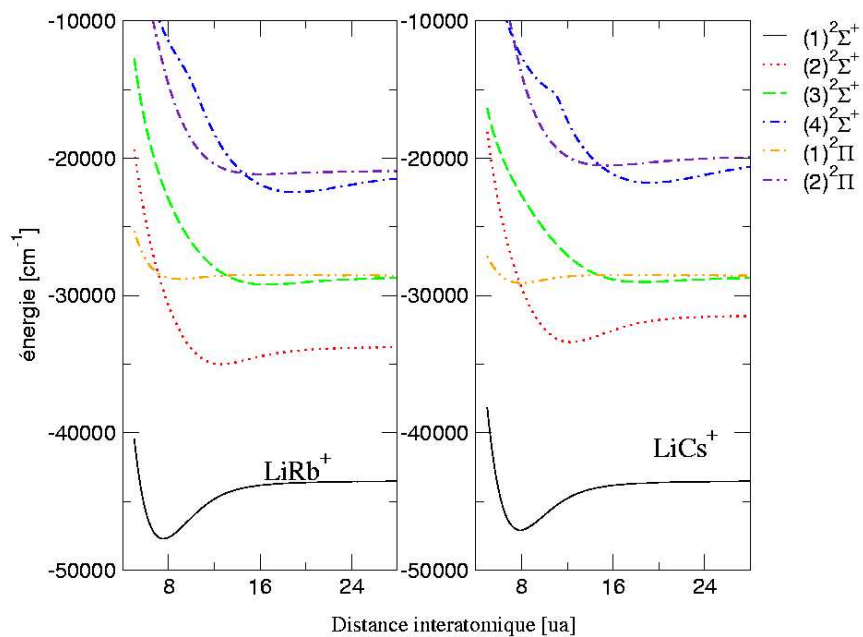


FIG. 2.15 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires $LiRb^+$ et $LiCs^+$ correspondant aux quatre premiers états $^2\Sigma^+$ et aux deux premiers états $^2\Pi$

$NaLi^+$ possède le puits le plus profond ($\sim 2648 \text{ cm}^{-1}$), alors que les ions $NaRb^+$ et KRb^+ possèdent les puits les moins profonds ($\sim 552 \text{ cm}^{-1}$). Les ions $LiCs^+$ et KCs^+ ne possèdent pas de puits.

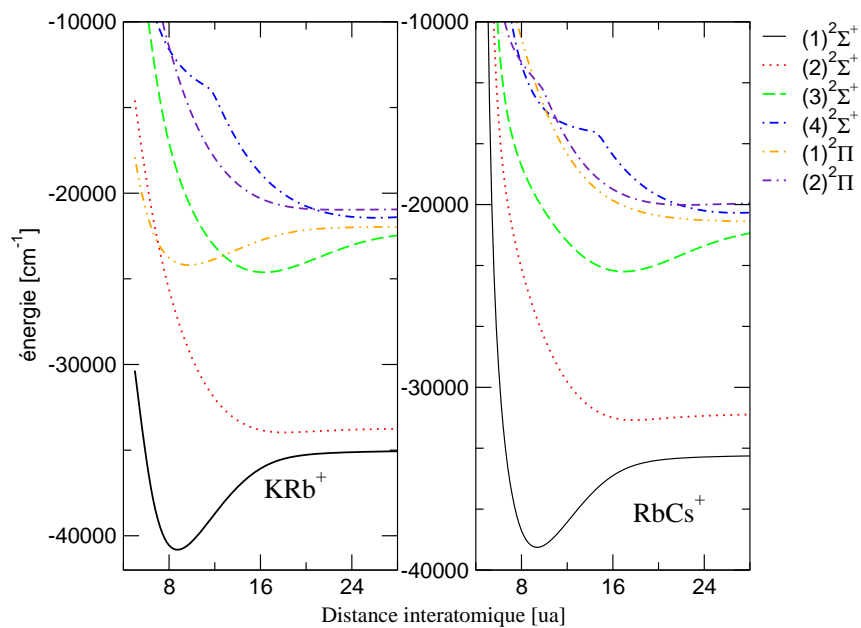


FIG. 2.16 – Courbes de potentiel adiabatique des ions moléculaires KRb^+ et $RbCs^+$ correspondant aux quatre premiers états $^2\Sigma^+$ et aux deux premiers états $^2\Pi$

Ion	état $(1)^2\Pi$		
	$D_e [cm^{-1}]$	R_e u.a.	$\omega_e (cm^{-1})$
$NaLi^+$	521.35	8.48	68.2
KLi^+	240.28	8.90	54.1
$LiRb^+$	218.16	8.90	49.6
$LiCs^+$	505.47	7.98	61.8
NaK^+	1207.79	9.38	40.3
$NaRb^+$	1042.91	9.44	35.5
$NaCs^+$	1353.03	8.74	39.2
KRb^+	2212.78	9.74	30.5
KCs^+	2540.94	8.84	31.7
$RbCs^+$	3272.25	8.82	25.5

TAB. 2.35 – Constantes spectroscopiques de l'état adiabatique $(1)^2\Pi$ des dimères hétéronucléaires.

Ion	état (2) ² Π			état (3) ² Π		
	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})	D_e [cm^{-1}]	R_e [ua]	ω_e (cm^{-1})
<i>NaLi</i> ⁺				2648.94	19.36	37.0
<i>KLi</i> ⁺	105.74	16.68	21.2	1663.47	19.98	32.5
<i>LiRb</i> ⁺	214.19	16.10	24.8	757.91	20.16	28.9
<i>LiCs</i> ⁺	682.88	15.38	33.1			
<i>NaK</i> ⁺	26.08	19.78	8.7	1385.45	20.48	20.3
<i>NaRb</i> ⁺	107.55	18.56	11.0	552.63	20.42	15.9
<i>NaCs</i> ⁺	465.57	17.30	17.0	1589.23	53.09	64.1
<i>KRb</i> ⁺	16.24	22.98	5.6	552.554	20.78	12.4
<i>KCs</i> ⁺	258.73	20.12	10.4			
<i>RbCs</i> ⁺				811.176	28.86	6.1

TAB. 2.36 – Constantes spectroscopiques des états adiabatiques (2)²Π et (3)²Π des dimères hétéronucléaires

2.7 Conclusion

Au-delà des exemples présentés dans ce chapitre, nous avons calculé les courbes de potentiel adiabatiques des 25 plus bas états $^2\Sigma_{g/u}^+$, 18 plus bas états $^2\Pi_{g/u}$ et les 4 plus bas états $^2\Delta_{g/u}$ des ions moléculaires alcalins homonucléaires, et les 25 plus bas états $^2\Sigma^+$, les 18 plus bas états $^2\Pi$ et les 4 plus bas états $^2\Delta$ des ions moléculaires hétéronucléaires. Beaucoup de ces états sont calculés pour la première fois. Cette étude a été menée sur une large gamme de distances internucléaires. Nous avons effectué les calculs avec un électron actif, utilisant une méthode complète basée sur des pseudopotentiels non-empiriques et qui tiennent compte de la polarisation cœur-valence via des potentiels de polarisation dépendant de l . Nous avons utilisé des ensembles de bases gaussiennes pour les deux atomes.

Dans tous nos calculs, nous n'avons pas tenu compte des effets relativistes, qui sont significatifs pour les ions moléculaires contenant les atomes lourds *Rb* et *Cs*. Une partie de ces effets peut-être prise en compte en incluant des termes spin-orbite, cette étude a été menée pour certains ions par l'équipe de M. Aubert-Frécon et A. R. Allouche. Nous avons comparé deux méthodes de calcul : pseudopotentiel et potentiel modèle, un bon accord a été trouvé entre les résultats des deux méthodes.

Nous avons aussi comparé les constantes spectroscopiques que nous obtenons pour l'état fondamental et les premiers états excités avec ceux de travaux théoriques ou expérimentaux antérieurs, et l'accord trouvé est en général bon.

Ce travail se poursuit actuellement par le calcul des moments dipolaires de transition des dimères hétéronucléaires alcalins [177].

Enfin, nous avons mis en évidence la présence de puits de potentiels à longue distance dans l'état $(1)^2\Sigma_u^+$ (voit tableau 2.37) pour tous les ions moléculaires homonucléaires. Ces puits peuvent être utilisés lors de la détection par photoionisation de molécules ultrafroides neutres qui sont formées dans des niveaux vibrationnels élevés [176]. Dans

ce mécanisme, les molécules formées par photoassociation suivie d'émission spontanée subissent une ionisation résonnante à deux photons via un état relais excité. Ces potentiels seront donc utilisés pour compléter l'étude de la photoassociation des dimères d'alcalins en modélisant l'étape de détection par photoionisation.

Ion	D_e [cm^{-1}]	R_e u.a.
Li_2^+	73.79	18.8
Na_2^+	73.57	19.8
K_2^+	85.13	22.2
Rb_2^+	81.44	22.9
Cs_2^+	82.46	24.2

TAB. 2.37 – Constantes spectroscopiques de l'état adiabatique $(1)^2\Sigma_u^+$ des dimères hétéronucléaires.

Chapitre 3

Photoassociation et formation de molécules froides hétéronucléaires

Cette partie est rédigée sous la forme d'un article (article II, pour suivre notre numérotation) paru à The European Physical Journal [2].

La photoassociation d'atomes froids, dont une application expérimentale essentielle est la création de molécules froides dans des états stables, a connu depuis une quinzaine d'années un formidable développement. Cet essor est d'une part d'ordre expérimental, avec la possibilité de réaliser la photoassociation avec tous les atomes d'alcalins piégés, et d'autre part théorique, mettant en jeu de façon essentielle le caractère quantique des atomes, puisque à ces très basses températures, les atomes ne peuvent plus être décrits par leur nature corpusculaire. En effet leur longueur d'onde de de Broglie, caractéristique de leur nature ondulatoire, devient aussi grande que leur extension spatiale.

Ce chapitre est consacré à l'étude de la photoassociation et la formation de molécules froides hétéronucléaires. En effet, ces molécules font l'objet d'un intense travail expérimental, et la recherche de nouveaux systèmes pour les molécules froides est un domaine en pleine expansion. Plusieurs dimères hétéronucléaires ont été produits par photoassociation en 2004 : NaCs [29], RbCs [28] et KRb[26, 27].

Un premier travail théorique pour établir une hiérarchie des dimères hétéronucléaires pour la photoassociation, a été proposé par Wang et al. [1]. Ce travail, basé sur un modèle semiclassique montre que KRb, RbCs et KCs sont les meilleurs candidats possibles pour le processus de photoassociation. Nous montrons, dans ce chapitre, que le taux de formation de molécules froides est du même ordre de grandeur pour les différentes paires mixtes d'atomes alcalins. Ce résultat est encourageant pour les équipes expérimentales, nombreuses, qui se sont investies dans la production de molécules froides hétéronucléaires.

Ce chapitre est organisé de la manière suivante : dans la première partie, nous dressons un bref récapitulatif des connaissances sur la photoassociation et la formation de molécules froides : le principe de la photoassociation et ses applications directes, les différentes expériences menant à la production de molécules froides à partir d'atomes froids, condensés ou non ainsi que la théorie de la photoassociation qui permet de

calculer les taux de photoassociation et de formation de molécules froides. Dans la seconde partie, nous présentons les résultats que nous avons obtenus pour les taux de photoassociation et de formation de molécules froides des dimères hétéronucléaires.

3.1 Les atomes froids

La découverte de méthodes de refroidissement, piégeage et manipulation d'atomes a généré une véritable révolution dans le monde de la physique atomique. Il est maintenant courant dans plusieurs laboratoires de disposer d'échantillons d'atomes refroidis à une température de quelques μK .

Les atomes froids se caractérisent par leur très faible énergie cinétique : la vitesse typique d'un atome est de l'ordre du cm/s .

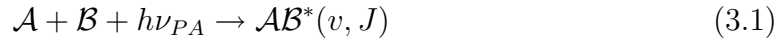
Les premières expériences ont été effectuées sur les atomes alcalins [17], mais désormais, près d'une vingtaine d'éléments, certains avec plusieurs isotopes, sont utilisés dans les expériences de refroidissement et de piégeage.

De nombreux développements, aussi bien théoriques qu'expérimentaux, ont été réalisés dans le domaine des atomes froids [178, 179, 180]. Parmi les études sur les atomes froids et leurs applications, on peut citer par exemple le développement spectaculaire des horloges atomiques [181], ou celui de l'interférométrie atomique [182]. On peut citer aussi les avancées considérables dans l'étude des collisions froides [16]. L'utilisation des processus de collisions élastiques d'atomes proches a abouti à une application très remarquée en 1995 : en alliant le refroidissement évaporatif au refroidissement par laser, on accédait à un nouvel état de la matière, purement quantique, le condensat de Bose-Einstein [183, 184, 185] prévu par la mécanique quantique soixante-dix ans auparavant. Le développement de l'optique atomique a consisté à reproduire avec les atomes ce qui avait été réalisé avec les photons en optique photonique. Grâce aux atomes froids, les longueurs d'onde de de Broglie ont le bon ordre de grandeur pour rendre observables des phénomènes ondulatoires impliquant des atomes [186]. Enfin, les propriétés de cohérence des condensats ont permis la mise au point des lasers à atomes [187] parachevant l'analogie avec l'optique photonique.

3.1.1 Principe de la photoassociation

La photoassociation d'atomes froids est une idée suggérée par H. R. Thorsheim, J. Weiner et P. S. Julienne en 1987 [15]. La réaction de photoassociation est une collision assistée par la lumière entre deux atomes, au cours de laquelle la paire d'atomes absorbe un photon. Le produit de la réaction est une molécule électroniquement excitée, dans un état de vibration v et de rotation J . A très basse température, la largeur de la distribution thermique des vitesses relatives des atomes en collision est très étroite, si bien que la transition état collisionnel initial (continuum) \rightarrow état lié vibrationnel a un caractère résonnant : seul l'état vibrationnel dont l'énergie de liaison est égale au désaccord du laser par rapport à la raie de résonance atomique est peuplé. La réaction

peut s'écrire sous la forme :



pour la photoassociation de deux atomes.

La figure 3.1 montre le principe de la photoassociation moléculaire d'une paire d'atomes froids. La photoassociation consiste donc en l'absorption d'un photon dans une tran-

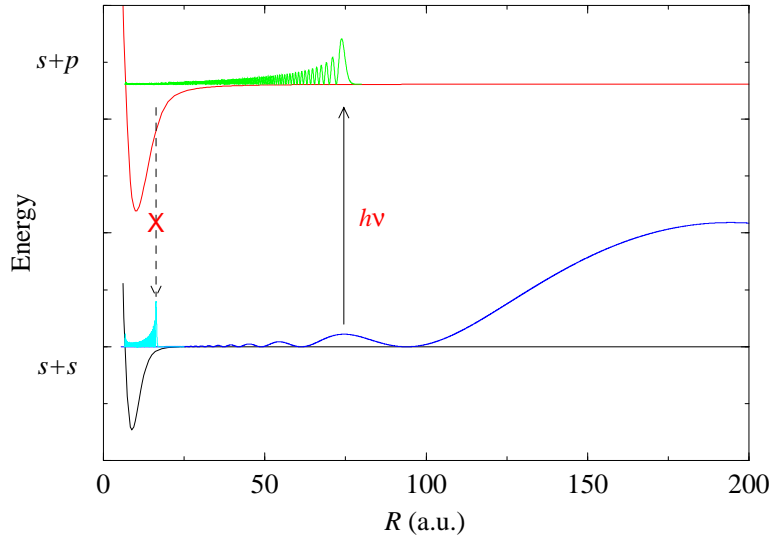


FIG. 3.1 – Le principe de la photoassociation. Une paire d'atomes en collision absorbe un photon pour former une molécule dans un état excité (flèche de droite). Par émission spontanée, la molécule formée peut se désexciter soit vers le continuum pour redonner une paire d'atomes soit vers un niveau vibrationnel du potentiel fondamental pour donner une molécule stable. Le mouvement dans la zone interne est trop rapide (le recouvrement entre les deux fonctions d'onde est pratiquement nul puisque les points tournants des deux potentiels ne coïncident pas) pour que la molécule ait le temps de se désexciter à courte distance, rendant cette transition presque impossible (flèche de gauche).

sition *continuum* \rightarrow *discret*, cette transition s'effectuant d'un état moléculaire de collision corrélé à la limite $S + S$ vers un niveau lié moléculaire électroniquement excité corrélé à la limite $S + P$ dans le cas de deux atomes alcalins.

Nous avons représenté le carré de la fonction d'onde radiale, $|\Psi_f|^2$, de l'état excité du niveau de rotation-vibration atteint par photoassociation et la fonction d'onde du continuum. L'efficacité de la photoassociation dépend du module au carré de l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde radiales initiale (deux atomes) et finale (une molécule). Détaillons un peu plus cette figure : l'excitation a lieu à grande distance (flèche de droite) où le recouvrement des fonctions d'onde radiales initiale et finale est important. La durée de vie de l'état peuplé est brève (quelques dizaine de nanosecondes) et la molécule se désexcite par émission spontanée. En général, ce

processus prend place aux grandes distances et donne lieu, par dissociation, à deux atomes dont l'énergie cinétique est augmentée. En effet (voir figure 3.1, flèche de gauche), la probabilité pour que la molécule se désexcite à courte distance en une molécule stable est presque impossible.

Comme toute transition, la photoassociation comporte des informations non seulement sur l'état final *i.e.* sur la fonction d'onde moléculaire excitée, mais aussi sur l'état initial, *i.e.* la fonction d'onde de collision des deux atomes. La photoassociation autorise l'excitation des niveaux moléculaires proches de la limite $S + P$ à grande distance internucléaire, puisque la fonction d'onde de collision peut recouvrir efficacement la fonction d'onde du niveau excité. Plus encore la réaction de photoassociation est favorisée à longue distance, puisque la densité de paires d'atomes proches séparés d'une distance R varie comme R^2 . L'efficacité de la photoassociation augmente avec cette distance.

Des molécules de grande élancement

Une autre particularité de la photoassociation est le type de molécules formées lors de l'absorption du photon : les deux atomes formant la molécule excitée peuvent être situés toujours à grande distance. L'interaction unissant les deux atomes est alors très différente de la liaison de valence, qui implique le recouvrement des nuages électroniques des deux atomes : elle ne fait intervenir que l'interaction électrostatique. De tels systèmes se situent à la frontière entre la physique atomique et la physique moléculaire. L'énergie cinétique moyenne des molécules photoassociées est l'énergie cinétique moyenne du centre de masse des paires d'atomes. Les molécules photoassociées sont donc des molécules froides. Leur durée de vie est limitée par l'émission spontanée.

La spectroscopie photoassociative

La réaction de photoassociation apporte des informations spectroscopiques originales, donnant des renseignements à la fois sur la structure des atomes et des molécules. Elle permet d'appréhender les processus collisionnels à température ultra-froide ($T \sim 1\mu K$ à $1mK$). Il est possible d'effectuer une *spectroscopie à haute résolution* par photoassociation des états moléculaires excités.

Une particularité de la spectroscopie photoassociative réside dans la nature des états excités : les niveaux de vibration atteints par photoassociation sont à priori de grande élancement, habituellement peu observés par d'autres techniques. En effet, la spectroscopie moléculaire "traditionnelle" entre états liés, en raison du principe de Franck-Condon qui n'autorise que des transitions radiatives à distance internucléaire fixe, ne permet d'atteindre que des niveaux de vibration de faible élancement, bien que certaines techniques multiphotoniques aient été développées par exemple par le groupe de Tiemann à Hanovre, permettant à partir de molécules stables du fondamental, d'exciter des états à longues distances. On peut aussi citer les travaux du groupe de Lyon [188], où des niveaux très élevés ont été observés en utilisant une transformée de Fourier à haute résolution.

La spectroscopie photoassociative permet d'étudier la partie asymptotique des potentiels excités à très grande distance internucléaire ; l'interaction coulombienne entre les deux atomes peut y être décrite par un développement multipolaire. Dans le cas des états excités des dimères alcalins homonucléaires (Li_2 , Na_2 , K_2 , Rb_2 et Cs_2), l'interaction interatomique varie à longue distance principalement en $-C_3/R^3$, il s'agit d'une *interaction de type dipôle-dipôle*. Un tel comportement asymptotique est différent du comportement de type *Van der Waals* en $-C_6/R^6$ de l'état fondamental et ne se retrouve pas pour les systèmes hétéronucléaires. Il a pour conséquence de rendre particulièrement efficace le processus de photoassociation pour les diatomes homonucléaires. La photoassociation permet aussi d'étudier un type de molécules très particulier et extrêmement intéressant, les *molécules purement longue distance* appelées aussi molécules géantes. En 1978, Stwalley et al. [78] ont montré l'existence d'états d'un type très particulier pour lesquels le potentiel électronique possède une forme en double puits (cf. figure 3.3 (b)), avec un puits externe dont le minimum se trouve à grande distance internucléaire. L'existence de ces deux puits résulte de la compétition entre les interactions multipolaires et les interactions de structure fine [189, 190]. Aux distances intermédiaires, le puits externe peut supporter des états liés de rotation et de vibration. La liaison entre les deux atomes ne fait alors aucunement intervenir le recouvrement des fonctions d'onde électroniques (liaison de valence), seules les interactions multipolaires électrostatiques assurent ici la cohésion entre les deux atomes. Le processus de photoassociation permet d'avoir accès à de nombreuses informations sur les collisions froides. Une particularité importante est que seules les ondes partielles de faible moment angulaire (s) interviennent dans la collision. Compte-tenu de l'existence de la barrière centrifuge, les ondes partielles de moments élevés ne participent pas au processus à basse température. De plus, les spectres de photoassociation, sont un excellent moyen de sonder l'amplitude de l'onde (s) des deux atomes en collision en fonction de la distance internucléaire. Rappelons que l'efficacité de la photoassociation dépend du module au carré de l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde radiales initiale et finale. Et d'autre part, pour des niveaux photoassociés de grand nombre quantique de vibration, la fonction d'onde est essentiellement concentrée au voisinage du point tournant externe si bien que les intensités des raies de photoassociation sont directement reliées au carré de l'amplitude de la fonction d'onde prise au point tournant externe. La photoassociation étant un processus résonnant, l'énergie du niveau photoassocié et par conséquent la position de son point tournant externe dépendent de la fréquence du laser de photoassociation. En balayant la fréquence du laser de photoassociation, on peuple successivement différents niveaux de vibration-rotation du potentiel excité et en étudiant l'efficacité de la photoassociation on peut déduire la forme radiale de la fonction d'onde initiale. L'exploitation de la position des nœuds de cette fonction permet en particulier de déduire des paramètres collisionnels importants tels que la longueur de diffusion qui est cruciale pour appréhender la faisabilité et la stabilité d'un condensat de Bose-Einstein [191].

La photoassociation d'atomes froids a été observée pour la première fois avec des atomes de sodium [69] et de rubidium [71] en 1993, puis en 1995 pour le lithium [81], en 1996 pour le potassium [70] et en 1997 pour le césium [14]. En 1999, la réaction

de photoassociation a également été observée avec des atomes d'hydrogène polarisé ($f = 1, M_f = -1$). Ce processus a aussi été mis en évidence pour l'hélium métastable [79] et se développe pour les alcalino-terreux, comme le calcium [75] et le strontium [192], ainsi que pour l'ytterbium [77], enfin la photoassociation hétéronucléaire a été observée pour le KRb [27, 26, 193], RbCs [28, 73, 194] et *NaCs* [29]. Tous les alcalins ont généré une impressionnante investigation des potentiels moléculaires excités et fondamentaux, ainsi que des longueurs de diffusion.

La formule de LeRoy-Bernstein

Une formule est fort utile dans l'interprétation des expériences de photoassociation, car elle relie les énergies expérimentales des niveaux excités au potentiel excité, il s'agit de la formule de LeRoy-Bernstein [195]. L'idée générale est de tirer parti du nombre de noeuds des fonctions d'onde radiales et d'utiliser l'approximation semi-classique W.K.B. (Cette théorie a été mise au point par Wentzel, Kramers et Brillouin en 1926, on peut trouver un exposé de cette méthode d'approximation dans le livre de Messiah [196] ou dans celui de Landau et Lifchitz [197]) pour décrire ces fonctions d'ondes des niveaux proches de dissociation, dans un potentiel asymptotiquement en C_n/R^n . Le potentiel s'écrit donc à grande distance $D - C_n/R^n$, où D est la limite de dissociation du potentiel. En notant v_D le nombre vibrationnel à la limite, non-entier, la formule de LeRoy-Bernstein s'écrit :

$$D - E_v = [(v - v_D) \left(\sqrt{\frac{\pi \hbar^2}{2\mu}} \frac{\Gamma(1 + 1/n)}{\Gamma(1/2 + 1/n)} \frac{n - 2}{C_n^{1/n}} \right)]^{\frac{2n}{n-2}} \quad (3.2)$$

où μ est la masse réduite des particules décrivant la collision. Comme la photoassociation permet d'accéder aux énergies E_v des niveaux des potentiels excités, ou du moins aux écarts en énergie entre ces niveaux, et comme on connaît la dépendance n du potentiel à grande distance, on peut attribuer les niveaux vibrationnels et surtout déduire la valeur du coefficient de dispersion C_n . Cette démarche a été utilisée très fréquemment dans les expériences de photoassociation.

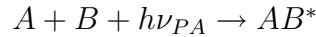
3.1.2 Quelques expériences de photoassociation

Notre travail consiste à calculer les taux de photoassociation et de formation de molécules froides alcalines hétéronucléaires. Dans cette section nous présentons brièvement quelques expériences de photoassociation de ces dimères, et nous passerons en revue quelques expériences de photoassociation d'atomes non alcalins, les expériences de photoassociation homonucléaire ayant été largement présentées dans d'autres thèses [100, 198].

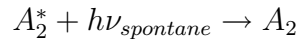
Mais avant cela, rappelons, succinctement, les différents processus mis en jeu dans ces expériences et les méthodes de détection des états photoassociés.

Les méthodes de détection

A partir d'atomes ultrafroids d'alcalins, la réaction de photoassociation est effectuée. Schématiquement, le processus résonnant s'écrit :



L'absorption du photon de fréquence ν_{PA} par la paire d'atomes en collision permet de peupler un niveau de rotation-vibration d'un état moléculaire excité. Ensuite cet état moléculaire excité, conduit, lors de l'émission spontanée d'un photon, à deux processus possibles. Le premier phénomène est la restitution, lors de la transition radiative, de deux atomes libres à nouveau. Généralement, l'énergie cinétique acquise par ces atomes est telle qu'ils quittent le piège. Pour mesurer ces pertes à résonance, il suffit donc de compter le nombre d'atomes du piège, *via* par exemple la lumière de fluorescence qu'ils émettent sous l'effet de l'excitation par les faisceaux du piège. Au cours de la photoassociation, on peut former des molécules froides, *via* l'émission spontanée d'un photon dans une nouvelle transition électronique vers un état lié du potentiel moléculaire fondamental :



Un autre signal peut-être enregistré c'est le signal d'ions, résultant de la photoionisation de molécules stables, produites par la désexcitation radiative de certains états moléculaires excités.

On peut aussi mentionner d'autres mécanismes de détection des états photoassociés, utilisés dans ces expériences :

- Autoionisation moléculaire (A.I.) : cette réaction a été observée sur le sodium [199] ;
- Photoionisation directe (P.I.) : l'ajout d'un ou de plusieurs photons permet d'ioniser la molécule excitée. Cette procédure a été employée par plusieurs équipes sur le sodium [69, 200, 201], sur le potassium [202] et sur le rubidium [203] ;
- La diminution de l'intensité du laser de photoassociation : ce phénomène n'a été mis en évidence que dans le cas de la photoassociation de l'hydrogène [204] en raison de la très forte densité d'atomes piégés (de l'ordre de 10^{16} *atomes/cm*³ dans un piège. Ces auteurs ont aussi observé la fluorescence induite par laser.
- Détection directe des états résultant de la prédissociation : cette technique a été employée pour le potassium par l'ajout d'un nouveau photon [205, 206]. On parle de détection de fragments de prédissociation. Dans le cas de l'hélium métastable [79], la photoassociation a été mise en évidence par l'observation du changement de taux d'ionisation (Penning ou photoassociative) lorsque le laser de photoassociation entre en résonance avec l'état moléculaire.

La photoassociation hétéronucléaire d'alcalins

La photoassociation de molécules hétéronucléaires a déjà connu plusieurs succès, mais tarde à se généraliser et ce pour deux raisons : la première (et sans doute la

raison principale) est expérimentale, il faut disposer de deux sources d'atomes froids de deux espèces différentes, piégés au même endroit, de manière homogène et avec des densités importantes. La seconde est inhérente à la forme des potentiels excités corrélés aux asymptotes $S + P$, qui pour les molécules hétéronucléaires varie en $1/R^6$. Ainsi pour de nombreux niveaux moléculaires excités, le décalage du laser de photoassociation est proche de la résonance atomique, ce qui a tendance à vider la source d'atomes, il y a donc compétition entre le processus d'excitation d'un atome associé à la transition $S \rightarrow P$ et le processus de photoassociation d'une paire d'atomes. Les niveaux accessibles dans la photoassociation hétéronucléaire sont de *courte portée* par rapport aux homonucléaires. Ceci résulte du fait que à longue distance, dans leur premier état excité deux atomes identiques interagissent *via* une interaction résonnante (avec un potentiel $V(R)$ proportionnel à R^{-3}), alors que deux atomes d'espèces différentes interagissent seulement *via* les forces de van der Waals à courte portée ($V(R) \propto R^{-6}$). Cependant plusieurs équipes ont réussi à observer la photoassociation hétéronucléaire d'alcalins. Nous allons détailler quelques unes de ces expériences.

${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$

Le groupe de C. Zimmermann à Tübingen s'est focalisé sur la photoassociation hétéronucléaire du lithium, dans un piège magnéto-optique mixte d'atomes de ${}^6\text{Li}$ et de ${}^7\text{Li}$. Le phénomène de photoassociation est détecté *via* l'absorption d'un faisceau lumineux par les atomes de ${}^7\text{Li}$. De plus, les fréquences des lasers du piège sont choisies de façon à ce que les atomes de ${}^7\text{Li}$ ressentent une densité constante d'atomes de ${}^6\text{Li}$. Ainsi, l'interprétation de la perte d'atomes est plus facile, puisque la densité de ${}^6\text{Li}$ peut-être considérée comme constante. Schölder et al. [207] observent ainsi, se superposant au spectre de ${}^7\text{Li}_2$, un spectre de photoassociation de ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$, qui présente une claire signature de la structure hyperfine atomique des deux isotopes. Ils [72] étudient la saturation des raies de photoassociation dans ce même système. La saturation est atteinte pour deux raies hyperfines. Cela est interprété dans un modèle à deux niveaux, mais en négligeant la distribution des énergies de collisions. Cette photoassociation est qualifiée d'hétéronucléaire, car les potentiels excités varient asymptotiquement à très grande distance (à partir de $R = 192.85 a_0$) en $1/R^6$ (grâce à l'interaction dipôle-dipôle) et non plus en $1/R^3$.

NaCs

L'équipe de N. Bigelow s'est investie dans la réalisation d'un piège magnéto-optique mixte de sodium et de césium. Le nombre des atomes dans chaque piège est obtenu à partir du taux de fluorescence, les densités d'atomes piégés sont ($\sim 10^{10} \text{ cm}^{-3}$) avec $\sim 10^6$ d'atomes de Na et $\sim 10^7$ d'atomes de Cs . Dans ces conditions les effets de diffusion multiple sont négligeables. Les expériences de photoassociation similaires à celles réalisées sur le sodium [69] montrent l'observation de molécules de NaCs excitées, détectées par la formation d'ions moléculaires NaCs^+ [208]. Deux types de molécules sont observées : NaCs^* et Na^*Cs , suivant la longueur d'onde du laser de photoassociation. En particulier, la structure hyperfine de césium est observée dans

la réaction de photoassociation : $\text{Na} + \text{Cs} \rightarrow \text{NaCs}^*$.

Une des fréquences des deux pièges magnéto-optiques suffit alors à créer les ions moléculaires NaCs^+ .

RbCs

Plus récemment encore, la photoassociation hétéronucléaire rubidium-césium a été observée [28] et [73] à l'université de Yale dans le Connecticut. Les expériences de photoassociation sont similaires à celles de NaCs ([208]). Les atomes de ^{85}Rb et ^{133}Cs utilisés pour la photoassociation, sont refroidis dans un piège magnéto-optique (MOT) mixte. Les deux espèces sont à la même température ($T \sim 100 \mu\text{K}$). Les densités atomiques et les nombres d'atomes sont mesurés en utilisant une absorption à deux couleurs à partir de deux directions orthogonales comme une fluorescence résonante. Les valeurs typiques utilisées pour les densités atomiques sont : $n_{\text{Cs}} = 3.10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $n_{\text{Rb}} = 7.10^{11} \text{ cm}^{-3}$, et les nombres d'atomes : $N_{\text{Cs}} = 3.10^8$ et $N_{\text{Rb}} = 4.10^8$. Les deux atomes en collision sont excités dans des niveaux rovibrationnels RbCs^* à un décalage du laser de photoassociation variable Δ en dessous de la plus basse asymptote corrélée à $\text{Rb}(5\text{S}_{1/2}) + \text{Cs}(6\text{P}_{1/2})$ (ceci étant le choix le plus favorable puisque ces niveaux ne se prédissocient pas). Les paires excitées qui se dés excitent en molécules stables de RbCs le font dans les niveaux vibrationnels du potentiel ($a^3\Sigma^+$).

KRb

En 2004, l'équipe de Stwalley [26] à Storrs, a observé le spectre de photoassociation d'atomes ultrafroids de ^{39}K et de ^{85}Rb en collision, pour produire des molécules excitées de KRb^* .

Dans cette expérience [27], un piège MOT mixte contenant les atomes ^{85}Rb et ^{39}K a été utilisé. La formation des molécules débute avec une paire d'atomes libres dans l'état fondamental. Après une absorption quasi-résonante, la paire est excitée vers des niveaux rovibrationnels d'un ou plusieurs des potentiels corrélés à une asymptote correspondant à un atome dans l'état fondamental et à un atome dans l'état excité $\text{K}(4\text{s}) + \text{Rb}(5\text{p}_{1/2})$.

la photoassociation d'atomes non alcalins

He*

La première mise en évidence de la photoassociation d'atomes d'hélium métastables $\text{He}(2^3\text{S}_1)$ date de 1999 [74]. En fait, deux expériences ont obtenu simultanément les preuves de la photoassociation sous l'asymptote $2^3\text{S}_1 + 2^3\text{P}_2$ [79], celle de l'équipe de P. van der Straten à Utrecht et celle de Hogervorst à Amsterdam. L'attribution des raies de photoassociation est plus délicate que dans les alcalins, où la structure hyperfine permet souvent de déterminer la symétrie de l'état photoassocié, par les structures qu'elle induit dans le spectre de photoassociation. Le travail de Herschbach et al. [79], ne conclut pas fermement sur la nature des états électroniques photoassociés (0_g^+ ou 1_g). L'équipe de M. Leduc à l'ENS (Paris) a réalisé il y a peu la

photoassociation d'atomes d'hélium métastables proche de la transition BEC. Cinq raies vibrationnelles ont été observées dans le potentiel à grande distance 0_u^+ corrélé à l'asymptote $2^3S_1+2^3P_0$. La photoassociation est détectée *via* la perte d'atomes, mesurée par absorption [209].

Ca

En 2000, Zinner et al [75] réalisent la première photoassociation d'atomes de calcium. La photoassociation est effectuée sous l'asymptote $(5^1S_0 + 5^1P_1)$, et détectée en mesurant la perte d'atomes dans le piège magnéto-optique par fluorescence.

H

La seule expérience de photoassociation d'atomes d'hydrogène a été réalisée en 1999 à Amsterdam [204] dans l'équipe de J. Walraven. Leur but était la condensation des atomes d'hydrogène. Les atomes sont produits par thermalisation avec deux gaz d'hélium à 0.3 K et 0.1 K, qui confèrent au gaz d'hydrogène une température de 0.15 K. Les collisions entre atomes H avec changement de spin assurent que tous les atomes sont dans l'état $|f = 0, M_f = 1\rangle$, piégés par un fort champ magnétique. L'échantillon utilisé pour la photoassociation a ainsi une densité très élevée. Ceci autorise une méthode de détection de la photoassociation par absorption du faisceau de photoassociation et par mesure de la fluorescence produite par la désexcitation des molécules excitées.

Sr

Nagel et al. [76] ont réalisé la spectroscopie photoassociative (PAS) d'atomes froids de ^{88}Sr dans un piège magnéto-optique (MOT). Les transitions photoassociatives sont menées avec un laser décalé vers le rouge de 600-2400 MHz de la résonance atomique $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ à 461 nm. A partir d'un fit des fréquences de transition, ils ont pu déterminer la durée de vie atomique de l'état 1P_1 . Cependant, dans un piège magnéto-optique, la création de molécules électroniquement excitées par les lasers du piège avait été mise en évidence par Dinneen et al. en 1999 [192]. En étudiant le temps de chargement du piège magnéto-optique d'atomes de ^{88}Sr en fonction de sa densité, le taux de collision entre atomes froids est mesuré, et comparé à la théorie. Il s'agit d'une théorie semi-classique [210] qui permet d'évaluer ce taux en prenant en compte l'existence d'états moléculaires excités et liés, dont la durée de vie est suffisamment longue pour assurer un changement d'état à courte distance internucléaire, responsable de la perte de la paire d'atomes.

Yb

Takasu et al. [77] ont réalisé la photoassociation d'atomes froids de ^{174}Yb dans un piège optique. La photoassociation est effectuée sous l'asymptote $^1S_0 + ^1P_0$, et détectée en mesurant la perte d'atomes dans le piège de type FORT. Ils ont pu déterminer

la durée de vie radiative de l'état $(6s6p)^1P_0$. Ils ont pu ainsi observer plus de 90 résonances de photoassociation des niveaux vibrationnels de l'état $^1\Sigma_u^+$, incluant 80 séries consécutives à un décalage du laser de photoassociation allant jusqu'à 490 GHz.

3.1.3 Difficulté de l'extension aux molécules du refroidissement par laser

La photoassociation moléculaire d'atomes froids permet de former des molécules excitées, dont la température est de l'ordre de la température atomique initiale. En général ces molécules se dissocient par émission spontanée donnant deux atomes "chauds".

Le mécanisme qui est à la base du refroidissement d'atomes par laser est la force de pression de radiation. Cette force est le résultat d'échanges de quanta d'impulsions entre les atomes et la lumière lors de cycles "d'absorption-émission spontanée". L'émission spontanée qui suit l'absorption du photon par l'atome s'effectue de manière aléatoire dans l'espace, il s'exerce sur l'atome une force dissipative dans la direction du faisceau laser incident.

Pour exercer de manière efficace une telle force, il est impératif de pouvoir considérer une *transition fermée* résonnante. Les atomes présentent de telles transitions. Un ou deux faisceaux lasers dits de repompage permettent d'éliminer les éventuelles pertes d'atomes lors des processus. Le refroidissement par laser qui s'est révélé particulièrement efficace pour les atomes ne se généralise pas, malheureusement, pour les systèmes plus complexes tels que les molécules.

Le nombre de degrés de liberté internes d'une molécule est beaucoup plus important que celui d'un atome. L'interaction électromagnétique est plus complexe ; elle met en jeu deux cœurs et les électrons de valence. Les noyaux eux-même, liés par interactions électroniques, peuvent de plus tourner et vibrer. Le mouvement relatif des constituants de la molécule se traduit par un très grand nombre de niveaux énergétiques correspondant pour chaque état électronique aux énergies de vibration et de rotation. Un système moléculaire ne comporte pas de transitions fermées. Les possibilités pour le niveau excité de la transition considérée de ne pas se désexciter dans le niveau de départ sont nombreuses. Il en résulte un rapide dépeuplement du niveau initial par pompage optique (voir figure 3.2).

A cela s'ajoute la distribution thermique des molécules, telle que plusieurs niveaux de rotation et vibration de l'état fondamental sont peuplés. Seule une faible partie des molécules peut alors être excitée par un laser vers un niveau excité défini. Même si cela n'est pas totalement exclu, techniquement il semble très difficile d'utiliser des mécanismes similaires à ceux conduisant au refroidissement et au piégeage des atomes [18]. D'autres méthodes doivent être employées pour obtenir des molécules froides ; l'une d'elles est la photoassociation.

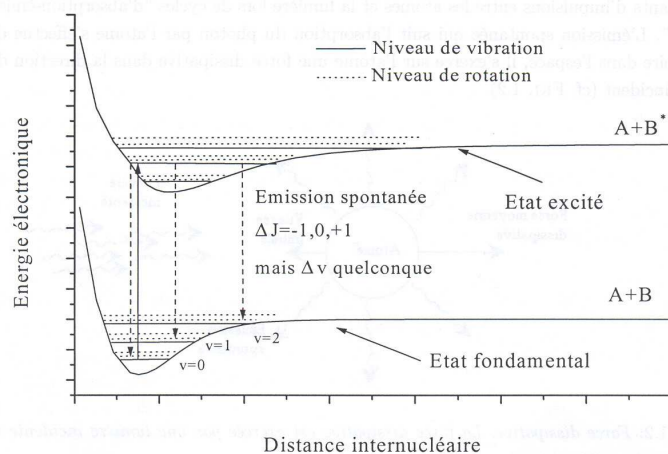


FIG. 3.2 – Cycle d’absorption-émission des molécules. Pour simplifier le problème, nous considérons que l’état moléculaire de départ n’est constitué que de molécules dans l’état $v = 0$, $J = 0$ du fondamental et que le laser piégeant ne peuple qu’un seul état excité de nombres quantiques v' , $J' = 1$. Par émission spontanée, l’état final pourra être un état de nombre quantique v'' très différent de v et de nombre quantique de rotation $J'' = J'$, $J' \pm 1$. (La figure est extraite de la référence [100]).

3.2 Formation de molécules froides

Nous avons vu dans la section précédente que les molécules avaient plusieurs degrés de liberté, suivant les mouvements de translation, de vibration et de rotation. Habituellement on attribue la notion de molécules froides à la translation, la température étant liée à la vitesse du centre de masse de la molécule. La notion de basse température étant relative, il est d’usage d’employer le terme froid lorsque celle-ci est inférieure au kelvin, et d’ultra-froid lorsqu’il s’agit de valeur inférieure au millikelvin. Comme nous venons de le voir il est difficile de généraliser les processus de refroidissement et de piégeage d’atomes neutres aux molécules. Afin de remédier à ce problème, on utilise des atomes préalablement refroidis et on les transforme en molécules.

3.2.1 Formation de molécules froides par photoassociation

Comme nous l’avons montré dans le paragraphe (3.1.1), les molécules de grande élongation produites par photoassociation à grande distance internucléaire ont une très faible probabilité de se désexciter radiativement dans un des états lié du fondamental. En effet, une telle molécule excitée, en raison de son mouvement très localisé sur le bord externe du potentiel, se désexcite de manière privilégiée à grande distance.

A ces distances, la densité d’états vibrationnels des potentiels corrélés à la limite asymptotique $nS+nS$, dont la forme varie asymptotiquement en $1/R^6$, est très faible. Les fonctions d’ondes radiales sont aussi très localisées sur le bord externe du poten-

tiel. Cependant, le recouvrement des fonctions d'onde liées de l'état fondamental et de l'état excité sera toujours négligeable, excepté dans les cas très rares où les maximums localisés des fonctions d'onde seront en coïncidence. Ainsi, en raison du principe de Franck-Condon, il est très peu probable que la transition entre états liés se produise.

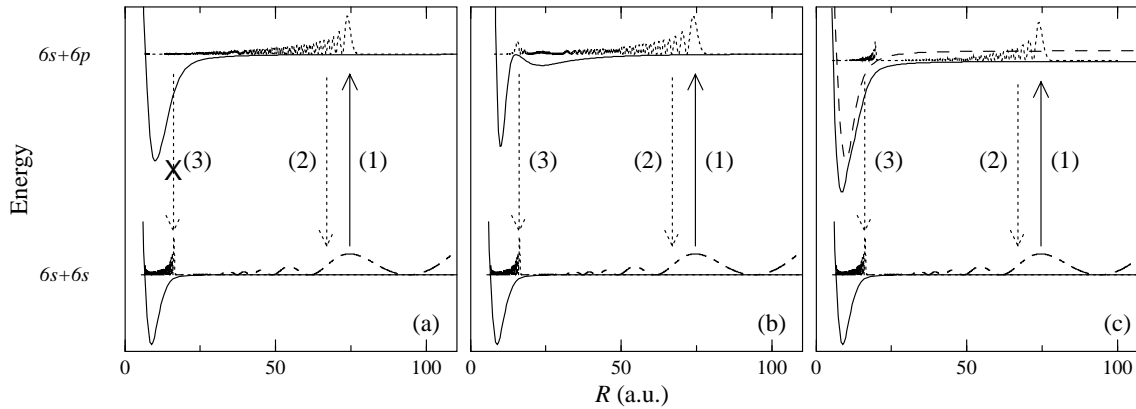


FIG. 3.3 – Différents schémas de la formation de molécules froides. Une paire d'atomes en collision absorbe un photon pour former une molécule dans un état excité (1). Par émission spontanée, la molécule formée peut se désexciter soit vers le continuum pour redonner une paire d'atomes (2) soit vers un niveau vibrationnel du potentiel fondamental pour donner une molécule stable (3). (a) : le mouvement dans la zone interne est trop rapide pour que la molécule ait le temps de se désexciter à courte distance, rendant la transition (3) presque impossible. Au contraire, dans le cas (b) où le potentiel est en double puits et/ou le cas (c), où la présence d'un second point tournant (qui résulte du couplage spin-orbite entre les deux potentiels excités) favorise la désexcitation vers un niveau stable car le mouvement est ralenti à courte distance, la transition (3) est permise.

Pour produire des molécules froides stables, il faut donc augmenter la densité de probabilité de la molécule excitée dans la zone interne de façon à avoir des recouvrements vers les niveaux fondamentaux importants. Ceci n'est possible que dans certaines circonstances dépendant crucialement des propriétés des potentiels moléculaires. Parmi les potentiels corrélés à la limite $nS+nP$ des atomes alcalins, certains ont une forme très particulière, en double puits (figure 3.3 (b)), résultant de l'interaction spin-orbite. Ce potentiel possède une partie interne profonde à courte distance, et un puits externe beaucoup moins profond à grande distance, ce qui donne la possibilité de former des états rovibrationnels pour des grandes valeurs de la distance internucléaire et d'obtenir ainsi, des états moléculaires purement longue distance. On peut remarquer que l'amplitude de la fonction d'onde radiale est la plus importante dans la partie longue distance bien décrite par sa forme asymptotique. Rappelons que ces états ont été mis en évidence par Stwalley et al. [78]. Nous avons représenté la courbe de potentiel de cet état sur la figure 3.3 (b), ainsi que le module au carré de la fonction d'onde radiale d'un des états vibrationnels très excités.

Pour ces états, la structure en double puits permet d'augmenter considérablement la probabilité de désexcitation dans un des états stables. Comme l'illustre la figure 3.3 (b), la présence d'une branche répulsive douce dans le puits externe, située à distance intermédiaire, a pour effet de ralentir le mouvement des atomes à courte distance et donc favoriser la transition entre états liés. A cette distance, l'amplitude de la fonction d'onde radiale de l'état excité devient importante et la désexcitation dans l'état stable devient beaucoup plus probable. Bien entendu, l'excitation de ces états, par photoassociation, s'effectue au point de Condon externe (flèche (1)).

Ce schéma permet une production très efficace de molécules dans l'état stable ¹.

Cette approche a constitué la première démonstration expérimentale de l'obtention de molécules froides. Elle a été développée originellement au Laboratoire Aimé Cotton dans l'équipe de P. Pillet. Les molécules sont formées dans les états fondamentaux grâce à la photoassociation d'atomes froids de césium froids, comme illustré en figure 3.3(b). Nous verrons plus en détail, la formation de molécules froides de césium plus loin.

Continuons à nous intéresser à la figure 3.3, la partie (c) montre deux potentiels excités corrélés sous la limite $nS + nP$ des dimères alcalins. Ces deux potentiels résultent d'un couplage spin-orbite entre deux états électroniques excités, ce couplage spin-orbite crée un second point tournant ; à cette distance l'amplitude de la fonction d'onde radiale de l'état excité devient importante. On peut penser que les probabilités de transitions vers des états liés du fondamental, à relativement courte distance, seront assez importantes pour ces molécules. Nous avons représenté le carré des fonctions d'ondes radiales des deux états excités et de l'état fondamental, et nous pouvons prédire un recouvrement important entre ces deux fonctions d'ondes. Ce mécanisme sera vu en détail dans le paragraphe (3.6.1).

Formation de molécules froides homonucléaires

Cs₂

La première mise en évidence de la formation de molécules froides dans les états fondamentaux électroniques est réalisée *via* la photoassociation des états 0_g^- et 1_u corrélés à l'asymptote $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ [14]. Ces états appartiennent à une forme de potentiel particulière, qui présente une structure en double puits (voir figure 3.4). Cette forme de potentiel est le résultat de croisements évités dûs à la structure fine atomique, ces états sont les états moléculaires purement longue distance prévu par Stwalley et al. [78]. Le puits externe 0_g^- , possède à distance intermédiaire une branche répulsive assez douce. Ainsi les fonctions d'onde du potentiel externe possèdent une probabilité suffisante à cette distance pour y favoriser la désexcitation radiative vers des niveaux vibrationnels généralement élevés de l'état fondamental triplet $^3\Sigma_u^+$. Les molécules froides ainsi créées sont alors détectées par photoionisation non selective.

Dans le spectre de l'état 0_g^- corrélé à l'asymptote $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$, plusieurs (trois) raies de photoassociation, baptisées "raies géantes", mènent à une formation de molécules

¹Les molécules produites dans l'état fondamental triplet sont en fait métastables. Leur durée de vie peut cependant être très grande, de l'ordre de la minute.

froides très efficace. Ces raies ne sont pas encore toutes comprises, mais pour deux d'entre elles, un mécanisme d'effet tunnel entre les deux puits du potentiel 0_g^- a été proposée par [211]. Cet effet tunnel est suivi d'une désexcitation à très courte distance, vers les niveaux profonds du potentiel $3\Sigma_u^+$. Ainsi les taux de photoassociation qui ont été déterminés expérimentalement, peuvent atteindre une valeur de $\mathcal{R}_{PA}^{exp} \simeq 5 \text{ s}^{-1}/\text{atome}$.

En considérant essentiellement la photoassociation des niveaux du potentiel $0_g^- P_{3/2}$, C. Drag [100] a mesuré par trois méthodes le taux de formation de molécules froides \mathcal{R}_{MF}^{th} qui est de l'ordre de $\mathcal{R}_{MF}^{th} \simeq 0.1 \text{ s}^{-1}/\text{atome}$.

D'autres mécanismes de formation de molécules froides ont été observés et étudiés. Le couplage entre deux courbes de potentiel peut avantageusement augmenter à courte distance l'amplitude de la fonction d'onde de l'état excité, favorisant ainsi la désexcitation spontanée dans les potentiels fondamentaux. Ainsi le couplage résonant entre les potentiels $0_u^+(S + P_{1/2})$ et $0_u^+(S + P_{3/2})$, étudiés par Dion et al. [24] explique la formation efficace de molécules froides stables *via* la photoassociation de l'état 0_u^+ corrélé à l'asymptote $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$. Ce schéma est intéressant car probablement généralisable à un grand nombre de systèmes.

D'autre part, la photoassociation vers le potentiel $0_g^-(S + P_{1/2})$, variant en C_6/R^6 , conduit lui aussi à la formation de molécules froides. Ce schéma est important car il est généralisable à des systèmes hétéronucléaires dont les premiers états excités ont également un comportement en $1/R^6$.

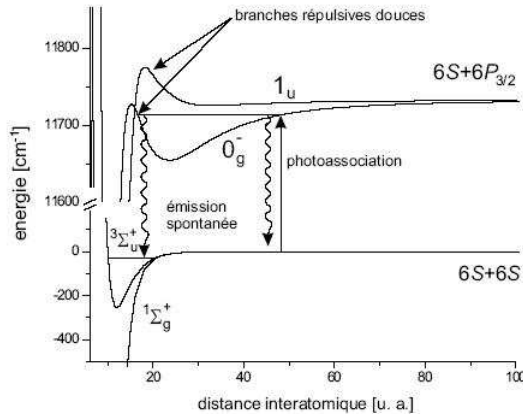


FIG. 3.4 – Les structures en double puits des potentiels excités 0_g^- et 1_u dans le césium. Les branches répulsives à distance intermédiaire sont suffisamment peu raides pour favoriser la désexcitation radiative au point tournant interne des puits de potentiels externes. Cette désexcitation est une transition lié-lié dont le produit est une molécule stable ou métastable.

*Rb*₂

La formation de molécules froides a été observée dans un piège magnéto-optique de rubidium par Gabbanini et al. [23]. Les molécules froides, dans l'état fondamental triplet, sont créées par un laser de photoassociation *via* l'état excité 0_g^- , qui présente, comme dans le césium un double puits à longue distance. Les deux isotopes ^{85}Rb et ^{87}Rb conduisent à la formation de molécules froides par ce mécanisme. Ces mêmes auteurs, [23], ont également étudié les mécanismes qui conduisent à l'observation de molécules dans le piège magnéto-optique sans laser de photoassociation (phénomène déjà observé par Fioretti et al. [14] et Takekoshi et al. [212] dans le césium). Ils observent des taux de formation de molécules froides très différents pour les deux isotopes, le taux du ^{85}Rb étant plus important que celui de ^{87}Rb . L'excitation par les lasers du piège magnéto-optique explique difficilement le taux important observé pour ^{85}Rb . En revanche, la recombinaison à trois corps peut permettre de comprendre cette production. La formation de molécules froides de *Rb*₂ a également été réalisée dans un condensat de rubidium, grâce à un processus à deux photons [213].

*K*₂

La photoassociation d'atomes de potassium [21] mène à la formation de molécules froides. Après l'étape de la photoassociation vers le potentiel $A^1\Sigma_u^+$, la molécule K_2^* se désexcite spontanément exclusivement vers le singulet $X^1\Sigma_g^+$ (ce cas constitue un exemple intéressant où la désexcitation se fait spontanément à courte distance. Flèche (3) du cas (a) de la figure 3.3 possible). En excitant un niveau vibrationnel élevé ($v \sim 191$) du potentiel $A^1\Sigma_u^+$, la désexcitation radiative a lieu vers des niveaux relativement profonds du singulet ($v \sim 36$). Ces molécules fondamentales sont détectées sélectivement par ionisation à deux photons. Le taux de formation de ces molécules froides est relativement modeste (10^3 molécules par seconde pour une densité atomique de 10^{11}cm^{-3}), mais a été multiplié par deux ordres de grandeurs par Nikolov et al. [22], grâce à un schéma de photoassociation à deux photons représenté en figure 3.5. Le premier photon excite la paire d'atomes en collision vers l'état $1^1\Pi_g$, au point de Condon situé vers $45 a_0$, tandis que le second photon excite à nouveau la molécule K_2^* vers l'état $5^1\Pi_u$ (ou $6^1\Pi_u$). Cette dernière se désexcite alors efficacement à très courte distance vers l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$. En particulier les premiers niveaux vibrationnels sont peuplés par cette désexcitation, y compris le niveau vibrationnel fondamental $v = 0$.

Formation de molécules froides hétéronucléaires

Les molécules hétéronucléaires sont aussi appelées molécules polaires du fait qu'elles possèdent un moment dipolaire permanent.

NaCs

L'équipe de Bigelow [29], a réussi à produire, par photoassociation d'atomes froids, des molécules froides polaires de NaCs (à une température translationnelle de $T =$

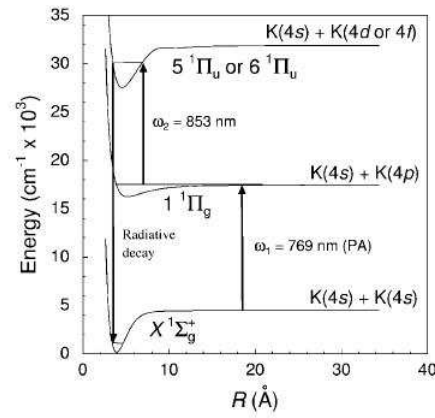


FIG. 3.5 – Schéma de photoassociation à deux photons dans le potassium, pour la production de molécules froides stables. La désexcitation s’effectue à très courte distance et permet une production des molécules dans les plus bas niveaux vibrationnels. Figure extraite de la référence [22].

$260 \pm 130 \mu K$ dans leur état fondamental. Dans leur expérience [214] sur la photoassociation de $NaCs$, les mesures faites des taux de photoassociation en $s^{-1} \mathfrak{R}_{PA}^{th} \sim 10^{-10} - 10^{-11} \sim 10^4 K_{NaCs}$. Ces taux montrent que seulement 1 paire dans $\sim 10^4$ paires d’atomes photoassociés forme une molécules dans un niveau lié de l’état fondamental. Ces molécules sont formées grâce au processus d’émission spontanée après formation dans un état un état excité par photoassociation. Ils espèrent, en améliorant l’expérience, arriver un taux de 10^6 molécules/seconde.

KRb

L’équipe de Bagnato [27] au Brésil a mené une expérience similaire à celle sur le $NaCs$. Ils ont réussi à observer un signal d’ions moléculaires de KRb (^{85}Rb et ^{39}K) dans leur état fondamental. Ces molécules ont été produites *via* photoassociation et détectées par une ionisation multiphotonique. Ils ont pu déterminer leur température et mesurer le taux de formation. En outre, ils ont proposé un schéma de formation basé sur la photoassociation de la paire d’atomes froids. Ce schéma est en accord avec la dépendance du signal d’ion moléculaire en densité et intensité de lumière. Dans cette expérience, les molécules translationnellement froides de KRb sont créées uniquement par la fréquence du piège magnéto-optique de Rb. La formation de la molécule commence avec une paire d’atomes libres dans leur état fondamental. Après l’absorption quasi-résonante du photon de fréquence du piège magnéto-optique de Rb, la paire est photoassociée dans quelques niveaux rovibrationnels d’un ou plusieurs potentiels corrélés aux asymptotes d’un état excité et d’un état fondamental. Dans la seconde étape, une petite fraction de ces molécules hétéronucléaires photoassociées, se désexcite spontanément vers les niveaux liés des potentiels fondamentaux singulet

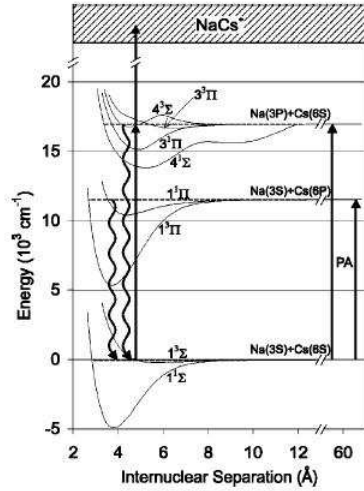


FIG. 3.6 – Diagramme des niveaux d'énergie pour un processus de détection et de formation de molécules froides de NaCs. Les atomes sont photoassociés dans un état moléculaire lié par un photon de photoassociation ("PA" dans la figure). La molécule excitée est autorisée à émettre dans un état électronique fondamental *via* émission spontanée, et est ionisée et ensuite détectée. Figure extraite de la référence [29].

ou triplet. Les molécules demeurent translationnellement froides. Les potentiels K^* -Rb accessibles par le laser du piège magnéto-optique de K , ne jouent aucun rôle car ils présentent des asymptotes répulsives à grande distance. Les dimères formés sont détectés par spectroscopie de masse.

L'équipe de Stwalley [26] a réussi à produire des molécules ultrafroides de KRb^* électroniquement excitées dans un piège magnéto-optique mixte. Les densités typiques sont $n_K = 3.10^{10} \text{ cm}^{-3}$ et $n_{Rb} = 1.10^{11} \text{ cm}^{-3}$. Les pièges magnéto-optiques individuels sont à des températures de ($T_K = 300 \mu K$ et $T_{Rb} = 100 \mu K$). Les deux MOTs sont soigneusement ajustés dans le but de maximiser le recouvrement des deux nuages atomiques. Les molécules électroniquement excitées sont produites par photoassociation suivie par une stabilisation radiative *via* émission vers l'état métastable ($a^3\Sigma^+$) et (dans certains cas) l'état fondamental ($X^1\Sigma^+$). Des pièges magnéto-optiques en configuration "dark-spot" sont utilisés. Ils observent le piégeage des molécules hétéronucléaires ultrafroides dans un premier temps en confinant les molécules triplet de KRb dans le champ hétérogène du MOT. Ils présentent aussi un spectre de photoassociation réalisé à 91 cm^{-1} sous l'asymptote $K(4s)+Rb(5p_{1/2})$. Ils ont pu aussi identifier les niveaux des huit courbes de potentiel du cas (c) de Hund de KRb^* dans cette région du spectre.

Jusqu'au travail récent de DeMille [194, 215], toutes les molécules MM' froides produites ont été formées dans l'état métastable $a^3\Sigma^+$. L'équipe de Julienne [216] a étudié la faisabilité de création de molécules froides de KRb dans leur état fondamental par spectroscopie de photoassociation à deux couleurs. Dans ce processus, les molécules sont formées à partir d'échantillons ultra-froids de K et de Rb . Ils ont évalué les

facteurs de Franck-Condon entre les niveaux vibrationnels des potentiels des états fondamental et excité en utilisant les moments dipolaires de KRb . Ils ont pu montrer qu'une transition Raman à deux photons pouvait former des molécules de KRb dans l'état fondamental dans des niveaux vibrationnels très bas.

RbCs

Très récemment encore des molécules ultrafroides de ^{85}Rb et ^{133}Cs ont été produites *via* photoassociation [28], [73], dans l'équipe de DeMille à l'université de Yale. Cette équipe [194, 215] a réussi à produire des molécules ultrafroides polaires de $RbCs$ dans l'état fondamental $X^1\Sigma^+$ et dans le niveau vibrationnel ($v=0$) à une température translationnelle de $\sim 100 \mu\text{K}$. Ces molécules sont froides dans tous les degrés de liberté. Ces molécules sont d'abord formées dans un niveau lié de l'état fondamental triplet et sont réexcitées par un photon dans un niveau lié d'un état électronique excité corrélé à l'asymptote $\text{Rb}(5s)+\text{Cs}(6p)$ (cet état excité i résulte du couplage de trois états excités : $c^3\Sigma^+$, $b^3\Pi$ et $B^1\Pi$), un second laser pulsé amène les molécules dans l'état fondamental $X^1\Sigma^+(v = 0, 1)$. L'état i est crucial dans cette technique. La composante $c^3\Sigma^+$ de l'état i et l'état initial $a^3\Sigma^+$ ($v=0$) ont des points tournants situés à distances interatomiques équivalentes ; suite à cela, la composante $B^1\Pi$ de l'état i contourne les règles de sélection interdisant les transitions de l'état initial triplet a vers l'état final singulet X . De plus, les minimums des potentiels $B^1\Pi$ et $X^1\Sigma^+$ coïncident, ce qui conduit à de grands facteurs de Franck-Condon favorisant le transfert vers le niveau $X(v = 0)$. Dans cette expérience, les densités atomiques sont très grandes ($n_{Rb} = 10^{11}$ et $n_{Cs} = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$), ainsi que les nombres d'atomes ($N_{Rb} = 2 \cdot 10^8$ et $N_s = 3 \cdot 10^8$). Les deux espèces sont à la température de $\sim 75 \mu\text{K}$ (voir figure 3.7).

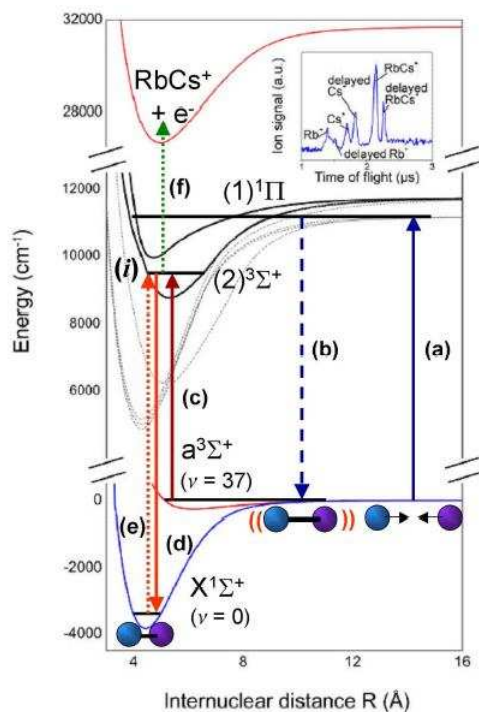


FIG. 3.7 – Schéma de formation et processus de détection de molécules ultra froides de RbCs. (a) La paire d'atomes en collision est excitée en molécules RbCs* faiblement liées, en (b) elles sont émises vers l'état $a^3\Sigma^+$ ($v = 37$). (c) Les molécules métastables a ($v=37$) sont excitées dans le niveau i et enfin, (d) amenées vers l'état $X^1\Sigma^+$ ($v=0$). Les molécules sont détectées directement (e) en les amenant vers le niveau excité d'origine et ensuite en les ionisant (f), ou alors indirectement en les détectant par la dépopulation du niveau i (dans ce cas, seule l'étape (f) est nécessaire). Figure extraite de [215]

3.2.2 Formation de molécules froides par transition Raman

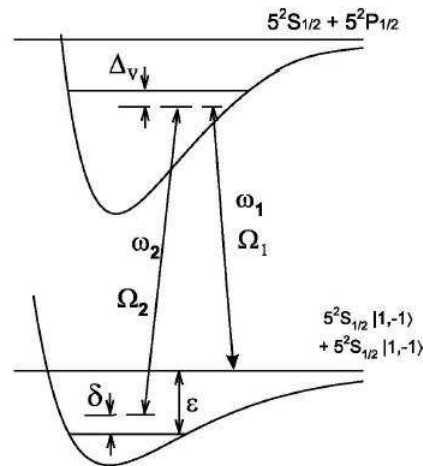


FIG. 3.8 – Schéma de principe de la transition Raman continuum \rightarrow discret, réalisée dans un condensat de Bose-Einstein de ^{87}Rb par l'équipe de D. Heinzen. Les deux photons sont issus d'un même laser, décalés en fréquence par un modulateur acousto-optique, et sont donc cohérents. La figure est tirée de la référence [213].

Dans un condensat de Bose-Einstein, non seulement la densité est plus forte que dans les nuages thermiques, ce qui favorise bien sûr la photoassociation, mais l'élargissement énergétique des états de collision y est beaucoup plus faible. De plus la photoassociation est augmentée du facteur bosonique ("Bose enhancement factor") particulier à l'état condensé. Cela autorise donc la mesure de niveaux moléculaires de largeur naturelle beaucoup plus faible, et ce avec des lasers peu intenses, vu la grande efficacité de la photoassociation. Tirant parti de ces deux points, en 2000, l'équipe de D. Heinzen effectue une photoassociation à deux couleurs dans un condensat de ^{87}Rb , réalisant ainsi une transition Raman stimulée des états à deux atomes vers un niveau vibrationnel de l'état moléculaire fondamental [213] (voir figure 3.8). La largeur extrêmement fine (\sim)1.5kHz de la résonance reflète ainsi la durée de vie de cet état moléculaire, limitée par la diffusion Raman des lasers de photoassociation par les molécules. Outre l'ouverture d'une voie vers un condensat de molécules, ce travail initie l'étude des interactions entre atomes ultrafroids et molécules ultrafroides, et révèle également l'incroyable précision spectroscopique accessible. Ainsi les énergies des niveaux des états moléculaires fondamentaux pourraient être mesurées avec une précision de l'ordre de 10^{-7}cm^{-1} ! Notons encore que dans cette expérience, le caractère cohérent du condensat ne joue aucun rôle. En particulier, la cohérence entre l'échantillon atomique et l'échantillon moléculaire n'y est pas étudiée.

3.2.3 Formation de molécules froides par résonance de Feshbach

Nous savons que pour former des molécules stables, il faut augmenter la densité de probabilité dans la zone interne. On peut utiliser pour cela une résonance de Feshbach.

Nous avons vu en introduction qu'à l'aide de champs magnétiques, il est possible de contrôler la position d'une résonance [217, 218, 34, 219, 92] et ainsi de modifier à loisir les interactions entre particules via la longueur de diffusion. Une résonance de Feshbach a été observée dans un condensat de Bose-Einstein de sodium [33] ainsi que dans des gaz froids de rubidium [37] et de lithium [220].

L'équipe de R. Grimm à Innsbruck a réussi à obtenir des molécules de Cs_2 [221] toujours par résonance de Feshbach.

Notons pour finir que les expériences de création de molécules froides dans les gaz quantiques dégénérés ne forment pour l'instant que des molécules très peu liées, puisque formées par résonance de Feshbach. Un large champ de recherche est donc ouvert pour atteindre des niveaux plus profonds dans les potentiels moléculaires et donc former des molécules plus "stables" [88]).

Très récemment, l'équipe de Ketterle [222] a réussi à observer des résonances de Feshbach entre les atomes 6Li et ^{23}Na , de même, l'équipe de D. Jin au NIST [223] a réussi à observer des résonances de Feshbach entre les atomes ^{87}Rb et ^{40}K . Les deux équipes pensent que ces résonances pourraient être utilisées pour la production des molécules froides correspondantes.

3.3 Modèle simple pour le calcul des taux de photoassociation et formation de molécules froides

Dans la première partie de cette section, nous exposons le calcul du taux de photoassociation, qui permet de caractériser l'efficacité de la réaction. Le problème est d'estimer combien de molécules excitées dans un niveau ro-vibrationnel donné peuvent être créées dans une expérience de photoassociation. Plusieurs équipes ont travaillé sur la théorie de la photoassociation utilisant dans un cas un formalisme indépendant du temps, utilisant des fonctions d'onde stationnaires (Napolitano et al. [224], Pillet et al. [225], Côté et Dalgarno [226], et Mackie et Javanainen [227]), et dans un autre cas, un formalisme dépendant du temps, avec une propagation de paquets d'ondes (Mackholm et al. [228], Vardi et al. [229], Boesten et al. [230], Vala et al. [90] et Vatasescu et al. [91]).

L'approche présentée ici consiste à évaluer la probabilité de transition radiative en utilisant le formalisme de la matrice densité. Des expressions analytiques simples ont été obtenues [225]. Elles permettent de donner des ordres de grandeur des taux de photoassociation pour les expériences envisagées. Ces taux ont été soigneusement calculés pour le césium et comparés aux résultats expérimentaux [100]. Cette description relativement exhaustive nous permettra dans la section 3.6, de calculer les taux de

photoassociation pour des dimères alcalins hétéronucléaires et ensuite de comparer les résultats théoriques avec ceux obtenus pour l'état $0_g^- P_{3/2}$ du césium (que nous prenons comme référence).

Dans la seconde partie, nous définissons les taux de formation de molécules froides hétéronucléaires et comme pour les taux de photoassociation, nous les comparons aux taux de formation de molécules froides de césium.

3.3.1 Théorie de la photoassociation

L'approche perturbative des interactions atomes-laser développée par Pillet et al. [225] utilise un point de vue atomique et l'évolution du système est décrite en utilisant le formalisme de la matrice densité.

L'ensemble des N atomes interagissent selon une interaction à deux corps dûe au champ laser décrit dans l'approximation dipolaire électrique. La matrice densité au temps $t=0$ est calculée pour l'ensemble des atomes quand le laser est éteint, en supposant que la distribution des vitesses relatives des atomes en collision est décrite par une distribution de Maxwell-Boltzmann à la température T .

Les principales approximations de la théorie développée dans la référence [225] sont :

- l'équation de Schrödinger dépendant du temps est résolue et est considérée l'excitation par un laser continu monochromatique, polarisé linéairement, suivant les premières expériences ;
- l'assemblée d'atomes est supposée être à l'équilibre thermodynamique (la température est très faible et de l'ordre de $140 \mu\text{K}$). Le taux de photoassociation, qui décrit l'efficacité du processus, doit être inférieur aux temps de relaxation du nuage atomique ;
- on se place dans le régime du champ faible². On parle de champ faible quand on peut utiliser la théorie des perturbations pour étudier l'effet du couplage avec le rayonnement lumineux. Autrement dit, le système étant décrit à l'instant initial par la matrice densité initiale, l'approche perturbative consiste à dire que la modification de cette matrice est très faible si aux instants ultérieurs dans les équations d'évolution on peut remplacer la matrice à l'instant t par la matrice initiale.

L'équation de l'évolution temporelle de la matrice densité, en représentation d'interaction, est résolue dans une approche perturbative. Pour une intensité I faible du laser de photoassociation à résonance, le taux de photoassociation \mathfrak{R}_{PA} (en s^{-1}), est défini comme le nombre de molécules photoassociées, formées dans un niveau individuel (v, J) , divisé par le nombre total $N_{at} = n_{at}V$ (n_{at} est la densité d'atomes dans le piège) d'atomes dans un piège magnéto-optique de volume V .

²Cette hypothèse du champ faible a été confirmée par l'analyse des données expérimentales et le calcul du taux d'absorption-émission stimulée dans le cas du césium [100].

3.3.2 Expression du taux de photoassociation

Partant d'un état $\chi_{E,J}$ du continuum d'énergie E appartenant à l'état électronique fondamental g , le laser de photoassociation de longueur d'onde λ_{PA} et d'intensité I peuple un niveau vibrationnel v d'un état électronique excité Ω , $\phi_{v\Omega,J'}$. La largeur en énergie de la distribution thermique du nuage d'atomes froids est extrêmement faible, bien plus faible que l'écart entre les niveaux d'énergie photoassociés et donc seuls les états résonnants du continuum avec une énergie $E = E(v_\Omega) - \frac{hC}{\lambda_{PA}}$ sont considérés, $E(v_\Omega)$ étant l'énergie du niveau photoassocié (C étant la célérité de la lumière, λ la longueur d'onde du laser de photoassociation et h la constante de Planck). On considère dans ce qui suit que $E = k_B T$, (k_B étant la constante de Boltzmann et T la température des atomes).

Les propriétés physiques des collisions à basses températures sont particulières :

- lorsque l'énergie de collision est faible, la barrière centrifuge empêche les atomes de s'approcher l'un de l'autre. En effet, au fur et à mesure que le moment de rotation des noyaux l augmente, la particule aura besoin de plus d'énergie cinétique pour aller "sonder" le potentiel $V(R)$. Les collisions sont dominées par la diffusion en onde s et tous les états correspondent à la condition $l = 0$. La distribution centrifuge est donc négligée ici.
- La longueur d'onde de de Broglie est grande devant la portée des interactions interatomiques, des phénomènes purement quantiques interviennent.

Le taux de photoassociation \mathfrak{R}_{PA} par atome (en s^{-1}) est défini comme le quotient du nombre de molécules photoassociées par unité de temps et du nombre initial d'atomes dans le piège. Son expression est la suivante :

$$\mathfrak{R}_{PA}(\Delta_v) = \mathcal{A}_\Omega(J, J', \epsilon) \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{h}{2} n_{MM'} \lambda_{th}^3 \times |\langle \phi_{MM'}(v_\Omega) | \Gamma | \chi_{MM'}(k_B T) \rangle|^2 \quad (3.3)$$

où :

- Δ_v : est l'énergie de liaison (égale au detuning du laser de PA avec une intensité I par rapport à la raie de résonance atomique, à résonance, Δ_v est égal au detuning) du niveau vibrationnel peuplé v , relative à la limite de dissociation de l'état électronique Ω .
- La fréquence moléculaire de Rabi $2\Gamma(R) = \frac{E_{PA} D(R)}{\hbar}$ est proportionnelle au moment de transition moléculaire dipolaire $D(R)$ (dépendant de R) et à l'amplitude du champ électrique du laser de PA (E_{PA}).
- $\mathcal{A}(J, J', \epsilon)$: facteur angulaire des éléments de matrice du dipôle entre un état initial de collision et les états moléculaires correspondants. L'état initial est une paire d'atomes dans un état fondamental donné (niveau hyperfin). Le facteur angulaire va dépendre de l'état initial g , de l'état final Ω , de la polarisation du laser $\vec{\epsilon}_{PA}$ et de la structure hyperfine des atomes que nous négligerons par la suite.
- $\lambda_{th} = h\sqrt{(1/3\mu k_B T)}$: longueur d'onde de de Broglie, avec μ : masse réduite du système en collision.
- $n_{MM'}$ est la densité de paires d'atomes.

La variation en R du moment dipolaire électrique moléculaire est négligée et l'élément de matrice du couplage se réduit à l'intégrale de recouvrement entre la fonction d'onde décrivant l'état initial de collision $\chi_{EJ}(k_B T)$ et la fonction d'onde $\phi_{MM'}(v_\Omega)$ décrivant l'état rovibrationnel peuplé.

On retrouve dans l'équation 3.3 l'idée très importante que l'efficacité de la photoassociation dépend de l'intégrale de recouvrement entre la fonction d'onde $\chi_{E,J}(k_B T)$ (normalisée en énergie) de l'état de collision initial (deux atomes) et de la fonction d'onde liée du niveau vibrationnel $\phi_{MM'}(v_\Omega)$ peuplé de façon résonnante de l'état final (la paire d'atomes photoassociés) : $|\langle \phi(v_\Omega) | \chi(k_B T) \rangle|^2$.

L'équation 3.3 divisée par $n_{MM'}$ et par le flux de photons incidents $\phi = I/h\nu_{PA}$, donne un taux k par photon et par unité de densité (sa dimension est une longueur puissance -5 , (cm^{-5})), qui est similaire aux expressions données par d'autres auteurs (Napolitano et al. [224], Julienne [231] et Côté et al. [226]).

La fonction de l'état initial, décrite par sa forme asymptotique déphasée $\chi_{E,J}(k_B T)$, est une fonction de collision qui oscille d'autant plus lentement que la température est plus basse.

La fonction radiale de l'état excité correspond à la fonction propre de vibration d'une molécule. Compte tenu de la localisation spatiale au point de Condon externe, R_{ext} , cette fonction d'onde peut être écrite comme une fonction $\phi\delta(R_{ext})$. Pour obtenir une valeur approchée des taux, le recouvrement entre les fonctions d'onde radiales est évalué dans l'approximation la plus simple, l'approximation δ [225]. Le recouvrement est alors égal à $\chi_{E,J}(R_{ext})$ [231]. Cette approximation s'appelle approximation de la réflexion. Ainsi, le taux de photoassociation est proportionnel au module au carré de la fonction d'onde initiale évaluée au point tournant du potentiel moléculaire excité. Le processus de photoassociation permet ainsi de sonder la fonction d'onde radiale de l'état fondamental.

Le recouvrement dans ce cas est évalué par la méthode d'intégration et d'interpolation de Simpson.

Le recouvrement entre ces deux fonctions sera plus grand lorsque les deux fonctions d'onde auront une probabilité de présence importante à grande distance.

La photoassociation va être plus efficace à grandes distances internucléaires ou à petits detunings.

Le taux de photoassociation est proportionnel à la longueur d'onde théorique de de Broglie, qui est inversement proportionnelle à la masse réduite du système étudié.

Dans la référence [225], l'approximation analytique suivante a été donnée :

$$\mathfrak{R}_{PA} \propto n_0 T^{-1} \mu^{-1/2} K_0^2 \frac{I^2}{I_0^2} \Delta_n^{-7/6} C_3^{2/3} \quad (3.4)$$

où n_0 est la densité des atomes au centre du piège, T la température des atomes à l'intérieur du piège, C_3 le coefficient asymptotique du potentiel excité (dans le cas d'un dimère homonucléaire), I l'intensité du laser de photoassociation, I_0 l'intensité de saturation, μ est la masse réduite du système, $2K_0$ la fréquence de Rabi à l'intensité de saturation et Δ_n est le décalage du laser de photoassociation.

L'efficacité de la photoassociation croît donc linéairement avec l'intensité du laser,

tant que la saturation n'est pas atteinte. L'intensité de saturation est définie par $I_0 = \pi h C \Gamma / (3\lambda_{PA}^3)$, on prévoit aussi une décroissance du signal en fonction du décalage en fréquence du laser par rapport à la transition atomique.

Approximation de la réflexion [231]

Selon cette approximation, le facteur de Franck-Condon (recouvrement) est proportionnel à :

$$|\Psi_g(R_C)|^2 / D_C$$

où $\Psi_g(R_C)$ est la fonction d'onde de diffusion de l'état fondamental à R_c qui est le point de Condon ou point tournant.

D_C est la différence entre les pentes des potentiels de l'état fondamental et de l'état excité à R_C .

La fonction de diffusion $|\Psi_g^+(E)\rangle$ est donnée par :

$$|\Psi_g^+(E)\rangle \sim e^{i\eta_g} \left(\frac{2\mu}{\pi\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sin(k_\infty R + \eta_g)}{\sqrt{k_\infty}} \quad (3.5)$$

où

- $\left(\frac{2\mu}{\pi\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}$ est le facteur qui assure la normalisation en énergie de la fonction d'onde,
- et $k_\infty = (2\mu k_\infty T / \hbar^2)$ est le vecteur d'onde thermique de la collision dans l'état fondamental.

L'équation 3.5 est valable pour de grandes valeurs de la distance internucléaire.

Dans la référence [1], les auteurs ont utilisé cette méthode pour calculer les recouvrements des dimères hétéronucléaires. Les recouvrements sont calculés au point tournant. Notre approche est différente puisque nous calculons les recouvrements sur tout le domaine de la distance internucléaire. Nous comparerons dans la section (3.6.4) les deux approches.

3.3.3 Expression du taux de formation de molécules froides

Une fois formée par photoassociation, la molécule excitée va se désexciter radiativement, seuls des processus de désexcitation peuplant les états liés du niveau électronique fondamental conduiront à la formation de molécules froides (les autres modes de désexcitation correspondent à la dissociation de la molécule (figure 3.3 (a))).

Pour l'état $0_g^- P_{1/2}$ des dimères alcalins homonucléaires (6Li_2 [81], 7Li_2 [80], K_2 [232], Rb_2 [71], Cs_2 [100]), on a observé la formation de molécules froides. Cette formation s'explique ici par une probabilité non négligeable de transition lié-lié entre les états discrets du potentiel excité et ceux du potentiel fondamental (où on néglige les interactions hyperfines). La situation est, ici, particulière, en raison de la forme asymptotique en $1/R^6$ du potentiel excité similaire à celle du potentiel fondamental si bien que les fonctions d'onde radiales des états liés oscillent à des fréquences proches. Et donc le recouvrement des fonctions d'onde liées, comme nous le verrons dans la

section (3.6.5) sera important, puisque les maximums localisés des fonctions d'onde seront en coïncidence. En raison du principe de Franck-Condon, la transition dans ce cas sera favorisée, et l'émission spontanée vers l'état lié sera plus importante.

La forme asymptotique des potentiels excités corrélés à la limite $nS + n'P$ des atomes alcalins hétéronucléaires, est similaire à celle du potentiel $0_g^- P_{1/2}$ des dimères alcalins homonucléaires, *i.e* en $1/R^6$. Et comme le processus de formation de molécules froides s'est révélé efficace pour des potentiels variant en $1/R^6$, on peut envisager une réaction et une efficacité similaires avec les systèmes hétéronucléaires. Notons de plus dans ce cas, les deux potentiels décroissant rapidement, pour un detuning donné, le photon est absorbé à plus courte distance que dans une molécule homonucléaire.

Définition du taux de formation de molécules froides

Nous nous proposons à présent de définir les grandeurs qui permettent de caractériser le taux de formation de molécules froides. Le paramètre important est la probabilité de transition entre un état lié (v, J) de l'état électronique excité Ω et un état lié (v', J') des potentiels corrélés sous la limite $nS + n'S$. Elle dépend du recouvrement entre les fonctions d'ondes radiales.

Si une fraction des molécules photoassociées se désexcite vers le fondamental, une autre partie de ces molécules se désexcite à longue distance en deux atomes libres. Pour chaque niveau vibrationnel, nous appelons le *rapport de branchement* la fraction de molécules stables formées par rapport au nombre total de molécules qui se désexcitent.

A partir d'un état ro-vibrationnel (v, J) donné, plusieurs niveaux ro-vibrationnels (v', J') stables peuvent être peuplés.

$$\mathcal{B}(v) = \frac{1}{A(v)} \sum_{v'} A_{vv'} \quad (3.6)$$

$$\mathcal{B}(v) = \frac{1}{A(v)} \sum_{v'} \frac{4e^2 \omega_{vv'}^3}{\hbar c^3} |\langle \phi(v) | D | \phi(v') \rangle|^2 \quad (3.7)$$

où :

- $\omega_{vv'}$ est la fréquence du photon émis.
- $A(v)$ est la probabilité d'émission totale.
- c est la célérité de la lumière et e la charge de l'électron.
- et $A_{vv'}$ est la probabilité d'émission de $v \rightarrow v'$

Une fois le rapport de branchement calculé, on relie facilement le taux de photoassociation $\mathfrak{R}_{PA}(\Delta_v, v, J)$, dans un niveau de rotation J et de vibration v d'un état électronique excité Ω , au taux de molécules froides produites dans un état ro-vibrationnel donné $\mathfrak{R}_{CM}(\Delta_v, v', J')$:

$$\mathfrak{R}_{CM}(\Delta_v, v', J') = \mathfrak{R}_{PA}(\Delta_v, v, J) \mathcal{B}(v) \quad (3.8)$$

Pour chaque état excité discret, la production efficace de molécules froides résulte d'un compromis entre l'étape de photoassociation (transition continuum-lié)

qui peuple l'état considéré et l'étape de stabilisation radiative (transition liée-liée) conduisant à la formation de molécules froides ou transition lié-continuum redonnant une paire d'atomes chauds.

Comme pour le taux de photoassociation, nous négligerons la variation en R du moment de transition dipolaire, et comme le domaine d'énergie des niveaux vibrationnels peuplés v' , déterminé par les facteurs de Franck-Condon, est étroit, cela permet de négliger la variation de la fréquence $\omega_{vv'}$. L'expression du rapport de branchement devient :

$$\mathcal{B}(v) = \sum_{v'} |\langle \phi(v) | \phi(v') \rangle|^2 \quad (3.9)$$

La somme couvre tous les niveaux vibrationnels liés des états du niveau du fondamental. *Le recouvrement, dans ce cas, est calculé par une méthode directe.*

3.4 Méthodes numériques

L'analyse des processus de formation de molécules froides (détermination des taux de formation et analyse des états moléculaires peuplés) demande le calcul d'un grand nombre d'éléments de matrice de l'opérateur moment dipolaire électrique de type état du continuum-état lié pour l'étape de la photoassociation et de type état lié-état lié pour l'étape de la stabilisation radiative.

Dans notre travail, nous évaluerons de façon numérique les intégrales de recouvrement et comparerons nos résultats à ceux de l'approche analytique développée dans la référence [225]. Il est donc nécessaire de déterminer les énergies et les fonctions d'onde des niveaux mis en jeu dans les deux processus : les niveaux continus décrivant l'état collisionnel initial et les niveaux liés rovibrationnels de l'état électronique excité ou fondamental.

La partie rotationnelle de la fonction d'onde $D_{MA}^J(\phi, \theta, \Psi)$ est donnée analytiquement sous la forme de fonction de Wigner, solution de l'équation différentielle angulaire de Schrödinger. La partie vibrationnelle de la fonction d'onde nécessite la résolution numérique de l'équation différentielle radiale de Schrödinger :

$$\left[T(R) + V_{JA}(R) - E_{vJ} \right] \chi_{vJ}(R) = 0 \quad (3.10)$$

où T est l'énergie cinétique et $V_{JA}(R)$ est la somme du potentiel centrifuge effectif ressenti par les noyaux en vibration et du potentiel électronique.

Nous discutons dans ce paragraphe le choix des méthodes numériques utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger en reportant au paragraphe (3.5) la discussion portant sur le choix des potentiels.

Il existe un grand nombre de méthodes numériques permettant d'intégrer l'équation de Schrödinger radiale 3.10. Un premier type de méthodes dites "méthodes des différences finies" telle que la méthode de Numérov [233] est basée sur une approximation polynômiale locale de la fonction d'onde. La méthode Numerov est une méthode de

prédiction-correction du 5^{me} ordre permettant de résoudre des équations différentielles du second ordre. La convergence de ces méthodes est donnée par une loi Δx^n où Δx est le pas de la grille et n est l'ordre de l'approximation des différences finies. A cause de cette propriété locale, ces méthodes demandent un pas petit, donc un très grand nombre de points. Une intégration numérique est réalisée pour chacun des niveaux étudiés, niveau lié ou niveau du continuum. Dans l'étude du spectre discret, ces méthodes font appel à un processus itératif pour déterminer les énergies des états liés. Ce processus itératif peut ne pas converger dans l'étude d'états électroniques couplés où dans l'étude d'un potentiel présentant un double puits, puisque dans ces cas l'écart d'énergie entre niveaux consécutifs varie de manière discontinue. Dans l'étude d'un niveau du continuum, pour une énergie donnée on effectue simplement une intégration "sortante" à R croissant.

Un second type de méthodes dites "représentation matricielle variationnelle" (VBR : Variational Basis Representation) utilise une base finie de N fonctions orthogonales et les énergies des niveaux et les coefficients donnant le développement des fonctions d'onde sur cette base sont obtenus de façon variationnelle par diagonalisation de la matrice hamiltonienne $N \times N$ tronquée. N niveaux sont obtenus par une seule diagonalisation. La convergence des calculs dépend alors du choix des fonctions de base et de la dimension N .

Les méthodes que nous utilisons doivent répondre aux spécificités de notre problème. Il est en effet nécessaire de considérer un grand nombre de niveaux rovibrationnels appartenant à l'état électronique fondamental ou à l'état excité, et s'étendant à plus ou moins grande distance internucléaire : les niveaux de grande extension spatiale proches de la limite de dissociation peuplés par photoassociation et les niveaux profonds du puits fondamental peuplés par stabilisation radiative.

Pour calculer de façon globale et simultanée un grand nombre d'états rovibrationnels liés, nous avons utilisé une méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier. Cette méthode présente comme principal intérêt de permettre l'étude facile de potentiels présentant un double puits ou d'un problème à plusieurs voies couplées. Un avantage supplémentaire de cette méthode est de demander une densité de points moins grande que la méthode de Numerov. Nous verrons, plus loin, que cette méthode possède les avantages des méthodes des différences finies et ceux des méthodes VBR. En effet, elle représente une fonction d'onde par les coefficients de son développement sur une base de fonctions comme dans les méthodes VBR.

Une autre spécificité de notre étude concerne la longueur d'onde de de Broglie locale

$$\lambda(E, R) = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\mu(E-V(R))}} = \frac{2\pi}{p(E,R)}$$

où :

- $p(E, R)$: impulsion locale classique
- μ : masse réduite du système (mouvement relatif)

³Dans tout ce qui suit, nous allons utiliser des unités atomiques (u.a.) et donc $\hbar = 1$, si bien que nous pourrons utiliser indifféremment p (impulsion) ou k (vecteur d'onde) puisque : $p = \hbar k$.

décrivant une fonction d'onde d'énergie E dans le potentiel $V(R)$. Pour des états liés de grande élongation, cette longueur d'onde varie de plusieurs ordres de grandeur entre la zone interne où le potentiel est très attractif et la zone asymptotique où le potentiel est très faible. La description de toutes ces fonctions d'onde sur une même grille de points équidistants nécessite un très grand nombre de points (grande extension, faible pas) et occupe donc une grande place en mémoire pour le calcul et le stockage. L'introduction d'une coordonnée radiale adaptée à la longueur d'onde de de Broglie locale (*introduisant une densité de points plus grande dans la zone où la fonction d'onde varie le plus rapidement*) est à la clé des développements théoriques, comme nous le verrons plus loin.

Enfin, le processus de photoassociation étant considéré comme la collision de deux atomes froids, nous serons amenés à déterminer des fonctions d'onde du continuum de très basse énergie dans l'état électronique fondamental. Les énergies propres d'une boîte d'extension spatiale L étant données par :

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8\mu L^2}$$

les états de basse énergie ($E/k_B \sim 100\mu K$) intervenant dans les collisions froides nécessitent des boîtes de grande dimension pour décrire les états du continuum discrétisé (Cs_2 $E_1 \sim 30\mu K$ $L = 20000 a_0$). Nous avons préféré utiliser la méthode de Numerov-Cooley pour obtenir par intégration sortante à une énergie choisie (avec R croissant) les fonctions d'onde du continuum pour une énergie E choisie.

Dans la suite de cette section, nous décrivons la méthode de FGH bien adaptée à l'étude du spectre rovibrationnel discret des molécules froides. Nous ne discuterons pas la méthode de Numerov abondamment décrite dans d'autres ouvrages [159].

3.4.1 Méthode générale de collocation

Représentation d'une fonction sur une grille

La méthode FGH est un cas spécial de la méthode de collocation [234] qui utilise une interpolation de type global, toute fonction $\Psi(R)$ étant développée sur une série finie de N fonctions analytiques $g_n(R)$ linéairement indépendantes et obéissant aux conditions aux limites imposées dans le problème considéré.

$$\Psi(R) \simeq \bar{\Psi}(R) = \sum_{n=1}^N a_n g_n(R)$$

Les N coefficients a_n représentent la fonction $\Psi(R)$.

Dans une méthode de collocation, les fonctions sont représentées sur une grille de N points R_j ($j = 1, N$) qui sont les points de collocation. On détermine les coefficients du développement a_n par la condition

$$\Psi(R_j) = \bar{\Psi}(R_j) = \sum_{n=1}^N a_n g_n(R_j)$$

(représentation exacte de la fonction d'onde aux N points de la grille)
qui peut s'écrire sous forme matricielle

$$\Psi = Ga$$

où :

- Ψ représente le vecteur $\Psi(R_j)$
- \mathbf{a} représente le vecteur a_n

Si la matrice G d'éléments $G_{nj}=g_n(R_j)$ n'est pas singulière, elle peut être inversée. Représenter la fonction d'onde $\Psi(R)$ par les coefficients a_n est équivalent à la représenter par ses valeurs $\Psi(R_j)$ aux points de collocation ($\mathbf{a} = G^{-1}\Psi$).

Dans un schéma de collocation orthogonale les fonctions de bases sont normées à 1 et orthogonales et les points de la grille sont choisis de façon telle que les relations d'orthogonalité soient satisfaites :

$$\sum_{n=1}^N g_n^*(R_i)g_n(R_j) = \delta_{ij}$$

$$\sum_{j=1}^N g_n^*(R_j)g_m(R_j) = \delta_{nm}$$

alors les coefficients a_n sont donnés par :

$$a_n = \sum_{j=1}^N \Psi^*(R_j)\chi(R_j)$$

3.4.2 Méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier

L'hamiltonien H radial, décrivant un mouvement dans le potentiel électronique $V(R)$ ($V(R)$ peut-être un simple puits de potentiel, un double puits de potentiel ou alors deux potentiels couplés) conduit à l'équation aux valeurs propres :

$$H\Psi_v(R) = E_v\Psi_v(R) \quad (3.11)$$

$$H = T + V \quad (3.12)$$

où T est l'opérateur énergie cinétique, V est l'opérateur énergie potentielle et R est la distance internucléaire.

Toute cette démarche s'inscrit dans le cadre de l'utilisation de la méthode de Fourier pour la représentation de l'hamiltonien sur une grille de points (Fourier Grid Hamiltonian). La méthode FGH a été proposée pour le calcul des états liés par Marston et Balint-Kurti [235], à la suite des articles de R. Kosloff [236],[237] qui a introduit la méthode de la transformée de Fourier dans la résolution numérique des problèmes quantiques dépendants du temps. FGH est un cas particulier de la méthode de représentation sur des variables discrètes DVR [238] (elle-même une application de la méthode générale de collocation [234]), la méthode est connue comme très efficace pour le calcul des états propres des voies couplées : elle a été utilisée par Monnerville et Robbe pour décrire la prédissociation due à l'interaction d'une voie liée avec une voie dissociative [239], [240] et par Dulieu et Julienne [241] pour le calcul des états liés des dimères alcalins. Pour obtenir les énergies E_v et les fonctions vibrationnelles $\Psi_v(R)$, la matrice hamiltonienne est d'abord évaluée sur une grille de points et ensuite diagonalisée.

En ce qui nous concerne, nous utilisons un programme numérique mis au point par O. Dulieu et P. Julienne [241], qui a été amélioré par V. Kokoouline dans sa thèse [98, 95, 96] et par la suite par C. Dion (entre 1999 et 2001). Cette version utilise une grille à pas variable, réduisant considérablement le nombre de points de la grille, ce qui la rend très puissante, car elle permet le calcul des fonctions vibrationnelles jusqu'à des grandes distances interatomiques.

Commençons d'abord par présenter la méthode, puis nous décrirons le passage à une grille à pas variable.

La méthode de Fourier pour la représentation de l'hamiltonien sur une grille de points (FGH)

Dans cette partie, nous allons rappeler les formules de base donnant l'opérateur hamiltonien $H=T+V$ sur une grille de points. L'hamiltonien peut-être décrit soit dans la représentation des positions, soit dans celle des impulsions. Dans la méthode de Fourier les deux sont utilisées pour rendre la résolution du problème plus facile. Ainsi, la méthode part de l'observation que H est une somme entre un opérateur potentiel V local dans l'espace des positions (ou, diagonal dans la représentation $|R\rangle$ de la position) et l'opérateur de l'énergie cinétique T , non-local en R , mais qui est diagonal dans la représentation $|k\rangle$ de l'impulsion ($p = \hbar k$). Les éléments de matrice de chaque opérateur sont calculés dans la représentation qui lui est la mieux adaptée.

Eléments de matrice de H dans une représentation sur une grille de points

On va noter par $|R\rangle$, respectivement $|k\rangle$ les vecteurs de base dans les deux représentations, qui vérifient les relations d'orthogonalité et de complétude (rappelons que $\hbar = 1$) :

$$\langle R|R'\rangle = \delta(R - R'), \quad \langle k|k'\rangle = \delta(k - k') \quad (3.13)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |R\rangle\langle R|dR = \hat{I}_R, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle\langle k|dk = \hat{I}_k \quad (3.14)$$

(\hat{I}_R et \hat{I}_k sont des opérateurs identité).

Le passage d'une représentation à l'autre introduit une transformation de Fourier qui associe à toute fonction d'onde $\Psi(R)$ dans l'espace des positions, une fonction d'onde $\Phi(p)$ dans l'espace des impulsions ($p = \hbar k$).

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikR} \Psi(R) dR$$

et l'opérateur impulsion $-i\hbar \frac{d}{dR}$ dans l'espace des positions a pour image l'opérateur $\hbar k$ dans l'espace des impulsions.

$$\langle k|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikR} \quad (3.15)$$

Les éléments de matrice des opérateurs T et V diagonaux respectivement dans les représentations $|k\rangle$ et $|R\rangle$ sont donnés par :

$$\langle R' | V | R \rangle = V(R) \delta(R - R') \quad (3.16)$$

$$\langle k' | T | k \rangle = \frac{k^2}{2\mu} \delta(k - k') \quad (3.17)$$

Donc, les éléments de matrice de l'opérateur H dans la représentation de la position :

$$\langle R' | H | R \rangle = \langle R' | T | R \rangle + V(R) \delta(R - R') \quad (3.18)$$

$$= \langle R' | T \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle \langle k| \right) | R \rangle dk + V(R) \delta(R - R') \quad (3.19)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle R' | k \rangle \frac{k^2}{2\mu} \langle k | R \rangle dk + V(R) \delta(R - R') \quad (3.20)$$

A la fin :

$$\langle R' | H | R \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(R'-R)} \frac{k^2}{2\mu} dk + V(R) \delta(R - R') \quad (3.21)$$

La méthode FGH s'appuie sur cette formule : la représentation matricielle de H, en fonction des coordonnées R, contient une partie diagonale d'énergie potentielle $V(R)$ à laquelle s'ajoute un terme d'énergie cinétique non diagonal en R.

L'équation 3.21 montre que les éléments de matrice T calculés dans l'espace des positions

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(R) \langle R' | T | R \rangle \Psi_2(R) dR dR'$$

peuvent être calculés dans l'espace des impulsions, en remplaçant :

- l'intégration sur R par une intégration sur k
- $\Psi_2(R)$ par son image $\Phi_2(k)$
- $\Psi_1^*(R)$ par son image $\Phi_1^*(k)$
- $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2}$ par l'opérateur multiplicatif $\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$

La discrétisation de l'espace des phases position-impulsion

Les calculs numériques imposent un espace discrétisé, les coordonnées continues sont remplacées par des valeurs discrètes : on va parler de la grille spatiale (R_i) et de la grille pour l'espace des impulsions (k_i).

Nous rappelons ici que la méthode de Fourier qui est un cas particulier des schémas de collocation orthogonaux, permet une représentation duale, dans l'espace des positions comme dans celui de l'impulsion, permettant de représenter facilement l'espace des phases position-impulsion (R,k) [242].

La base de fonctions utilisée, est donnée par les N (pair) exponentielles complexes (ondes planes) :

$$g_n(R) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i2\pi n \frac{R}{L}} \quad n = -(\frac{N}{2} - 1) \dots 0, \dots N/2$$

où $i^2 = -1$, R représentant la position, $k_n = \frac{2\pi n}{L}$ sont les N valeurs discrètes du vecteur impulsion dans la boîte de longueur L représentées sur une grille à pas constant $dk = \frac{2\pi}{L}$.

Deux grilles à N points sont définies : la grille spatiale de longueur L , avec un pas constant dR , et la grille en impulsion, d'impulsion maximum k_{max} , avec un pas dk . Ces deux grilles sont dépendantes. L'impulsion maximale que nous devons représenter (k_{max}) impose le pas dR de la grille des positions et la longueur $L=NdR$ de la grille spatiale sur laquelle on a besoin de décrire le problème physique est liée au pas dk de la grille des impulsions. Donc l'extension maximale d'une grille détermine le pas de la discrétisation dans l'autre. Les propriétés des deux grilles sont résumées ci-dessous :

$$Grille\ spatiale\ (R) : \begin{cases} pas\ minimal : & dR = \frac{\pi}{k_{max}} \\ nombre\ de\ points : & N \\ longueur : & L = NdR \\ extension : & [0, L] \\ points\ de\ la\ grille : & R_j = (j - 1)dR, \quad j = 1, \dots, N \end{cases} \quad (3.22)$$

$$Grille\ des\ impulsions\ (k) : \begin{cases} pas : & dk = \frac{2\pi}{L} \\ nombre\ de\ points : & N \\ impulsion\ maximum : & k_{max} = \frac{\pi}{dR} \\ extension : & [-k_{max}, k_{max}] \\ points\ de\ la\ grille : & k_n = ndk, \quad n = -(\frac{N}{2} - 1), \dots, 0, \dots, \frac{N}{2} \end{cases} \quad (3.23)$$

Les éléments de matrice $g_n(R_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sin \frac{2\pi}{N} (j-1)$ vérifient les relations d'orthogonalité. Une fonction d'onde $\psi(R)$ sera déterminée par sa valeur sur les N points de la grille spatiale comme :

$$\langle R_j | \psi \rangle = \psi(R_j) = \psi_j \quad (3.24)$$

Les coefficients a_n de son développement sur les fonctions de base $g_n(R)$ étant égaux à :

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \Psi_j e^{-2i\pi \frac{nj}{N}}$$

Dans l'équation (3.21) donnant les éléments H_{ij} de la matrice hamiltonienne sur les points de la grille spatiale, l'intégrale sera remplacée par une somme discrète sur les points de la grille. Le grand avantage du FGH vient justement du fait que la sommation peut être faite analytiquement [243], [240], de sorte que l'on a des formules exactes pour les éléments de matrice discrets T_{ij} (il n'est pas besoin de calculer numériquement la transformée de Fourier). Pour un nombre de points N pair, ces éléments de matrice s'écrivent :

$$T_{ii} = \frac{h^2}{4\mu L^2} \frac{N^2 + 2}{6} \quad (3.25)$$

$$T_{ij} = (-1)^{(i-j)} \frac{h^2}{4\mu L^2} \frac{1}{\sin^2[(i-j)\pi/N]} \quad (3.26)$$

pour $i \neq j$.

Quant au potentiel, il est un opérateur local dans la représentation de la position et il suffit de l'avoir défini sur les points R_j de la grille :

$$V_{ij} = V(R_j)\delta_{ij} \quad (3.27)$$

L'hamiltonien sera représenté par une matrice $N \times N$: $H_{ij} = T_{ij} + V_{ij}$, qui diagonalisée, aura N valeurs propres E_α correspondant aux N vecteurs propres ψ_α dont les composantes $\psi_\alpha(R_j)$ représentent les valeurs de la fonction d'onde $\psi_\alpha(R)$ aux points R_j de la grille spatiale.

Cette formulation matricielle pour le problème aux valeurs propres décrivant un seul état électronique est également valable pour décrire plusieurs voies couplées. Par exemple, dans le cas de deux voies 1 et 2 faisant intervenir les potentiels V_{11} et V_{22} et couplés par l'élément non-diagonal V_{12} .

$$H = \begin{pmatrix} \bar{T}_{11} & 0 \\ 0 & \bar{T}_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \bar{V}_{11} & \bar{V}_{12} \\ \bar{V}_{21} & \bar{V}_{22} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

où \bar{T}_{ij} et \bar{V}_{ij} sont des matrices construites sur les voies i et j . L'hamiltonien sera représenté par une matrice $2N \times 2N$ et la diagonalisation donnera $2N$ valeurs propres pour le système des deux voies couplées.

L'efficacité de la méthode FGH provient de son caractère global, permettant d'obtenir toutes les valeurs propres à la suite d'une seule diagonalisation (nous rappelons qu'une méthode de type itératif comme Numerov n'est pas recommandée puisqu'elle demande de déterminer séparément l'énergie de chacun des états propres). Cependant, ce qui peut poser des problèmes c'est la dimension N de la matrice à diagonaliser, c'est-à-dire le nombre de points de la grille spatiale sur laquelle on décrit le problème. Si on veut décrire les derniers états très excités d'un potentiel, par exemple les fonctions propres correspondant à des mouvements de vibration de grande amplitude, il faudra utiliser une grille spatiale de grande longueur L et N . De plus le pas devra être suffisamment faible pour représenter correctement les oscillations rapides de la fonction d'onde dans la zone interne où le potentiel est très attractif. Le nombre de points de la grille sera donc très grand, et les contraintes numériques empêcheront d'appliquer cette méthode à l'étude de ces derniers états liés (dimension très grande des matrices à diagonaliser pour lesquels le temps de diagonalisation croît comme N^3).

En fait, pour un potentiel ayant une forme asymptotique en $1/R^6$, décroissant rapidement, la presque totalité de la fonction d'onde du dernier état lié s'étend en dehors de la zone classique (où prend place le mouvement de vibration dans une zone où l'impulsion est très faible), ce qui accroît encore la valeur L nécessaire au calcul [244].

3.4.3 Introduction d'une grille à pas variable ("Mapped Fourier Grid Hamiltonian Method" MFGH)

Dans ce paragraphe, nous exposons les lignes principales de la méthode introduisant une grille à pas variable dans la méthode FGH, proposée par R. Kosloff et al. [245] et généralisée aux potentiels en R^{-3} , R^{-6} etc... par V. Kokoouline et al. [95], [98] et ensuite par K. Willner [97]. Cette méthode permet de décrire les derniers états liés qui jouent un rôle important dans l'étude des collisions froides, et d'étudier la photoassociation pour de faibles désaccords du laser.

Grille à pas constant : "la grille numérique de travail"

La méthode numérique FGH est obligatoirement construite avec la représentation de l'hamiltonien sur une grille en R uniforme. Le pas constant ΔR de la grille en R est lié à l'impulsion maximum dans le potentiel $V(R)$:

$$p_{max} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu(V_{max} - V_{min})} \quad (3.29)$$

(avec $\hbar = 1$ eu u.a et $p_{max} = h_{hmax}$ où $(V_{max} - V_{min})$ est la profondeur du puits de potentiel, donc égale au maximum de l'énergie cinétique locale pour un état lié. Le pas de la grille uniforme doit vérifier :

$$dR \leq \frac{\pi}{p_{max}} = \frac{\pi}{\sqrt{2\mu(V_{max} - V_{min})}} \quad (3.30)$$

La méthode FGH implique le choix d'une grille à pas constant. Dans la méthode MFGH usuelle utilisant la grille spatiale R , une valeur minimale est donc choisie pour le pas constant, afin qu'à toute distance, la densité de points soit suffisante pour décrire le mouvement vibrationnel dans la zone où l'énergie cinétique est la plus grande. Il y a la même densité de points partout, même si toutes les zones en R n'exigent pas un pas aussi fin, en particulier la zone asymptotique où l'énergie cinétique est faible. En fait, il est suffisant qu'à chaque distance R le pas de la grille soit assez petit pour représenter correctement l'impulsion locale. On peut introduire une grille à pas variable, dont le pas $s(R)$ est adapté à chaque distance à la longueur d'onde de de Broglie $\lambda(E, R)$ qui détermine les périodes d'oscillations des fonctions d'onde. *Cette façon de relier le pas s et la longueur d'onde de de Broglie λ sera appelé mapping et la méthode correspondante sera appelée, dans la suite, FGMH (Fourier Grid Mapped Hamiltonian).*

Grille à pas variable : "la grille physique"

En conséquence, il faut chercher une transformation $R \rightarrow x$, permettant de passer de la grille physique à pas variable $s(R)$ dans l'espace des positions R à une grille de

travail en x à pas constant ⁴.

$$s(R) = \frac{\pi}{p(R)} = \frac{\pi}{\sqrt{2\mu(V_{max} - V(R))}} \quad (3.31)$$

Dans cette équation $p(R)$ est l'impulsion locale.

$s(R)$ doit être adapté à la longueur d'onde de de Broglie locale pour la fonction liée d'énergie maximale $E=V_{max}$.

La fonction de transformation $f(R) : x = f(R)$ ($f_i = g(R_i)$, $i = 1, N$) qui va lier les points $x_i = f_i$ et R_i dans les deux grilles doit satisfaire à :

$$dx = f'(R)dR$$

et

$$dR = s(R)$$

et le pas dx doit être choisi constant :

$$dx = f'(R)s(R)$$

comme :

$$x = f(R) = f(R_0) + \int_{R_0}^R \frac{\sqrt{2\mu(V_{max} - V(R))}}{\pi} dR \quad (3.32)$$

où, dans la relation (3.32), le pas de la grille x a été pris : $\Delta x = 1$.

La grille physique est adaptée aux différentes régions du potentiel : le pas $s(R)$ varie selon la profondeur locale du puits de potentiel, il devient plus grand dans la région asymptotique. Une grille construite de cette manière arrive à résoudre le problème de description de la région des grandes distances, car le nombre N de points nécessaires est beaucoup réduit, et donc la diagonalisation d'une matrice $N \times N$ (ou $2N \times 2N$, etc...) peut-être diagonalisée relativement facilement.

Le nombre de points d'une grille d'extension L donnée est considérablement réduit si le pas est défini localement par $s(R)$, et non plus par le pas constant dR , nous verrons l'exemple de l'état $0_g^- P_{1/2}$ du Cs_2 dans le paragraphe suivant.

L'introduction d'un "potentiel enveloppe" pour le calcul du pas variable

Dans l'équation (3.31) qui définit un pas local maximal, le potentiel réel $V(R)$ peut être remplacé par un autre potentiel $V_{env}(R)$, à condition que l'énergie cinétique exigée par ce dernier soit plus grande ou au moins égale à celle imposée par $V(R)$ ($V_{env}(R)$ donnerait un pas local de grille plus petit ou égal au pas $s(R)$). Ce potentiel, appelé "potentiel enveloppe", va donc envelopper la courbe réelle $V(R)$, en étant toujours plus attractif que le potentiel réel où ($V_{env}(R) \leq V(R)$). Ce remplacement est indispensable dans le cas où on a plusieurs potentiels couplés. Les détails concernant les différentes manières de choisir ce potentiel et la convergence des calculs sont discutés dans la

⁴Nous travaillons toujours en unités atomiques.

référence [95].

On peut donc remplacer les potentiels $V_i(R)$ par tout potentiel $V_{env}(R)$ vérifiant à toute position $V_{env}(R) < V_i(R)$. Le choix du potentiel enveloppe n'est pas unique ; on impose souvent à $V_{env}(R)$ d'être une fonction croissante de R .

Deux exemples de potentiel enveloppe sont présentés dans les figures 3.9 et 3.10. et correspondent respectivement à un modèle à une voie avec un double puits et à un modèle à deux voies introduisant des potentiels adiabatiques.

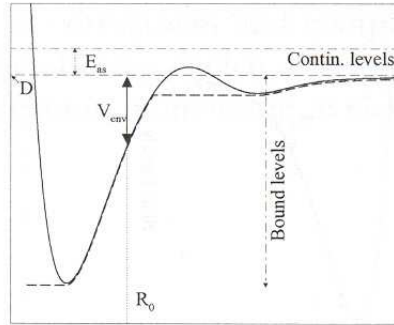


FIG. 3.9 – Potentiel enveloppe pour un potentiel en double puits, présentant un mur répulsif à courte distance et une barrière de potentiel aux distances intermédiaires. Le potentiel enveloppe V_{env} est représenté en pointillés, et le potentiel $V(R)$ en traits pleins. Figure adaptée de la référence [98].

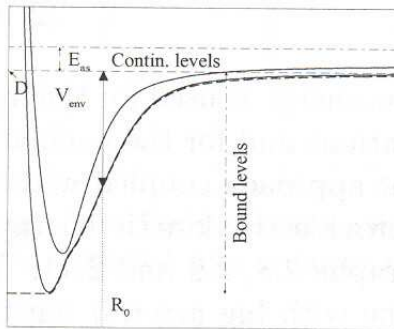


FIG. 3.10 – Potentiel enveloppe pour deux voies couplées. Le potentiel enveloppe suit le comportement du potentiel le plus attractif. Le potentiel enveloppe est toujours représenté en pointillés. Figure adaptée de la référence [98].

- A courte distance $V_{env}(R)$ ne reproduit pas la barrière de potentiel de $V(R)$ et introduit un pas constant sur un intervalle en R réduit ce qui n'introduit pas trop de points supplémentaires.

- Dans la zone où apparait une barrière de potentiel, $V_{env}(R)$ permet de décrire l'effet tunnel entre les deux puits.
- Dans le cas de deux potentiels couplés, $V_{env}(R)$ est toujours inférieur au plus profond des potentiels $V_i(R)$.

le pas de la grille est alors défini par :

$$s_{env}(R) = \frac{\pi}{\sqrt{2\mu(V_{max} - V_{env}(R))}} \leq s(R) \quad (3.33)$$

Contrôle de la convergence de la discrétisation spatiale

Le pas local $s(R)$ est une valeur maximale du pas permettant de décrire correctement les oscillations des fonctions d'onde étudiées au voisinage de la distance R . On définit donc une grille aussi qu'avant, avec un nombre plus grand de points, ce qui est aussi une très bonne manière de contrôler la convergence des calculs à travers le paramètre auxiliaire :

$$\beta = s_{env}(R)/s(R) \leq 1$$

Pour simplifier la discussion en ce qui concerne la dépendance en R du terme $\beta(R)$, on peut choisir le pas de la grille à partir d'un $\beta \leq 1$ constant, qui définit le pas de la grille utilisé réellement dans les calculs comme :

$$s_\beta(R) = \beta s(R)$$

Transformation de l'opérateur hamiltonien

La méthode FGH, qui conduit à la résolution d'une équation aux valeurs propres pour un hamiltonien écrit sur une grille de points à pas constant, peut donc s'appliquer dans la représentation x à condition d'effectuer pour l'opérateur différentiel $\frac{d}{dR}$ la transformation :

$$\frac{d}{dR} = \frac{1}{J(x)} \frac{d}{dx}$$

$J(x) = \frac{dR}{dx}$ est le jacobien de la transformation $R \rightarrow x$.

Ce qui entraîne que l'équation à résoudre n'est plus :

$$-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} \psi + V(R)\psi = E\psi \quad (3.34)$$

mais une autre obtenue à travers le changement de variable $R(x)$:

$$R(x) : dR = J(x)dx, \quad J(x) = R'(x) \quad (3.35)$$

c'est-à-dire :

$$\left(-\frac{1}{2\mu J^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{J'}{2\mu J^3} \frac{d}{dx} \right) \psi + V(x)\psi = E\psi \quad (3.36)$$

Dans la représentation FGH, l'hamiltonien de l'équation (3.36) n'est plus symétrique, car les éléments de matrice de l'opérateur énergie cinétique T_{ij} et T_{ji} (exprimée dans la parenthèse) ne sont pas égaux.

Il est possible de réintroduire une matrice hamiltonienne symétrique dans la représentation FGH, comme démontré dans la référence [95], en définissant une nouvelle fonction d'onde $\Phi(x)$:

$$\psi(x) = J^{-\frac{1}{2}}(x)\phi(x) \tag{3.37}$$

L'équation (3.36) sera écrite dans une forme symétrique :

$$\left(-\frac{1}{4\mu} \left(\frac{1}{J^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{J^2} \right) + V^{eff} \right) \phi = E\phi \tag{3.38}$$

avec le potentiel effectif (terme local dans l'équation 3.38) :

$$V^{eff}(x) = V(x) + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{7}{4} \frac{(J')^2}{J^4} - \frac{1}{2} \frac{J''}{J^3} \right) \tag{3.39}$$

A la fin, c'est l'équation (3.38) qui est résolue avec la méthode FGH sur la grille en x à pas constant. Les nouveaux éléments de matrice de l'opérateur énergie cinétique, après le changement de variable et la symétrisation, sont :

$$\tilde{T}_{ij} = \tilde{T}_{ji} = (-1)^{i-j} \frac{\pi^2}{2\mu L^2} \frac{1}{\sin^2[(i-j)\pi/N]} \left(\frac{1}{J_i^2} + \frac{1}{J_j^2} \right) \tag{3.40}$$

Pour $i \neq j$

$$\tilde{T}_{i,i} = \frac{\pi^2}{\mu L^2} \frac{N^2 + 2}{6} \frac{1}{J_i^2} \tag{3.41}$$

Avec $J_i = J(x_i)$.

Il faut noter que les fonctions d'onde définies par leurs valeurs $\Phi(x_j)$ sur les points x_j de la grille peuvent être interpolées sans perte de précision à tout point x (donc à tout point R de la grille physique), en utilisant le développement :

$$\Phi(x) = \sum_{j=1}^N \Phi(x_j) \text{sinc} \left[\frac{\pi(x-x_j)}{dx} \right]$$

pour $x \neq x_j$ $j = 1$ à N

(où $\text{sinc}(z) = \frac{\sin(z)}{z}$), il apparait donc N fonctions d'interpolation qui sont des pics de Dirac approchés localisés aux points x_j de la grille [98].

Occupation de l'espace des phases après transformation $R \rightarrow x$

Il y a une autre image qui aide à comprendre l'efficacité du "mapping", celle donnée par le volume occupé par le problème dans *l'espace des phases position-impulsion* [246] : sa capacité de construire, du point de vue numérique, un volume dans l'espace de phase position-impulsion qui est le volume effectivement utilisé par le problème. L'espace de phase décrit numériquement est donc, en variable x , restreint au volume

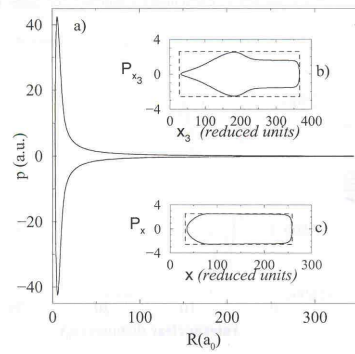


FIG. 3.11 – En traits pleins : (a) montre le volume occupé dans l'espace des phases sans aucun mapping. (b) cette figure donne le volume avec le mapping défini par le potentiel enveloppe ($-C_3^{env}/R^3$) (c) cette figure donne le volume avec le mapping utilisant le vrai comportement du potentiel. En pointillés : les rectangles définissant l'espace de phase. On peut voir que sans le mapping, un large volume de phase est utilisé dans le calcul, ce qui requiert un grand nombre de points de la grille. Le troisième cas est le plus efficace. Figure adaptée de la référence [98].

caractéristique du problème : il ne reste pas de volume non utilisé par le problème physique [95].

La transformation canonique $(R, p) \rightarrow (x, p_x)$ conduit à une utilisation optimale de l'espace des phases : l'espace des phases disponible est un rectangle de dimension $L \cdot 2p_{max}$ ($p_{max} = k_{max}$ en u.a.) en représentation R , mais seule une faible partie de cet espace est occupée par les trajectoires classiques, l'impulsion étant très faible en module aux grandes distances R . En représentation x , compte tenu du jacobien $J(x)$, la valeur $|p_{x,max}|$ est la même pour tout x , et les trajectoires classiques occupent quasiment tout le rectangle $N \cdot p_{x,max}$.

Pour montrer l'importance du gain introduit par le mapping, nous étudions la photoassociation de l'état $6S + 6P_{3/2} 0_g^-$ de Cs_2 à 1 cm^{-1} du seuil de dissociation. Une boîte d'extension $L = 250 a_0$ est nécessaire pour étudier la photoassociation l'état $6S + 6P_{3/2} 0_g^-$ de Cs_2 à 1 cm^{-1} de la limite de dissociation (l'état vibrationnel d'énergie de liaison égale à 1 cm^{-1} a son point tournant externe à environ $130 a_0$). Pour $\beta = 0.6$, la grille à pas variable comprend $N = 370$ points et le pas le plus faible (au voisinage du minimum du potentiel 0_g^- soit $R \sim 10 a_0$) est $J(x)|_{min} \sim 0.070$. Une grille à pas constant dR et de même extension contient $N = 3570$ points. La place en mémoire et le temps de calcul croissant comme N^3 , le gain est de l'ordre de $(N'/N)^3 \sim 1000$.

Dans les calculs présentés ici, pour les deux potentiels électroniques couplés ${}^3\Pi(s+p)$ et ${}^1\Sigma(s+p)$, la convergence a été obtenue pour $\beta = 0.6$.

Nous avons utilisé cette méthode pour calculer les fonctions d'onde des niveaux

vibrationnels liés et résumons ci-dessous ses principaux avantages.

La méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier est une méthode globale puisque toutes les valeurs propres sont issues d'une seule diagonalisation. Elle est utilisable lorsque l'écart entre niveaux consécutifs varie de manière discontinue. Cela se produit lorsque la courbe de potentiel comporte un double puits, un épaulement ou des potentiels couplés. La méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier est très souple puisqu'elle permet de traiter tous ces cas.

Plus l'extension spatiale de la fonction d'onde est grande, plus le nombre de points nécessaire pour la décrire est important, sachant que cela, prend un grand espace mémoire de calcul et de stockage. La méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier présente un grand intérêt puisqu'elle demande une densité de points moins grande que la méthode de Numerov et fournit une bonne représentation globale des fonctions d'onde. Elle est particulièrement bien adaptée à l'étude d'états rovibrationnels proches de la limite de dissociation qui sont décrits avec une bonne précision.

Un autre avantage de la méthode de représentation de l'hamiltonien sur une grille de Fourier est qu'elle utilise l'espace réciproque des impulsions et que le choix de la grille détermine avant tout calcul la précision de la représentation choisie (pas en énergie, énergie maximale étudiée).

De plus chaque opérateur -énergie cinétique ou potentielle- est calculé dans la représentation où il est un opérateur local. Les éléments de matrice de l'énergie cinétique sont calculés de façon exacte et analytique.

Cependant l'introduction d'une grille à pas variable adaptée à la longueur d'onde de de Broglie locale permet d'étendre le domaine d'application de la méthode FGH à des états vibrationnels de grande élongation très proches de la limite de dissociation.

Cette méthode très efficace pour étudier le processus de photoassociation près du seuil, puisqu'elle permet de traiter avec une précision comparable la partie à courte portée (R petit) où le potentiel internucléaire, assurant la liaison de la molécule, étant très attractif, la fonction d'onde oscille très rapidement, et la partie asymptotique (R grand) où la fonction d'onde oscille très lentement l'énergie cinétique est très faible et est comparable à l'énergie décrivant l'interaction entre les deux atomes.

L'inconvénient majeur des méthodes de grille est la taille des matrices à diagonaliser. Dans un système à plusieurs voies, cette taille peut rapidement devenir très importante.

Dans ce processus apparaissent des états parasites qui sont liés au choix de la base de Fourier. Ces états non physiques semblent être les équivalents des états fantômes (ghost) connus des spectroscopistes par transformée de Fourier. Leur présence est problématique lorsqu'on utilise la méthode FGMH. K. Willner [97] a montré que l'utilisation d'une base de fonctions sinus et cosinus permet de s'affranchir de ce problème.

3.4.4 Mise en œuvre

Comme nous l'avons vu, les taux de photoassociation et de formation de molécules froides nécessitent le calcul des recouvrements entre les fonctions d'onde.

Dans le cas de la photoassociation le recouvrement se fait entre :

- la fonction libre du continuum (calculée par la méthode de Numerov)
- et les niveaux liés de l'état excité (calculés par la méthode de grille de Fourier)

il est calculé par la méthode d'intégration et d'interpolation de Simpson (puisque nous avons deux fonctions sur deux grilles différentes, il faut donc définir une troisième grille d'où l'interpolation).

Alors que pour la formation de molécules froides, le recouvrement se fait entre :

- les états liés du niveau excité,
- et les états liés du niveau fondamental correspondant (calculés par la méthode de grille de fourier),

et est calculé par une méthode de produit direct.

Les fonctions d'onde vibrationnelles ont donc été calculées en utilisant la méthode FGMH, qui convient, comme nous l'avons vu plus haut, particulièrement pour le calcul des niveaux liés avec une grande élongation (des molécules qui vibrent à grande distance) situés juste au-dessous de la limite de dissociation, ainsi que des niveaux résonants.

Le programme que nous utilisons pour le calcul des recouvrements a été développé par C. Dion dans l'équipe théorique du groupe Atomes et Molécules Froids du LAC (dernière version : avril 2003). Le principal intérêt de ce code est qu'il permet le calcul des trois processus à la fois : photoassociation, émission spontanée et formation de molécules froides (avec tous les niveaux et intégrales correspondants).

3.5 Potentiels

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude de la photoassociation et la formation de molécules froides hétéronucléaires. Le principal intérêt pour cette étude apparait dans les équations 3.3 et 3.7, puisque :

- le calcul du taux de photoassociation dépend de l'intégrale de recouvrement entre la fonction libre du continuum et les niveaux liés de l'état excité
- et le calcul du taux de formation de molécules froides dépend de l'intégrale de recouvrement entre les états liés du niveau excité et les états liés du niveau fondamental correspondant.

Contrairement au cas des dimères homonucléaires, l'émission spontanée à partir de l'état de photoassociation est favorisée à courte distance, puisque l'état fondamental (ou l'état métastable) et l'état excité varient en R^{-6} . La chance de peupler des niveaux bas de l'état fondamental augmente.

Les potentiels Born-Oppenheimer du cas (a) de Hund des molécules que nous avons utilisés ont été construits à partir de courbes *ab initio* (pour $R \leq 25$ [u.a.]) déterminées par le groupe de Lyon *LiCs*, *NaCs* et *KCs* [104], *RbCs* [105], *LiRb* et *NaRb* [247] et *KRb* [103]. Ces potentiels sont disponibles sur le site : <http://lasim.univ->

lyon1.fr/allouche/pec.html. Ces potentiels ont été déterminés par la méthode de pseudopotentiel [108] que nous avons présentée dans le chapitre I.

Nous avons connecté ces potentiels à une partie asymptotique ($R \geq 25$ [u.a.]) que nous avons obtenue en utilisant une expression résultant d'un calcul perturbatif (complément C_{XI} de la référence [248]). On trouve que l'énergie électronique peut se mettre sous la forme d'un développement en puissance inverse de la distance internucléaire R . Plus particulièrement, on trouve que l'énergie des états moléculaires fondamentaux $^1\Sigma$ et $^3\Sigma$, pour une molécule formée de deux atomes identiques dans l'état S sera :

$$\Delta E_{multipol}(^1\Sigma, ^3\Sigma) = \frac{C_6}{R^6} + \frac{C_8}{R^8} + \frac{C_{10}}{R^{10}} + \dots \quad (3.42)$$

Pour les états se dissociant sous la limite asymptotique $n^2S + n'^2P$, le développement multipolaire sera,

$$\Delta E_{multipol}(^1\Sigma, ^3\Pi) = \frac{C_3}{R^3} + \frac{C_6}{R^6} + \frac{C_8}{R^8} + \frac{C_{10}}{R^{10}} + \dots \quad (3.43)$$

les C_n dépendant de l'état électronique considéré.

Les molécules que nous étudions sont *hétéronucléaires* et le développement multipolaire des états électroniques excités sera similaire à celui des états électroniques fondamentaux en C_6/R^6 voir équation 3.42.

Wang et al. [1] ont décrit les potentiels excités et fondamentaux des dimères hétéronucléaires et ils ont identifié les états électroniques *longue portée* qui peuvent être sondés par spectroscopie photoassociative dans un piège atomique mixte. Et par analogie avec la photoassociation homonucléaire (les deux états excités $A^1\Sigma_u^+$ et $b^3\Pi_u$ corrélés à la limite de dissociation $M(ns) + M(np)$ ont conduit à la formation de molécules froides stables homonucléaires), les potentiels excités des dimères hétéronucléaires seront : $A^1\Sigma^+(s+p)$ et $b^3\Pi(s+p)$. Ces potentiels ne possèdent pas de double puits comme l'état $0_g^- P_{3/2}$.

Les coefficients C_n ont beaucoup été étudiés ces dernières années, théoriquement et expérimentalement. Les valeurs théoriques que nous utiliserons, pour les différentes molécules hétéronucléaires sont celles indiquées dans les tables (3.1) et (3.2), dans lesquelles sont recensées les valeurs les plus récentes. Notons, cependant, qu'un dernier calcul [249], utilisant un calcul relativiste à plusieurs corps, a donné des résultats plus précis pour les coefficients asymptotiques de van der Waals C_8 et C_{10} .

Les potentiels des états fondamentaux $X^1\Sigma^+$ et $a^3\Sigma^+$ et excités $A^1\Sigma^+$ et $b^3\Pi$ sont représentés dans les figures (3.12) et (3.13).

Les longueurs de diffusion de $^2S + ^2S$ des potentiels de chimie quantique résultants est arbitraire et n'aura aucun rapport avec l'étude que nous nous proposons de faire. Nous les avons calculées (voir paragraphe 3.6.4) dans le but de les utiliser dans la comparaison que nous ferons entre nos calculs et ceux menés par Wang et al. avec une approche semi-classique [1].

	$C_6[250]$	$C_8[251]$	$C_{10}[251]$
Rb(5s)+Cs(6s)	-5663	-730520	-108310000
K(4s)+Cs(6s)	-5159	-636060	-90399000
Na(3s)+Cs(6s)	-3227	-349070	-44378000
Li(2s)+Cs(6s)	-3065	-312530	-37627000
K(4s)+Rb(5s)	-4274	-475990	-63524000
Na(3s)+Rb(5s)	-2683	-258150	-30567000
Li(2s)+Rb(5s)	-2545	-228250	-25645000

TAB. 3.1 – Valeurs des coefficients de dispersion C_6 , C_8 et C_{10} en [u.a] pour les états fondamentaux $X^1\Sigma^+(s+s)$ et $a^3\Sigma^+(s+s)$

	$b^3\Pi(s+p)$		$A^1\Sigma^+(s+p)$	
	$C_6[251]$	$C_8[251]$	$C_6[251]$	$C_8[251]$
Rb(5s)+Cs(6p)	-26721	-838440	-82377	-7690100
K(4s)+Cs(6p)	-21731	-636290	-64292	-6813200
Na(3s)+Cs(6p)	-7959.8	-247780	-18353	-3792700
Li(2s)+Cs(6p)	-8901.6	-189260	-22416	-3618700
K(4s)+Rb(5p)	-62776	-583550	-232470	-5374400
Na(3s)+Rb(5p)	-7484.5	-220300	-18621	-2964100
Li(2s)+Rb(5p)	-9431.2	-171350	-26744	-2808900

TAB. 3.2 – Valeurs des coefficients de dispersion C_6 et C_8 en [u.a] pour les états excités $A^1\Sigma^+(s+p)$ et $b^3\Pi(s+p)$

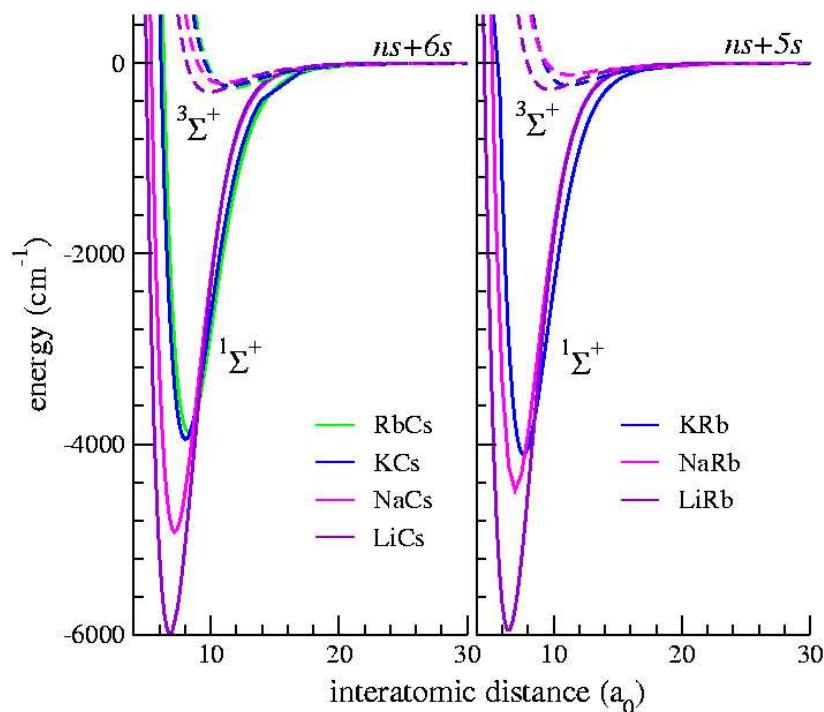


FIG. 3.12 – Potentiels moléculaires des états fondamentaux corrélés à la limite asymptotique $nS+n'S$ des dimères hétéronucléaires contenant Cs (à gauche) et Rb (à droite). $X^1\Sigma^+$ (traits pleins) et $a^3\Sigma^+$ (tirets)

Dion et al. [24] ont montré que le couplage résonnant résultant de l'interaction spin-orbite entre deux courbes de potentiel induit une augmentation, à courte distance, de la probabilité de présence dans le niveau de photoassociation, donnant accès à des niveaux vibrationnels bas après émission spontanée.

Dion et al. [24] ont appliqué ce modèle à la formation de molécules froides de Cs_2 , où une forte interaction spin-orbite existe entre les états excités $A^1\Sigma_u^+$ et $b^3\Pi_u$ corrélés à la limite de dissociation $Cs(6s) + Cs(6p)$. Dans le cas (c) de Hund ces états se dissocient en $Cs(6s) + Cs(6p_{1/2,3/2})$.

Plusieurs travaux ont montré que l'interaction spin-orbite dans les atomes lourds alcalins Rb et Cs est responsable de la forte perturbation du spectre vibrationnel du dimère dans les états excités. Ce qui nécessite de traiter simultanément les états A et B et leur couplage pour déterminer les fonctions d'onde des états vibrationnels [252, 96]. Nous pensons, que dans notre cas aussi, le couplage résonnant induit par l'interaction spin-orbite entre les états $A^1\Sigma^+$ et $b^3\Pi$ des molécules hétéronucléaires composées par Rb ou Cs : MRb ou MCs (avec $M = Li, Na, K$, en incluant $RbCs$), similaires au cas homonucléaire cité plus haut, va être efficace de la même manière. Nous allons dans la section suivante voir dans quelles conditions s'effectue le calcul du couplage spin-orbite.

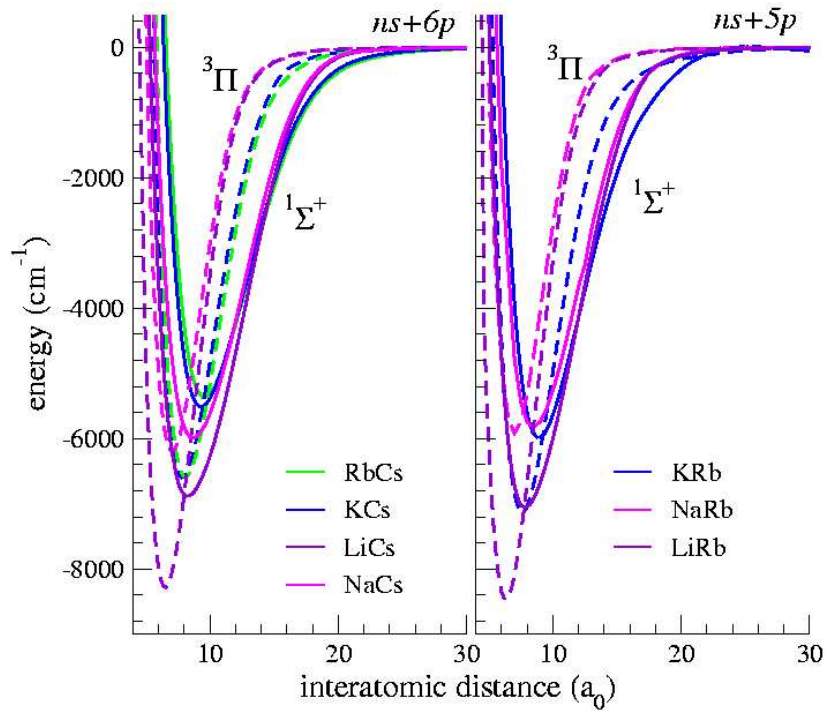


FIG. 3.13 – Potentiels moléculaires des états excités corrélés à la limite asymptotique $nS+n'P$ des dimères hétéronucléaires contenant Cs (à gauche) et Rb (à droite). $A^1\Sigma^+$ (traits pleins) et $b^3\Pi$ (tirets)

Structure fine des molécules diatomiques et Couplage spin-orbite

L'hamiltonien de structure fine moléculaire peut s'écrire comme :

$$H_{sf} = \underbrace{H_{SO}}_{\text{spin-orbite}} + \underbrace{H_{SS}}_{\text{spin-spin}} + \underbrace{H_{SR}}_{\text{spin-rotation}} + \underbrace{H_{OR}}_{\text{orbite-rotation}} + \dots$$

L'énergie d'interaction spin-orbite est due aux champs magnétiques créés par le mouvement des électrons et à l'influence de ce champ sur les spins électroniques. L'hamiltonien spin-rotation est dû à l'interaction entre le champ magnétique créé par la rotation des noyaux et le moment magnétique des électrons. L'interaction d'orbite-rotation résulte quant à elle du moment magnétique d'une orbite d'un électron plongé dans le champ magnétique créé par la rotation des noyaux.

Afin d'étudier l'effet de ces interactions sur les énergies électroniques, il faut connaître leur ordre de grandeur et les états qu'ils peuvent coupler. Nous ne donnerons pas ici l'expression de chaque terme de H_{sf} , on pourra les trouver dans la référence [253]. On peut constater que la principale correction de l'hamiltonien de structure fine H_{sf} est due à l'interaction de spin-orbite H_{SO} , qui est assez importante pour les molécules lourdes contenant l'atome de césium par exemple, on peut voir dans la table 3.3, les valeurs de l'énergie de structure fine pour tous les alcalins. Cette correction à l'énergie de la molécule dépend bien évidemment fortement de R du fait de la grande variation des énergies électroniques en fonction de la distance internucléaire.

atome	$E_{SO}[cm^{-1}]$
Cs	554.11
Rb	237.6
K	57.6
Na	17.196
Li	0.3366

TAB. 3.3 – Valeurs de l'énergie de structure fine pour les atomes alcalins

On nomme $E_1^{elec.}(R)$ et $E_2^{elec.}(R)$ les courbes de potentiel moléculaire des états $|\Psi_1^{ele} \rangle$ et $|\Psi_2^{elec.} \rangle$. Ces courbes sont définies sur la figure (3.14(a)) qui représente les potentiels couplés par un couplage spin-orbite corrélés à la limite $2S + 5P$ $A^1\Sigma$ et $b^3\Pi$ du dimère alcalin $LiRb$ (*analogue aux autres dimères étudiés dans ce travail*). Les fonctions moléculaires obtenues dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer s'écrivent de manière simplifiée :

$$\Psi_1 = \Psi_1^{elec.} \Psi_1^{rot.} \frac{\Psi_1^{vib.}}{R} \quad \Psi_2 = \Psi_2^{elec.} \Psi_2^{rot.} \frac{\Psi_2^{vib.}}{R}$$

Les énergies électroniques se croisent en $R = R_C$, le couplage entre états électroniques $W_{12}(R)$ conduit à de nouveaux états et à de nouvelles énergies que l'on note respectivement $|\Psi_+^{ele} \rangle$, $|\Psi_-^{ele} \rangle$, E_+ et E_- . D'une manière générale, un état initialement peuplé Ψ_1 peut évoluer au cours du temps vers un état Ψ_2 . La probabilité de la transition peut s'évaluer par le modèle de Landau-Zener (cf. relation (90-18) de [248]).

Dans la représentation du cas (c) de Hund, la paire des états $0^+(P_{1/2})$ et $0^+(P_{3/2})$, voir figure (3.14) résulte de la diagonalisation de l'hamiltonien moléculaire décrivant l'interaction entre les états $A^1\Sigma(s+p)$ et $b^3\Pi(s+p)$ du cas (a) de Hund :

$$H = \begin{pmatrix} V^\Pi(R) - \Delta^{\text{III}}(R) & \Delta^{\Sigma\Pi}(R) \\ \Delta^{\Sigma\Pi}(R) & V^\Sigma(R) \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

Où $V^\Pi(R)$ et $V^\Sigma(R)$ sont les potentiels des états $b^3\Pi(s+p)$ et de $A^1\Sigma(s+p)$ respectivement. Les termes $\Delta^{\text{III}}(R)$ et $\Delta^{\Sigma\Pi}(R)$ représentent l'interaction *spin-orbite* dépendante de la distance interatomique R , agissant dans le sous-espace de l'état $^3\Pi$ et couplant les états $^3\Pi$ et $^1\Sigma$, respectivement. Dans la section (3.6.2), nous étudions l'influence de la forme de l'opérateur de couplage spin-orbite sur les taux de photoassociation et de formation de molécules froides. Dans un premier cas noté (i), nous ne prenons en considération que le potentiel non perturbé $0(nS+n^1P_{1/2})$. Ensuite, nous avons utilisé l'expression effective suivante [254] :

$$\Delta^{\text{III}}(R) = \frac{\sqrt{2}}{2} \Delta^{\Sigma\Pi}(R) = \frac{E_{SO}}{3} \quad (3.45)$$

E_{SO} est l'énergie de structure fine de l'atome le plus lourd (car dans une molécule hétéronucléaire, le premier état électronique excité $^{2S+1}\Omega(s+p)$ a pour limite de

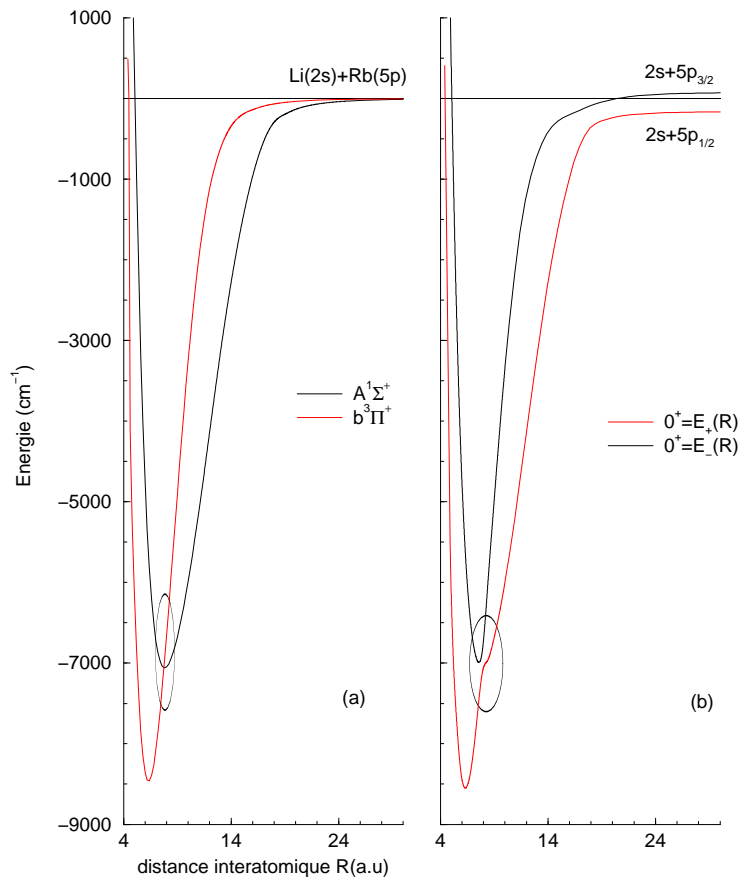


FIG. 3.14 – Potentiels moléculaires, exemple : LiRb. (a) On représente les états propres non perturbés, dans la base du cas (a) de Hund. (b) On représente dans la base du cas (c) de Hund les états propres incluant la perturbation. Ce sont les états de symétrie 0^+ adiabatiques, cas (c) de Hund.

dissociation $M(ns)$ et $M'(n'p)$ où M' est l'atome le plus lourd).

Ceci a constitué notre première modélisation du couplage entre les états $A^1\Sigma(s+p)$ et $b^3\Pi(s+p)$, nous l'avons appelé couplage constant et que nous noterons dans la section (3.6.2) par (ii).

Et pour tenir compte de la variation en fonction de la distance interatomique R du couplage SO on peut dans l'équation (3.45) remplacer E_{SO} par une fonction $\zeta(R)$ modélisant le couplage spin-orbite moléculaire dépendant de R . Pour ce dernier, nous avons utilisé les résultats provenant d'un calcul de chimie quantique [255] concernant les états $Cs_2(0_u^+)$ pour les dimères lourds contenant l'atome de Cs . Nous avons, dans ce cas, suivi la même approche que Dion et al. dans la référence [24], et Kokoouline et al. dans les références [95] et [98], cela a constitué la seconde modélisation du couplage entre les états $A^1\Sigma(s+p)$ et $b^3\Pi(s+p)$, nous l'avons appelé couplage dépendant de R noté (iii). Pour les dimères lourds contenant l'atome de Rb , nous avons suivi la même démarche en déterminant le couplage dépendant de R à partir du rapport des

énergies de structure fine du Cs et du Rb . Nous avons représenté la variation du couplage spin-orbite $\zeta(R)$ en fonction de la distance internucléaire R dans les cas du Cs_2 et Rb_2 dans la figure 3.15.

$$\zeta_{Rb}(R) = \zeta_{Cs}(R)\Delta_{SO}(Rb)/\Delta_{SO}(Cs)$$

Dans la figure (3.14,b), les courbes 0^+ sont obtenues pour le couplage constant de l'équation 3.45.

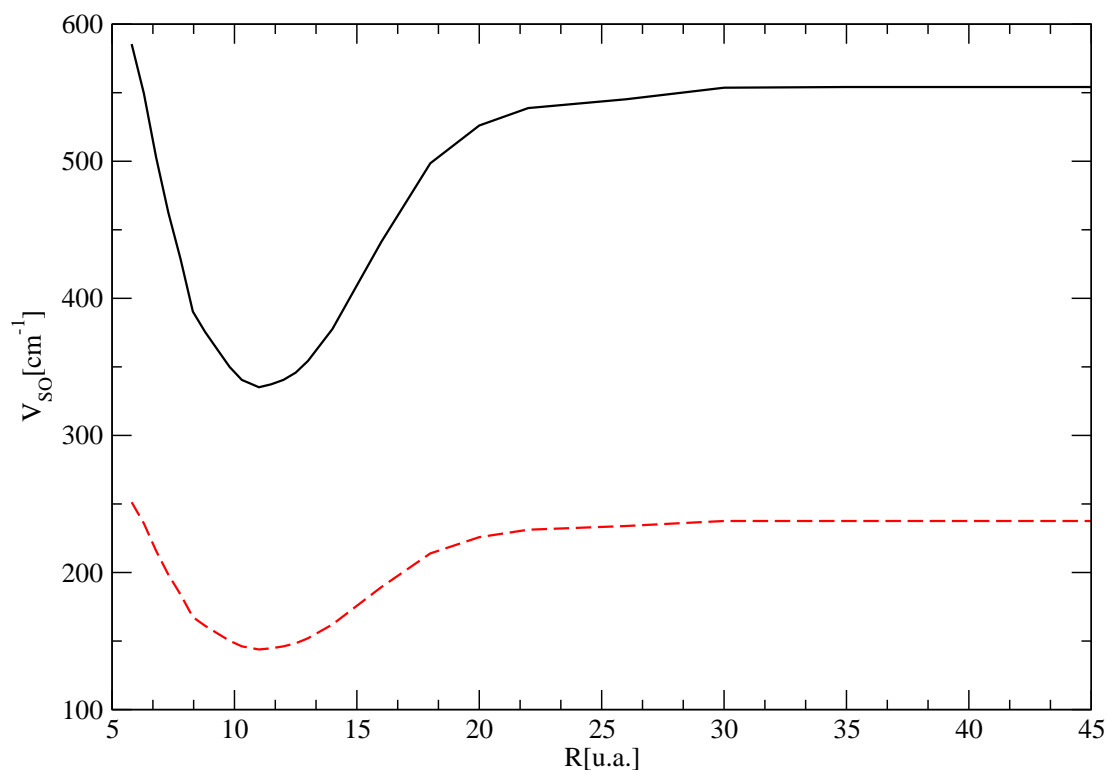


FIG. 3.15 – Variation du couplage spin-orbite $\zeta(R)$ utilisé dans les calculs en fonction de la distance internucléaire R . La quantité représentée est $V_{SO}(R)=3/\sqrt{2}\zeta(R)$ qui est asymptotiquement égale à E_{SO} . En traits pleins, nous avons représenté les calculs de la référence [255] pour Cs_2 , et en tirets, la courbe modélisée à partir de la courbe de Cs_2 et adaptée à l'infini à l'énergie de structure fine de l'atome de Rb .

3.6 Résultats et discussion

Nous voulons savoir si les dimères hétéronucléaires d'alcalins sont favorables ou non à la photoassociation et à la formation de molécules froides par rapport aux cas connus homonucléaires.

De manière générale, pour espérer obtenir une forte probabilité de photoassociation des molécules hétéronucléaires, il faut que le coefficient C_6 de l'état excité décrivant l'interaction entre les deux atomes à longue distance, soit grand. En effet, pour ces états le point de Condon sera situé à plus grande distance interatomique.

Dans le cas de l'état $0_g^- P_{1/2}$, le processus était favorable car le coefficient C_6 [100] est très important, de l'ordre de 100 000 u.a.. Ainsi, même à des décalages du laser de photoassociation de quelques cm^{-1} , le point de Condon du niveau excité se situe à relativement grande distance, vers $50 a_0$, où la probabilité de photoassocier est encore importante.

Ce principe a été vérifié expérimentalement par l'équipe d'Orsay [100], puisqu'ils ont pu mesurer le taux de photoassociation de l'état $0_g^- P_{1/2}$ dont la forme asymptotique varie en C_6/R^6 de manière similaire à celles des potentiels excités corrélés sous la limite $nS + n'P$ des dimères alcalins hétéronucléaires. Les coefficients C_6 des états excités des dimères alcalins hétéronucléaires ont de grandes valeurs (voir tableau 3.2), nous pouvons alors espérer une efficacité similaire pour la photoassociation des molécules hétéronucléaires.

Pour effectuer nos calculs, nous nous sommes placés dans des conditions correspondants aux expériences sur le Cs réalisées à Orsay, dans deux cas de transitions moléculaires induites par photoassociation dans le cas du Cs_2 : $a^3\Sigma_u^+(6s, 6s) \rightarrow 0_g^-(6s, 6p_{3/2})$ et $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow 0_u^+(6s, 6p_{1/2})$. Rappelons que le potentiel $0_g^-(6s, 6p_{3/2})$ est un potentiel à double puits qui a donné lieu à la formation de molécules froides. Et le potentiel $0_u^-(6^2S + 6^2P_{1/2})$, qui a aussi donné lieu à la formation de molécules froides, représente l'exemple type de l'état couplé résonant [24] équivalent à la situation que nous étudions ici, *i.e.*, avec des dimères hétéronucléaires.

Et donc, nous comparons nos résultats de taux de photoassociation et de formation de molécules froides calculés avec l'approche perturbative de Pillet et al. [225] à ceux (calculés avec la même approche, et comparés avec l'expérience) des états $0_g^- P_{3/2}$ et $0_u^+ P_{1/2}$ du Cs_2 .

Mais commençons d'abord par mettre les taux de photoassociation et de formation de molécules froides à l'échelle de ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$ du Cs_2 .

3.6.1 Définition des taux mis à l'échelle des taux calculés du césium

Dans les équations 3.3 et 3.8, les conditions expérimentales typiques doivent être définies, pour pouvoir calculer les taux de photoassociation et de formation de molécules froides. Dans ce qui suit, nous considérons que les expériences de photoassociation hétéronucléaires seront exécutées avec une température et une densité atomique similaires à celles de l'expérience de formation de molécules froides de Cs_2 du groupe

d'Orsay [14]. Les taux de photoassociation et de formation de molécules froides ont été soigneusement mesurés pour l'état $0_g^- P_{3/2}$ du Cs_2 [256] et comparés aux valeurs calculées avec les équations 3.3 et 3.8. Le taux de photoassociation du Cs_2 est donné par l'équation 3.46 :

$$\mathfrak{R}_{PA}(Cs_2) = \mathcal{A}_\Omega(J, J', \epsilon) \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{h}{2} n_{Cs_2} \lambda_{th}^3 | \langle \phi_{Cs_2}(v_\Omega) | \Gamma | \chi_{Cs_2}(k_B T) \rangle |^2 \quad (3.46)$$

La comparaison des facteurs de Franck-Condon des dimères hétéronucléaires avec ceux du césium n'est pas suffisante pour obtenir une estimation du taux de photoassociation, puisque d'autres facteurs dépendant de la masse réduite et du moment moléculaire de transition interviennent dans le calcul du taux. Pour cela, nous définissons un taux réduit de photoassociation pour le Cs_2 :

$$\bar{\mathfrak{R}}_{PA}(Cs_2) = | \langle \phi_{Cs_2}(v_\Omega) | \Gamma | \chi_{Cs_2}(k_B T) \rangle |^2$$

Le seul terme pris en compte, dans cette équation, est le recouvrement entre la fonction d'onde du continuum et la fonction d'onde vibrationnelle de l'état excité. Et donc :

$$\mathfrak{R}_{PA}(Cs_2) = \mathcal{A}_\Omega(J, J', \epsilon) \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{h}{2} n_{Cs_2} \lambda_{th}^3 \bar{\mathfrak{R}}_{PA}(Cs_2)$$

Les taux de photoassociation calculés des dimères hétéronucléaires peuvent être mis à l'échelle des taux de Cs_2 en définissant :

$$\bar{\mathfrak{R}}_{PA}(MM') = \left(\frac{\mu_{CsCs}}{\mu_{MM'}} \right)^{3/2} \alpha_{at}^2 | \langle \phi_{MM'}(v_{v_\omega}) | \chi_{MM'}(k_B T) \rangle |^2 \quad (3.47)$$

Le taux défini dans l'équation 3.47 va dépendre des facteurs de Franck-Condon de chaque dimère hétéronucléaire étudié, ce qui met en relief le comportement des courbes de potentiel de chaque dimère, ainsi que les valeurs des moments de transition dipolaires.

Le taux réduit ($\bar{\mathfrak{R}}_{PA}(MM')$) va dépendre principalement du rapport des longueurs d'onde de de Broglie qui est proportionnel au rapport des masses réduites du Cs_2 et du dimère hétéronucléaire considéré :

$$(\lambda_{th_{MM'}} / \lambda_{th_{Cs_2}})^3 = (\mu_{Cs_2} / \mu_{MM'})^{3/2}$$

Le moment moléculaire de transition dipolaire $D(R)$, qui varie très lentement avec R , peut être remplacé par le moment atomique pour la transition correspondante. Et donc le taux de photoassociation réduit va dépendre aussi du rapport des moments de transition dipolaires :

$$\alpha_{at} = \Gamma_{MM'}/\Gamma_{CsCs}$$

Il est égal à 1 pour $LiCs$, $NaCs$, KCs et $RbCs$, il sera égal au rapport des fréquences atomiques de Rabi :

$$\frac{\Gamma_{Rb(5s \rightarrow 5p)}}{\Gamma_{Cs(6s \rightarrow 6p)}} \simeq 0.9$$

pour $LiRb$, $NaRb$ et KRb .

Finalement, comme nous avons négligé la structure hyperfine atomique, nous n'avons pas inclu, dans l'équation 3.47, le rapport des facteurs angulaires.

Dans la référence [256], les facteurs angulaires ont été calculés dans le cas de la photoassociation du Cs_2 pour les symmétries 0_g^- et 0_u^+ pour l'onde s et en considérant une polarisation linéaire du laser de photoassociation. Les rapports $\bar{\mathcal{A}}$ des facteurs angulaires, $\bar{\mathcal{A}} = \mathcal{A}(0_u^+(P_{1/2}))/\mathcal{A}(0_g^-(P_{3/2}))$ selon la combinaison choisie du moment angulaire atomique total (F, F') sont donnés dans le tableau 3.4 :

(F, F')	$\bar{\mathcal{A}}$
(3,3)	0.293
(3,4)	0.778
(4,4)	0.280

TAB. 3.4 – Les rapports $\bar{\mathcal{A}} = \mathcal{A}(0_u^+(P_{1/2}))/\mathcal{A}(0_g^-(P_{3/2}))$ des facteurs angulaires du césium. Valeurs tirées de la référence [256].

Une simplification concernant nos estimations pour les taux de photoassociation peut être faite en considérant que les rapports $\bar{\mathcal{A}} = \mathcal{A}_{MM'}(0_u^+(P_{1/2}))/\mathcal{A}_{Cs_2}(0_g^-(P_{3/2}))$ que nous devons inclure dans les calculs de taux de photoassociation des dimères hétéronucléaires peuvent prendre des valeurs similaires à celles calculées dans la référence [256]. Les taux calculés pour les dimères hétéronucléaires seront modifiés par ces facteurs lorsqu'ils seront comparés aux taux de $Cs_2(0_g^-(P_{3/2}))$ (que nous prenons comme référence).

Les taux que nous calculerons dépendront bien sûr des recouvrements entre les fonctions d'onde, mais aussi du facteur α_{at} et du facteur de masse. Cependant, étant donné les valeurs du facteur de masse (tableau 3.5), nous pouvons déjà dire que seul celui-ci aura une réelle influence sur la valeur du taux de photoassociation. Le tableau 3.5 donne les facteurs de masses calculés pour tous les dimères alcalins ainsi que leurs isotopes :

Comme nous avons défini un taux de photoassociation réduit des dimères hétéronucléaires, nous pouvons donc définir, dans les mêmes conditions, le taux de formation de molécules froides réduit (remis à l'échelle du $Cs_2(0_g^-(P_{3/2}))$) qui peut-être écrit comme suit :

$$\bar{\mathfrak{R}}_{CM}(MM') = \bar{\mathfrak{R}}_{PA}(MM')\mathcal{B}(v_\Omega) \quad (3.48)$$

Nous évaluerons les taux de photoassociation et de formation de molécules froides pour une énergie de liaison (detuning) comprise entre $-1cm^{-1}$ et $-30cm^{-1}$, valeurs

MM'	$\mu(MM')[ua]$	$(\mu(Cs_2)/\mu(MM'))^{3/2}$
6LiCs	10490.137	39.24
7LiCs	12148.112	31.48
$NaCs$	35727.701	6.24
${}^{39}KCs$	54924.432	3.27
${}^{85}RbCs$	94445.005	1.45
${}^{87}RbCs$	95788.267	1.42
Cs_2	121136.005	1
${}^6Li{}^{85}Rb$	10239.541	40.69
${}^7Li{}^{85}Rb$	11813.306	32.83
$Na{}^{85}Rb$	32978.838	7.03
${}^{39}K{}^{85}Rb$	48685.913	3.92
${}^{85}Rb_2$	77392.426	1.95
${}^6Li{}^{87}Rb$	10255.132	40.59
${}^7Li{}^{87}Rb$	11834.063	32.74
$Na{}^{87}Rb$	33141.121	6.98
${}^{39}K{}^{87}Rb$	49040.422	3.88
${}^{87}Rb_2$	79212.941	1.89

TAB. 3.5 – Masses réduites des dimères alcalins hétéronucléaires et valeurs des facteurs d'échelle de masse.

typiques aussi des réactions de photoassociation dans des pièges magnéto-optiques standards. Les niveaux vibrationnels liés situés en dessous de $1cm^{-1}$ sont fortement affectés par la structure hyperfine, puisque l'écart entre deux niveaux successifs devient petit, et par conséquent ne seront pas significatifs dans la présente étude.

Avant de poursuivre notre travail, *i.e.*, le calcul des taux de photoassociation et de formation de molécules froides des molécules hétéronucléaires, il nous semble important de vérifier lequel des couplages (constant [254] ou dépendant de R [255]) est le plus favorable à la photoassociation et à la formation de molécules froides.

3.6.2 Effet du couplage spin-orbite sur les taux de photoassociation et de formation de molécules de $RbCs$

Pour étudier cet effet nous avons pris comme exemple celui du dimère $RbCs$, qui est le plus lourd des dimères que nous étudions et qui par conséquent, sera le dimère le plus affecté par le couplage spin-orbite. Nous considérons à titre d'exemple la transition $X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+(A^1\Sigma)$. Nous avons calculé les taux de photoassociation et de formation de molécules froides du dimère $RbCs$ dans les trois cas suivants :

- Seul le potentiel $0^+(5^2S + 6^2P_{1/2})$ non perturbé est considéré dans le calcul des taux cas (i) ;
- Les deux potentiels $0^+(A^1\Sigma)$ et $0^+(b^3\Pi)$ sont pris en compte, le couplage considéré est un couplage spin-orbite constant cas (ii) ;
- Les deux potentiels $0^+(A^1\Sigma)$ et $0^+(b^3\Pi)$ sont pris en compte, le couplage est le

couplage $\zeta(R)$ spin-orbite dépendant de R défini dans la référence [255] cas (iii).

Constantes rotationnelles et fonctions d'onde vibrationnelles

Chaque niveau vibrationnel a une structure rotationnelle qu'on peut identifier d'après la loi :

$$E_{vJ} \sim B_v J(J+1)$$

où : B_v est le paramètre appelé "constante rotationnelle", obtenu comme moyenne de l'opérateur :

$$B_v = \hbar^2 \frac{1}{2\mu R^2} \quad (3.49)$$

dans l'état Ψ_{vJ} .

Dans la figure 3.16, nous avons représenté les constantes rotationnelles des niveaux vibrationnels calculées dans trois cas différents : (3.16 (i)) cas (a) de Hund $A^1\Sigma^+$ et $b^3\Pi^+$, et cas (c) de Hund $0^+(5^2S + 6^2P_{1/2,3/2})$ dans le cas d'un calcul à voies indépendantes ; (3.16 (ii) et (iii)) dans le cas où on considère deux voies, du cas (a) de Hund, couplées par un couplage constant (ii) et un couplage dépendant de R (iii).

Les calculs à une seule voie donnent deux courbes assez différentes dans le cas des voies $A^1\Sigma^+$ et $b^3\Pi$, alors qu'elles ont un comportement similaire, et se coupent dans le cas des voies $0^+(5^2S + 6^2P_{1/2,3/2})$. Les calculs des deux voies couplées 3.16 (ii) et (iii) montre que l'introduction du couplage spin-orbite a un effet très fort sur le spectre et introduit un mélange important entre les deux voies, puisque les valeurs de B_v ne suivent aucune des courbes précédentes.

La raison de ces perturbations dans le spectre de 0^+ est dans le comportement des deux courbes de potentiel $A^1\Sigma^+$ et v (en cm^{-1}) dans les courbes de potentiel du $RbCs$ $A^1\Sigma^+$ et $b^3\Pi$ de la symétrie 0^+ . L'écart d'énergie entre elles est petit pour un domaine de distance internucléaire R (approximativement de $9 a_0$ à $17 a_0$), et comme la valeur du couplage spin-orbite est comparable à l'écart en énergie entre les deux courbes de potentiel, ceci implique un fort mélange des deux états moléculaires, ils ne peuvent plus être considérés comme indépendants.

Comme conséquence, le spectre de ce système à deux voies présente deux séries de lignes, fortement perturbées l'une par l'autre.

Les résultats apparaissent assez sensibles suivant le choix du couplage spin-orbite, quand on compare le spectre entier de la variation des constantes rotationnelles avec un couplage spin-orbite indépendant de R (3.16(ii)) et dépendant de R (3.16(iii)) : il apparaît dans le premier cas (3.16(ii)), que les perturbations sont faibles dans la région proche de la limite de dissociation $P_{1/2}$ (3.17) et les constantes rotationnelles ont qualitativement le même comportement que celui des deux potentiels non perturbés du cas (c) de Hund (figure 3.16(i)). Quand on introduit un couplage spin-orbite dépendant de R (3.16(iii)), le comportement est qualitativement différent, puisque la perturbation est visible sur la presque totalité du spectre (3.16(iii)).

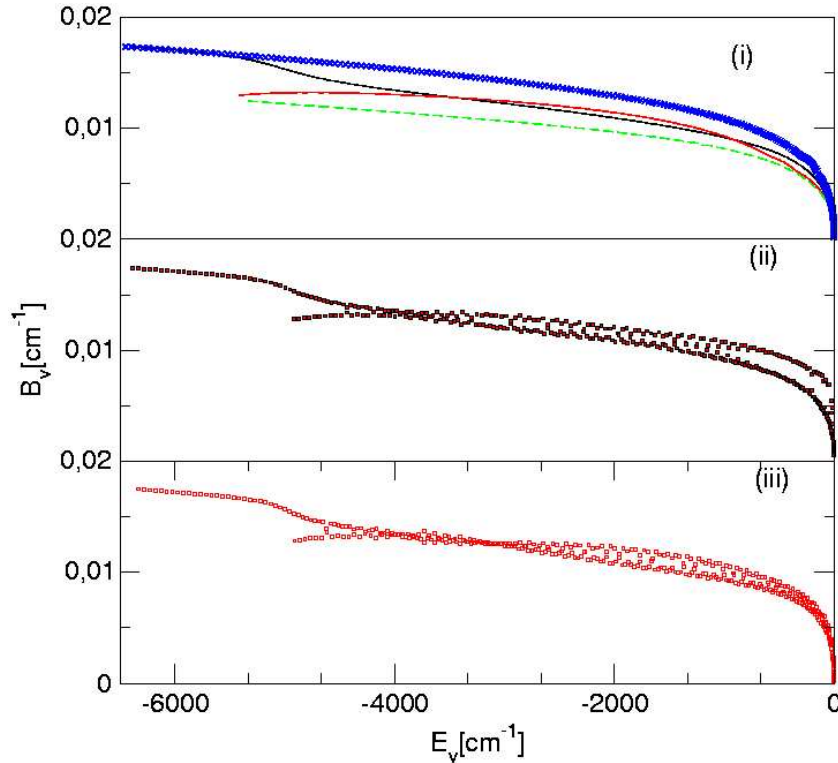


FIG. 3.16 – Constantes rotationnelles B_v (en cm^{-1}) des états $0^+(5^2S+6^2P_{1/2,3/2})$ issus de $A^1\Sigma^+$ et $b^3\Pi$, cas du RbCs : (i) en négligeant le couplage de structure fine (cas (a) de Hund : tirets) ; en négligeant le couplage radial (cas (c) de Hund : traits pleins). Et considérant deux voies couplées (ii) couplage spin-orbite constant (iii) couplage spin-orbite dépendant de R .

Cette différence dans les deux spectres s'explique par la nature du couplage spin-orbite, dans le cas (ii), il est constant dans tout le domaine de la distance internucléaire considéré, le mélange des deux états moléculaires sera grand au voisinage du point R_c où se croisent les deux états excités du cas (a) de Hund, et il sera plus faible ailleurs. Alors que dans le cas (iii), voir figure 3.15, la variation du couplage suit la forme du puits de potentiel, le mélange entre les deux états moléculaires est plus important sur tout le domaine de la distance internucléaire considéré.

De plus la valeur de B_v nous renseigne sur la localisation en R de la fonction d'onde vibrationnelle. B_v sera d'autant plus grand que la densité de probabilité de la fonction d'onde vibrationnelle est située à R petit.

Le comportement oscillant de B_v montre que le cas (c) de Hund est adapté, seulement, à un petit nombre de niveaux que nous attribuons à l'état électronique $0^+(P_{1/2})$, la majorité des autres devenant perturbés. Quand la valeur de B_v est petite, la fonction d'onde correspondante est effectivement très proche du mouvement vibrationnel non perturbé de la voie $0^+(P_{1/2})$ voir figure 3.17(iii).

Au contraire, le maximum des oscillations correspond à un important mélange de

la fonction d'onde de l'état $0^+(P_{3/2})$, où le mouvement vibrationnel est confiné aux courtes distances avec un point tournant externe qui dans l'exemple choisi est proche de $20 a_0$. La figure 3.18 représente des fonctions d'onde de niveaux vibrationnels proches de la limite de dissociation $P_{1/2}$. La figure 3.18 (a) et (b) représente des fonctions d'onde pour des niveaux avec une composante $P_{3/2}$ moyenne (dans le domaine d'énergie considéré) correspondant à une valeur moyenne de B_v . Les deux maximum des fonctions d'onde correspondant à différents points tournants des deux potentiels couplés : $0^+(P_{1/2})$ et $0^+(P_{3/2})$. Bien entendu, nous avons représenté les module carrés des amplitudes des fonctions d'onde vibrationnelles dans le cas de deux voies couplées (a) et (b) et dans le cas d'une voie (c) et (d).

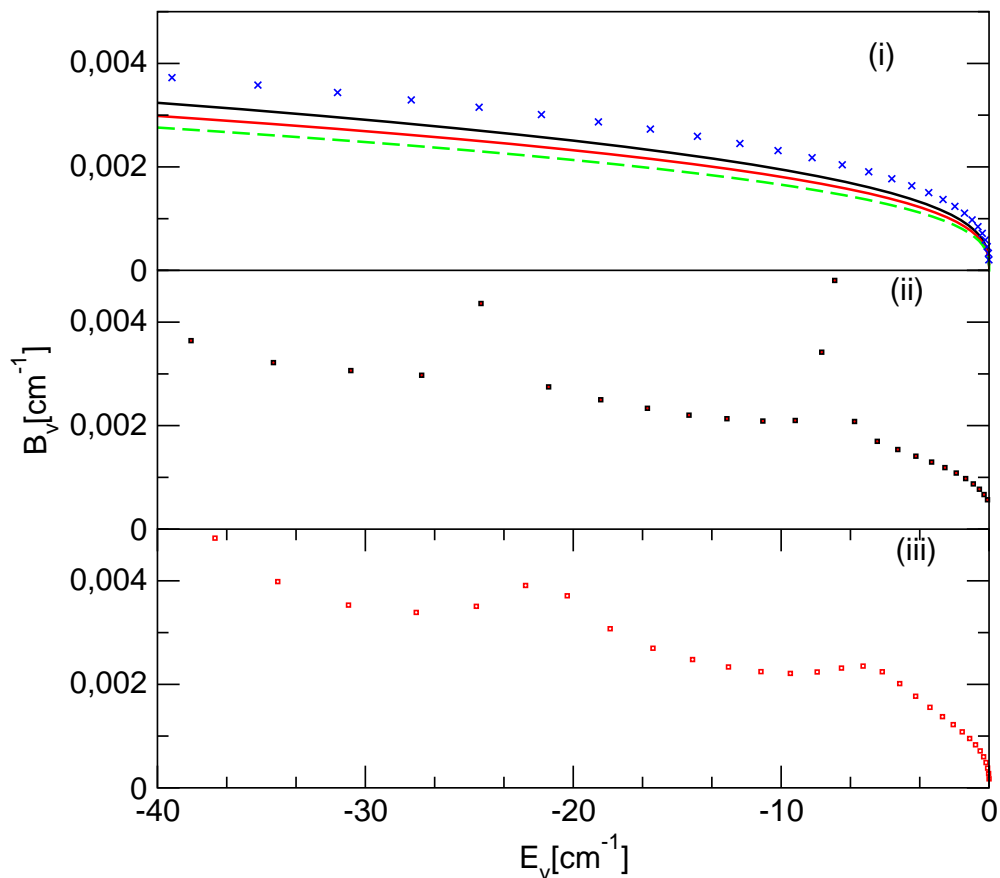


FIG. 3.17 – Constantes rotationnelles (idem que 3.16), zoom sur 40 cm^{-1}

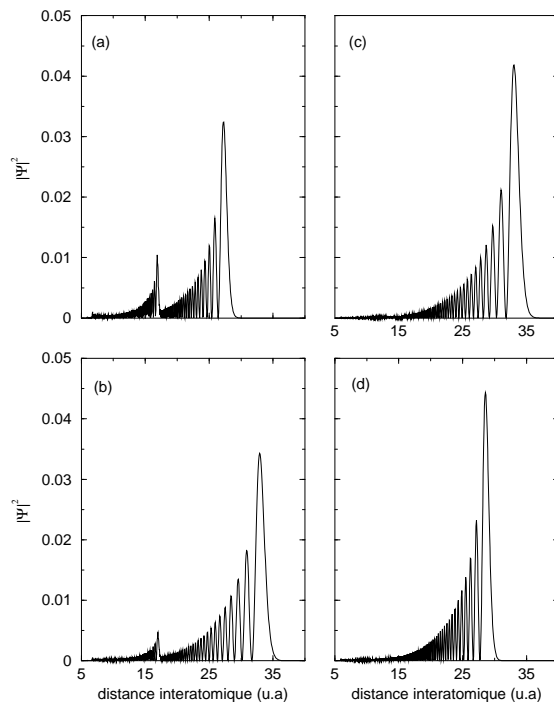


FIG. 3.18 – Fonctions d’onde vibrationnelles pour l’état $0^+(A^1\Sigma)$ du $RbCs$, près de la limite de dissociation. (a) et (b) : Calcul à deux voies couplées par un couplage dépendant de R (a) fonction d’onde avec un numéro vibrationnel $v = 365$ à un detuning de -20 cm^{-1} . (b) : fonction d’onde avec un $v = 373$ et à un detuning de -7 cm^{-1} . (c) et (d) : Calcul à un seul état non perturbé (c) $v = 241$ et $\Delta_L = -7 \text{ cm}^{-1}$ (d) $v = 235$ et $\Delta_L = -20 \text{ cm}^{-1}$

La figure (3.18 (a) et (b)) montre que le couplage résonant induit dans la fonction d’onde du niveau de photoassociation un point tournant supplémentaire à une distance interatomique intermédiaire. Le couplage augmente la probabilité de présence $|\Psi|^2$ dans les fonctions d’onde vibrationnelles au voisinage du point tournant de l’état excité. Sa présence, comme nous le verrons dans la section suivante est obligatoire si on veut former des molécules froides stables.

Distribution vibrationnelle

Intéressons nous maintenant à la distribution vibrationnelle des molécules froides formées dans l’état fondamental. La distribution vibrationnelle dans le cas du $RbCs$ est donnée dans la figure (3.19).

Nous avons considéré le cas d’un calcul à un seul état non perturbé et le cas du calcul à deux voies couplées par un couplage dépendant de R [255]. La figure 3.19 illustre le rôle crucial du couplage résonant étudié ici : en l’absence du couplage spin-orbite (cas d’un état non perturbé), seuls les niveaux vibrationnels élevés sont peuplés. Alors que dans le cas du couplage spin-orbite, on remarque qu’une quantité non négligeable de

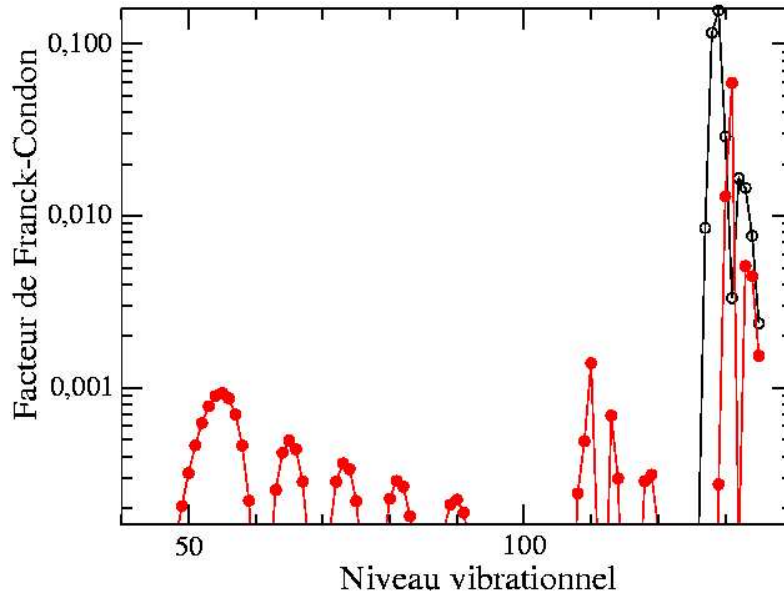


FIG. 3.19 – Distribution vibrationnelle des molécules froides de $RbCs$ dans l'état fondamental $X^1\Sigma^+$, après émission spontanée du niveau de PA de l'état $0^+(A^1\Sigma)$ à un décalage du laser égal à -7 cm^{-1} . L'abscisse montre le numéro quantique vibrationnel des niveaux de l'état fondamental. en cercles pleins : cas(iii), calcul à deux voies couplées par un couplage dépendant de R ; en cercles : cas(i), calcul à un seul état non perturbé.

molécules froides est créée dans des niveaux vibrationnels profonds de l'état fondamental, ceci est dû à la présence du second point tournant où augmente le recouvrement de ces états vibrationnels dans les niveaux profonds de l'état fondamental favorisant la création de molécules froides stables (figure 3.19).

Nous retrouvons l'une des principales conclusions des travaux des références [95] et [24] qui est qu'il est possible de former des molécules froides stables à travers un niveau couplé, vibrationnel résonant bien au dessous de la limite de dissociation.

Taux de photoassociation et de formation de molécules froides

Si nous comparons les taux de photoassociation et de formation de molécules froides (figure 3.20), nous remarquons que ces taux ont pratiquement la même amplitude dans les trois cas cités précédemment, ils ne sont donc pas sensibles à la présence ou non du couplage spin-orbite. Il est cependant crucial de rajouter ce couplage au calcul des niveaux vibrationnels des états électroniques excités et fondamentaux si nous voulons former des molécules froides dans des niveaux vibrationnels profonds des états fondamentaux.

Le terme de couplage spin-orbite [255] est donc crucial et dans le reste de nos calculs, et nous considérerons le cas du couplage spin-orbite dépendant de R .

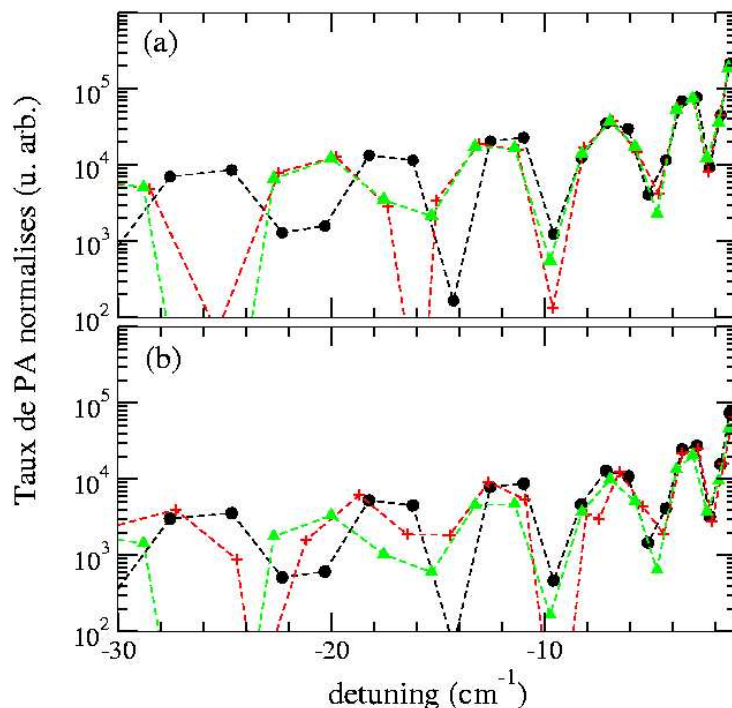


FIG. 3.20 – Taux (a) de photoassociation et (b) de formation de molécules froides pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \leftarrow X^1\Sigma^+$ dans le dimère de RbCs calculés selon les trois hypothèses citées précédemment (i) calcul à un seul état non perturbé (en vert avec des triangles), (ii) calcul à deux voies couplées par un couplage spin-orbite atomique (en rouge avec des +), (iii) calcul à deux voies couplées par un couplage dépendant de R (en noir avec des cercles)

3.6.3 Taux de photoassociation des dimères alcalins hétéronucléaires

Avant de présenter les résultats originaux de cette partie, il est important de voir dans quelle mesure les différents facteurs d'échelle vont influencer ces taux. Le facteur qui aura le plus d'influence sera le facteur de masse, les autres ayant des valeurs plus faibles.

Influence du facteur de masse sur les taux de photoassociation

Nous avons calculé, grâce à l'équation 3.3 les recouvrements pour les composés de Cs et de Rb pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \leftarrow X^1\Sigma^+$. Les résultats sont reportés sur la figure 3.21. Ils sont comparés aux recouvrements pour les transitions $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \leftarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2}) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ dans le Cs₂ (qui sont nos références). Les recouvrements pour les composés de Cs et de Rb sont 40 à 50 fois plus petits que ceux des états 0_g^- et 0_u^+ de Cs₂. Nous remarquons que pour une même densité, les dimères sont avantagés parce que leurs potentiels sont à plus longue portée (voir

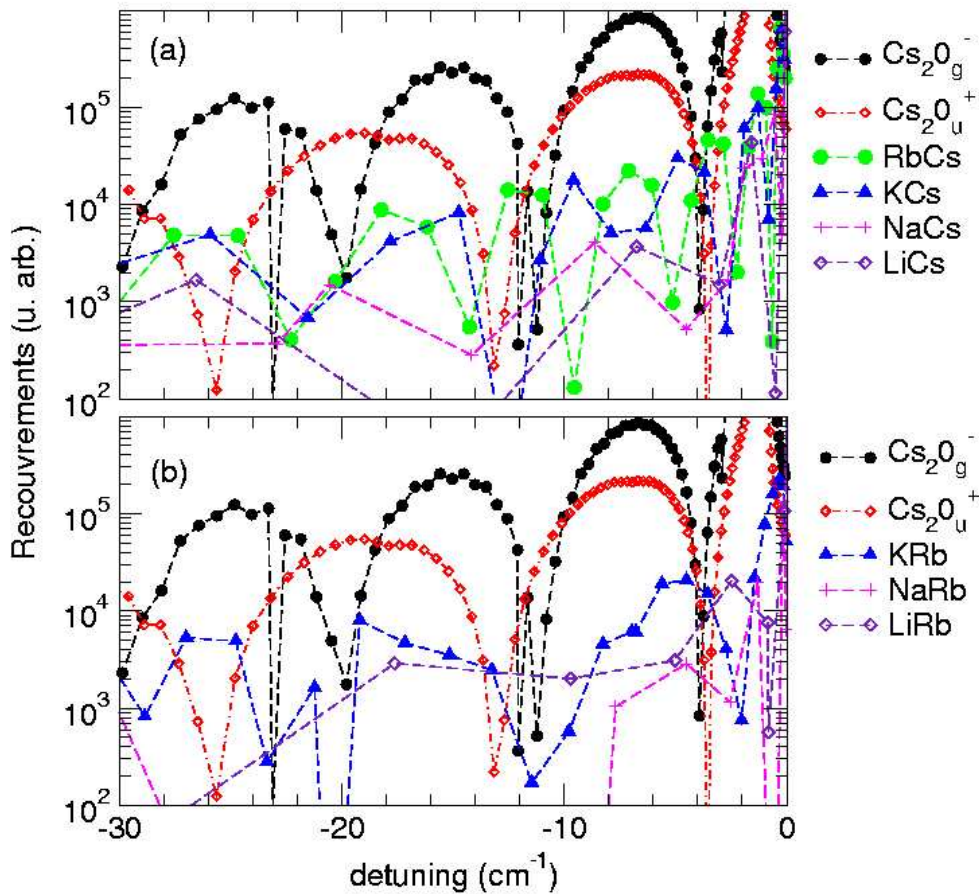


FIG. 3.21 – Valeurs des recouvrements calculés pour (a) composés avec le Cs et (b) composés avec le Rb, pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \leftarrow X^1\Sigma^+$ en fonction du detuning du laser de photoassociation sous l'asymptote $^2S + ^2P_{1/2}$. La température est fixée à $140 \mu K$ pour la paire d'atomes initiale en collision. Ils sont comparés aux recouvrements pour les transitions $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \leftarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2}) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ dans le Cs_2 .

figure 3.13)

La possibilité d'obtenir des recouvrements élevés pour les dimères alcalins hétéro-nucléaires reste assez faible, ceci est dû, comme nous l'avons vu dans le paragraphe 3.5, aux propriétés de leurs potentiels excités, ils sont de courte portée par rapport

aux homonucléaires (ils varient asymptotiquement en $1/R^6$ contrairement aux homonucléaires qui eux varient asymptotiquement en $1/R^3$), bien que les valeurs des coefficients C_6 des potentiels excités soient très grandes voir tableau 3.2. Cependant, nous n'avons donné dans cette figure que les valeurs des recouvrements entre les fonctions d'onde.

En effet, si on veut parler en termes de taux de photoassociation, il est nécessaire de considérer les conditions expérimentales qui sont présents dans les facteurs d'échelle que nous avons définis dans le paragraphe 3.6.1 et présents dans l'équation 3.47. Le facteur le plus important est celui dû à la masse.

De manière générale, le facteur de masse qui apparaît dans l'équation 3.47 compense le facteur d'échelle des intégrales de recouvrement (les recouvrements des dimères légers LiCs, LiRb, NaCs et NaRb sont les plus faibles). Les dimères légers verront leur taux de photoassociation devenir comparables à ceux des espèces dimères plus lourds, contrairement aux résultats donnés dans la référence [1], où les auteurs privilégiaient les dimères lourds aux dimères légers.

Les taux de photoassociation normalisés pour les composés de Cs et de Rb calculés pour les deux transitions $0^+(A^1\Sigma^+) \leftarrow X^1\Sigma^+$ et $0^+(b^3\Pi) \leftarrow a^3\Sigma^+$ et utilisant les fonctions de couplage $\zeta_{Rb}(R)$ et $\zeta_{Cs}(R)$, sont donnés dans les figures (3.22) et (3.23). Ces taux sont comparés à ceux des états $0_g^-(6s + 6p_{3/2})$ et $0_u^+(6s + 6p_{1/2})$ du Cs_2 .

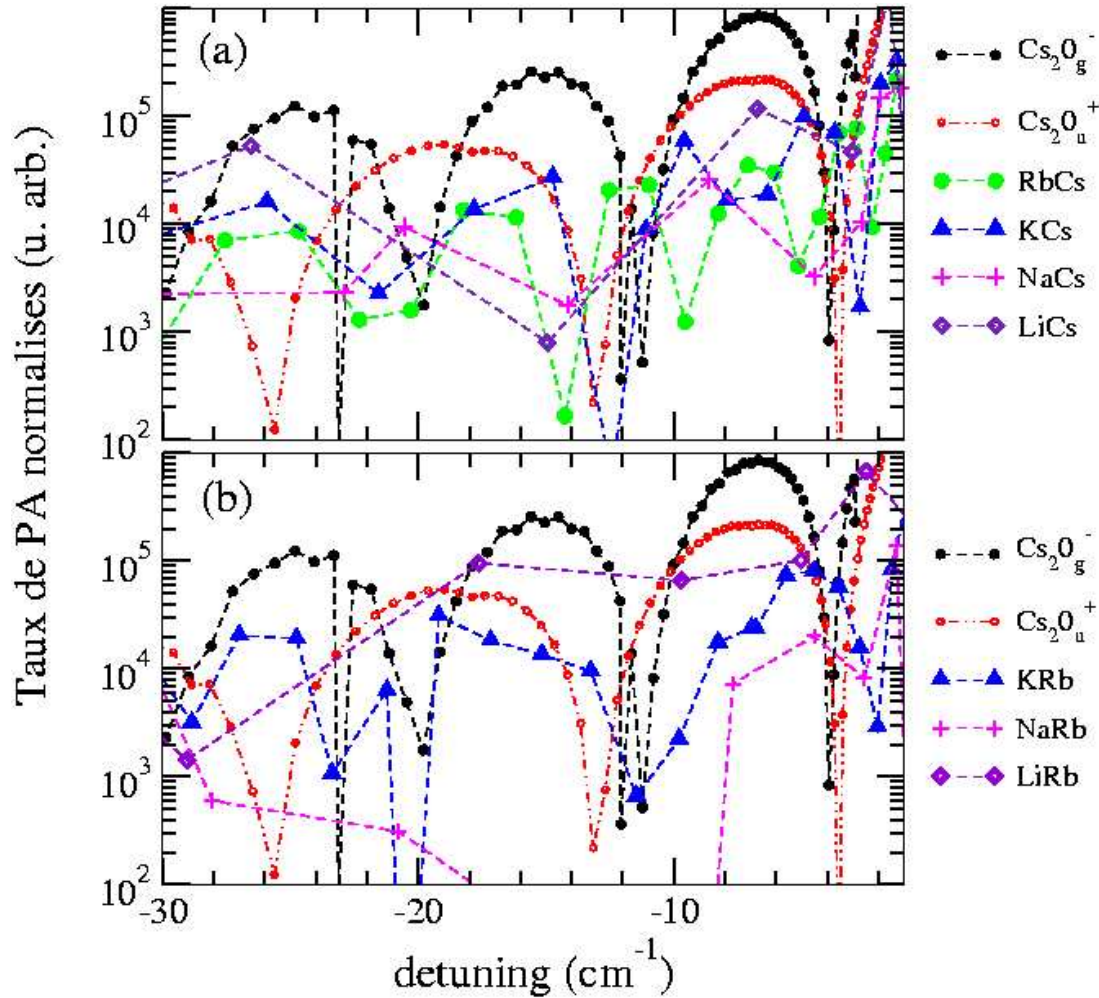


FIG. 3.22 – Taux de photoassociation (PA) normalisés pour (a) composés avec *Cs* et (b) composés avec *Rb*, pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \leftarrow X^1\Sigma^+$ en fonction du detuning du laser de photoassociation sous l’asymptote $2S + 2P_{1/2}$. La température est fixée à $140 \mu K$ pour la paire d’atomes initiale en collision. Ils sont comparés aux taux de photoassociation des transitions $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \leftarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2}) \leftarrow X^1\Sigma_u^+$ dans le Cs_2

Il est intéressant de remarquer que les taux normalisés de photoassociation pour tous les dimères ne diffèrent plus, entre eux, que d’un facteur 5 dans le cas de la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \leftarrow X^1\Sigma^+$ et d’un facteur 3 dans le cas de la transition $0^+(b^3\Pi) \leftarrow a^3\Sigma^+$. Le facteur de masse réduite a équilibré la hiérarchie trouvée dans les valeurs des recouvrements.

Les taux que nous trouvons sont 10 à 30 fois plus petits que ceux du $0_g^-(6s + 6p_{3/2})$ du Cs_2 . Le dimère $LiRb$ a un taux de photoassociation comparable à celui du $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2})$. Ceci est dû au facteur d’échelle de masse. Ce résultat que nous mettons en évidence pour la première fois, montre la faisabilité d’une expérience de photoassociation

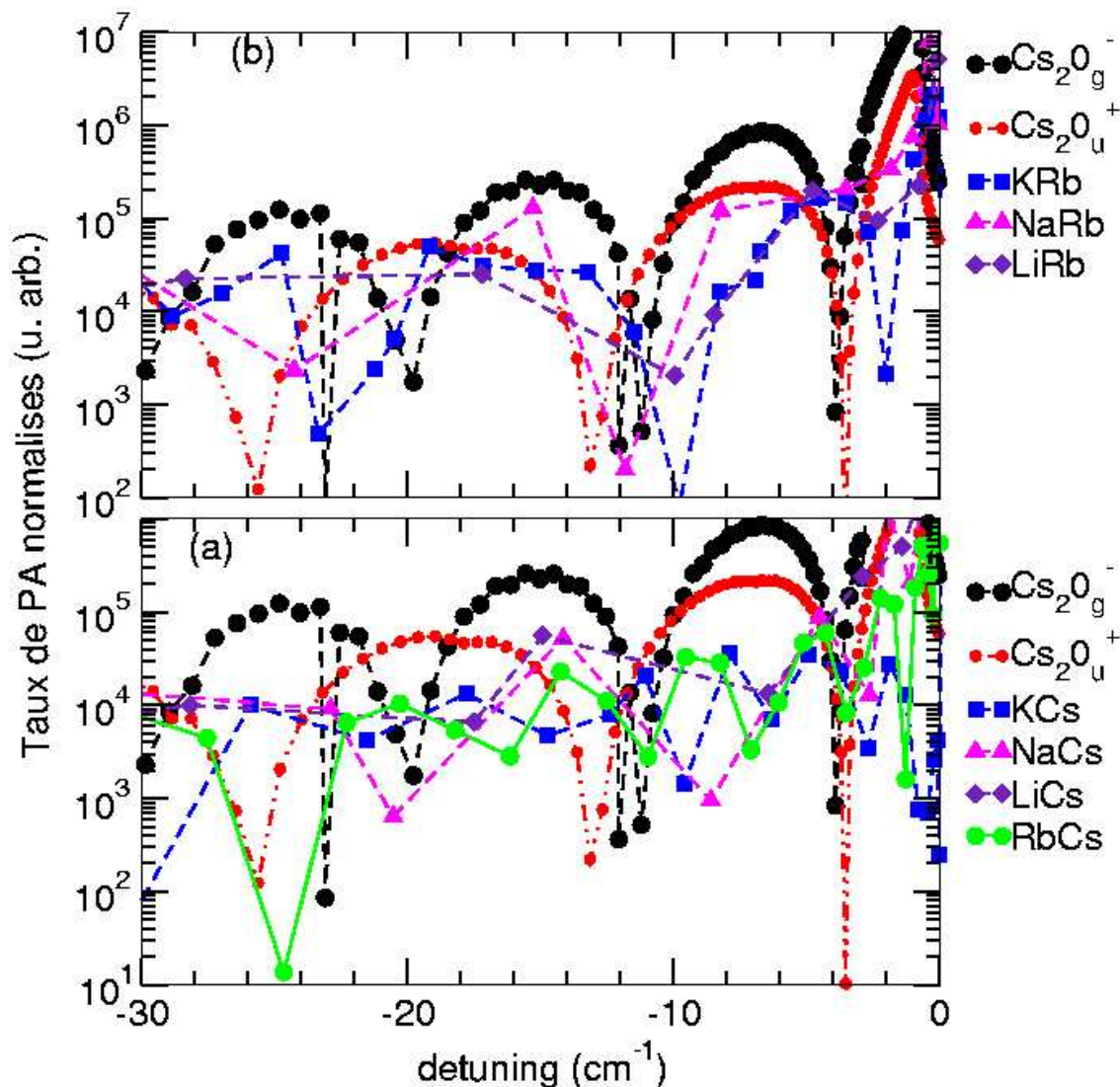


FIG. 3.23 – Taux de photoassociation (PA) normalisés pour (a) composés avec *Cs* et (b) composés avec *Rb*, pour la transition $0^+(b^3\Pi) \leftarrow a^3\Sigma^+$ en fonction du detuning du laser de photoassociation sous l'asymptote $^2S + ^2P_{1/2}$. La température est fixée à $140\mu K$ pour la paire d'atomes initiale en collision. Ils sont comparés aux taux de photoassociation des transitions $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \leftarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2}) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ dans le Cs_2

du LiRb (expériences déjà menées pour le KRb [27, 193, 26] et le RbCs [28, 73, 194], dimères plus lourds).

3.6.4 Calculs de taux de photoassociation semi-classiques menés par Wang et al. [1]

Wang et al. ont utilisé une approche semi-classique pour l'évaluation des taux de photoassociation des dimères hétéronucléaires. Ils ont étudié quantitativement le principe selon lequel, il faut que le coefficient C_6 de l'état excité décrivant l'interaction entre les atomes à longue distance, soit grand si on espère obtenir une forte probabilité de photoassociation des molécules hétéronucléaires. Les auteurs utilisent les coefficients asymptotiques des molécules évalués dans la référence [257], voir tableau 3.6.

Parmi les 10 molécules hétéronucléaires que l'on peut construire à partir des 5 atomes alcalins (Li, Na, K, Rb et Cs), il est montré dans la référence [1], par des calculs de recouvrement utilisant l'approximation de la réflexion [231] des fonctions d'onde radiales, que KRb , $RbCs$ et KCs sont les meilleurs candidats possibles pour le processus de photoassociation. Ces résultats s'interprètent aisément en comparant les coefficients C_6 des potentiels excités (voir tableau 3.6). Ceux des molécules KRb , $RbCs$ et KCs sont les plus importants quelle que soit la symétrie des états moléculaires excités. Ce résultat apparaît clairement lorsque l'on trace les courbes de potentiel, voir figures (3.12 et 3.13). Il y a aussi un sens physique au fait que ces trois molécules hétéronucléaires ont le coefficient C_6 le plus important. Les longueurs d'onde des transitions D , des alcalins K, Rb et Cs sont les plus proches.

Notons aussi que les potentiels corrélés aux deux asymptotes de plus basses énergie sont généralement attractifs à longue distance et ceux corrélés aux deux asymptotes de plus grandes énergie sont répulsifs. Il existe quelques exceptions à cette règle [1].

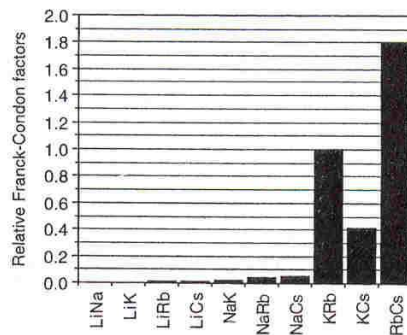


FIG. 3.24 – Valeurs relatives des facteurs de Franck-Condon pour les systèmes hétéronucléaires comparés au dimère de KRb figure extraite de la référence [1]

La figure (3.24), qui est extraite de la référence [1], montre les valeurs relatives (normalisées à KRb) du produit

$$[\mu^{\frac{4}{9}}(C'_6)^{3/4}]$$

qui détermine les facteurs de Franck-Condon calculés par Wang et al. [1] avec la méthode semi-classique pour les différents dimères alcalins à grande distance interatomique. KRb a des facteurs de Franck-Condon à grande distance plus grands d'un facteur 10 que les sept espèces plus légères et d'un facteur 2 plus grand que KCs . L'espèce la plus lourde $RbCs$, a la valeur la plus grande (d'après ces auteurs [1], les longueurs de diffusion pour les collisions hétéronucléaires n'étant pas connues, les valeurs absolues des facteurs de Franck-Condon ne peuvent être estimées en utilisant l'équation (3.50)).

Nous avons voulu comparer nos résultats obtenus avec la méthode perturbative de Pillet et al. [225] et que nous avons présenté dans la section (3.3) avec ceux obtenus par Wang et al. [1]. Pour cela, nous avons repris l'expression analytique (15) de la référence [1] qui calcule les facteurs de Franck-Condon :

$$F_{v,E}(n=6) = \frac{\Gamma(7/6)}{\Gamma(2/3)} [\bar{X}_0(6)]^{-5/6} \left(\frac{8\mu^{7/2}k_\infty^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/2} (C'_6)^{3/4} (v_D - v)^{-5/2} \left(1 - \frac{a_s}{R_{v+}} \right) \quad (3.50)$$

où

- a_s est la longueur de diffusion de l'onde s .
- R_{v+} est la valeur du point tournant du potentiel excité.
- $(v_D - v)$ est le nombre quantique vibrationnel, v_D est le nombre quantique vibrationnel effectif à la limite de dissociation.
- $k_\infty = \left(\frac{2\mu k_B T}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ est le vecteur de l'onde thermique de la collision de l'état fondamental (pour $T < 1mK$).
- $\bar{X}_0(n)$ est une constante qui dépend uniquement de n .
- $n = 6$ dans le cas d'une transition libre-liée.

Cette expression repose sur le modèle proposé par P. Julienne [231] basé sur l'approximation de la réflexion. On peut noter que le recouvrement se fait au point tournant externe R_{v+} du niveau excité (niveau de photoassociation). Elle est valable à grande distance internucléaire $R_{v+} \gg a_s$.

De cette approximation provient la principale différence entre nos calculs et ceux présentés dans la référence [1], puisque dans la méthode perturbative que nous avons utilisé dans nos calculs de recouvrements, nous avons déterminé les fonctions d'onde *sur tout le domaine de distance interatomique*.

Nous avons, malgré cette constatation, refait les calculs effectués par Wang et al. en utilisant l'expression du recouvrement (3.50) et les mêmes coefficients C'_6 qu'ils ont utilisé [257] (voir tableau 3.6), et en ne considérant que la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \rightarrow X^1\Sigma^+$.

Dans l'équation (3.50), la valeur de la longueur de diffusion est requise. Nous savons que la longueur de diffusion a un rôle important dans les processus collisionnels et dépend des caractéristiques du potentiel d'interaction. La longueur de diffusion impose la forme asymptotique de la fonction d'onde à énergie nulle : cette fonction d'onde au seuil a pour asymptote une droite qui coupe l'axe des abscisses au point $R = a_s$. Par contre, dans la méthode perturbative [225] que nous avons utilisée pour la détermination des taux de photoassociation, les longueurs de diffusion des potentiels $^2S + ^2S$ étant arbitraire, nous ne les avons pas inclus dans nos calculs de taux.

dimère alcalin	C'_6 [u.a.]
RbCs	-51213
KCs	-40556
NaCs	-14165
LiCs	-15342
KRb	-103106
NaRb	-12913
LiRb	-16072

TAB. 3.6 – Valeurs des coefficients C'_6 tirées de la référence [257] et utilisées par Wang et al. dans la référence [1]

Pour les calculs avec la méthode semi-classique, nous avons déterminé graphiquement

	$X^1\Sigma^+[u.a.]$	$a^3\Sigma^+[u.a.]$
RbCs	239.5	-16.2
KCs	-83.9	224.4
NaCs	130.9	-184.8
LiCs	-30.6	62.3
KRb	55.6	68.4
NaRb	33.8	1085.9
LiRb	-20.9	402.0

TAB. 3.7 – longueurs de diffusion des potentiels $X^1\Sigma^+$ et $a^3\Sigma^+$

les longueurs de diffusion des dimères hétéronucléaires, les valeurs correspondantes sont regroupées dans le tableau 3.7. Notons que ces paramètres dépendent du choix des potentiels que nous avons considéré, ils n'ont aucune réalité physique.

Les résultats sont reportés sur la figure (3.25), où nous comparons les valeurs que nous obtenons avec la méthode de la référence [1] que nous désignerons par (b), avec les recouvrements obtenus avec la méthode perturbative que nous avons utilisé [225] (a).

Les résultats que nous obtenons avec l'équation 3.50 tirée de la référence [1] (b) sont très différents de ceux obtenus avec l'équation 3.47 (a). Ces différences s'expliquent par les approximations faites pour le calcul des recouvrements, dans le cas de la méthode perturbative (a), les fonctions d'onde sont déterminées sur tout le domaine de la distance interatomique, alors que dans le cas (b), nous n'avons calculé ce recouvrement qu'au point de Condon, de plus dans le cas (a), le recouvrement est multiplié au facteur de masse (rapport des masses réduites du dimère de césium et du dimère hétéronucléaire considéré), alors que dans le cas (b) seule la masse du dimère hétéronucléaire est considérée. Rajoutons que dans le cas (b), la valeur du coefficient C_6 est aussi prise en compte.

Cela donne des valeurs de Franck-Condon plus élevées dans le cas (b) sauf pour le NaRb dont les valeurs sont plus petites.

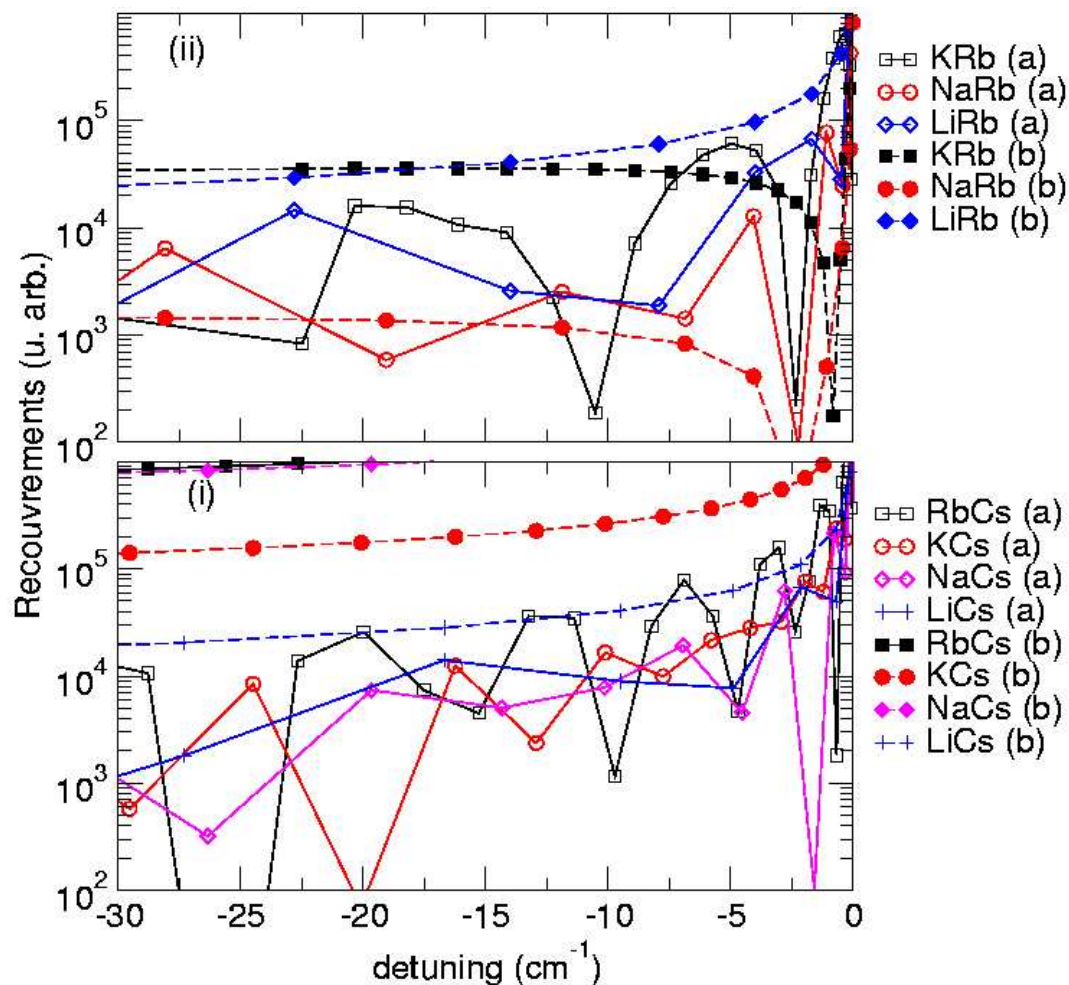


FIG. 3.25 – Comparaison entre les recouvrements calculés par la méthode perturbative de [225] (en traits pleins, notés (a)), et ceux calculés par la méthode semi-classique [1] (tirets, notés (b)). (i) : dimères composés avec le Cs. (ii) : dimères composés avec le Rb

Si nous comparons maintenant les résultats que nous obtenons avec l'équation 3.50 tirée de la référence [1] (b) avec ceux obtenus par Wang et al. (voir figure 3.24), les différences trouvées s'expliquent par le fait que les auteurs n'ont considéré que le rapport $[\mu^{\frac{4}{9}}(C_6')^{3/4}]$ en omettant la longueur de diffusion.

3.6.5 Taux de formation de molécules froides hétéronucléaires

Dans cette partie, nous calculons la formation de molécules froides. Les taux normalisés de formation de molécules froides de l'équation (3.8) dépendent du rapport de branchement $B(v_{0+})$ (voir équation 3.7) vers les états électroniques des potentiels fondamentaux. Rappelons que les rapports de branchements représentent la fraction de molécules stables formées par rapport au nombre total de molécules qui se désexcitent. Ils dépendent de la somme des intégrales de recouvrement entre la fonction d'onde liée de l'état excité photoassocié et des fonctions d'onde liées de l'état fondamental.

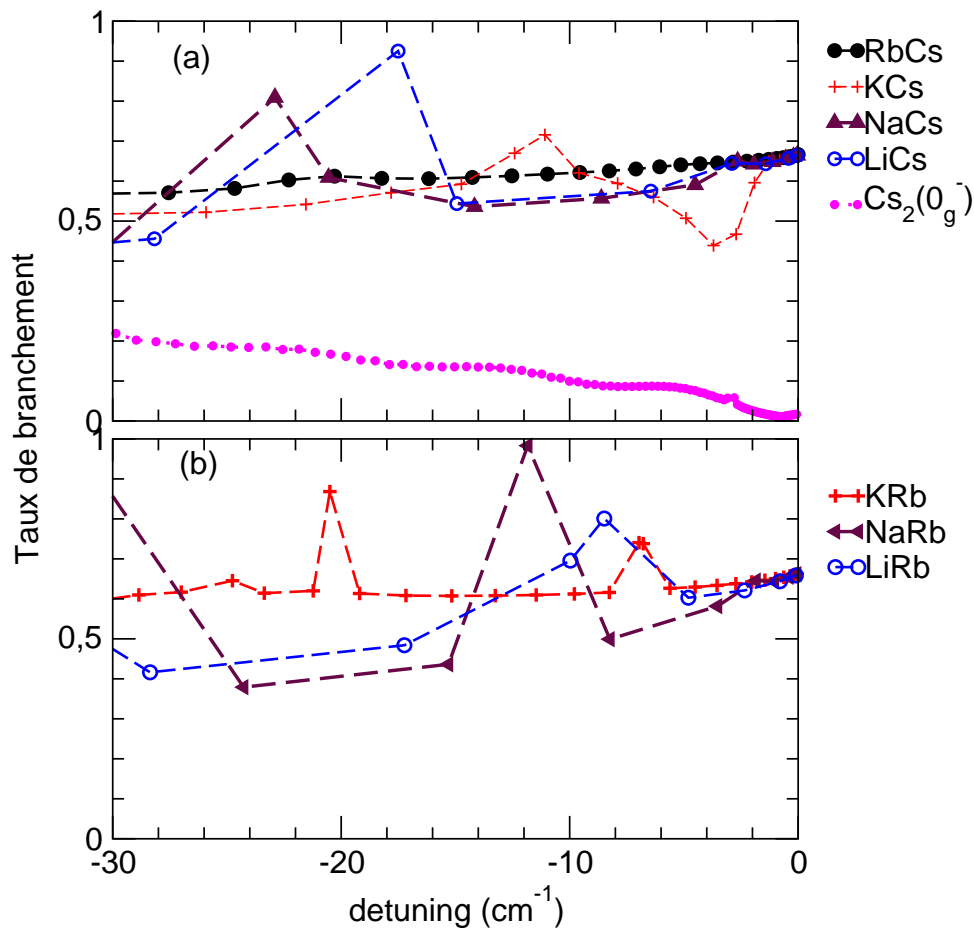


FIG. 3.26 – Rapports de branchements pour la transition $0^+(b^3\Pi) \rightarrow a^3\Sigma^+$ pour les composés de *Cs* et de *Rb*. Dans (a), le rapport de branchement pour la transition $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \rightarrow a^3\Sigma_u^+$ dans le Cs_2 est aussi indiqué.

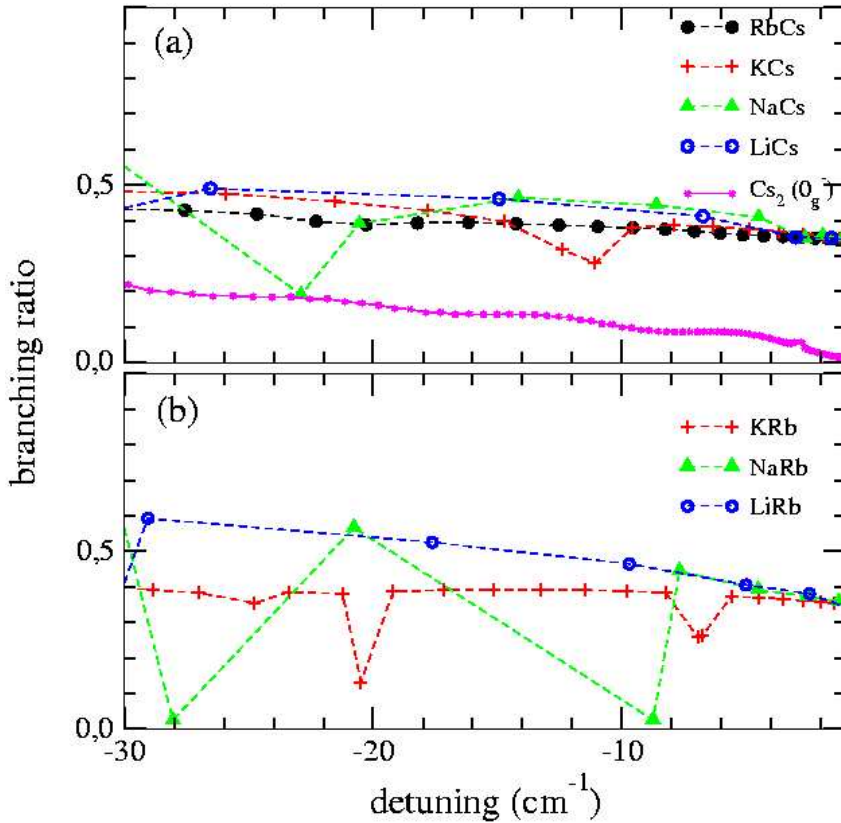


FIG. 3.27 – Rapports de branchements pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \rightarrow X^1\Sigma^+$ pour les composés de *Cs* et de *Rb*. Dans (a), le rapport de branchement pour la transition $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \rightarrow a^3\Sigma_u^+$ dans le Cs_2 est aussi indiqué.

Ils (voir figures (3.27) et (3.26)) varient lentement avec le detuning du niveau de photoassociation.

La fonction d'onde du niveau de photoassociation a des recouvrements notables avec plusieurs fonctions d'onde vibrationnelles des états du fondamental qu'on somme en une quantité où les détails des fonctions d'onde individuelles sont effacés. Pour les dimères légers contenant le lithium *Li* et le sodium *Na*, des irrégularités (la valeur du rapport de branchement chute), dues à des effets accidentels de résonances dans les rapports de branchements, sont observées. Ces irrégularités sont dues aussi au fait que la densité des niveaux dans les états fondamentaux est plus faible que celle des dimères plus lourds.

Dans la référence [256], les auteurs ont démontré, dans le cas du Cs_2 que la lente augmentation du rapport de branchement avec l'augmentation du detuning compense la diminution du taux de photoassociation amenant à un taux de formation de molécules froides qui a une grandeur moyenne en grande partie constante sur le domaine de detuning étudié. C'est aussi le cas des dimères hétéronucléaires que nous étudions, à l'exception des dimères $NaRb$, $LiRb$ et $LiCs$.

Nous avons représenté (en ne considérant que la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \rightarrow X^1\Sigma^+$ à titre d'exemple) les taux de formation de molécules froides calculés avant la mise à l'échelle sur les taux de sur la figure 3.28. Nous les comparons à ceux des états $0_g^-(6^2S+6^2P_{3/2})$ et $0_u^+(6^2S+6^2P_{1/2})$ du Cs_2 .

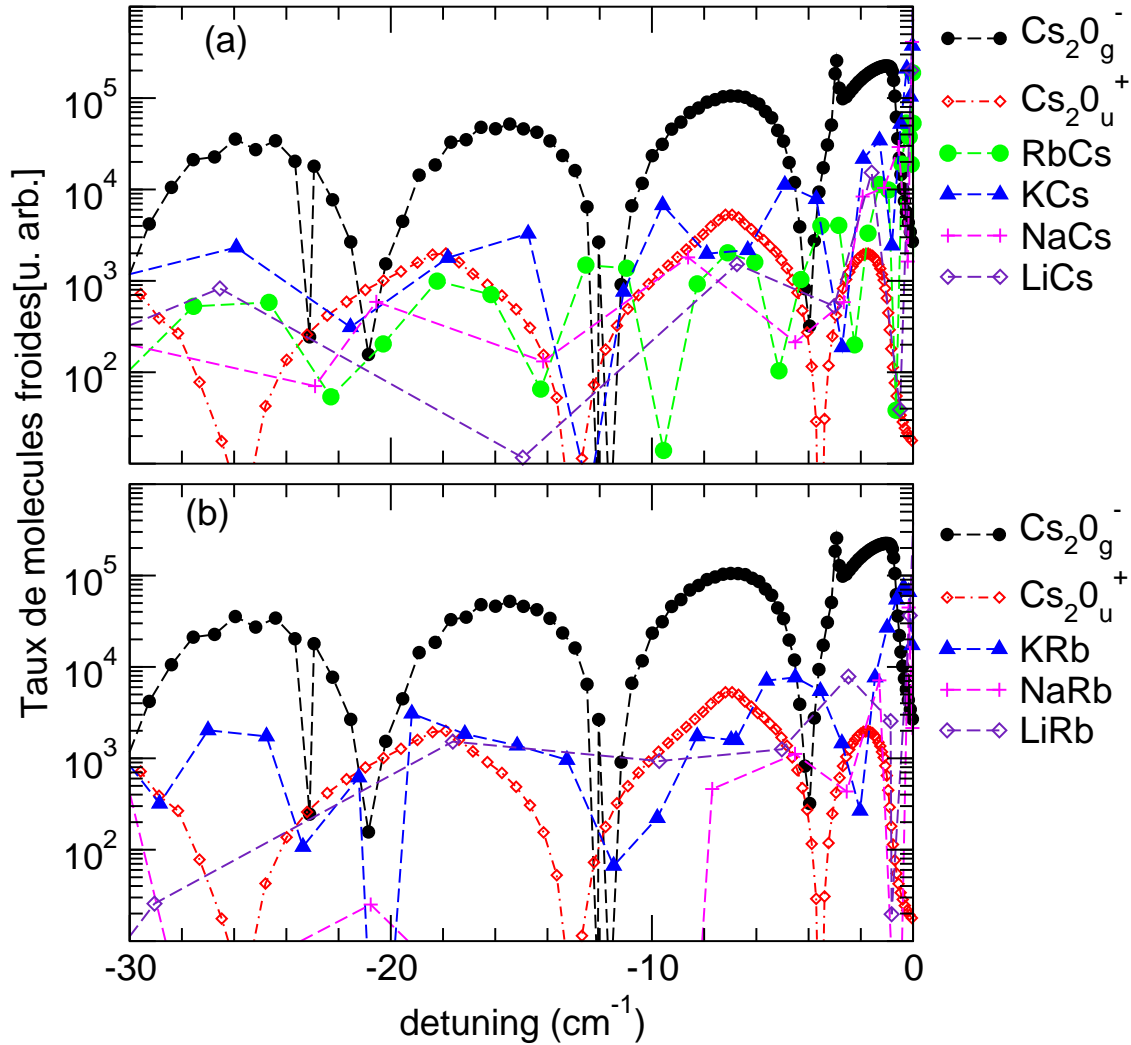


FIG. 3.28 – Taux de molécules froides calculés avec l'équation 3.8 pour (a) composés avec Cs et (b) composés avec Rb , pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \rightarrow X^1\Sigma^+$ en fonction du detuning du laser de photoassociation sous l'asymptote $^2S+^2P_{1/2}$. La température est fixée à $140\mu K$ pour la paire d'atomes initiale en collision. Ils sont comparés au taux de formation de molécules froides des transitions $0_g^-(6^2S+6^2P_{3/2}) \rightarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S+6^2P_{1/2}) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ dans le Cs_2 .

Les taux de formation de molécules froides avant la mise à l'échelle du taux de césium, calculés avec l'équation 3.8, que nous trouvons sont 10 à 20 fois plus petits que ceux de l'état $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$. Les dimères plus légers LiRb et LiCs ont les taux les plus petits.

Nous avons dans le paragraphe (3.6.1) défini les taux réduits de formation de molécules froides renormalisés, les résultats sont reproduits sur les figures (3.30) et (3.29). Comme pour les taux de photoassociation, la mise à l'échelle des taux de formation des molécules hétéronucléaires rééquilibre la hiérarchie. Les figures (3.30) et (3.29) prédisent des taux pour les molécules hétéronucléaires 10 fois plus petits que ceux du Cs_2 . Alors que les taux de $LiRb$ et $LiCs$ sont à peu près du même ordre que celui du Cs_2 . Ces résultats vont dans le même sens que ceux que nous avons obtenus pour les taux de photoassociation. Nous avons mis en évidence la faisabilité d'expériences de formation de molécules froides hétéronucléaires.

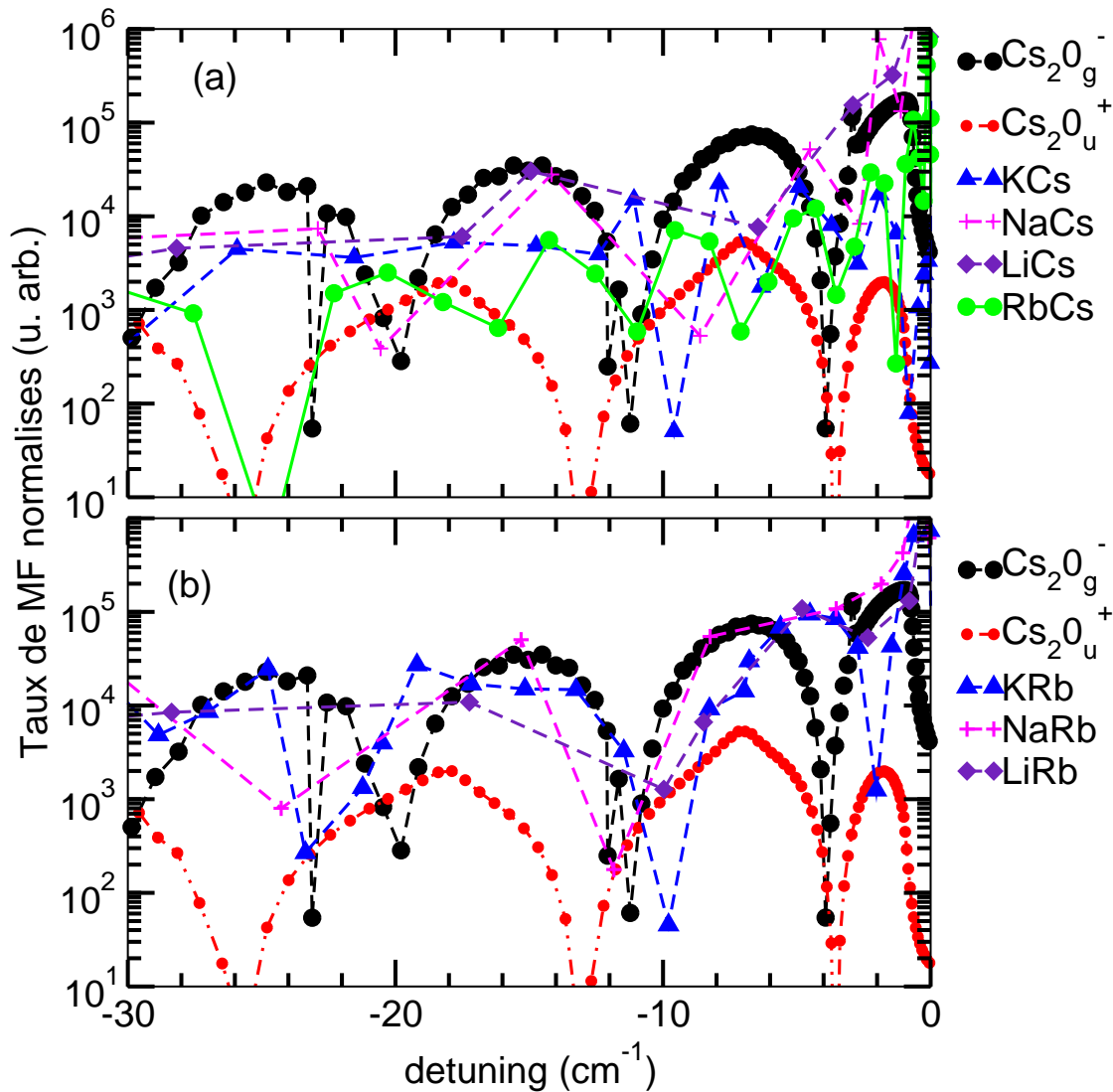


FIG. 3.29 – Taux de formation de molécules froides normalisés pour (a) composés avec *Cs* et (b) composés avec le *Rb*, pour la transition $0^+(b^3\Pi) \rightarrow a^3\Sigma^+$ en fonction du detuning du laser de photoassociation sous l'asymptote $^2S + ^2P_{1/2}$. La température est fixée à $140\mu\text{K}$ pour la paire d'atomes initiale en collision. Ils sont comparés au taux de formation de molécules froides des transitions $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \rightarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2}) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ dans le Cs_2 .

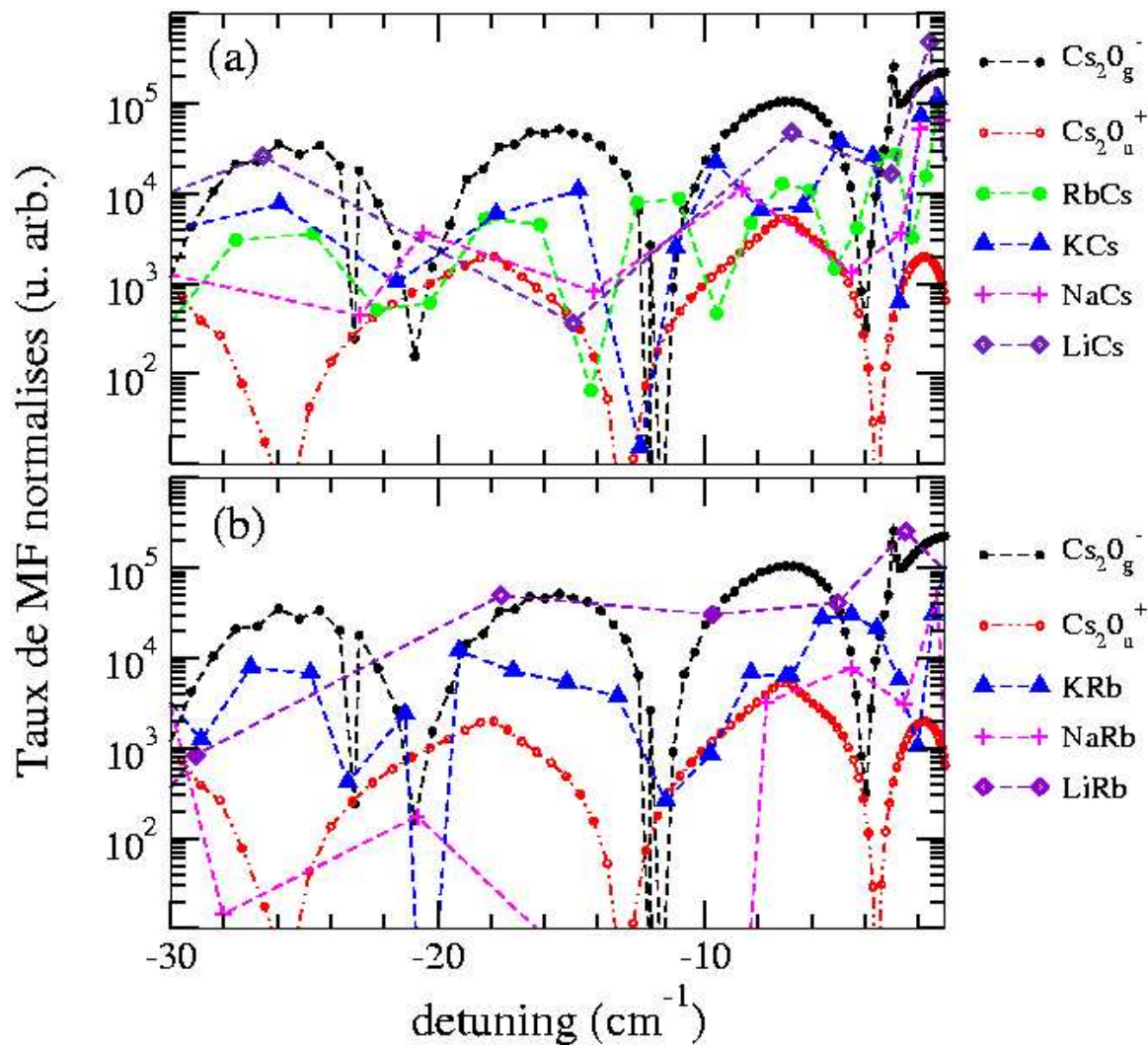


FIG. 3.30 – Taux de formation de molécules froides normalisés pour (a) composés avec Cs et (b) composés avec le Rb , pour la transition $0^+(A^1\Sigma^+) \rightarrow X^1\Sigma^+$ en fonction du detuning du laser de photoassociation sous l'asymptote $^2S + ^2P_{1/2}$. La température est fixée à $140\mu K$ pour la paire d'atomes initiale en collision. Ils sont comparés au taux de formation de molécules froides des transitions $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \rightarrow a^3\Sigma_u^+$ et $0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2}) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ dans le Cs_2 .

3.6.6 Comparaison avec l'expérience

Dans les deux sections précédentes, nous avons présenté les résultats que nous avons obtenus pour les taux de photoassociation et de formation de molécules froides. Il serait intéressant d'exprimer ces taux en terme de taux mesurables afin de les comparer aux valeurs expérimentales. Dans la référence [256], le taux de photoassociation pour le niveau $v = 77$ pour l'état $0_g^-(6^2S+6^2P_{3/2})$ du puits externe dans le Cs_2 localisé à un detuning de 7 cm^{-1} a été mesuré autour de $1.25 \times 10^8 s^{-1}$ (avec un facteur d'incertitude estimé à 2 lié à la détermination du nombre absolu d'atomes, $N_{Cs} = 510^7$) pour un laser de photoassociation d'intensité $I=55 \text{ W.cm}^{-2}$, et un nuage atomique à une température de $140 \mu K$. Dans le même papier, l'approche perturbative que nous utilisons pour nos calculs a donné un taux égal à $2.5 \times 10^8 s^{-1}$ en bon accord avec la valeur expérimentale.

Dans l'expérience de photoassociation de $RbCs$ [28] que nous avons décrite dans le paragraphe (3.1.2), les auteurs trouvent un taux de $1.5 \times 10^8 s^{-1}$, mesuré pour une intensité de laser de $I = 10 \text{ W.cm}^{-2}$, et utilisant un grand nombre d'atomes froids $N_{Cs} = 3.10^8$ et $N_{Rb} = 4.10^8$ aux températures $T_{Rb} = 55 \mu K$ et $T_{Cs} = 140 \mu K$.

Si on suppose [225] que le taux de photoassociation selon l'équation 3.3 est proportionnel :

- à l'intensité du laser de photoassociation (qui diffère d'un facteur 2 entre les deux expériences,
- au nombre d'atomes présents dans le piège (qui est plus grand d'un facteur 10 dans l'expérience de $RbCs$)
- et enfin à l'inverse de la température (qui produit un facteur allant de 1 à 2, difficile à estimer puisque les deux espèces ne sont pas à la même température, et que nous prendrons égal à 1.5).

Si nous multiplions tous ces facteurs, nous trouvons une valeur égale à 30. Or notre calcul dont les résultats sont représenté sur la figure (3.22) indique que le taux de photoassociation pour les états 0^+ du $RbCs$ est 30 fois plus petit que celui du $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ du Cs_2 , dans les mêmes conditions expérimentales. Si nous le multiplions par le facteur 30 que nous venons de trouver, nous retrouvons la valeur expérimentale mesurée par Kerman et al. [28].

Comme pour les taux de photoassociation, nous pouvons établir un rapport entre les taux de formation de molécules froides que nous calculons avec les valeurs expérimentales : le taux de molécules froides de Cs_2 formées après la photoassociation de l'état $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ est à peu près égal à $2.10^6 s^{-1}$ [256]. L'expérience de formation de molécules froides de $RbCs$ menée par l'équipe de DeMille [73] a trouvé un taux égal à $10^6 s^{-1}$, ce qui nous donne un facteur 2 entre les deux expériences. Si nous relient le facteur 30 induit par les différences dans les conditions expérimentales, le taux de formation de molécules froides stables de $RbCs$ dans l'état fondamental sera $30/2=15$ fois plus petit que celui du Cs_2 . Or la figure 3.30 montre que les taux de formation de molécules froides de $RbCs$ que nous calculons diffèrent par un facteur 10 des taux de formation de molécules froides de Cs_2 . L'accord entre nos calculs et les mesures expérimentales est satisfaisant.

De plus, notre modèle prédit une formation, dans les états fondamentaux, de molécules ultrafroides de LiRb et LiCs , 4 fois plus efficace que celle de RbCs . Si on tient compte des résultats concernant la formation de molécules froides de RbCs et de Cs_2 , les expériences menant à la production de molécules froides de LiCs et LiRb devraient fournir des taux non négligeables.

Remarque

Dans l'article publié par l'équipe de DeMille [28], les auteurs comparent les constantes rotationnelles obtenues grâce à un traitement théorique avec les valeurs qu'ils obtiennent de l'expérience représenté sur la figure 3.31, l'accord entre les deux courbes est excellent. Nous avons à notre tour représenté les constantes rotationnelles que nous obtenons avec la méthode perturbative et l'avons mis à l'échelle du graphe précédent comme représenté dans la figure 3.32. L'accord est très bon avec les résultats expérimentaux et théoriques de [28]. Notons pour finir que les potentiels fondamentaux et excités [105] de RbCs que nous avons utilisés sont les mêmes que ceux utilisés par l'équipe de DeMille.

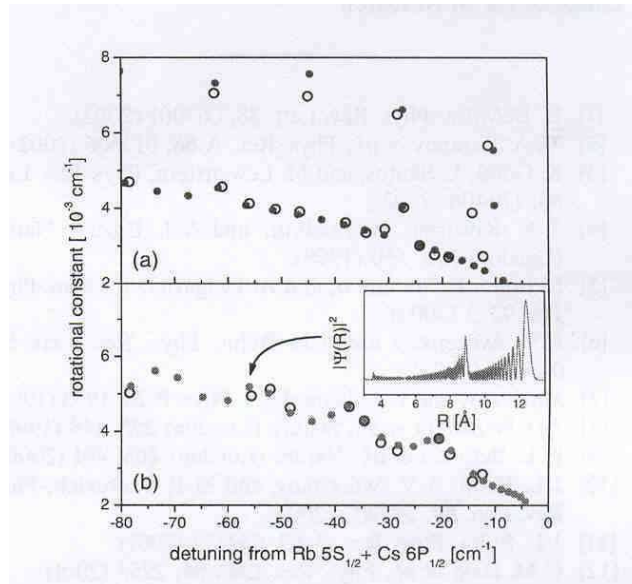


FIG. 3.31 – Comparaison entre les niveaux observés, $\Omega = 0^+$ (cercles ouverts) et ceux calculés à partir de potentiels théoriques (cercles pleins). Chaque point correspond à une série rotationnelle (a). L'axe des abscisses représente l'énergie $E_{v,0}$ des composantes $J = 0$ et l'axe des ordonnées les constantes rotationnelles correspondantes B_v définies par $E_{v,J} - E_{v,0} = B_v J(J+1)$. Dans (a), les niveaux 0^- et dans (b), les niveaux 0^+ . Dans le petit carré, ils ont représenté $|\Psi(R)|^2$ pour le niveau 0^+ à $\Delta = -55.63 \text{ cm}^{-1}$ qui montre le fort caractère mélangé. Figure tirée de la référence [28]

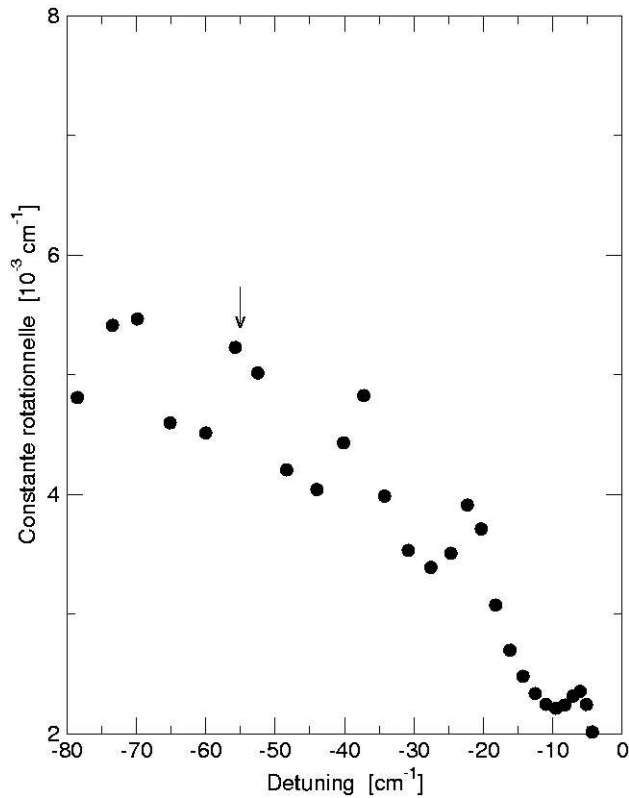


FIG. 3.32 – Constantes rotationnelles B_v correspondantes à l'état 0^+ calculées sous la limite $P_{1/2}$. La flèche montre la constante rotationnelle situé avec un $\Delta = -55.6 \text{ cm}^{-1}$. Les constantes rotationnelles que nous avons calculées sont similaires à celles calculées dans la référence [28], figure 3.31(b). Figure mise à l'échelle de la figure 3.31.

3.6.7 Distribution vibrationnelle des molécules ultrafroides

Nous avons vu dans le paragraphe (3.6.2), le rôle crucial du couplage résonant sur les distributions vibrationnelles.

Les distributions vibrationnelles dépendent principalement du niveau de photoassociation et de son couplage résonant avec les niveaux voisins. Elles dépendent aussi de l'état moléculaire final (singulet ou triplet).

Dans les figures suivantes, nous présentons quelques exemples qui illustrent différentes situations :

Dans le cas du $RbCs$, on s'attend à ce que les niveaux profonds de l'état triplet soient efficacement peuplés, figures 3.33 (c) et 3.16 (c), à cause du couplage résonant dans les niveaux de photoassociation comme dans le cas de la transition singulet de la figure 3.19.

Au contraire, dans le cas du KRb , il semble que les niveaux vibrationnels bas soient plus difficile à atteindre, figures (3.33 (a) et (b)), ceci est probablement dû à la valeur du coefficient asymptotique C_6 qui est grande par rapport aux autres systèmes. Cette grande valeur peut favoriser l'émission spontanée à grande distance interatomique.

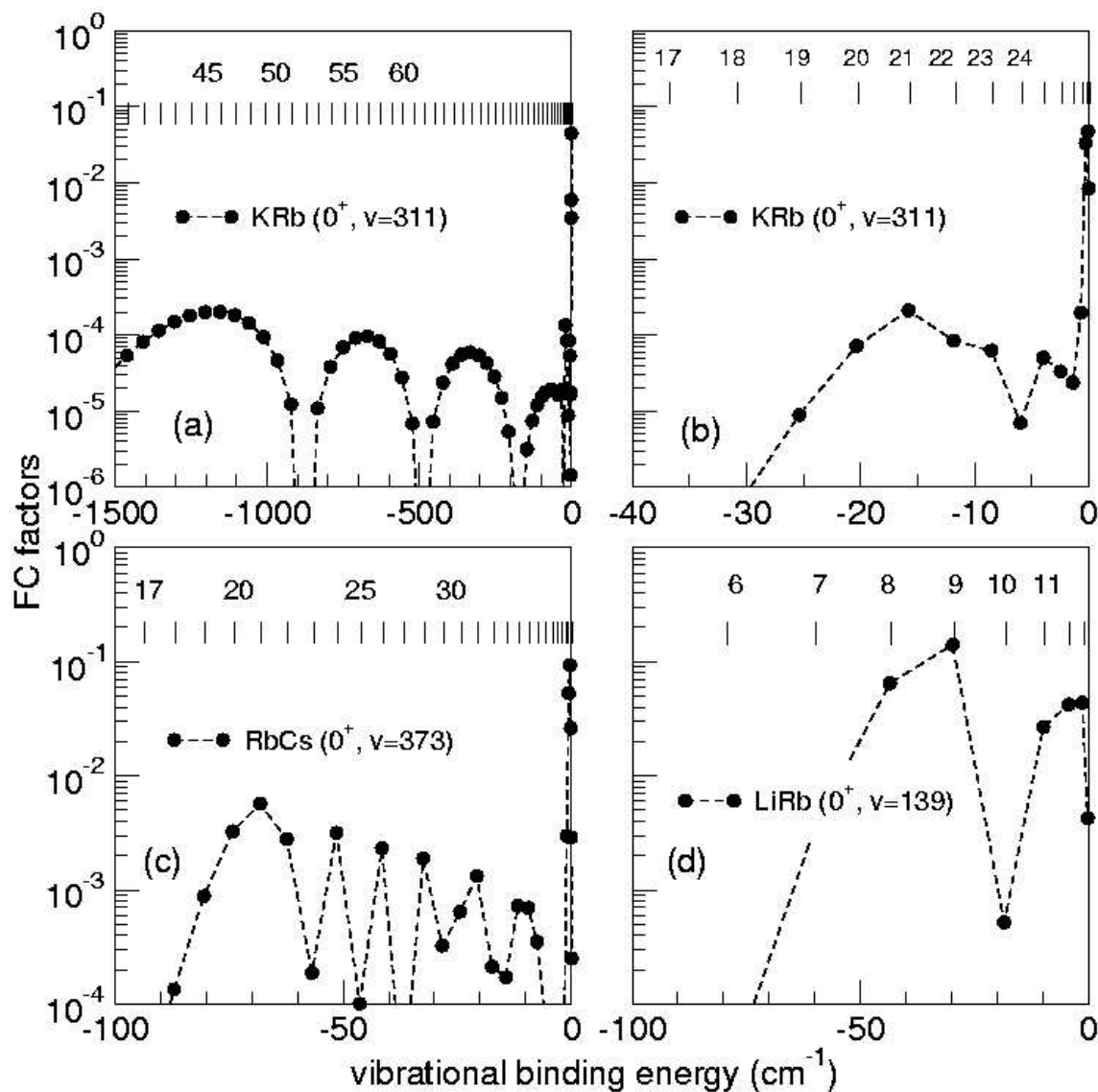


FIG. 3.33 – Distributions vibrationnelles. Les facteurs de Franck-Condon sont donnés pour un niveau vibrationnel donné de l'état excité en fonction de l'énergie de liaison. Les niveaux vibrationnels de l'état fondamental sont donnés en haut de chaque graphe. (a) : transition $0^+(A^1\Sigma^+) \rightarrow X^1\Sigma^+$, (b) : transition $0^+(b^3\Pi) \rightarrow a^3\Sigma^+$, (c) : transition $0^+(b^3\Pi) \rightarrow a^3\Sigma^+$ et (d) : transition $0^+(b^3\Pi) \rightarrow a^3\Sigma^+$.

La molécule LiRb est donc un cas où la distribution vibrationnelle est concentrée sur quelques niveaux liés de l'état triplet fondamental : cette distribution vibrationnelle très sélective peut-être exploitée dans des expériences futures.

Notons encore que la seule expérience de photoassociation menée sur un dimère alcalin hétéronucléaire léger qui est le LiCs par l'équipe de M. Weidemüller à Heidelberg n'a pas encore abouti.

3.6.8 Article : Prospects for the formation of ultracold ground state polar molecules from mixed alkali atom pairs [2]

Les principaux résultats sont exposés dans l'article présenté ci-après.

Prospects for the formation of ultracold ground state polar molecules from mixed alkali atom pairs

S. Azizi, M. Aymar, and O. Dulieu^a

Laboratoire Aimé Cotton, CNRS, Bâtiment 505, Campus d'Orsay, 91405 Orsay Cedex, France

Received 2nd July 2004

Published online 23 November 2004 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2004

Abstract. Photoassociation rates of mixed cold alkali atom pairs and formation rates of cold heteronuclear alkali dimers in their ground state are computed within an approach where the wave functions are calculated exactly, and the laser field is treated as a perturbation. These rates are predicted to have the same magnitude for all heteronuclear species involving either Rb or Cs atoms. Moreover, these rates are found slightly smaller than, or similar to, the same rates for Cs₂ molecules, which is encouraging for future experiments. We studied the specific case of the photoassociation into excited molecular states coupled with spin-orbit interaction, emphasizing the role of the so-called resonant coupling in the formation of stable ultracold molecules with low vibrational levels. The comparison with recent experimental results on RbCs photoassociation and cold molecule formation show their reasonable agreement with our calculations.

PACS. 32.80.Pj Optical cooling of atoms; trapping – 33.20.Tp Vibrational analysis – 33.70.Ca Oscillator and band strengths, lifetimes, transition moments, and Franck-Condon factors

1 Introduction

Controlling the external and internal degrees of freedom of atomic and molecular systems is an ongoing quest of physicists for many years. Laser-cooling of ions [1] and atoms [2] represent spectacular achievements, as the external motion of the systems can be lowered down to temperatures well below 1 mK. Observation of Bose-Einstein condensation in atoms [3], and of quantum degeneracy of fermions [4], have provided the coldest gaseous samples ever observed.

However, these advances in laser cooling are not easily extended to molecules [5], due to their more complex level structure, which prevents to find a closed level scheme for population cycling. A solution has been provided via the photoassociation (PA) of ultracold atoms [6]: a pair of atoms first resonantly absorbs a photon to create an electronically excited molecule, which may then stabilize into a long-lived electronic state by spontaneous emission [7]. The PA process is favoured due to the long-range dipole-dipole interaction between identical atoms, one being in the ground ²S state, the other in the first excited state ²P, varying as R^{-3} with the interatomic distance R : the absorption probability is enhanced at large distances, where the radial wave function of the colliding ultracold atoms has a large amplitude. Most achievements concern homonuclear alkali dimers observed in cold atom traps, i.e. Cs₂ [7,8], Rb₂ [9], K₂ [10], Na₂ [11]. A major advance just

occurred with quantum degenerate gases, where molecules in the last bound state of the ground state potentials have been detected [12–14].

It is then highly desirable to look for new ways to form ultracold ($T < 1$ mK) molecules of various species. The formation of ultracold dipolar molecules is particularly appealing, due to their prospected applications to quantum computation [15], or to fundamental tests like the measurement of the electron dipole moment [16,17]. The dipole-dipole long-range force is also expected to dominate the dynamics of quantum degenerate dipolar gases [18,19], with a possible control of the different quantum phases [20,21].

Promising non-optical techniques have already led to the creation of cold molecular samples in the milliKelvin range, composed of CO and ND₃ with a Stark decelerator [22,23], and of CaH with the buffer gas cooling approach [24]. Other approaches include phase space filtering [25], supersonic expansion of a gas out of a rotating nozzle [26], or formation of dimers on helium nanodroplets [27].

An obvious possibility using one-color photoassociation (1CPA) of laser-cooled atoms, while hardly observable until recently, concerns dimers formed with different alkali atoms. In contrast with the homonuclear case, a short-range van der Waals term in R^{-6} dominates the interaction between two different alkali atoms being both in their ground state or in a different state: in order to be efficient, the PA reaction requires the atoms to approach each other at sufficiently close distances, in a region where

^a e-mail: olivier.dulieu@lac.u-psud.fr

the initial wave function has generally a small amplitude. This experimental challenge has been successfully solved for the first time [28] with RbCs molecules. Other groups are also aiming at getting similar results with other systems like LiCs, NaLi, ... We can also quote the observation of 1CPA of the quasi-heteronuclear alkali system ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ [29]. Two groups have recently reported the detection of NaCs^+ [30,31] and KRb^+ [32] in two-species magneto-optical traps, as an evidence of the formation of the corresponding neutral cold molecules. Finally, the production of stable ultracold RbCs molecules created after 1CPA has been unambiguously reported by Kerman et al. [33], and by Wang et al. [34] for KRb molecules.

The purpose of this paper is to provide estimates for the 1CPA and cold molecule formation rates in cold heteronuclear alkali pairs, as a guidance for ongoing experiments. A first attempt to establish a hierarchy for the 1CPA efficiency for PA at small detunings of mixed alkali pairs has been proposed [35], based on a semiclassical modelling of the wave functions. Here we start instead from realistic potential curves available from the literature, to compute the wave functions of the relative radial motion of the atom pair and the reaction rates, following previous work in our group [36,37]. These rates are scaled to the cesium experimental rates, which have been carefully measured in our group [38]. We also discuss the expected vibrational distribution of the formed ultracold molecules, which could be interpreted as a probe of the actual dynamical couplings within the created molecules.

2 Model for rate calculations

We briefly recall here the main steps for the calculation of 1CPA rates and ultracold molecule formation rates, following the perturbative approach previously developed in our group [36,37], essentially equivalent to those described elsewhere [39,40]. The 1CPA rate of a pair of cold ground state atoms M, M' , into a molecule MM^* excited in an electronic state Ω , expressed in s^{-1} per atom, is calculated according to:

$$\mathcal{R}_{PA}(\Delta_v) = \left(\frac{3\lambda_{th}^2}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\hbar}{2} n_{MM'} \mathcal{A}_\Omega |\langle \phi(v_\Omega) | \Gamma | \chi(k_B T) \rangle|^2, \quad (1)$$

where Δ_v is the binding energy (or the detuning of the PA laser with intensity I) of the populated vibrational level v_Ω relative to the dissociation limit of the electronic state Ω . The atomic cloud composed of M and M' species is assumed in equilibrium at a temperature T , with a pair density $n_{MM'}$ and is characterized by the thermal de Broglie wavelength $\lambda_{th} = h\sqrt{1/(3\mu k_B T)}$ (μ is the reduced mass of the M, M' pair). The rate is determined by the Franck-Condon factor involving the initial radial continuum wave function $\chi(k_B T; R)$ and the vibrational wave function $\phi(v_\Omega; R)$ of the PA level (the brackets hold for the integral over the interatomic distance R). The molecular Rabi frequency $2\Gamma(R) = E_{PA}D(R)/\hbar$ is proportional to the molecular (R -dependent) transition dipole moment

$D(R)$ and to the amplitude E_{PA} of the PA laser. The \mathcal{A}_Ω factor includes all angular factors relevant to the chosen approximations and experimental arrangement (choice for the laser polarization). We assume that the (M, M') pair collides in the s -wave, and that its rotational angular momentum is decoupled from its internal angular momenta. At this point, we also neglect the hyperfine structure of the atoms.

The cold molecule (CM) formation rate:

$$\mathcal{R}_{CM}(\Delta_v) = \mathcal{R}_{PA}(\Delta_v) B(v_\Omega) \quad (2)$$

is proportional to the PA rate, and to the branching ratio $B(v_\Omega)$ for spontaneous emission of the v_Ω level into the vibrational levels v'' of the lowest allowed electronic state of the molecule:

$$\begin{aligned} B(v_\Omega) &= \frac{1}{A(v_\Omega)} \sum_{v''} A_{v_\Omega v''} \\ &= \frac{1}{A(v_\Omega)} \sum_{v''} \frac{4e^2 \omega_{v_\Omega v''}^3}{\hbar c^3} |\langle \phi(v_\Omega) | D | \phi(v'') \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3)$$

where $\omega_{v_\Omega v''}$ is the frequency of the emitted photon, and $A(v_\Omega)$ the total spontaneous emission probability. Assuming that $D(R)$ is slowly varying with R , and that the energy range of the populated v'' levels is small compared to the magnitude of $\hbar\omega_{v_\Omega v''}$, the branching ratio can be approximated by:

$$B(v_\Omega) = \sum_{v''} |\langle \phi(v_\Omega) | \phi(v'') \rangle|^2. \quad (4)$$

The main interest for studying ultracold molecules formed from different alkali atoms appears clearly from equations (2–4): in contrast with an homonuclear pair, the spontaneous emission from the PA state is favoured at short distances since both the ground state (or the accompanying lowest triplet state) and the excited potential curves vary as R^{-6} , giving a good opportunity to populate vibrational levels of the ground state. Another general motivation is to create stable ultracold molecules in vibrational levels as bound as possible, and ultimately in the lowest vibrational level $v = 0$. Dion et al. [37] have shown that the so-called “resonant coupling”, resulting from the non-Born-Oppenheimer interaction between two electronic states, is a good candidate for such a goal. The coupling between two potential curves may induce an enhancement at quite short distances of the probability density in the PA level, giving access to low vibrational levels after the spontaneous decay step. Dion et al. applied this model to the formation of ultracold cesium dimers, which involves the strong spin-orbit interaction between the two excited states $A^1\Sigma_u^+$ and $b^3\Pi_u$ correlated to the $\text{Cs}(6s)+\text{Cs}(6p)$ dissociation limit. In Hund’s case c coupling scheme, these states are labeled as belonging to the 0_u^+ symmetry and dissociate into $\text{Cs}(6s)+\text{Cs}(6p_{1/2,3/2})$. Several other works have also shown that the spin-orbit interaction in the heavy alkali atoms Rb and Cs is responsible for the strong perturbation of the dimer vibrational spectrum in their excited states, which requires to treat

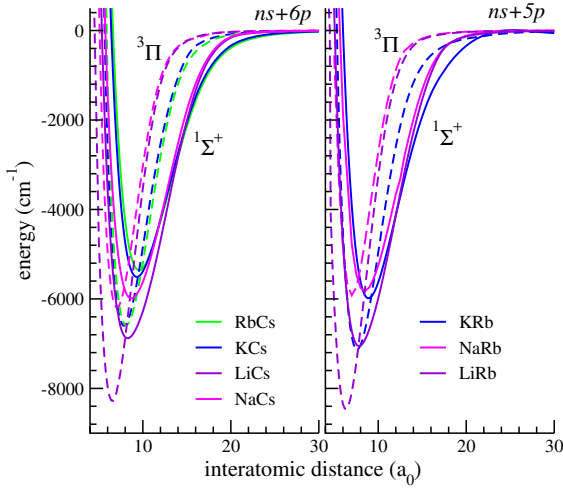


Fig. 1. The $A^1\Sigma^+$ (full lines) and $b^3\Pi^+$ (dashed lines) curves for mixed-alkali dimers containing (a) Cs and (b) Rb. References for these data are given in the text. A color version of the figure is available in electronic form at www.eurphysj.org.

simultaneously both A and b states and their coupling for the vibrational assignment [41,42]. So we expect that the resonant coupling induced by the spin-orbit interaction between the similar states of the mixed compounds MRb or MCs (with $M = \text{Li, Na, K}$, including also RbCs), denoted by $A^1\Sigma^+$ and $b^3\Pi^+$ will also be efficient. We will focus on the A and b states of these heavy species in the following. As for the homonuclear case, the Hund's case c coupling scheme assigns the 0^+ symmetry to these states.

Wang and Stwalley [35] extensively recalled in their paper the basic properties of the electronic potential curves of the heteronuclear alkali-metal diatomic molecules, especially their large-distance part. Briefly, such molecules have two lowest excited $^2S + ^2P$ asymptotes which split into four fine-structure asymptotes $^2S_{1/2} + ^2P_j$, with $j = 1/2, 3/2$. Numerical data for these potential curves are available in the literature, and we use here results from the following references: reference [43] (LiCs, NaCs, KCs), reference [44] (RbCs), reference [45] (LiRb, NaRb), and reference [46] (KRb).

The potential curves correlated to the lowest $^2S + ^2P$ asymptote, which corresponds to $M(ns) + Cs(6p)$ (with $M = \text{Li, Na, K, Rb}$), and to $M(ns) + Rb(5p)$ (with $M = \text{Li, Na, K}$), behave similarly to those of the homonuclear systems. For instance, Figure 1 displays the $A^1\Sigma^+$ and $b^3\Pi^+$ curves for Cs and Rb compounds, which are expected to undergo spin-orbit coupling due to their short-range crossing. At large distances where PA takes place, these states have a dominant 0^+ Hund's case c character. Due to their mixed singlet-triplet character, they are both accessible from the ground state $X^1\Sigma^+$ and the lowest triplet state $a^3\Sigma^+$ dissociating into the $^2S + ^2S$ ground state asymptote (Fig. 2).

Just like homonuclear dimers, the asymptotic behavior of the $^2S + ^2P$ excited potential curves is different from one mixed pair to another. The coefficient C_6 of the leading term in R^{-6} of their long-range expansion [47] has the

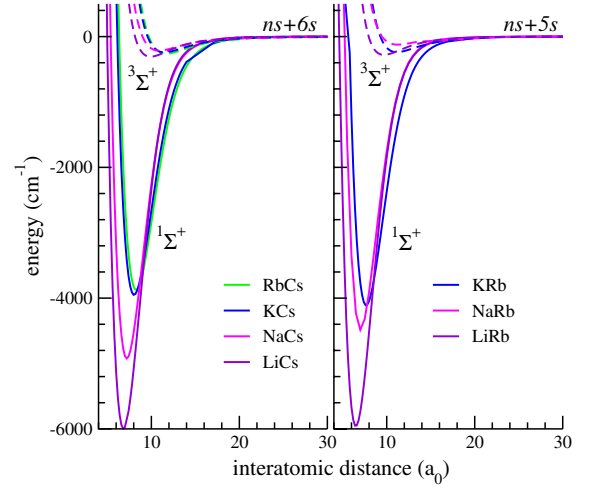


Fig. 2. The $X^1\Sigma^+$ (full lines) and $a^3\Sigma^+$ (dashed lines) curves for mixed-alkali dimers containing (a) Cs and (b) Rb. References for these data are given in the text. A color version of the figure is available in electronic form at www.eurphysj.org.

largest value for KRb, RbCs, and KCs, which lead Wang and Stwalley [35] to suggest that for small PA detunings the photoassociation process will be more favorable for these latter species by at least one order of magnitude than for all the others due to their enhanced attractive character at large R . In the next section, we investigate this statement for large PA detunings using exact wave functions in the rate expression, instead of the semiclassical approach of reference [35].

3 Results

3.1 Definition of rescaled rates

In equations (1, 2), typical experimental conditions must be defined to compute the rates. We assume here that PA experiments could be performed under temperature and atomic density conditions similar to those achieved for the Cs_2 experiment of the Orsay group [7]. As \mathcal{R}_{PA} and \mathcal{R}_{CM} have been carefully measured for Cs_2 [38], we define a reduced PA rate for Cs_2 according to $\bar{\mathcal{R}}_{PA}(\text{Cs}_2) = |\langle \phi_{\text{CsCs}}(v_\Omega) | \Gamma | \chi_{\text{CsCs}}(k_B T) \rangle|^2$, where all fundamental constants and experimental parameters have been left out. The computed PA rates for heteronuclear dimers can now be rescaled to the Cs_2 rates, by defining:

$$\bar{\mathcal{R}}_{PA}(MM') = \left(\frac{\mu_{\text{CsCs}}}{\mu_{MM'}} \right)^{3/2} \alpha_{at}^2 \times |\langle \phi_{MM'}(v_\Omega) | \chi_{MM'}(k_B T) \rangle|^2. \quad (5)$$

Equation (5) depends on the Franck-Condon (FC) factor relevant for each system, and then emphasizes the role of the differences for each M, M' pair between the potential curves behavior. But comparing the FC factor for MM' to the Cs_2 one is not sufficient to obtain an estimate

for the rate, as other factors depending on the reduced mass and on the transition dipole moment are involved. Since PA occurs mainly at large R , the molecular transition dipole moment has been replaced in $\Gamma(R)$ by the atomic one for the relevant atomic transition. This is accounted by the scaling factor α_{at} , equal to 1 for LiCs, NaCs, KCs, RbCs, and to the ratio of atomic Rabi frequencies $\alpha_{at} = \Gamma_{\text{Rb}}(5s \rightarrow 5p)/\Gamma_{\text{Cs}}(6s \rightarrow 6p) \approx 0.9$ for LiRb, NaRb, KRb. Numerical values for the scaling factor involving reduced masses in equation (5) are listed in Annex (Tab. 1) for these pairs, considering various isotopic combinations. Finally, as we neglect the atomic hyperfine structure, we have not included in equation (5) the ratio of \mathcal{A}_Ω factors. In reference [38], this factor has been evaluated for Cs₂ photoassociation in the 0_g^- and 0_u^+ symmetries, assuming a linear polarized PA light and s -wave incoming channel. The ratio $\mathcal{A}(0_u^+(P_{1/2}))/\mathcal{A}(0_g^-(P_{3/2}))$ is found equal to 0.29, 0.77, and 0.28 according to the chosen initial combination of atomic total angular momentum $(F, F') = (3, 3), (3, 4), (4, 4)$ respectively. One may assume that the ratio $\mathcal{A}(0_u^+(P_{1/2}))/\mathcal{A}(0_g^-(P_{3/2}))$ relevant for the present study will take similar values, and that the rates computed for the mixed species, displayed in the following figures, could be changed by a similar amount when they are compared to the Cs₂ $0_g^-(P_{3/2})$ rates.

The rescaled CM rate can now be written following equation (2):

$$\bar{\mathcal{R}}_{CM}(MM') = \bar{\mathcal{R}}_{PA}(MM')B(v_\Omega). \quad (6)$$

The main task is now the numerical computation of wave functions, achieved just like in reference [37]: continuum wave functions are determined from a standard Numerov integration algorithm, for a temperature $T = 140 \mu\text{K}$ typical of the PA experiment in cesium [7]. Vibrational wave functions and energies are obtained from our Fourier Grid Hamiltonian code described elsewhere [42, 48], which is well adapted to the solution of the coupled state problem under study. We focus on the $X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+(A^1\Sigma^+)$ and $a^3\Sigma^+ \rightarrow 0^+(b^3\Pi)$ transitions in our list of heavy mixed pairs, for both the PA and CM rates. These notations refer to the component of the coupled 0^+ states which is allowed for dipolar transition selection rule.

We evaluate these rates for photoassociated levels with a binding energy between 1 cm^{-1} and 30 cm^{-1} , typical of PA experiments in standard magneto-optical traps. Levels bound by less than 1 cm^{-1} are strongly affected by the hyperfine structure, and the present calculations are no more significant. At large internuclear distances, we smoothly connected the quantum chemistry potential curves displayed in Figures 1 and 2 to asymptotic expansions $\sum_n C_n/R^n$, using the accurate asymptotic C_n coefficients of reference [47]. The scattering length of the 2^S+2^S resulting potentials is arbitrary, and not relevant for our purpose, as long as they are not too large. The 2×2 Hamiltonian describing the 0^+ states (see for instance Ref. [37]) involves either the Rb or Cs atomic spin-orbit interaction, or a model function $\zeta(R)$ for the R -dependent molecular spin-orbit coupling. Indeed, as no molecular data is available for this latter quantity, we follow the same approach

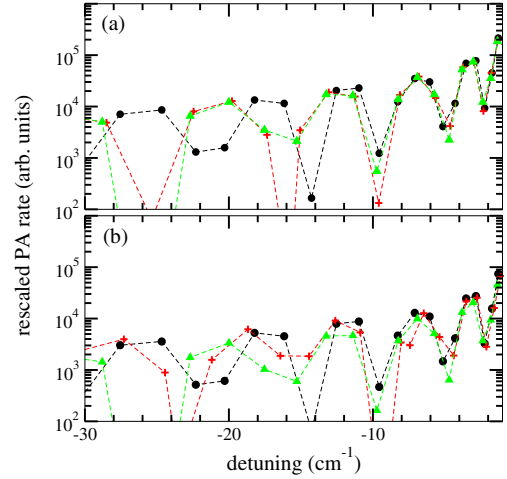


Fig. 3. Rescaled rates (a) for photoassociation and (b) cold molecule formation for the $X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+(A^1\Sigma^+)$ transition in RbCs, under the three assumptions (i) single state calculation (in green with triangles), (ii) coupled state calculation with atomic spin-orbit coupling (in red with plus signs), (iii) coupled state calculation with variable spin-orbit coupling (in black with circles). These different cases are defined in the text. The dashed lines are displayed to guide the eye. A color version of the figure is available in electronic form at www.eurphysj.org.

than in reference [49]: we use for the Cs compounds the $\zeta_{\text{Cs}}(R)$ function from the quantum chemistry results of Spies [50] on Cs₂ 0_u^+ states. For Rb compounds we rescale the coupling to $\zeta_{\text{Rb}}(R) = \zeta_{\text{Cs}}(R)\Delta_{so}(\text{Rb})/\Delta_{so}(\text{Cs})$, by the ratio of atomic fine structure splittings, as no calculation is available.

3.2 Photoassociation rates

As a typical example, we first check some of our hypothesis on RbCs rates (Fig. 3). Since the molecular spin-orbit interactions are almost unknown, we calculated the PA rate assuming that (i) the single $0^+(5^2S + 6^2P_{1/2})$ potential is effective for PA, (ii) both 0^+ potentials are effective, coupled through atomic spin-orbit interaction, (iii) or by the R -dependent spin-orbit interaction defined above. We see that the rates have almost the same magnitude for all cases, which actually reflects the conclusion of reference [37] for the resonant coupling between 0_u^+ states in Cs₂. The approximation used here for the unknown coupling term is then not crucial for the remaining of the discussion.

The reduced PA rates for Cs and Rb compounds calculated for the transition $X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+(A^1\Sigma^+)$ using the $\zeta_{\text{Cs}}(R)$ and $\zeta_{\text{Rb}}(R)$ coupling functions are displayed in Figure 4. It is striking to see that rescaled PA rates for all species differ by at most a factor 4. This contrasts with reference [35], where the authors obtained for small PA detunings overlap integrals larger by orders of magnitude for heavy species, compared to the light ones. But despite the large value of the leading asymptotic coefficient C_6 in the PA state, compared to the C_6 coefficient in the ground

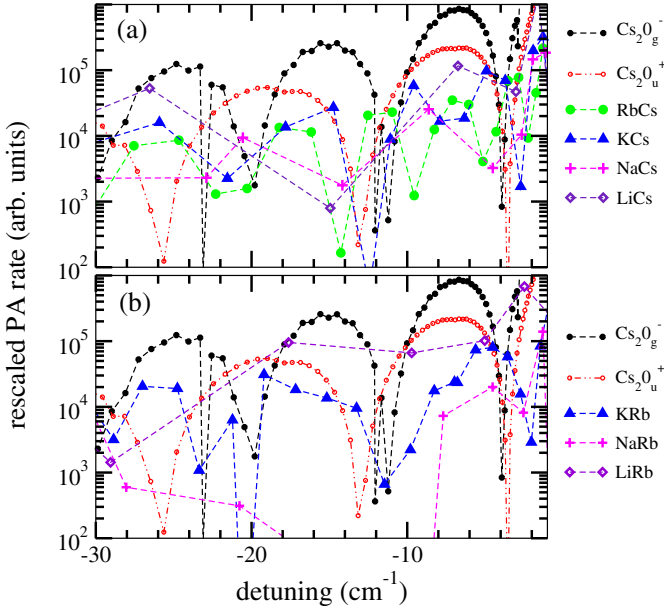


Fig. 4. Rescaled photoassociation (PA) rates for (a) Cs compounds and (b) Rb compounds, for the $X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+(A^1\Sigma^+)$ transition, as a function of the detuning of the PA laser below the relevant $2S + 2P_{1/2}$ asymptote. The temperature is fixed to $140 \mu\text{K}$ for the initial colliding pair of atoms. They are compared to reduced PA rates for the $a^3\Sigma_u^+ \rightarrow 0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ and $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow 0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2})$ transitions in Cs_2 . A color version of the figure is available in electronic form at www.eurphysj.org.

state, the density of levels in the present detuning range is not large enough for the reflection approximation to be accurate [39], i.e. the quantum calculation of the full wave functions is required, instead of their values at the outer turning point of the PA level. However, as in reference [35], our computed overlap integral for the heavier species KRb, KCs, RbCs are still predicted to be larger than the lighter species LiRb, LiCs, NaRb, and NaCs. Finally the reduced mass scaling factor present in the rescaled rates balances this hierarchy, and tends to slightly favour the lighter species. This result is in qualitative agreement with the weak $\mu^{-1/2}$ dependence found in the perturbative model of reference [36]. Although not surprising, the comparison with the PA rate for the $a^3\Sigma_u^+ \rightarrow 0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ transition in Cs_2 is found about 10 to 30 times smaller for the heteronuclear species. This is due to the shorter range of their excited molecular potentials (varying as R^{-6} at large distances), compared to the homonuclear case (in R^{-3}). The same qualitative conclusion holds also for the PA rates of $a^3\Sigma^+ \rightarrow 0^+(b^3\Pi)$ transition (not displayed here), which are predicted to be 5 to 20 times smaller than the Cs_2 ones. It should be noted that PA signal from the $0_g^-(6^2S + 6^2P_{1/2})$ state of Cs_2 , which behaves also as R^{-6} at large distances, has been observed in reference [51], with a magnitude well below the one for the $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ state.

Together with the preceding example, the rate for the $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow 0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2})$ transition in Cs_2 , which rep-

resents the resonant coupled state case in Cs_2 equivalent to the situation studied with mixed species here, provides an indication on the typical range for PA rates in Cs_2 , which may vary by a factor of about 5 depending on the considered PA state: experimentally, an interval of 1 to 5 s^{-1} per atom has been measured [38].

Finally it is interesting to try to express these results in terms of measurable rates, in order to compare them to experimental values. In reference [38], the PA rate for the $v = 77$ level of the $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ external well in Cs_2 , located at a detuning of about 7 cm^{-1} , was measured around $1.25 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ (with a factor of 2 uncertainty linked to the determination of the absolute number of atoms $N_{\text{Cs}} = 5 \times 10^7$), for a PA laser intensity $I = 55 \text{ Wcm}^{-2}$, and an atomic cloud with a temperature of $140 \mu\text{K}$; in the same paper, the same perturbative model than the one used here yields a value of about $2.5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, in good agreement with the experimental value. In the recent PA experiment on RbCs of reference [28], the authors reported a rate of about $1.5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, measured on PA lines saturating for a laser intensity of 100 Wcm^{-2} , and using larger sample of cold atoms $N_{\text{Rb}} = 4 \times 10^8$ and $N_{\text{Cs}} = 3 \times 10^8$ with temperature $T_{\text{Rb}} = 55 \mu\text{K}$ and $T_{\text{Cs}} = 140 \mu\text{K}$ respectively. Our calculation in Figure 4 indicates that the PA rate for 0^+ levels of RbCs is about 30 times smaller than for the $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ levels in Cs_2 , assuming similar experimental conditions. This predicted difference in the rate magnitude agrees quite well with the experiments, if we assume [36] that the rate is proportional to the PA laser intensity (which is larger by a factor of 2 in the RbCs experiment), to the atom number (which is larger by a factor of 10 in the RbCs experiment), and to the inverse of the temperature (which brings a factor between 1 and 2, difficult to estimate as the two species are not at the same temperature in the RbCs experiment).

3.3 Cold molecule formation rates

The rescaled cold molecule formation rates depend on the branching ratio $B(v_{0+})$ towards the lowest electronic states, displayed in Figure 5, which are slowly varying functions of the detuning of the PA level: indeed, the wave function of the PA level has noticeable overlaps with several vibrational wave functions of the ground state, which all sum up into $B(v_{0+})$ where the details of the individual wave functions are smoothed. For the lighter species involving Li and Na, irregularities are still visible, as the density of levels in the ground state is weaker than for the heavier species. As inferred in the first section, the branching ratio for the mixed species is larger than for Cs_2 , which reflects that the similar R^{-6} asymptotic behavior of the lowest potential curve and of the excited potential curves favours the spontaneous emission, compared to the Cs_2 case.

The rescaled cold molecule (CM) formation rates are reproduced in Figure 6. As already discussed in reference [38], the slow increase of the branching ratio with increasing detunings compensates the decreasing of the rescaled PA rate, leading to a CM rate which has an

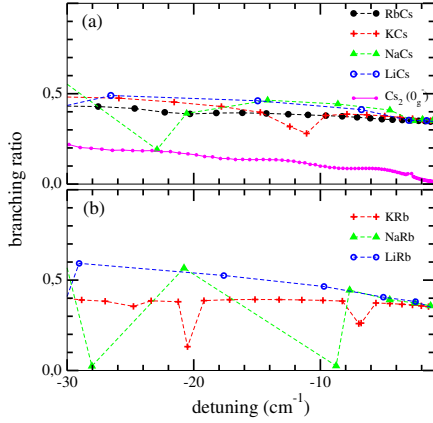


Fig. 5. Branching ratio of the $X^1\Sigma^+ \leftarrow 0^+(A^1\Sigma^+)$ transition for (a) Cs and (b) Rb compounds. In (a), the branching ratio for the $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2}) \rightarrow a^3\Sigma_u^+$ transition in Cs_2 is also indicated. A color version of the figure is available in electronic form at www.eurphysj.org.

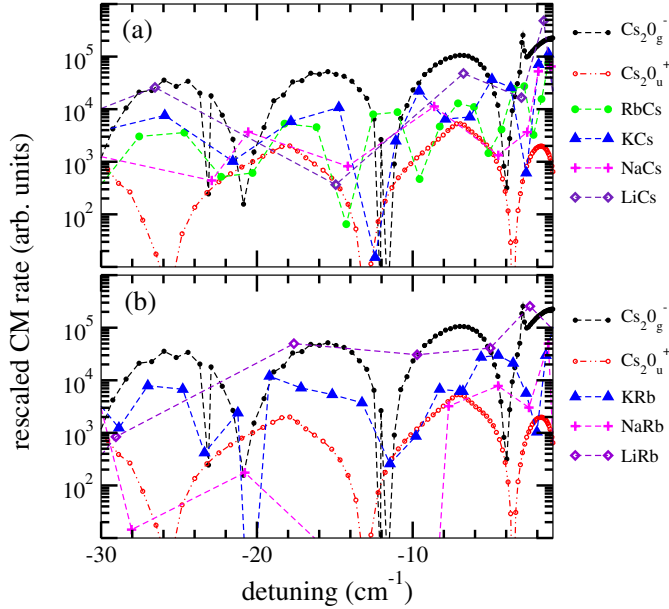


Fig. 6. Rescaled cold molecule formation (CM) rates for (a) Cs compounds and (b) Rb compounds, for the $X^1\Sigma^+ \rightarrow 0^+(A^1\Sigma^+)$ transition, as a function of the detuning of the PA laser below the relevant $2S + 2P_{1/2}$ asymptote. The temperature is fixed to $140 \mu\text{K}$ for the initial colliding pair of atoms. They are compared to reduced CM rates for the $a^3\Sigma_u^+ \rightarrow 0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ and $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow 0_u^+(6^2S + 6^2P_{1/2})$ transitions in Cs_2 . A color version of the figure is available in electronic form at www.eurphysj.org.

almost constant average magnitude over the displayed range. The spontaneous emission probability towards bound levels of the ground state is favoured for the mixed dimers compared to the homonuclear ones, so that the CM rate is predicted to have a magnitude at most 10 times smaller than the rate observed for Cs_2 , which is encouraging for future experiments. Again, our calculations lead to the same conclusion for the triplet transition.

As in the previous section, we can relate the calculated rates to available experimental values: the formation rate of Cs_2 ultracold molecules after PA of the $0_g^-(6^2S + 6^2P_{3/2})$ levels is found around $2 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ [38], while a value of 10^6 s^{-1} is reported for RbCs [33]. If we rely again on the factor of about 30 induced by the differences in the experimental conditions, the formation rate for RbCs ground state molecules is found about 15 times smaller than for Cs_2 , while Figure 6 shows that the calculated rates differ by a factor around 10. The agreement is then satisfactory, and our model predicts that formation of LiRb and LiCs ultracold ground state molecules should be four times more efficient than for RbCs molecules.

The comparison with experiments in KRb [32], NaCs [30], and NaRb [31] is not discussed here, as these experiments rely on a PA step performed with the trapping lasers, at very small detunings. Moreover, no PA rate is available in the most recent KRb experiment of Wang et al. [34].

3.4 Vibrational distributions of ultracold molecules

The branching ratio $B(v_{0+})$ is defined as the sum of the overlap integrals between the PA vibrational wave function and the wave functions of the populated levels in the ground state. It is worthwhile to look at the individual integrals, as it enlightens the vibrational distribution of the formed ground state ultracold molecules. The computed distribution in the RbCs case is given in Figure 7, considering a single channel model (case (i) above), and a coupled channel calculation with a variable coupling (case (iii) above). This clearly illustrates now the crucial role of the resonant coupling studied here: in the absence of this coupling (case (i)), only the highest vibrational levels of the ground state are populated. In contrast, a significant amount of ultracold molecules are created in deeper vibrational levels for case (iii), as the resonant coupling induces in the PA wave function a Condon point at intermediate distances, which favours the spontaneous emission towards these levels. This was the main result of reference [37], where the observation of PA lines below the $6S + 6P_{1/2}$ asymptote was interpreted as a clear evidence of the presence of the resonant coupling between levels of the two 0_u^+ states coupled with spin-orbit interaction. Kerman et al. interpreted [33] their observations in the same way, and predicted a rate of about $5 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ (corresponding to $\approx 1.5 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ for experimental conditions of reference [38] using again the factor 30 above) for the formation of ground state RbCs molecules in the level $v = 62$ bound by almost 1300 cm^{-1} . As represented in Figure 7, our calculations predict that the lowest populated level in the ground state is around $v = 55$, bound by almost 1400 cm^{-1} , with a Franck-Condon factor of 0.001, out of a total branching ratio of ≈ 0.4 . Under conditions similar to those of reference [38], it would correspond to a rate of $5 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$, in reasonable agreement with reference [33]. The differences in the vibrational assignment is probably due to the choice of the 0^+ molecular potentials and of their coupling.

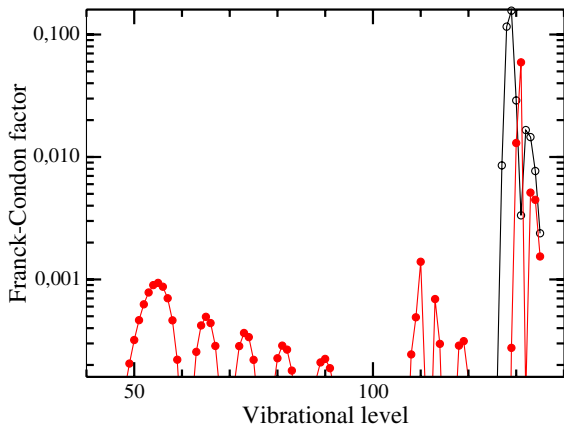


Fig. 7. Vibrational distribution of cold RbCs molecules in the $X^1\Sigma_g^+$ ground state, after spontaneous emission from the PA level of the 0^+ state located at a 7 cm^{-1} detuning. The abscissa shows the vibrational quantum number of the ground state levels. Open circles: case (i), single-state calculation; closed circles: case (iii), two-coupled-state calculation (see text).

The vibrational distributions depend on the final molecular state (singlet or triplet), and on their scattering length which is arbitrary here, as well as on the PA level and on the strength of its resonant coupling with neighbouring levels. We present in Figure 8 several examples which illustrates different situations. Generally, the most populated levels are still by far those which are close to the dissociation limit. Deep vibrational levels of the RbCs lowest triplet state are expected to be efficiently populated (see Fig. 8c) due to the resonant coupling in the PA level, as for the singlet case of Figure 7. In contrast, the low vibrational levels in KRb seem more difficult to reach in the present model (see Figs. 8a and 8b): this is probably due to the large C_6 asymptotic coefficient of the PA state, which will favour spontaneous emission at large distances. The LiRb molecule seems to provide a valuable case where the vibrational distribution could be concentrated on a few levels of the lowest triplet state.

4 Conclusion

In this paper, we have shown that the photoassociation of cold mixed alkali atom pairs and the subsequent formation of cold molecules is a promising experimental investigation, as our calculations predict rates for these processes which have a magnitude comparable to the rates previously measured for Cs_2 molecules. Our results are also in agreement with the most recent observations on cold RbCs molecule formation. An important statement is the necessity to compute exactly the vibrational wave functions over their whole radial extension, and not only at the vicinity of their classical outer turning point. Reliable quantitative comparisons of rate magnitude among different pairs are obtained when mass scaling factors are introduced in the calculations as a weight for the Franck-Condon factors involved in the rate expressions.

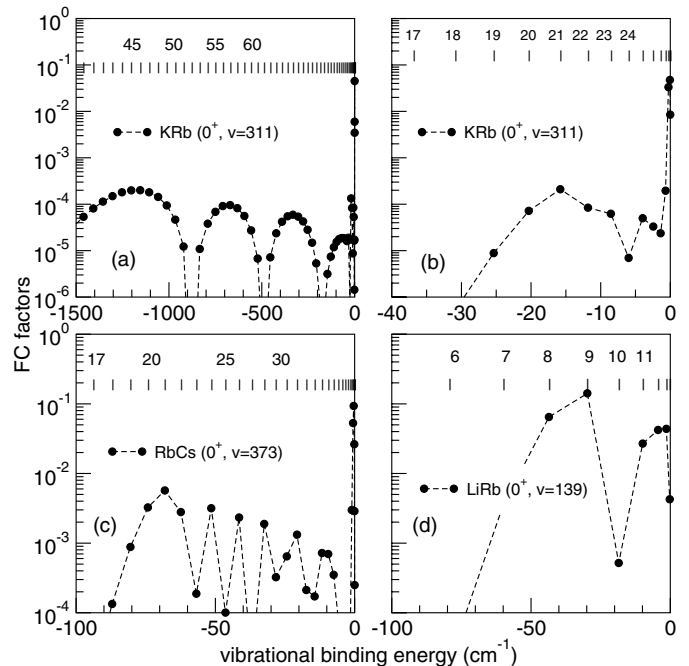


Fig. 8. Various examples of vibrational distribution of cold molecules, expressed as Franck-Condon (FC) factors computed in case (iii) defined previously, as a function of the binding energy of the vibrational levels of the singlet ground state (a), or of the lowest triplet state (b), (c), and (d). The corresponding numbering of the levels is also given in the upper part of each figure. The initial PA level of the excited molecule is indicated by its rank in the eigenvalues of the coupled 0^+ states. In each case, the chosen level corresponds to a detuning where the cold molecule formation rate is maximum: (a) and (b) $\approx 5\text{ cm}^{-1}$, (c) $\approx 8\text{ cm}^{-1}$, (d) $\approx 2.5\text{ cm}^{-1}$.

We also emphasize the role of the resonant coupling between vibrational levels of two coupled electronic excited states of the molecules, which is predicted to enhance the formation of cold molecules in deeply bound vibrational levels of the ground state. Such a mechanism, initially proposed by Dion et al. [37], is also invoked by Kerman et al. [33] as the first step for the formation of ultracold ground state molecules in the $v = 0$ vibrational level. The main challenge for experimentalists is now the detection of the ultracold molecules and their vibrational population, as the density of photoassociated levels is lower for heteronuclear species than for homonuclear pairs. The ionization of the created molecules is a powerful method [7], and is a necessity, as it has been clearly demonstrated for RbCs [33]. Further theoretical studies should rely either on precise molecular potential curves determined by other means, like for instance conventional absorption spectroscopy [52], high-resolution laser spectroscopy [53], spectroscopy of molecules trapped on helium droplets [27], or should suggest improvement of existing potential curves through the fit of experimental photoassociation data which are expected to come in a near future.

Table 1. Reduced masses and mass scaling factors involved in the rescaled PA rates (Eq. (5)).

MM'	$\mu(MM')$ (a.u.)	$(\mu(\text{Cs}_2)/\mu(MM'))^{3/2}$
${}^6\text{LiCs}$	10490.137	39.24
${}^7\text{LiCs}$	12148.112	31.48
NaCs	35727.701	6.24
${}^{39}\text{KCs}$	54924.432	3.27
${}^{85}\text{RbCs}$	94445.005	1.45
${}^{87}\text{RbCs}$	95788.267	1.42
Cs_2	121136.005	1
${}^6\text{Li}{}^{85}\text{Rb}$	10239.541	40.69
${}^7\text{Li}{}^{85}\text{Rb}$	11813.306	32.83
$\text{Na}{}^{85}\text{Rb}$	32978.838	7.03
${}^{39}\text{K}{}^{85}\text{Rb}$	48685.913	3.92
${}^{85}\text{Rb}_2$	77392.426	1.95
${}^6\text{Li}{}^{87}\text{Rb}$	10255.132	40.59
${}^7\text{Li}{}^{87}\text{Rb}$	11834.063	32.74
$\text{Na}{}^{87}\text{Rb}$	33141.121	6.98
${}^{39}\text{K}{}^{87}\text{Rb}$	49040.422	3.88
${}^{87}\text{Rb}_2$	79212.941	1.89

Annex

We display in Table 1 reduced masses and the mass scaling factors $(\mu(\text{Cs}_2)/\mu(MM'))^{3/2}$ present in equation (5) for the mixed pair involving Rb and Cs. Values for different isotopes are given for clarity.

Stimulating discussions with Claude Dion and Andrea Simoni are gratefully acknowledged. This work is supported by the European Research and Training Network ‘‘Cold Molecules’’ (contract HPRN-CT-2002-00290). S.A. acknowledges the support of the Algerian Ministry for High Education.

References

- J. Eschner, G. Morigi, F. Schmidt-Kaler, R. Blatt, *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 1003 (2003)
- C.E. Wieman, D.E. Pritchard, D.J. Wineland, *Rev. Mod. Phys.* **71**, s253 (1999)
- W. Ketterle, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1131 (2002)
- C.A. Regal, C. Ticknor, J.L. Bohn, D.S. Jin, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 053201 (2003)
- J.T. Bahns, P.L. Gould, W.C. Stwalley, *J. Chem. Phys.* **104**, 9689 (1996)
- H.R. Thorsheim, J. Weiner, P.S. Julienne, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2420 (1987)
- A. Fioretti, D. Comparat, A. Crubellier, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws, P. Pillet, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4402 (1998)
- T. Takekoshi, B.M. Patterson, R.J. Knize, *Phys. Rev. A* **59**, R5 (1999)
- C. Gabbanini, A. Fioretti, A. Lucchesini, S. Gozzini, M. Mazzoni, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2814 (2000)
- A.N. Nikolov, E.E. Eyler, X.T. Wang, J. Li, H. Wang, W.C. Stwalley, P.L. Gould, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 703 (1999)
- F.K. Fatemi, K.M. Jones, P.D. Lett, E. Tiesinga, *Phys. Rev. A* **66**, 053401 (2002)
- J. Herbig, T. Kraemer, M. Mark, T. Weber, C. Chin, H.-C. Nägerl, R. Grimm, *Science* **301**, 1510 (2003)
- S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, C. Chin, J. Hecker Denschlag, R. Grimm, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 240402 (2003)
- C.A. Regal, C. Ticknor, J.L. Bohn, D.S. Jin, *Nature* **424**, 47 (2003)
- D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002)
- M.G. Kozlov, D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 133001 (2002)
- J.J. Hudson, B.E. Sauer, M.R. Tarbutt, E.A. Hinds, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 023003 (2002)
- K. Góral, L. Santos, *Phys. Rev. A* **66**, 023613 (2002)
- M.A. Baranov, M.S. Mar’enko, V.S. Rychkov, G.V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **66**, 013606 (2002)
- K. Góral, L. Santos, M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 170406 (2002)
- B. Damski, L. Santos, E. Tiemann, M. Lewenstein, S. Kotochigova, P. Julienne, P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 110401 (2003)
- H.L. Bethlem, G. Berden, G. Meijer, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1558 (1999)
- H.L. Bethlem, A.J.A. van Roij, R.T. Jongma, G. Meijer, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 133003 (2002)
- J.D. Weinstein, R. deCarvalho, T. Guillet, B. Friedrich, J.M. Doyle, *Nature* **395**, 148 (1998)
- S.A. Rangwala, T. Junglen, T. Rieger, P.W.H. Pinkse, G. Rempe, *Phys. Rev. A* **64**, 043406 (2003)
- B.S. Zhao, M. Castillejo, D.S. Chung, B. Friedrich, D. Herschbach, *Rev. Sci. Instr.* **75**, 146 (2004)
- M. Mudrich et al., *Eur. Phys. J. D* **31**, 291 (2004)
- A.J. Kerman, J.M. Sage, S. Sainis, T. Bergeman, D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 033004 (2004)
- U. Schlöder, C. Silber, T. Deuschle, C. Zimmermann, *Phys. Rev. A* **66**, 061403 (2002)
- J.P. Shaffer, W. Chalupczak, N.P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1124 (1999)
- C. Haimberger, J. Kleinert, M. Bhattacharya, N.P. Bigelow, *Phys. Rev. A* **70**, 021402(R) (2004)
- M.W. Mancini, G.D. Telles, A.R.L. Caires, V.S. Bagnato, L.G. Marcassa, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 133203 (2004)
- A.J. Kerman, J.M. Sage, S. Sainis, T. Bergeman, D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 153001 (2004)
- D. Wang et al., *Eur. Phys. J. D* **31**, 165 (2004)
- H. Wang, W.C. Stwalley, *J. Chem. Phys.* **108**, 5767 (1998)
- P. Pillet, A. Crubellier, A. Bleton, O. Dulieu, P. Nosbaum, I. Mourachko, F. Masnou-Seeuws, *J. Phys. B* **30**, 2801 (1997)
- C.M. Dion, C. Drag, O. Dulieu, B. Laburthe Tolra, F. Masnou-Seeuws, P. Pillet, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2253 (2001)
- C. Drag, B. Laburthe Tolra, O. Dulieu, D. Comparat, M. Vataescu, S. Boussen, S. Guibal, A. Crubellier, P. Pillet, *IEEE J. Quant. Electron.* **36**, 1378 (2000)
- P.S. Julienne, *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **101**, 487 (1996)
- J.L. Bohn, P.S. Julienne, *Phys. Rev. A* **60**, 414 (1999)
- C. Amiot, O. Dulieu, J. Vergès, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2316 (1999)

42. V. Kokoouline, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws, *Phys. Rev. A* **62**, 022504 (2000)
43. M. Korek, A.R. Allouche, K. Fakhreddine, A. Chaalan, *Can. J. Phys.* **78**, 977 (2000)
44. A.R. Allouche, M. Korek, K. Fakhreddine, A. Chaalan, M. Dagher, F. Taher, M. Aubert-Frécon, *J. Phys. B* **33**, 2307 (2000)
45. M. Korek, A.R. Allouche, M. Kobeissi, A. Chaalan, M. Dagher, K. Fakhreddin, M. Aubert-Frécon, *Chem. Phys.* **256**, 1 (2000)
46. S. Rousseau, A.R. Allouché, M. Aubert-Frécon, *J. Mol. Spectrosc.* **203**, 235 (2000)
47. A. Derevianko, J.F. Babb, A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **63**, 052704 (2001)
48. K. Willner, O. Dulieu, F. Masnou-Seeuws, *J. Chem. Phys.* **120**, 548 (2004)
49. V. Kokoouline, O. Dulieu, R. Kosloff, F. Masnou-Seeuws, *J. Chem. Phys.* **110**, 9865 (1999)
50. N. Spies, Ph.D. thesis, Universität Kaiserslautern (1989)
51. D. Comparat, C. Drag, A. Fioretti, O. Dulieu, P. Pillet, *J. Mol. Spectrosc.* **195**, 229 (1999)
52. H. Skenderovic, R. Beuc, T. Ban, G. Pichler, *Eur. Phys. J. D* **19**, 49 (2002)
53. O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, H. Knöckel, E. Tiemann, *Phys. Rev. A* **69**, 042503 (2004)

3.6.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étendu aux molécules hétéronucléaires, les études faites sur les dimères homonucléaires. Cette étude a été possible car :

- les taux de photoassociation et de formation de molécules froides s'expriment sous une forme analytique simple où les propriétés des différentes molécules apparaissent sous la forme d'intégrales de recouvrement entre fonctions d'ondes vibrationnelles,
- nous avons utilisé des potentiels, issus de calculs de chimie quantique, donnant avec une bonne approximation les propriétés spectroscopiques des molécules considérées,
- nous avons utilisé la méthode de grille à pas variable permettant de déterminer les états vibrationnels proches de la limite de dissociation ainsi que leurs fonctions d'onde,
- les calculs des taux de photoassociation et de formation de molécules froides a été possible grâce à un calcul exact des recouvrements entre fonctions d'onde,
- Ces fonctions d'onde vibrationnelles sont alors calculées sur la totalité de leur extension radiale, et pas seulement au voisinage du point tournant externe du potentiel, où la fonction d'onde vibrationnelle est principalement localisée.

Par rapport au cas des molécules homonucléaires, la photoassociation et la formation de molécules hétéronucléaires froides est favorisée :

- par la forme particulière des potentiels asymptotiques excités en R^{-6} , correspondant à l'interaction de Van der Waals, et qui est similaire à celle des potentiels fondamentaux,
- par le couplage résonant entre niveaux vibrationnels de deux potentiels moléculaires électroniques excités couplés qui crée un deuxième point tournant. Ce dernier augmente et favorise l'émission spontanée vers les niveaux vibrationnels liés profonds (petits v) formant des molécules froides stables

Nous avons pu mener une comparaison quantitative entre les taux calculés des différentes molécules en introduisant un facteur de masse dans les calculs des facteurs de Franck-Condon compris dans les expressions des taux de photoassociation et de formation de molécules froides.

Les taux que nous obtenons sont d'un ordre comparable à ceux calculés pour la molécule de césium pour laquelle la photoassociation et la formation de molécules froides ont été observées. Pour cette molécule, l'accord entre la valeur des taux mesurés expérimentalement et la valeur théorique obtenue par la méthode que nous avons utilisé permet de penser que nos prédictions sont fiables.

Nos résultats montrant la faisabilité d'expériences de photoassociation et de formation de molécules froides sur les dimères légers peuvent être mises à profit par les équipes expérimentales, nombreuses, qui se sont lancées dans les expériences de photoassociation et de formation de molécules froides hétéronucléaires.

Chapitre 4

Formation de molécules froides de césium

Nous nous intéressons, dans ce chapitre, à l'exploitation de spectres de photoassociation d'atomes de césium obtenus sous la limite asymptotique $6S_{1/2}+6P_{1/2}$. En effet, certains spectres, obtenus par l'équipe expérimentale de P. Pillet au laboratoire Aimé Cotton ne sont toujours pas interprétés, et il est important de vérifier certaines hypothèses émises lors d'interprétations précédentes [100]. Nous effectuerons des calculs de taux de photoassociation et de formation de molécules froides, pour essayer d'attribuer les raies observées et de déterminer les états qui ont été détectés par photoassociation.

4.1 Introduction

La recherche de nouveaux schémas de formation de molécules froides de Cs_2 est toujours d'actualité (citons, à titre d'exemple, l'expérience menée en ce moment par l'équipe expérimentale qui essaie de former des molécules froides stables de Cs_2 dans le niveau $v = 0$ de l'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$) et afin de favoriser la désexcitation vers les niveaux stables des potentiels fondamentaux, il faut nous focaliser sur les potentiels excités pouvant être photoassociés.

Nous présentons tout d'abord les spectres de photoassociation effectués, sur le dimère de césium, à des fréquences proches des limites asymptotiques $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$ et $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$. Ensuite nous décrivons les potentiels moléculaires corrélés aux limites asymptotiques $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$ et $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$. Enfin, nous calculons les taux de photoassociation et de formation de molécules froides correspondants aux états corrélés à la limite asymptotique $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$.

Les expériences de photoassociation sur le césium s'effectuent dans un piège magnéto-optique standard. La détection de la photoassociation se fait en mesurant la perte d'atomes du piège *via* la baisse de

la fluorescence, mais aussi par la détection d'ions moléculaires. Ces derniers sont créés par un processus à deux photons, qui ionise les molécules de l'état fondamental métastable $a^3\Sigma_u^+$.

Dans un spectre de photoassociation, la position d'une raie reflète la sélection en énergie effectuée par la longueur d'onde du laser de photoassociation. L'intensité de la raie reflète quant à elle le recouvrement entre la fonction d'onde de collision et la fonction d'onde excitée.

La figure 4.1 représente le spectre réalisé en décalant la fréquence du laser de photoassociation par rapport à la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$, jusqu'à une énergie d'environ 80 cm^{-1} correspondant aux décalages maximums où ont été réalisés les spectres de photoassociation. On peut noter sur ce spectre la nette oscillation de l'intensité des raies de photoassociation pour les décalages à résonance entre -60 cm^{-1} et -10 cm^{-1} . L'identification des séries est effectuée par l'analyse de LeRoy-Bernstein, la largeur des raies observées, en raison des interactions hyperfines des états excités, contribue aussi à l'identification des séries observées expérimentalement.

Sur ce spectre, tous les états attractifs corrélés à la limite asymptotique $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$: 1_u , 1_g , 0_g^- et 0_u^+ ont été observés.

Notons que seuls les états $0_g^- P_{3/2}$ et $1_u P_{3/2}$ sont détectés par production d'ions Cs_2^+ , $1_g P_{3/2}$ et $0_u^+ P_{3/2}$ sont détectés en perte d'atomes du piège.

Sur la figure 4.1, on peut voir le signal ionique Cs_2^+ pour un décalage du laser de photoassociation compris entre -7 cm^{-1} et -2.5 cm^{-1} , des raies vibrationnelles possédant une structure très large. Cette série vibrationnelle a été attribuée aux niveaux du potentiel $1_u P_{3/2}$ (nous verrons les caractéristiques de ce potentiel dans la section 4.3).

51 niveaux vibrationnels sont observés pour le potentiel $1_g P_{3/2}$, ils sont situés dans l'intervalle de nombre d'ondes $[-28.5231 \text{ cm}^{-1}; -3.0531 \text{ cm}^{-1}]$.

Quant au potentiel $0_u^+ P_{3/2}$, 66 niveaux vibrationnels sont observés dans un domaine spectral assez large $[-40.5494 \text{ cm}^{-1}; -2.7837 \text{ cm}^{-1}]$.

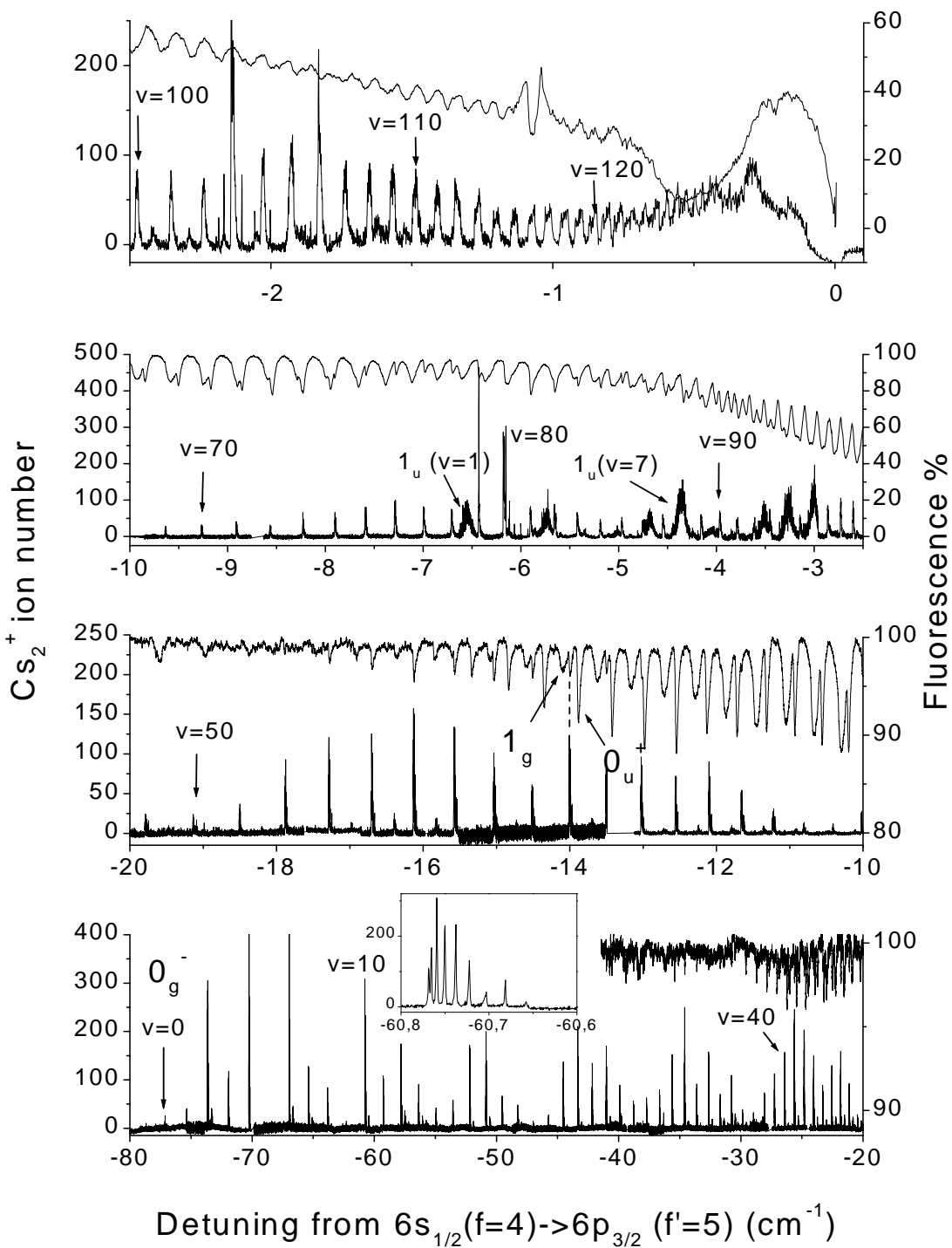


FIG. 4.1 – Spectre de photoassociation obtenu sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$. La fluorescence des atomes du piège est normalisée à 100. L'autre signal enregistré est le nombre d'ions détectés. (La figure est extraite de la référence [100]).

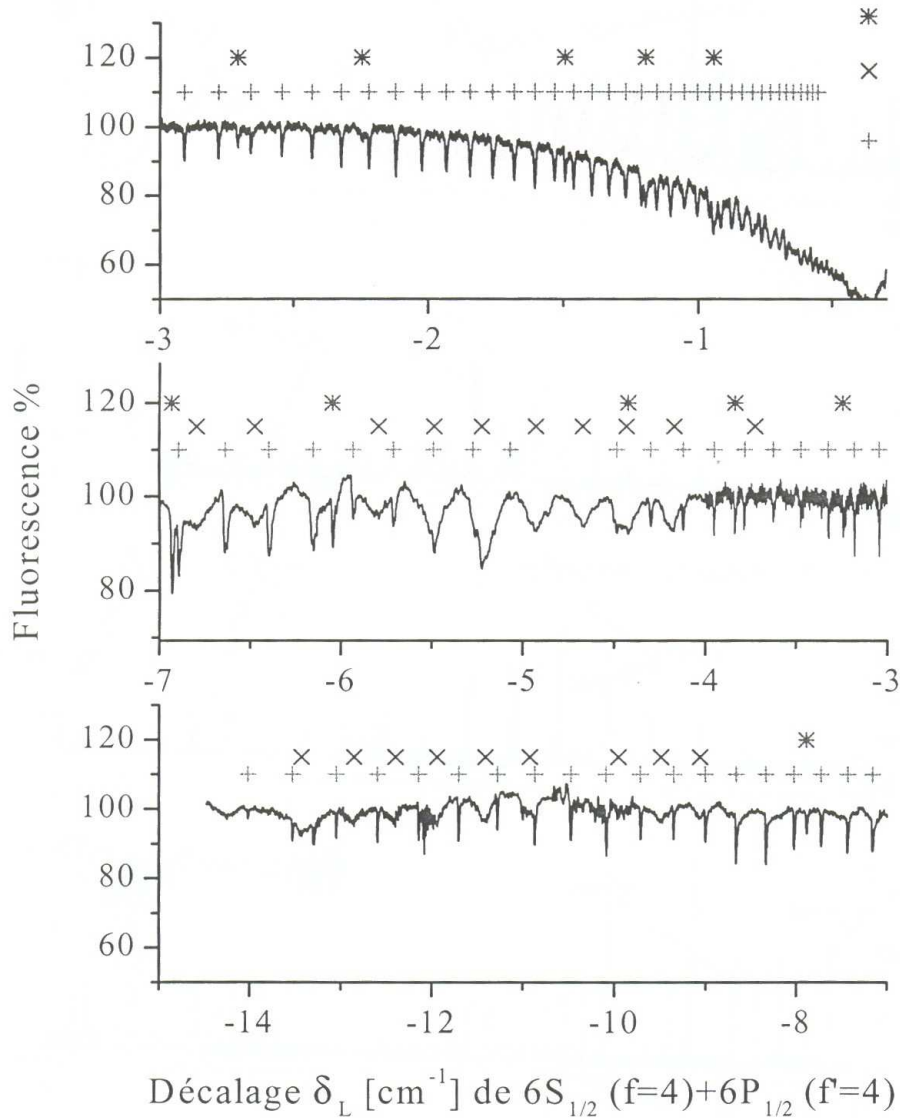


FIG. 4.2 – Spectre de photoassociation obtenu sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$. La fluorescence des atomes du piège est normalisée à 100. * représente l'état 0_g^- , x l'état 1_g et + l'état 0_u^+ . (La figure est extraite de la référence [100])

La figure 4.2 représente le spectre réalisé en décalant la fréquence du laser de photoassociation par rapport à la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$, jusqu'à une énergie d'environ 14 cm^{-1} .

Dans le chapitre II, nous avons vu que le premier terme attractif du potentiel $0_g^- P_{1/2}$ est en C_6/R^6 . Ce potentiel varie plus lentement que les autres (leur premier terme attractif étant en C_3/R^3), le nombre de niveaux vibrationnels détectés est plus petit. De plus, les niveaux vibrationnels sont plus espacés : 11 niveaux dans le domaine $[-7.8837 \text{ cm}^{-1} ; 0.9445 \text{ cm}^{-1}]$.

Les niveaux de l'état $1_g P_{1/2}$ sont identifiés d'après la largeur des raies vibrationnelles,

de l'ordre de 3 GHz à 5 cm^{-1} . 19 points sont situés à des décalages dans l'intervalle $[-13.4276 \text{ cm}^{-1} ; -3.7261 \text{ cm}^{-1}]$.

Sur ce spectre, tous les états attractifs corrélés à la limite asymptotique $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$: 1_u , 1_g , 0_g^- et 0_u^+ ont été observés. Les progressions vibrationnelles correspondant à ces états électroniques sont également indiquées.

4.2 Signal moléculaire sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$

Au cours de leurs expériences sur la formation de molécules froides de Cs_2 , le groupe expérimental de P. Pillet [100] au Laboratoire *Aimé Cotton* ont observé, parmi de très nombreux spectres, différentes (dix) raies (voir figure 4.3, cette figure est identique à la figure 4.2 pour la partie perte d'atomes du piège) correspondant au signal de détection ionique. Ces raies ont les caractéristiques suivantes :

- les raies (iii), (iv), (v), (viii), (ix), et (x) sont très fines spectralement et ne comportent pas de structure rotationnelle. Elles sont observées à un décalage qui semble correspondre à la série $1_gP_{1/2}$ obtenue en pertes d'atomes du piège ;
- les raies (i), (ii), (vi) et (vii), observables aussi bien en pertes d'atomes qu'en détection ionique, ont une structure rotationnelle résolue voir figure (4.4) :
 - (i), $B_v = 67.5 \text{ MHz}$, $\langle R \rangle = 20.1 \text{ a}_0$;
 - (ii), $B_v = 82.3 \text{ MHz}$, $\langle R \rangle = 18.2 \text{ a}_0$;
 - (vi), $B_v = 89.2 \text{ MHz}$, $\langle R \rangle = 17.5 \text{ a}_0$;
 - (vii), $B_v = 266.5 \text{ MHz}$, $\langle R \rangle = 10.1 \text{ a}_0$.

La figure (4.4) montre des agrandissements des structures rotationnelles. La position des raies ne correspond à aucune des progressions vibrationnelles précédemment identifiées. Il faut remarquer, que les raies (iii) et (iv) sont incompatibles pour faire une progression rotationnelle avec la raie (ii).

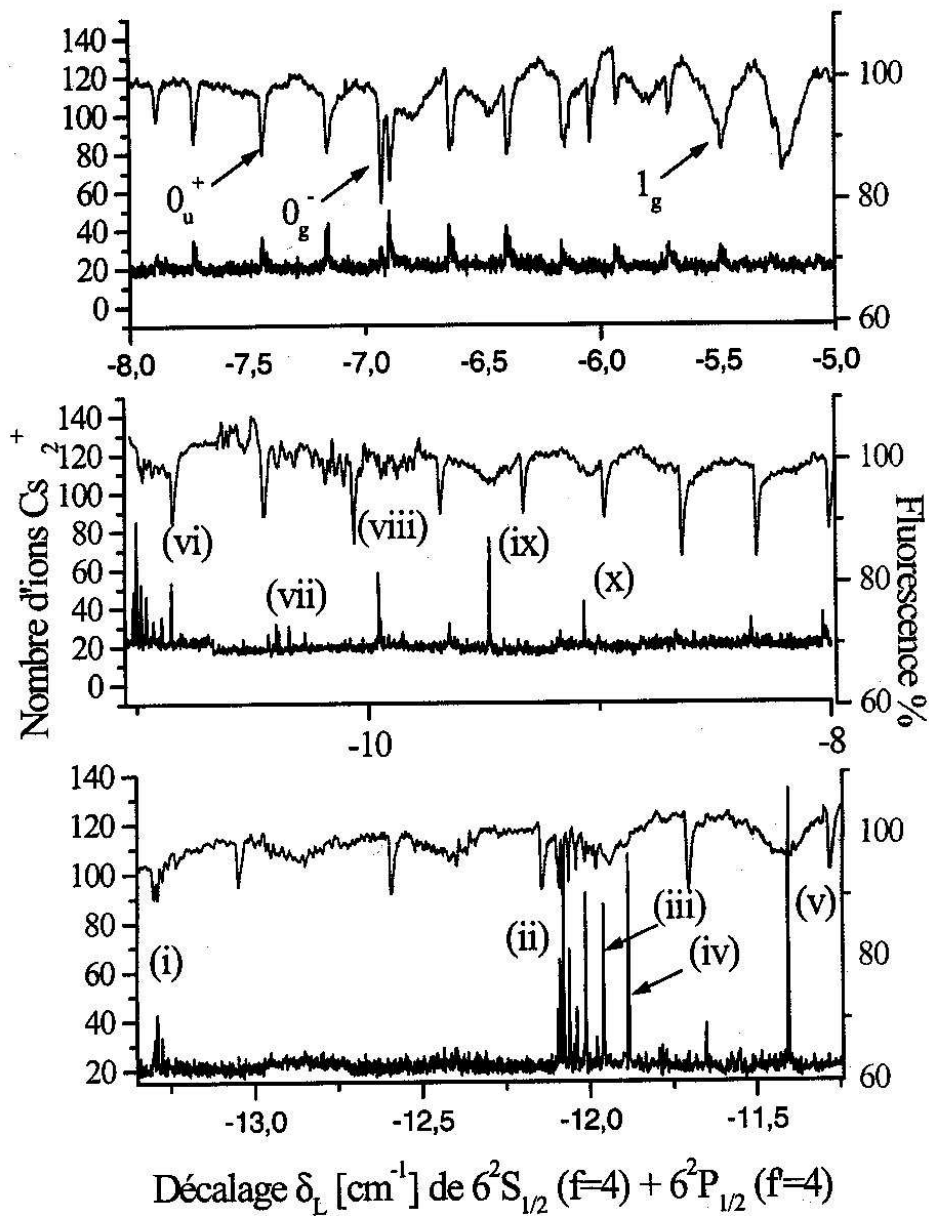


FIG. 4.3 – Spectre de photoassociation obtenu sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$. La fluorescence des atomes du piège est normalisée à 100. L'autre signal enregistré est le nombre d'ions détectés. Les raies non identifiées sont repérées par un numéro arbitraire. (La figure est extraite de la référence [100]).

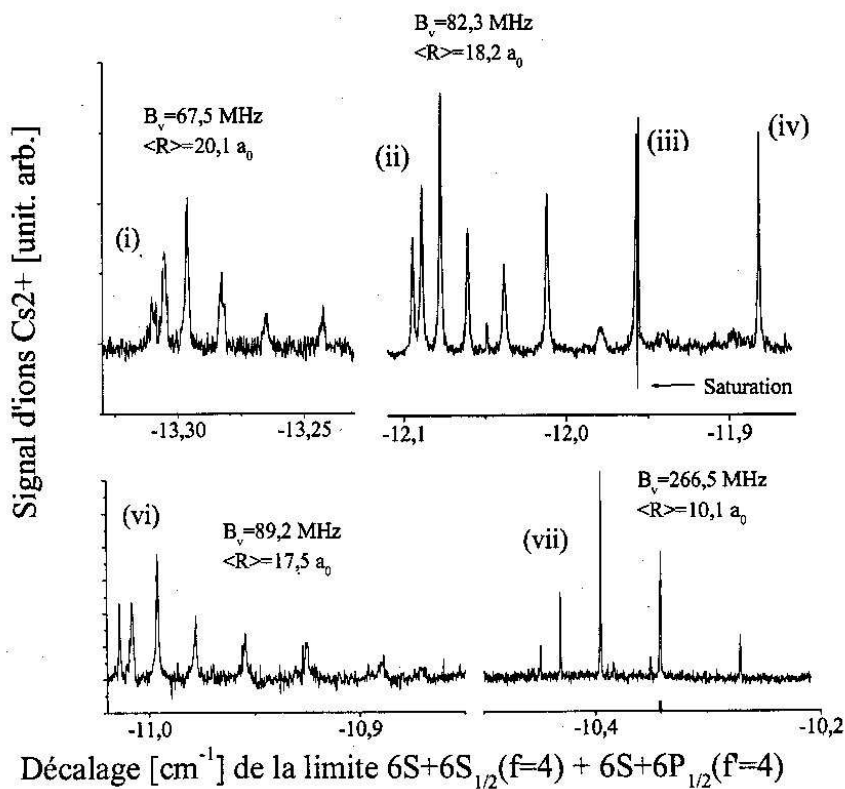


FIG. 4.4 – Signal d’ions moléculaires obtenu à des décalages supérieurs à -9 cm^{-1} sous la limite $6S_{1/2}(f = 4) + 6P_{1/2}(f' = 4)$. Pour chaque structure rotationnelle on indique la constante de rotation et la valeur moyenne de R correspondante. Les raies, non identifiées, sont repérées par un numéro arbitraire. (La figure est extraite de la référence [100]).

L’équipe expérimentale n’a pu donner aucune interprétation convaincante afin d’expliquer la présence de ces raies. C. Drag [100] a cependant, s’agissant de celles où la structure rotationnelle est résolue (voir figure 4.4), formulé les hypothèses suivantes sur les états électroniques excités :

- Au vu des très faibles valeurs de la distance moyenne de vibration¹, on peut penser que des puits à courte distance sont peuplés. Leur minimum doit se situer à une énergie inférieure à celle de la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$ et avoir un point tournant externe à courte distance.
- Par ailleurs, pour ces raies, il a été procédé à des spectres, en fonction de la longueur d’onde du laser d’ionisation des molécules, du deuxième étage, en fixant le laser de photoassociation sur les raies rotationnelles d’intensité maximale. Pour les quatre structures : (i), (ii), (vi) et (vii), les spectres sont identiques à ceux obtenus par la même équipe pour les trois états moléculaires $[0_g^- P_{3/2}, v \sim 140]$, $[0_g^- P_{3/2}, v = 6, J = 2]$ et $[1_u P_{3/2}, v = 1]$ [100]. C. Drag en a déduit que ce

¹Rappelons que $B_v = \frac{\hbar^2}{2\mu} \langle \frac{1}{R^2} \rangle$, $\langle R \rangle$ est la distance moyenne séparant les deux atomes.

sont les niveaux vibrationnels du potentiel $a^3\Sigma_u^+$ qui sont peuplés par désexcitation. Comme l'émission spontanée, au vu des constantes rotationnelles, semble s'effectuer à une distance inférieure à $20 a_0$, ces états sont de symétrie g .

Ces deux conditions, la symétrie g et un point de Condon assez interne, l'ont conduit [100] à penser que l'état photoassocié serait l'état 1_g corrélé à la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ ou alors l'état 0_g^+ corrélé à la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$.

Et en effet un mouvement de vibration de ces potentiels peut tout à fait expliquer la structure des raies (ii), (vi) et (vii). Mais il n'a pas trouvé par ce type de raisonnement l'explication de la présence sur le spectre de la raie (i).

4.3 Courbes de potentiel de la molécule Cs_2

Avant de vérifier les hypothèses émises par C. Drag, nous devons d'abord présenter les courbes de potentiels moléculaires que nous utilisons. Bien que le signal ait été enregistré sous la limite asymptotique $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$, nous représentons aussi les potentiels attractifs corrélés à la limite asymptotique $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ (les spectres obtenus étant similaires à ceux obtenus pour les 2 états 0_g^- et $1_u P_{3/2}$).

Nous avons utilisé les courbes de potentiel issus de calculs *ab initio* menés par le groupe de M. Aubert-Frécon et A. R. Allouche par la méthode de pseudopotentiel [145] que nous avons présenté dans le chapitre I. Les calculs menés par ce groupe, au moment où nous avons initié ce travail, étaient les plus récents et la grille de points est très serrée, nous pensons donc que ces calculs sont très fiables. Depuis notre équipe a refait ces calculs avec la même méthode de calcul.

Les deux potentiels moléculaires fondamentaux corrélés à la limite $6S + 6S$ de la molécule Cs_2 sont représentés sur la figure (4.5). L'atome de césium possède une structure hyperfine atomique particulièrement large 9.192631770 GHz dans l'état électronique fondamental. Une conséquence est la brisure de symétrie *gerade/ungerade* des états moléculaires à longue distance internucléaire [258]. Ainsi les états moléculaires proches des asymptotes ne peuvent être décrits dans le cas (a) de Hund, les états $X^1\Sigma_g^+$ et $a^3\Sigma_u^+$ sont couplés par l'interaction hyperfine. Comparé aux autres alcalins, cette brisure intervient à distance particulièrement faible à cause de l'énorme structure hyperfine atomique, et mélange fortement triplet et singulet pour les derniers niveaux fondamentaux [258]. La brisure de symétrie assure aux niveaux élevés de l'état triplet un certain caractère *gerade*, qui rendent possibles les transitions radiatives avec l'état 1_u . Nous avons représenté les potentiels corrélés aux limites asymptotiques $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$ et $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ *i.e.*, 0^- , 0^+ et 1 sur la figure (4.6). Les deux états de symétrie *gerade* (g) et *ungerade* (u) sont représentés.

Nous pouvons remarquer sur la figure 4.6(a)

- que l'état 0_g^+ corrélé à la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$ présente une barrière de potentiel à courte distance interatomique ~ 20 u.a..
- que deux potentiels de symétrie 1_g sont corrélés à la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ (voir figure 4.6(b)), le potentiel 1_g attractif sera noté $1_g(1)$ et le potentiel répulsif sera noté $1_g(2)$. On peut aussi remarquer un croisement évité entre les deux

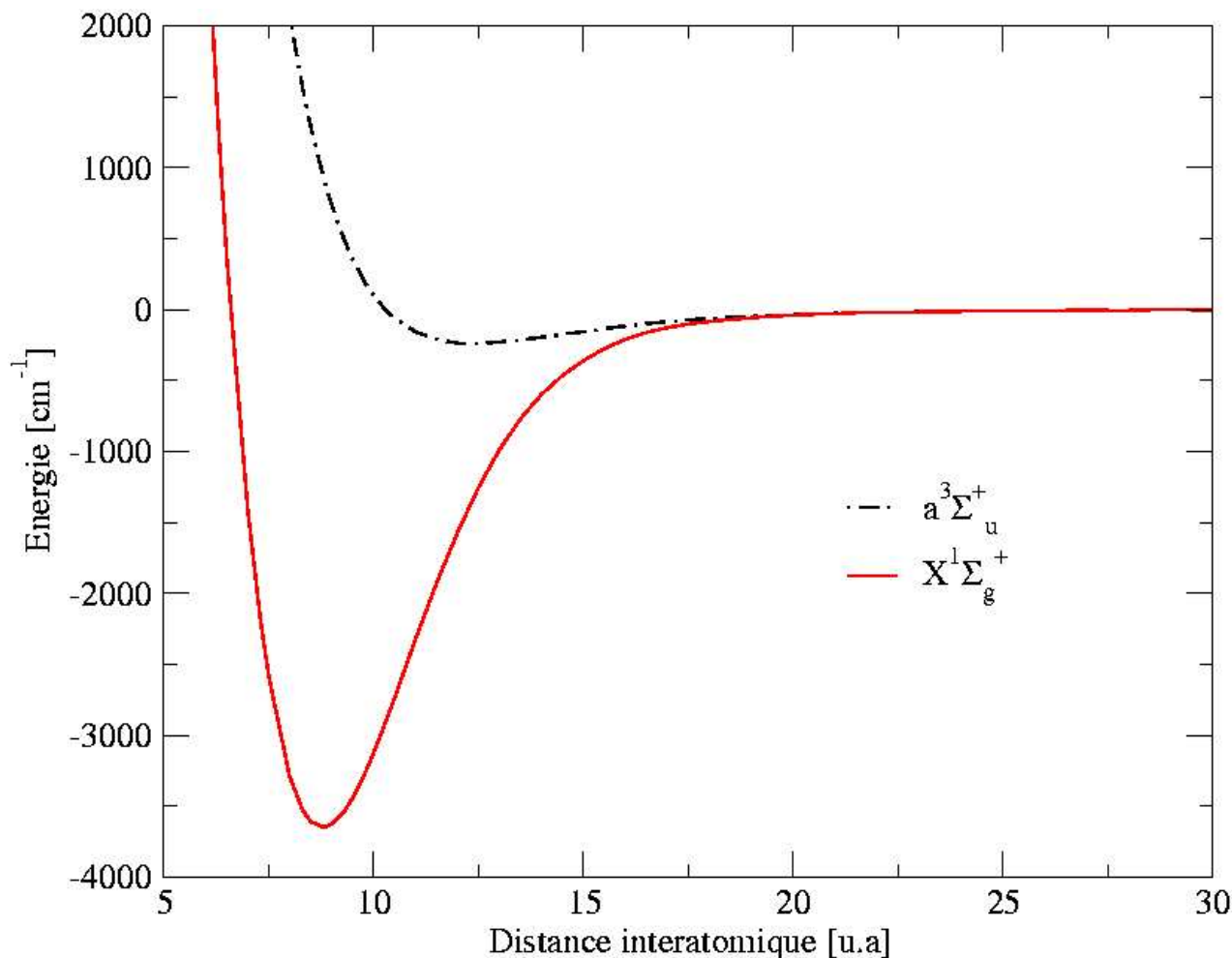


FIG. 4.5 – Potentiels moléculaires de l'état fondamental du dimère de césium.

potentiels de symétrie 1_g à très courte distance interatomique $R \sim 9$ u.a. ;

- les potentiels 0_g^- et 1_u corrélés à la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ figure 4.6(b) possèdent un puits profond à courte distance, respectivement d'environ 673 cm^{-1} et 2360 cm^{-1} , ainsi qu'un puits externe beaucoup moins profond, il a une profondeur de 77.94 cm^{-1} et son minimum est situé à 23.30 a_0 pour l'état 0_g^- alors que le puits externe de l'état 1_u a une profondeur estimée à 7 cm^{-1} et sa distance d'équilibre est de 32 a_0 .

Les états excités par photoassociation sont exprimés dans la base du cas (c) de Hund, puisque la photoassociation a lieu à grande distance interatomique où les énergies de liaison sont faibles et le couplage spin-orbite est important.

Les potentiels moléculaires des états de symétrie (c) sont des combinaisons des potentiels moléculaires des états de symétrie (a). Les différentes combinaisons sont les

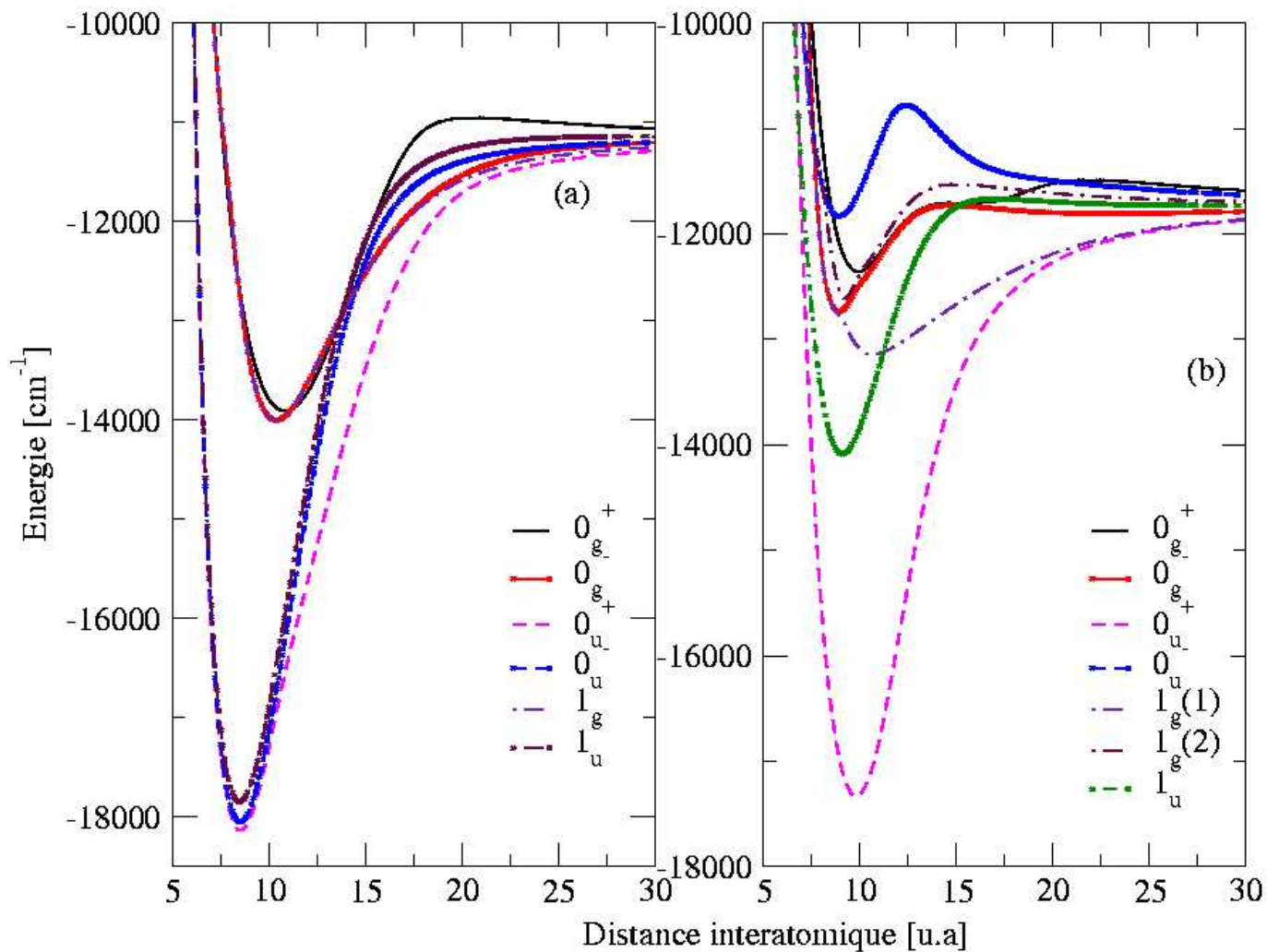


FIG. 4.6 – Potentiels moléculaires des états de symétrie g et u, corrélés aux limites de dissociation (a) $6S + 6P_{1/2}$ et (b) $6S + 6P_{3/2}$ (dans la base du cas (c) de Hund) du dimère de césium [145].

suivantes :

$$\begin{array}{l}
 1_g \left\{ \begin{array}{l} 3\Pi_g \\ 3\Sigma_g^+ \\ 1\Pi_g \end{array} \right. \quad 1_u \left\{ \begin{array}{l} 3\Pi_u \\ 3\Sigma_u^+ \\ 1\Pi_u \end{array} \right. \\
 0_u^+ \left\{ \begin{array}{l} 3\Pi_u \\ 1\Sigma_u^+ \end{array} \right. \quad 0_u^- \left\{ \begin{array}{l} 3\Pi_u \\ 3\Sigma_u^+ \end{array} \right. \\
 0_g^+ \left\{ \begin{array}{l} 3\Pi_g \\ 3\Sigma_g^+ \end{array} \right. \quad 0_g^- \left\{ \begin{array}{l} 3\Pi_g \\ 3\Sigma_g^+ \end{array} \right.
 \end{array}$$

L'utilisation de la base du cas (c) permet d'établir les règles de sélection des transitions radiatives. Les seules transitions permises sont dans ce cas de l'état fondamental

Σ_u^+ vers un état excité Π_g , ou de l'état fondamental Σ_g^+ vers l'état excité Π_u . Nous les avons représenté ci-dessous :

$$\begin{array}{c}
 1_g \left\{ \begin{array}{l} {}^3\Pi_g \leftarrow {}^3\Sigma_u^+ \\ {}^3\Sigma_g^+ \leftarrow {}^3\Sigma_u^+ \end{array} \right. \quad 1_u \left\{ {}^1\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma_g^+ \right. \\
 \\
 0_u^+ \left\{ {}^1\Sigma_u^+ \leftarrow {}^1\Sigma_g^+ \right. \\
 \\
 0_g^+ \left\{ {}^3\Pi_g \leftarrow {}^3\Sigma_u^+ \right. \quad 0_g^- \left\{ \begin{array}{l} {}^3\Pi_g \leftarrow {}^3\Sigma_u^+ \\ {}^3\Sigma_g^+ \leftarrow {}^3\Sigma_u^+ \end{array} \right.
 \end{array}$$

Les règles de transition ne permettant aucune transition de l'état électronique excité 0_u^- vers les états fondamentaux ${}^3\Sigma_u^+$ et ${}^1\Sigma_g^+$, cet état ne sera pas pris en considération dans le reste de notre discussion (bien que nous ayons effectué les calculs de taux de photoassociation et de formation de molécules froides).

Dans les paragraphes qui suivent, nous effectuons les calculs de taux de photoassociation et de formation de molécules froides des états attractifs corrélés à la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$. Nous calculerons aussi les de taux de photoassociation et de formation de molécules froides de l'état 1_g corrélé à la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$, puisque cet état est supposé être l'état photoassocié par C. Drag [100].

4.4 Constantes rotationnelles

Dans une première étape, nous avons essayé d'identifier les raies qui possèdent une structure rotationnelle résolue (*ie* les raies (i), (ii), (vi) et (vii)). Les constantes rotationnelles qui leur correspondent sont respectivement : $B_v(i) = 67.5 \text{ MHz}$, $B_v(ii) = 82.3 \text{ MHz}$, $B_v(vi) = 89.2 \text{ MHz}$ et $B_v(vii) = 266.5 \text{ MHz}$ (voir figure 4.4).

Et avant de calculer les constantes rotationnelles des états corrélés à la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$, nous avons d'abord calculé celles de l'état 1_g $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$. Un croisement évité entre les deux potentiels 1_g $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ existe à très courte distance interatomique $R \sim 9 \text{ u.a.}$. Ce croisement évité résulte de l'interaction spin-orbite entre les deux états électroniques $1_g(1)$ et $1_g(2)$.

Dion et al. [24] ont montré que le couplage résonnant résultant de l'interaction spin-orbite entre deux courbes de potentiel induit une augmentation, à courte distance, de la probabilité de présence dans le niveau de photoassociation, donnant accès à des niveaux vibrationnels bas après émission spontanée.

Dion et al. [24] ont appliqué ce modèle à la formation de molécules froides de Cs_2 , où une forte interaction spin-orbite existe entre les états excités $A^1\Sigma_u^+$ et $b^3\Pi_u$ corrélés à la limite de dissociation $Cs(6s) + Cs(6p)$. Dans le cas (c) de Hund, ces états appartiennent à la symétrie 0_u^+ et se dissocient en $Cs(6s) + Cs(6p_{1/2,3/2})$.

Plusieurs travaux ont montré que l'interaction spin-orbite dans les atomes lourds alcalins Rb et Cs est responsable de la forte perturbation du spectre vibrationnel du dimère dans les états excités. Ce qui nécessite de traiter simultanément les états A et b et leur couplage pour déterminer les fonctions d'onde des états vibrationnels [252, 96].

Nous pensons, que dans ce cas aussi, le couplage résonnant induit par l'interaction spin-orbite entre les états $1_g(1)$ et $1_g(2)$ va être efficace de la même manière. Or le couplage spin-orbite utilisé par Allouche et al. pour le calcul des courbes de potentiels de Cs_2 avec structure fine nous est inconnu. Nous avons donc effectué une diabatisation des deux potentiels 1_g corrélés à la limite $6S + 6P_{3/2}$. Nous avons obtenu deux potentiels diabatiques, ensuite en utilisant le couplage spin-orbite dépendant de R , déterminé par des calculs de chimie quantique par Spies [255], que nous avons présenté et utilisé dans le chapitre II, nous avons adiabatisé les potentiels diabatiques. Les résultats sont reportés sur la figure 4.7.

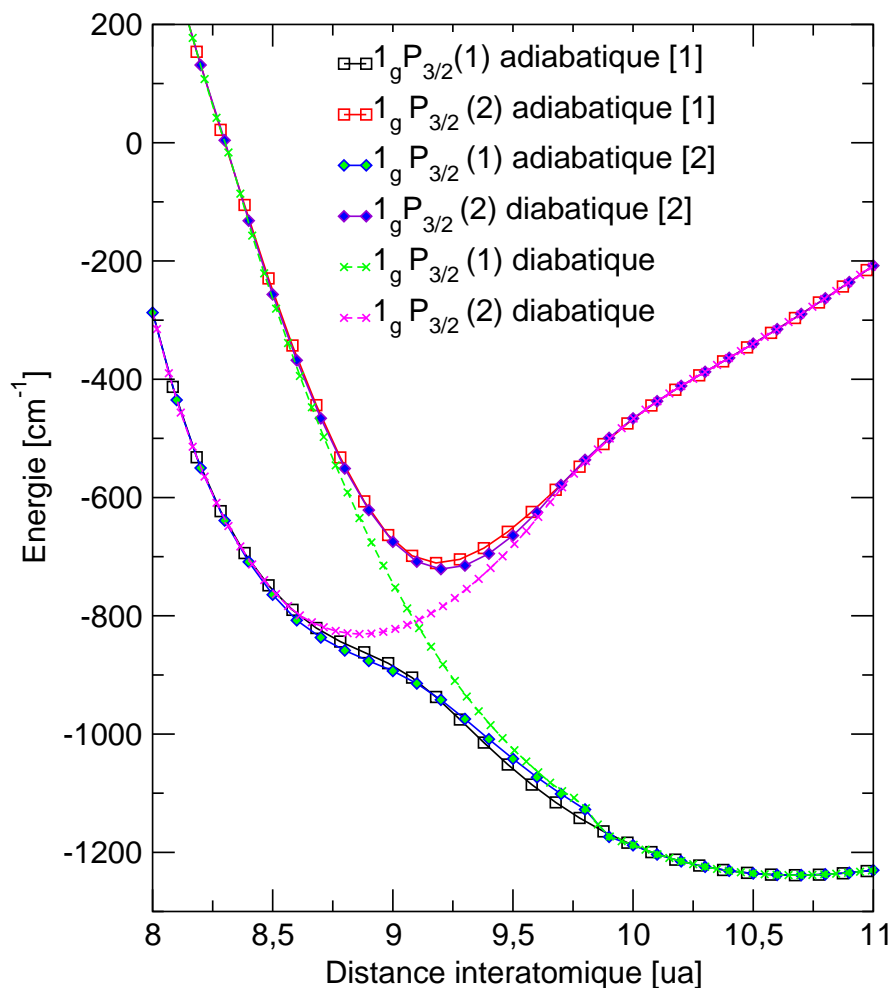


FIG. 4.7 – Les deux potentiels de symétrie 1_g corrélés à la limite $6S + 6P_{3/2}$ sont représentés avant et après les procédures de diabatisation et d'adiabatisation. Les potentiels adiabatiques [1] sont ceux calculés par Allouche et al. [145]. Après la procédure de diabatisation, nous obtenons les potentiels diabatiques, et enfin les potentiels adiabatiques [2] sont ceux obtenus après la seconde adiabatisation.

Nous avons déterminé les constantes rotationnelles ($B_v = \frac{\hbar^2}{2\nu} \langle \frac{1}{R^2} \rangle$) relatives aux deux potentiels diabatiques et aux potentiels adiabatiques et les avons représenté dans la figure 4.8.

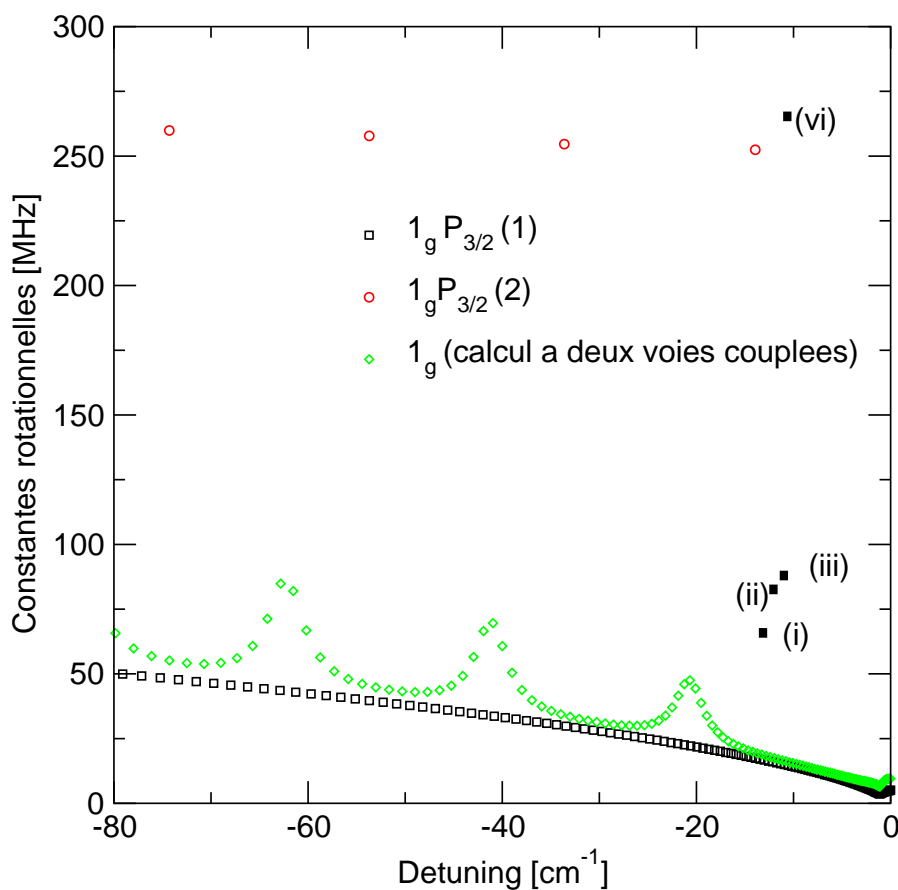


FIG. 4.8 – Constantes rotationnelles calculées pour les deux voies non couplées (diabatiques) de l'état 1_g corrélés à la limite $6S + 6P_{3/2}$ (cercle et carré). (en losange pleins) calculs utilisant un couplage entre les deux états. Les carrés noirs représentent les valeurs expérimentales.

Dans le tableau 4.1, nous avons représenté les constantes rotationnelles expérimentales ainsi que les décalages du laser par rapport au laser de photoassociation (detuning) correspondants. Dans le tableau 4.2, nous avons représenté les constantes rotationnelles que nous avons calculées pour l'état 1_g sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$ avec les décalages du laser par rapport au laser de photoassociation (detuning) correspondants.

Rappelons que, dans un premier temps, nous essayons de vérifier l'hypothèse émise par C. Drag, qui est que l'état photoassocié serait l'état $1_gP_{3/2}$. Et que dans une seconde étape, nous calculons les constantes rotationnelles des états attractifs corrélés à la limite $6S + 6P_{1/2}$.

raie	$B_v(exp)[MHz]$	detuning [cm^{-1}]
(i)	67.5	~ -13.3
(ii)	82.3	~ -12.1
(vi)	89.2	~ -11.0
(vii)	266.5	~ -10.3

TAB. 4.1 – Constantes rotationnelles expérimentales sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$.

$B_v(1_g(1))$	detuning	$B_v(1_g(2))$	detuning	$B_v(1_g(coupl))$	detuning
67.45	-133.44			66.5	-41.93
82.96	-193.33			81.99	-61.53
89.83	-223.43			71.29	-64.19
		262.22	-94.12	267.88	-382.85

TAB. 4.2 – Constantes rotationnelles calculées de l'état 1_g sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{3/2}$.

Regardons d'un peu plus près les tableaux 4.1 et 4.2, pour des valeurs comparables des constantes rotationnelles, les valeurs des décalages du laser qui leur correspondent sont très différentes, celles que nous avons calculées sont beaucoup plus grandes (en valeurs absolues) que celles qui ont été mesurées expérimentalement. Ce qui laisse penser que l'état photoassocié ne peut pas être l'état 1_g .

Pour cela nous avons déterminé les constantes rotationnelles des états 0_g^+ , 0_g^- , 0_u^+ , 0_u^- , 1_g et 1_u sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$. Elles sont représentées sur la figure (4.9).

Le tableau 4.3 montre les constantes rotationnelles calculées pour ces états.

Si nous examinons attentivement le tableau 4.3, on peut noter que pour des valeurs comparables de constantes rotationnelles, les valeurs des décalages du laser calculées, leur correspondant, sont beaucoup plus grandes (en valeurs absolues) que les valeurs mesurées sauf pour les états 1_u et 1_g pour la raie (vi), où la valeur calculée est plus petite. De plus, aucune valeur des constantes rotationnelles calculées pour l'état 0_g^+ ne coïncide avec les valeurs expérimentales, puisque ce dernier *présente une barrière de potentiel*.

En pratique, il apparaît qu'aucun de ces potentiels ne reproduit les résultats expérimentaux.

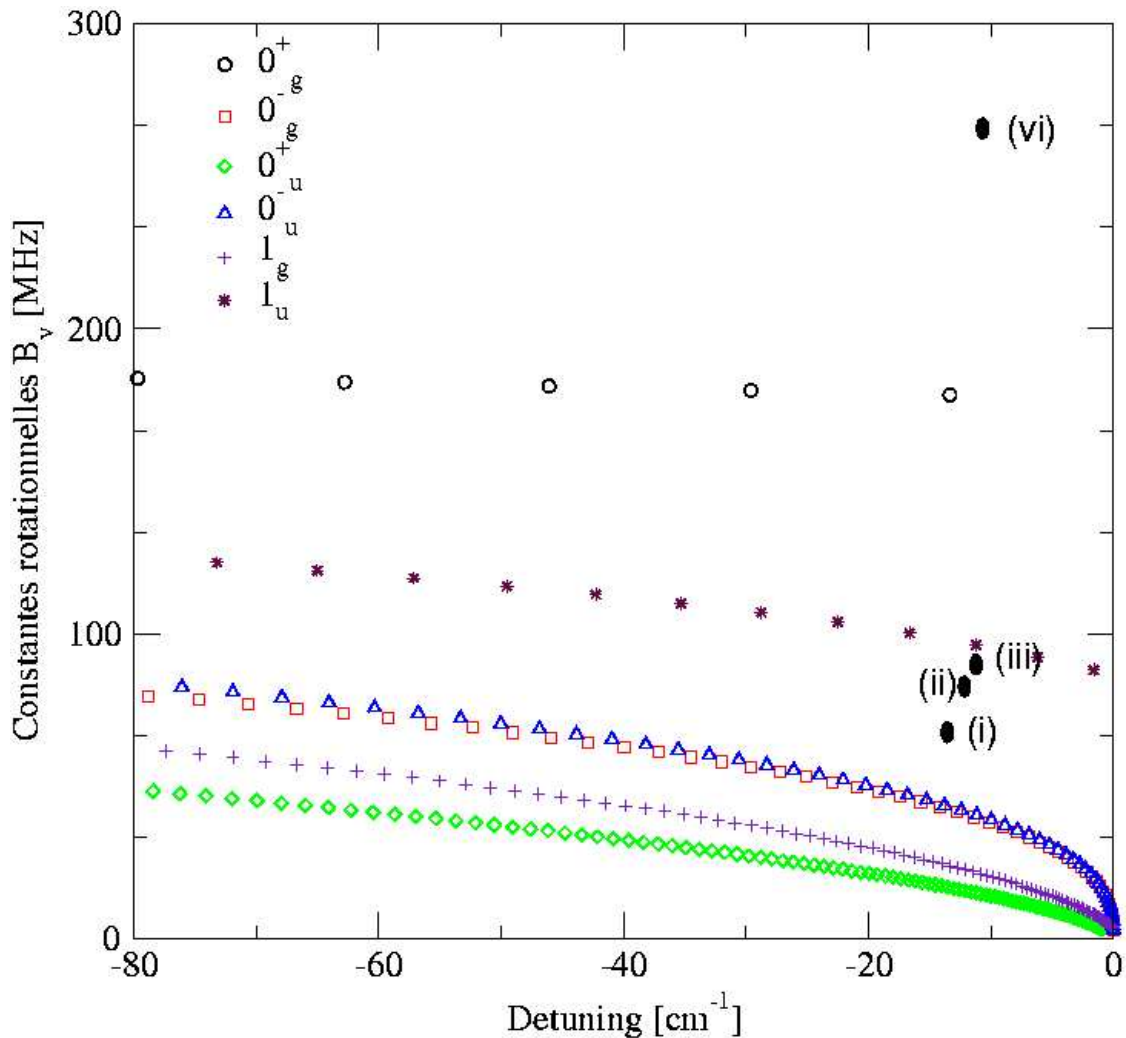


FIG. 4.9 – constantes rotationnelles calculées pour les états 0_g^+ , 0_g^- , 0_u^+ , 0_u^- , 1_g et 1_u sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$. Les losanges représentent les valeurs expérimentales.

$B_v(0_g^-)$	detuning	$B_v(1_u)$	detuning	$B_v(1_g)$	detuning	$B_v(0_u^+)$	detuning
67.61	-49.02			67.40	-167.04	67.02	-136.15
82.79	-87.51			81.79	-138.55	81.68	-191.836
89.50	-111.59	88.18	-1.6	89.13	-1.6	89.33	-223.96
		266.19	-1717.54			266.81	-3230.63

TAB. 4.3 – Constantes rotationnelles calculées des états 0_g^- , 1_u , 1_g et 0_u^+ sous la limite $6S_{1/2} + 6P_{1/2}$

4.5 Taux de photoassociation et de formation de molécules froides

Nous avons effectué un calcul des taux de photoassociation et de formation de molécules froides pour chacun de ces états. Ces taux peuvent servir de prédictions

pour les expérimentateurs et les guider dans de nouvelles expériences. Pour calculer ces taux, nous avons utilisé les équations 3.3 et 3.8 de la référence [225] et que nous avons présentées dans le chapitre II. Les résultats sont reportés sur les figures (4.10 et 4.11).

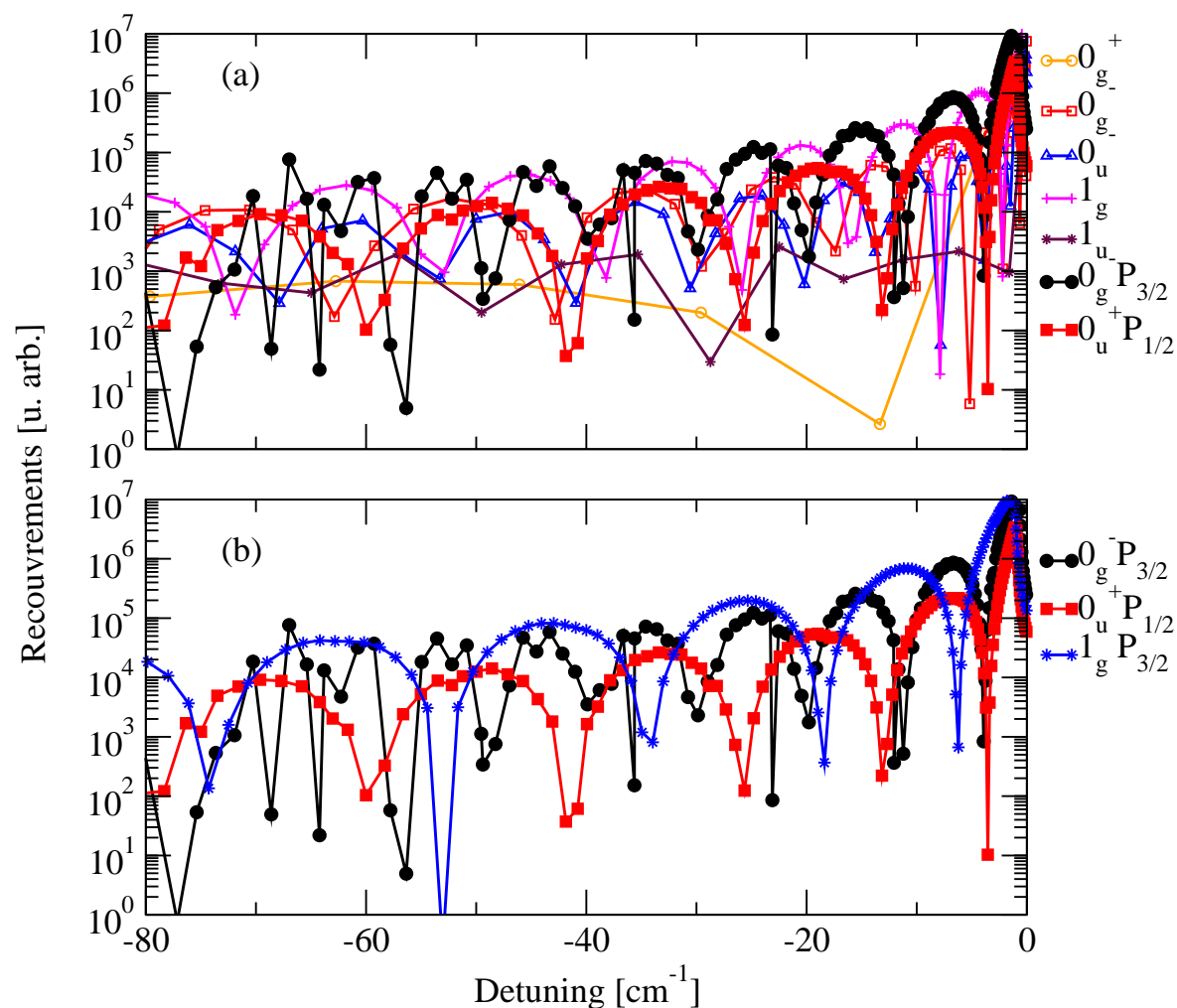


FIG. 4.10 – Taux de photoassociation du Cs_2 . (a) Les états 0_g^+ , 0_g^- , 0_u^- , 0_u^+ , 1_g et 1_u sous la limite $6S + 6P_{1/2}$. (b) L'état 1_g (couplé) sous la limite $6S + 6P_{3/2}$. Ces taux sont comparés aux taux de photoassociation du Cs_2 $0_g^- P_{3/2}$.

Les taux de photoassociation que nous obtenons sont comparés aux taux de photoassociation de l'état $0_g^- P_{3/2}$ (puisque ces taux ont été soigneusement mesurés et comparés aux calculs théoriques). Ces résultats montrent que les taux des états 1_g , 0_u^+ et 0_g^- corrélés à la limite asymptotique $P_{1/2}$ sont comparables à ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$. Sur le spectre expérimental 4.2, le signal en perte d'atomes dans le piège est important pour ces états, ce qui concorde avec nos résultats théoriques.

Considérons d'abord le cas particulier de l'état $0_g^- P_{1/2}$, pour lequel la variation asymptotique du potentiel est en $1/R^6$. Ce potentiel varie plus lentement que les autres, on s'attend à ce que le processus de photoassociation soit moins efficace puisque le photon est absorbé à distance plus courte. Mais l'expérience montre que le recouvrement est favorable (cette constatation a été faite pour d'autres alcalins $^6\text{Li}_2$ [81], $^7\text{Li}_2$ [80], K_2 [232], Rb_2 [71]).

Le taux de photoassociation de l'état $0_u^+ P_{1/2}$ sont 5 fois plus petits que le taux de photoassociation de l'état $0_g^- P_{3/2}$.

Le taux de photoassociation de l'état $1_g P_{1/2}$ est lui aussi similaire au taux de photoassociation de l'état $0_g^- P_{3/2}$, bien que à priori, cet état ne peut être l'état photoassocié (aucun des décalages du laser de photoassociation des constantes rotationnelles expérimentales ne concordait avec nos valeurs théoriques).

L'état $1_g P_{1/2}$ présente des taux de photoassociation 20 fois plus petits que ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$. L'état $0_g^+ P_{1/2}$ présente les taux de photoassociation les plus bas dus à la barrière de potentiel. Ces deux états n'ont pas été observés expérimentalement.

L'état $1_g P_{3/2}$ couplé, observé expérimentalement (la détection s'est effectuée par la mesure des pertes d'atomes dans le piège), présente quant à lui des taux de photoassociation similaires à ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$.

La formation de molécules froides via l'état $0_g^- P_{1/2}$ (les taux de formation de molécules froides sont comparables à celles de $0_g^- P_{3/2}$) s'explique par une probabilité non négligeable de transition liée-liée entre les états discrets du potentiel $0_g^- P_{1/2}$ et ceux du $a^3\Sigma_u^+$ (les interactions hyperfines sont négligées). Les taux de molécules froides obtenus pour les états $1_g P_{3/2}$ couplé (observé expérimentalement) et non couplé $P_{1/2}$ sont comparables à ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$. Ce détail est sans doute intéressant pour les expérimentateurs car elles n'ont pas été observées. Ces molécules sont sûrement formées, mais comme elles sont proches de la limite de dissociation, elles sont difficilement détectées.

L'état 1_u présente des taux 40 fois plus petits que ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$. Et bien sûr les taux les plus bas sont ceux de l'état $0_g^+ P_{1/2}$.

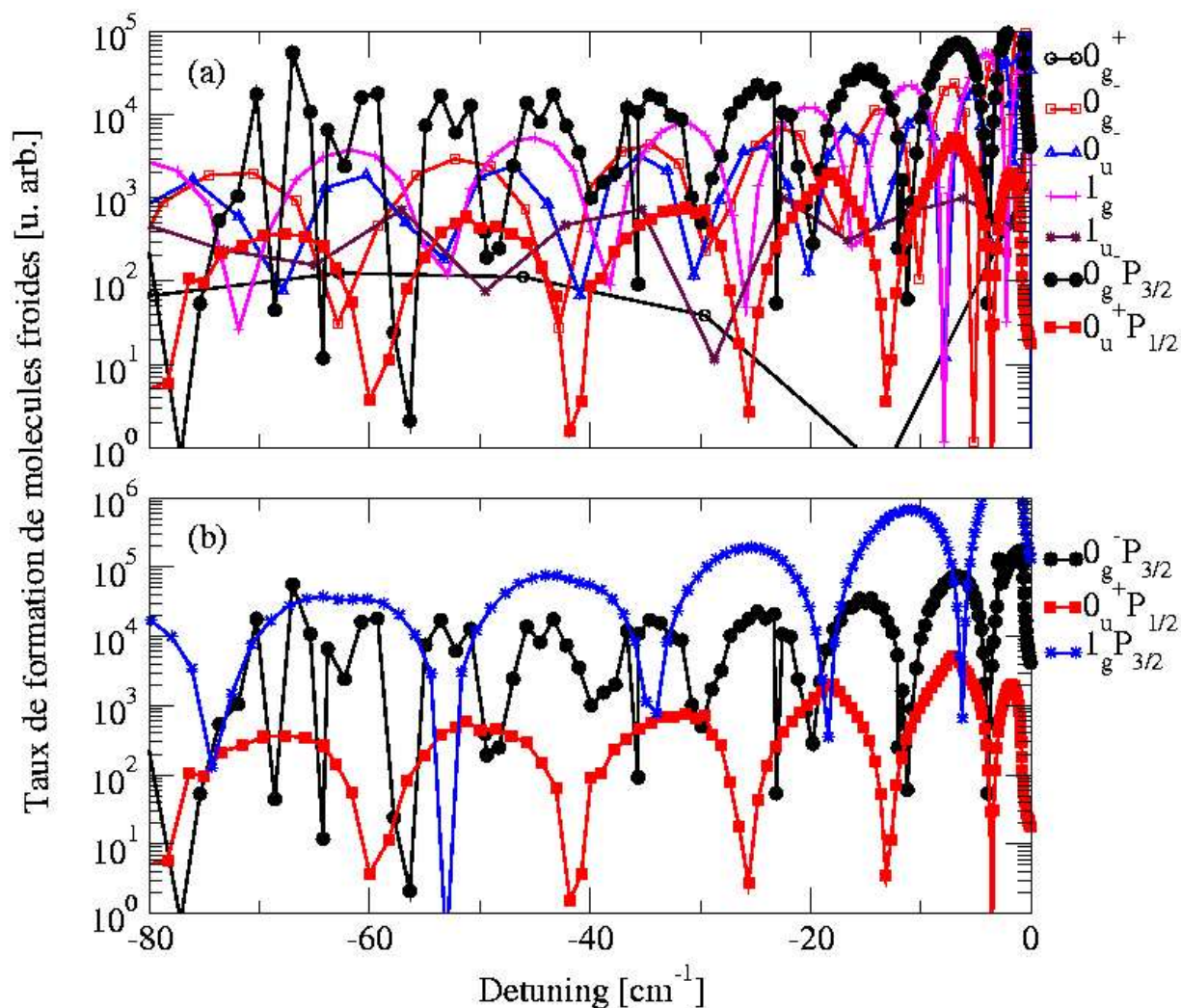


FIG. 4.11 – Taux de formation de molécules froides du Cs_2 . (a) Les états 0_g^+ , 0_g^- , 0_u^- , 0_u^+ , 1_g et 1_u sous la limite $6S + 6P_{1/2}$. (b) L'état 1_g (couplé) sous la limite $6S + 6P_{3/2}$. Ces taux sont comparés aux taux de photoassociation du Cs_2 $0_g^- P_{3/2}$.

4.6 Distributions vibrationnelles

Nous avons montré dans le chapitre 2 que les distributions vibrationnelles des molécules stables formées dépendaient de l'état moléculaire final (singulet ou triplet), ainsi que du niveau de photoassociation. En général, les niveaux vibrationnels liés les plus peuplés sont ceux qui sont proches de la limite de dissociation. Nous avons représenté sur la figure 4.12 plusieurs exemples qui illustrent différentes situations. Les niveaux v sélectionnés correspondent au maximum de photoassociation.

On peut noter que, la distribution vibrationnelle est concentrée sur quelques niveaux liés de l'état fondamental. Il semble aussi que les niveaux soient plus difficile à atteindre.

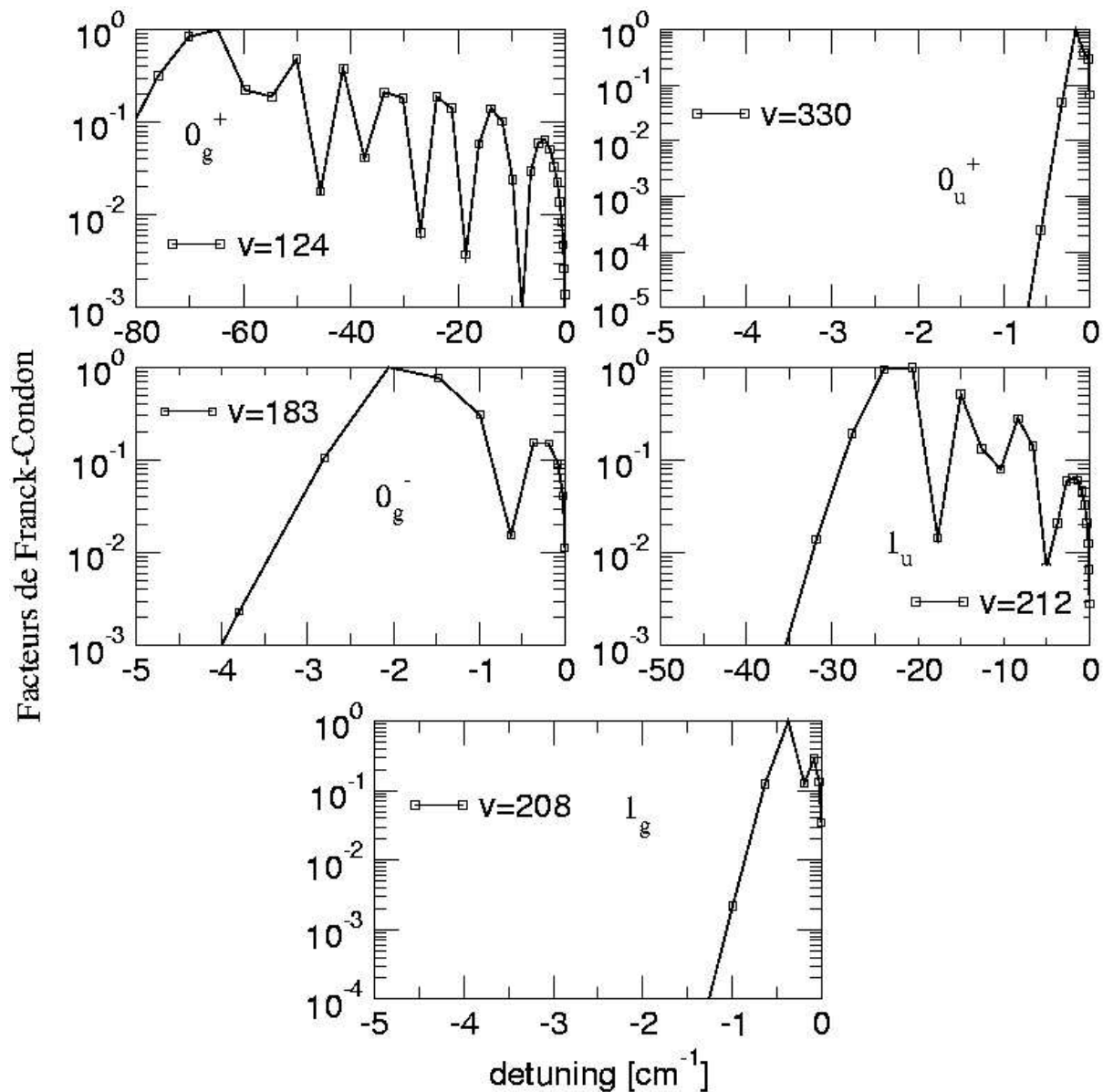


FIG. 4.12 – Distributions vibrationnelles des états 0_u^+ , 1_u , 0_g^+ , 0_g^- et $1_gP_{3/2}$. Les facteurs de Franck-Condon sont donnés pour un niveau vibrationnel v donné de l'état excité en fonction de l'énergie de liaison.

4.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons essayé d'interpréter les spectres obtenus par l'équipe expérimentale, mais nous ne sommes pas parvenus à expliquer la présence sur l'un de ces spectres certaines raies observées. Les seules raies ayant une constante rotationnelle comparable à celles mesurées expérimentalement correspondent à des décalages du laser de photoassociation très grands et donc à très courte distance. Or à la lu-

mière de la théorie de la photoassociation, il est très peu probable que l'excitation de la paire d'atomes s'effectue à courte distance. Les calculs de taux de photoassociation et de formation de molécules froides que nous avons effectués, nous permettent de dire que seule une très forte coïncidence entre les fonctions d'ondes radiales permettrait une telle réaction. Nous pensons que les raies observées ne proviennent pas d'une excitation à un seul photon.

Dion et al. [176] avaient étudié les propriétés d'un schéma de détection de molécules froides de césium, basé sur une ionisation à deux photons augmenté par résonance. Ce schéma montre que l'ionisation provient principalement des états excités intermédiaires $(2)^3(0_g^-, (2)^3(0_g^+, 1_g, 2_g)(6S + 5D_{5/2})$.

Nous sommes donc en attente de nouvelles données résultant d'une expérience de photoassociation à deux photons différents qui permettrait de photoassocier des potentiels plus excités que nous n'avons pas inclus dans cette étude.

D'autre part, les calculs de taux de photoassociation et de formation de molécules froides prédisent des taux comparables à ceux de l'état $0_g^- P_{3/2}$ pour l'état attractif 1_g sous la limite $P_{3/2}$. Ceci est intéressant, dans la mesure où les molécules froides ainsi produites n'ont pas été observées. Cette constatation est probablement due au fait qu'elles sont formées dans des états relativement profonds de l'état fondamental $X^1\Sigma^+$. L'observation de ces molécules avec une longueur d'onde d'un laser d'ionisation bien choisie serait une étape importante vers l'observation de molécules formées dans l'état singulet. Ce schéma pourrait être aussi une étape de formation de molécules dans le niveau vibrationnel fondamental le plus bas.

Chapitre 5

Conclusion

Les travaux effectués au cours de cette thèse, concernent deux thématiques distinctes : la première est celle de la détermination des potentiels des ions moléculaires, la seconde porte sur la photoassociation et la formation de molécules froides.

Nous dressons au chapitre 1 un état des connaissances actuelles sur le calcul des potentiels des ions moléculaires. Nous montrons en particulier que l'énergie électronique calculée ne peut représenter à elle seule le potentiel ressenti par les deux atomes. Des potentiels de polarisation et de répulsion cœur-cœur doivent être ajoutés.

Dans cette partie, nous avons pour la première fois, entrepris une étude englobant tous les systèmes et avec la même méthode de pseudopotentiel [108].

Dans ce travail, nous avons abordé du point de vue théorique la spectroscopie des ions moléculaires alcalins. Nous nous sommes particulièrement attachés à donner des résultats directement comparables aux résultats expérimentaux disponibles ou à venir.

Pour tous les ions moléculaires alcalins homonucléaires et hétéronucléaires, nous avons calculé les courbes de potentiel de l'état fondamental et des premiers états excités.

Par ailleurs, nous avons effectué une comparaison entre la méthode de pseudopotentiel [108] et une méthode de potentiel modèle [118] précédemment utilisée dans notre groupe [93] pour les ions lourds Rb_2^+ , Cs_2^+ , et RbCs^+ .

Au cours de cette étude, nous avons montré que les deux méthodes sont aussi bien adaptées à la représentation des premiers états que des états excités des ions moléculaires alcalins. Cette comparaison a fait l'objet d'un article paru dans le *Journal of Physics B* [94].

Pour pratiquement tous les ions alcalins étudiés, l'accord des constantes spectroscopiques que nous avons calculées avec celles mesurées expérimentalement est excellent. Seul, le manque d'informations expérimentales nous empêche actuellement d'évaluer la qualité de nos calculs pour les ions : KLi^+ , LiRb^+ , LiCs^+ , NaRb^+ , NaCs^+ , KRb^+ et KCs^+ .

Ce chapitre nous a aussi permis de vérifier la qualité des modèles utilisés pour le calcul des courbes de potentiel.

Aux grandes distances interatomiques, nous avons montré que ces ions possèdent des puits de potentiel peu profonds.

Nous présentons au chapitre 2 un schéma de photoassociation produisant des molécules froides [2]. Ce mécanisme utilise les particularités des potentiels excités résultant d'un couplage résonant entre les potentiels $b^3\Pi(s+p)$ et $A^1\Sigma^+(s+p)$. Notons que les potentiels asymptotiques excités en R^{-6} , correspondant à l'interaction de van der Waals, est similaire à celle des potentiels fondamentaux.

Nous avons montré que le couplage résonant entre niveaux vibrationnels des deux potentiels moléculaires électroniques excités couplés crée un second point tournant. Ce dernier augmente et favorise l'émission spontanée vers les niveaux vibrationnels liés profonds formant des molécules froides stables.

Cette étude permet de réaliser, les premières déterminations analytiques des taux de photoassociation et de formation de molécules froides hétéronucléaires.

La précision de ces déterminations confère à ce travail une grande capacité de prédiction

Comme l'ont montré les récentes expériences (KRb [26] et RbCs [28, 73]) l'extension de la production des molécules froides aux dimères alcalins hétéronucléaires est possible. Nous avons pu mener une comparaison quantitative entre les taux calculés des différentes molécules en introduisant un facteur de masse dans les calculs des facteurs de Franck-Condon compris dans les expressions des taux de photoassociation et de formation de molécules froides.

Les taux que nous obtenons sont d'un ordre comparable à ceux calculés pour la molécule de césium pour laquelle la photoassociation et la formation de molécules froides ont été observées. Pour cette molécule, l'accord entre la valeur des taux mesurés expérimentalement et la valeur théorique obtenue par la méthode que nous avons utilisé permet de penser que nos prédictions sont fiables.

Nos résultats montrant la faisabilité d'expériences de photoassociation et de formation de molécules froides sur les dimères légers peuvent être mises à profit par les équipes expérimentales, nombreuses, qui se sont lancées dans les expériences de photoassociation et de formation de molécules froides hétéronucléaires.

Nous avons vu que ces molécules sont très intéressantes, car elles sont susceptibles de posséder un moment dipolaire permanent. Dans nos calculs de taux de photoassociation et de formation de molécules froides, nous avons considéré que le moment dipolaire de transition *moléculaire* était constant sur tout le domaine de distance interatomique considéré et qu'il était "égal" au moment dipolaire de transition *atomique*. Nous avons obtenu des résultats en accord avec l'expérience menée par Kerman et *al.* sur la formation de molécules froides de RbCs [73]. Cette approximation s'est révélée suffisante dans ce cas; cependant, les expériences de formation de molécules froides *via* photoassociation nécessitent une meilleure connaissance de leurs propriétés électroniques comme la variation radiale des moments dipolaires permanents et de transition. En effet une connaissance précise et complète des dimères susceptibles d'être photoassociés et par conséquent former des molécules froides permet d'envisager des schémas de plus en plus complexes de photoassociation, dans le but de réaliser un nuage de molécules froides sélectionnées dans un petit nombre de niveaux de vibration-rotation. C'est dans ce but que notre groupe a calculé les moments dipolaires

lares permanents des potentiels fondamentaux des dimères alcalins hétéronucléaires [177]. Il s'investit également dans le calcul des potentiels des dimères neutres autres que des alcalins [259].

Dans le chapitre 3, nous avons tenté d'expliquer la présence de certaines raies présentes dans les spectres de photoassociation du césium [100]. Pour cela, nous avons calculé les taux de photoassociation et de formation de molécules froides pour les états moléculaires reliés à l'asymptote $6s+6p_{1/2}$ de Cs_2 . Aucun de ces états électroniques excités couplés ne s'est avéré être un état de photoassociation possible. Nous pensons que les raies observées ne proviennent pas d'une excitation à un seul photon. Nous sommes donc en attente de nouvelles données résultant d'une expérience de photoassociation à deux photons différents qui permettrait de photoassocier des potentiels plus excités que nous pas inclus dans cette étude.

Annexe A

Courbes de potentiel des ions alcalins homonucléaires

Nous donnons dans cette annexe les courbes de potentiel pour les symétries ${}^2\Sigma_{g/u}^+$, ${}^2\Pi_{g/u}$ et ${}^2\Delta_{g/u}$ pour les distances internucléaires comprises entre 5 ua et 100 ua des ions moléculaires alcalins homonucléaires. Les énergies sont exprimées en ua, l'origine des énergies étant prise à la limite $M^+ + M^+$.

R(ua)	(1) ${}^2\Sigma_g^+$	(2) ${}^2\Sigma_g^+$	(3) ${}^2\Sigma_g^+$	(4) ${}^2\Sigma_g^+$	(5) ${}^2\Sigma_g^+$	(6) ${}^2\Sigma_g^+$
5.00	-.241727E+00	-.877743E-01	0.784671E-02	0.524217E-01	0.896987E-01	0.109545E+00
5.20	-.243719E+00	-.922901E-01	0.121191E-02	0.462619E-01	0.824789E-01	0.102722E+00
5.40	-.245022E+00	-.963621E-01	-.481511E-02	0.406209E-01	0.758309E-01	0.964449E-01
5.60	-.245759E+00	-.100054E+00	-.102978E-01	0.354402E-01	0.696952E-01	0.906482E-01
5.80	-.246028E+00	-.103415E+00	-.152904E-01	0.306676E-01	0.640206E-01	0.852746E-01
6.00	-.245915E+00	-.106489E+00	-.198427E-01	0.262583E-01	0.587603E-01	0.802703E-01
6.20	-.245487E+00	-.109311E+00	-.239966E-01	0.221744E-01	0.538754E-01	0.755774E-01
6.40	-.244803E+00	-.111909E+00	-.277903E-01	0.183807E-01	0.493297E-01	0.711237E-01
6.60	-.243913E+00	-.114311E+00	-.312587E-01	0.148483E-01	0.450913E-01	0.668053E-01
6.80	-.242856E+00	-.116535E+00	-.344335E-01	0.115505E-01	0.411325E-01	0.625035E-01
7.00	-.241668E+00	-.118600E+00	-.373423E-01	0.846373E-02	0.374247E-01	0.581897E-01
7.20	-.240378E+00	-.120522E+00	-.400119E-01	0.556908E-02	0.339441E-01	0.539311E-01
7.40	-.239010E+00	-.122313E+00	-.424652E-01	0.284581E-02	0.306688E-01	0.497838E-01
7.60	-.237586E+00	-.123986E+00	-.447238E-01	0.278150E-03	0.275782E-01	0.457672E-01
7.80	-.236122E+00	-.125548E+00	-.468049E-01	-.214795E-02	0.246521E-01	0.418841E-01
8.00	-.234633E+00	-.127008E+00	-.487260E-01	-.444604E-02	0.218740E-01	0.381300E-01
8.20	-.233131E+00	-.128373E+00	-.505014E-01	-.662539E-02	0.192266E-01	0.344956E-01
8.40	-.231628E+00	-.129650E+00	-.521441E-01	-.869806E-02	0.166929E-01	0.309749E-01
8.60	-.230131E+00	-.130843E+00	-.536641E-01	-.106721E-01	0.142539E-01	0.275659E-01
8.80	-.228649E+00	-.131956E+00	-.550727E-01	-.125567E-01	0.118923E-01	0.242673E-01
9.00	-.227187E+00	-.132992E+00	-.563792E-01	-.143582E-01	0.958278E-02	0.210868E-01
9.20	-.225750E+00	-.133956E+00	-.575922E-01	-.160862E-01	0.730079E-02	0.180388E-01
9.40	-.224344E+00	-.134851E+00	-.587207E-01	-.177457E-01	0.501634E-02	0.151433E-01
9.60	-.222971E+00	-.135677E+00	-.597700E-01	-.193450E-01	0.269902E-02	0.124290E-01
9.80	-.221635E+00	-.136439E+00	-.607480E-01	-.208900E-01	0.322968E-03	0.991897E-02

10.00	-.220339E+00	-.137137E+00	-.616622E-01	-.223892E-01	-.212223E-02	0.763177E-02
10.20	-.219086E+00	-.137775E+00	-.625175E-01	-.238495E-01	-.462854E-02	0.556646E-02
10.40	-.217875E+00	-.138354E+00	-.633206E-01	-.252796E-01	-.717158E-02	0.370942E-02
10.60	-.216708E+00	-.138875E+00	-.640776E-01	-.266866E-01	-.971460E-02	0.203740E-02
10.80	-.215588E+00	-.139340E+00	-.647945E-01	-.280805E-01	-.122175E-01	0.524469E-03
11.00	-.214514E+00	-.139750E+00	-.654780E-01	-.294700E-01	-.146430E-01	-.853032E-03
11.20	-.213486E+00	-.140109E+00	-.661325E-01	-.308645E-01	-.169595E-01	-.211449E-02
11.40	-.212507E+00	-.140418E+00	-.667641E-01	-.322711E-01	-.191401E-01	-.327607E-02
11.60	-.211574E+00	-.140678E+00	-.673797E-01	-.336947E-01	-.211657E-01	-.435371E-02
11.80	-.210687E+00	-.140891E+00	-.679851E-01	-.351361E-01	-.230271E-01	-.535914E-02
12.00	-.209848E+00	-.141060E+00	-.685859E-01	-.365889E-01	-.247229E-01	-.630493E-02
12.20	-.209053E+00	-.141186E+00	-.691865E-01	-.380455E-01	-.262595E-01	-.720045E-02
12.40	-.208303E+00	-.141274E+00	-.697920E-01	-.394900E-01	-.276480E-01	-.805496E-02
12.60	-.207598E+00	-.141324E+00	-.704065E-01	-.409105E-01	-.289065E-01	-.887854E-02
12.80	-.206934E+00	-.141339E+00	-.710332E-01	-.422922E-01	-.300512E-01	-.967715E-02
13.00	-.206312E+00	-.141322E+00	-.716736E-01	-.436236E-01	-.310996E-01	-.104576E-01
13.50	-.204926E+00	-.141154E+00	-.733357E-01	-.466797E-01	-.333907E-01	-.123537E-01
14.00	-.203762E+00	-.140836E+00	-.750664E-01	-.493104E-01	-.353394E-01	-.141944E-01
14.50	-.202795E+00	-.140405E+00	-.768208E-01	-.515248E-01	-.370508E-01	-.159848E-01
15.00	-.201994E+00	-.139887E+00	-.785441E-01	-.533691E-01	-.385851E-01	-.177131E-01
15.50	-.201335E+00	-.139308E+00	-.801852E-01	-.548992E-01	-.399762E-01	-.193672E-01
16.00	-.200796E+00	-.138692E+00	-.817049E-01	-.561689E-01	-.412429E-01	-.209359E-01
16.50	-.200354E+00	-.138056E+00	-.830765E-01	-.572265E-01	-.424005E-01	-.224095E-01
17.00	-.199992E+00	-.137416E+00	-.842838E-01	-.581128E-01	-.434578E-01	-.237838E-01
17.50	-.199696E+00	-.136786E+00	-.853212E-01	-.588602E-01	-.444222E-01	-.250572E-01
18.00	-.199454E+00	-.136178E+00	-.861883E-01	-.594963E-01	-.452993E-01	-.262273E-01
18.50	-.199257E+00	-.135601E+00	-.868886E-01	-.600416E-01	-.460956E-01	-.272956E-01
19.00	-.199093E+00	-.135058E+00	-.874319E-01	-.605149E-01	-.468159E-01	-.282629E-01
19.50	-.198959E+00	-.134556E+00	-.878283E-01	-.609303E-01	-.474653E-01	-.291333E-01
20.00	-.198847E+00	-.134096E+00	-.880892E-01	-.612992E-01	-.480482E-01	-.299092E-01
20.50	-.198756E+00	-.133679E+00	-.882266E-01	-.616316E-01	-.485696E-01	-.305966E-01
21.00	-.198678E+00	-.133303E+00	-.882529E-01	-.619329E-01	-.490319E-01	-.312009E-01
21.50	-.198613E+00	-.132966E+00	-.881813E-01	-.622093E-01	-.494423E-01	-.317273E-01
22.00	-.198559E+00	-.132668E+00	-.880243E-01	-.624663E-01	-.498043E-01	-.321813E-01
22.50	-.198512E+00	-.132404E+00	-.877933E-01	-.627063E-01	-.501223E-01	-.325683E-01
23.00	-.198473E+00	-.132171E+00	-.874984E-01	-.629314E-01	-.504004E-01	-.328924E-01
23.50	-.198439E+00	-.131966E+00	-.871504E-01	-.631444E-01	-.506444E-01	-.331594E-01
24.00	-.198411E+00	-.131788E+00	-.867579E-01	-.633449E-01	-.508579E-01	-.333719E-01
24.50	-.198385E+00	-.131631E+00	-.863302E-01	-.635342E-01	-.510452E-01	-.335362E-01
25.00	-.198364E+00	-.131494E+00	-.858745E-01	-.637125E-01	-.512105E-01	-.336545E-01
26.00	-.198329E+00	-.131269E+00	-.849019E-01	-.640349E-01	-.514909E-01	-.337739E-01
27.00	-.198301E+00	-.131096E+00	-.838863E-01	-.643053E-01	-.517223E-01	-.337743E-01
28.00	-.198278E+00	-.130963E+00	-.828630E-01	-.645180E-01	-.519240E-01	-.337070E-01
29.00	-.198261E+00	-.130858E+00	-.818585E-01	-.646675E-01	-.521075E-01	-.336405E-01
30.00	-.198245E+00	-.130775E+00	-.808959E-01	-.647449E-01	-.522799E-01	-.336569E-01
32.00	-.198220E+00	-.130653E+00	-.791612E-01	-.646652E-01	-.526052E-01	-.341392E-01
35.00	-.198197E+00	-.130537E+00	-.771807E-01	-.639577E-01	-.530587E-01	-.349827E-01

37.00	-.198185E+00	-.130485E+00	-.762881E-01	-.631891E-01	-.533341E-01	-.349311E-01
40.00	-.198173E+00	-.130429E+00	-.754491E-01	-.619121E-01	-.536951E-01	-.340541E-01
45.00	-.198173E+00	-.130368E+00	-.747998E-01	-.602208E-01	-.541608E-01	-.322918E-01
50.00	-.198173E+00	-.130330E+00	-.745310E-01	-.592440E-01	-.544960E-01	-.314840E-01
55.00	-.198173E+00	-.130306E+00	-.743982E-01	-.586852E-01	-.547462E-01	-.312202E-01
60.00	-.198173E+00	-.130289E+00	-.743223E-01	-.583313E-01	-.549333E-01	-.311193E-01
70.00	-.198173E+00	-.130268E+00	-.742423E-01	-.579063E-01	-.551813E-01	-.310373E-01
80.00	-.198173E+00	-.130268E+00	-.742423E-01	-.576670E-01	-.553250E-01	-.310000E-01
90.00	-.198173E+00	-.130268E+00	-.742423E-01	-.575229E-01	-.554109E-01	-.310000E-01
100.00	-.198173E+00	-.130268E+00	-.742423E-01	-.575229E-01	-.554109E-01	-.310000E-01

TAB. A.1: Orbitales Σ_g , ion Li_2^+ .

R(ua)	(1) ² Σ _g ⁺	(2) ² Σ _g ⁺	(3) ² Σ _g ⁺	(4) ² Σ _g ⁺	(5) ² Σ _g ⁺	(6) ² Σ _g ⁺
5.00	-.208282E+00	-.375331E-01	0.120479E-01	0.672639E-01	0.918269E-01	0.114386E+00
5.20	-.212635E+00	-.450760E-01	0.545402E-02	0.599160E-01	0.847800E-01	0.106842E+00
5.40	-.216168E+00	-.518766E-01	-.562641E-03	0.532144E-01	0.782564E-01	0.998344E-01
5.60	-.218976E+00	-.580218E-01	-.606183E-02	0.470832E-01	0.722042E-01	0.932872E-01
5.80	-.221153E+00	-.635891E-01	-.110961E-01	0.414559E-01	0.665749E-01	0.871409E-01
6.00	-.222780E+00	-.686485E-01	-.157135E-01	0.362755E-01	0.613285E-01	0.813485E-01
6.20	-.223936E+00	-.732586E-01	-.199536E-01	0.314894E-01	0.564304E-01	0.758754E-01
6.40	-.224686E+00	-.774737E-01	-.238507E-01	0.270573E-01	0.518483E-01	0.706923E-01
6.60	-.225090E+00	-.813397E-01	-.274367E-01	0.229403E-01	0.475553E-01	0.657773E-01
6.80	-.225201E+00	-.848954E-01	-.307384E-01	0.191056E-01	0.435276E-01	0.611096E-01
7.00	-.225064E+00	-.881741E-01	-.337781E-01	0.155249E-01	0.397439E-01	0.566699E-01
7.20	-.224720E+00	-.912065E-01	-.365775E-01	0.121715E-01	0.361875E-01	0.524415E-01
7.40	-.224200E+00	-.940164E-01	-.391544E-01	0.902457E-02	0.328406E-01	0.484106E-01
7.60	-.223538E+00	-.966259E-01	-.415269E-01	0.606310E-02	0.296891E-01	0.445621E-01
7.80	-.222756E+00	-.990533E-01	-.437093E-01	0.326867E-02	0.267197E-01	0.408837E-01
8.00	-.221880E+00	-.101315E+00	-.457158E-01	0.625234E-03	0.239192E-01	0.373642E-01
8.20	-.220925E+00	-.103426E+00	-.475600E-01	-.188103E-02	0.212790E-01	0.339940E-01
8.40	-.219911E+00	-.105397E+00	-.492548E-01	-.426384E-02	0.187852E-01	0.307642E-01
8.60	-.218850E+00	-.107241E+00	-.508100E-01	-.653496E-02	0.164300E-01	0.276680E-01
8.80	-.217756E+00	-.108964E+00	-.522373E-01	-.870628E-02	0.142017E-01	0.246977E-01
9.00	-.216641E+00	-.110578E+00	-.535479E-01	-.107869E-01	0.120911E-01	0.218501E-01
9.20	-.215511E+00	-.112086E+00	-.547493E-01	-.127843E-01	0.100887E-01	0.191187E-01
9.40	-.214377E+00	-.113497E+00	-.558523E-01	-.147093E-01	0.818471E-02	0.165027E-01
9.60	-.213246E+00	-.114816E+00	-.568641E-01	-.165671E-01	0.636691E-02	0.140009E-01
9.80	-.212123E+00	-.116047E+00	-.577945E-01	-.183645E-01	0.462452E-02	0.116125E-01
10.00	-.211015E+00	-.117196E+00	-.586498E-01	-.201088E-01	0.294624E-02	0.934024E-02
10.20	-.209924E+00	-.118264E+00	-.594378E-01	-.218028E-01	0.131718E-02	0.718918E-02
10.40	-.208855E+00	-.119257E+00	-.601652E-01	-.234542E-01	-.275200E-03	0.516280E-02
10.60	-.207812E+00	-.120177E+00	-.608381E-01	-.250641E-01	-.184708E-02	0.326892E-02
10.80	-.206797E+00	-.121026E+00	-.614623E-01	-.266373E-01	-.340833E-02	0.151067E-02
11.00	-.205814E+00	-.121810E+00	-.620436E-01	-.281766E-01	-.496858E-02	-.110576E-03
11.20	-.204861E+00	-.122527E+00	-.625872E-01	-.296842E-01	-.652815E-02	-.160015E-02
11.40	-.203943E+00	-.123183E+00	-.630962E-01	-.311602E-01	-.808118E-02	-.297018E-02
11.60	-.203061E+00	-.123779E+00	-.635756E-01	-.326066E-01	-.962157E-02	-.423357E-02
11.80	-.202213E+00	-.124316E+00	-.640290E-01	-.340230E-01	-.111380E-01	-.540502E-02
12.00	-.201402E+00	-.124797E+00	-.644611E-01	-.354101E-01	-.126241E-01	-.649907E-02
12.20	-.200627E+00	-.125224E+00	-.648731E-01	-.367671E-01	-.140721E-01	-.752608E-02
12.40	-.199888E+00	-.125599E+00	-.652693E-01	-.380943E-01	-.154783E-01	-.849627E-02
12.60	-.199186E+00	-.125924E+00	-.656527E-01	-.393887E-01	-.168397E-01	-.941671E-02
12.80	-.198519E+00	-.126201E+00	-.660243E-01	-.406503E-01	-.181543E-01	-.102933E-01
13.00	-.197887E+00	-.126432E+00	-.663880E-01	-.418770E-01	-.194230E-01	-.111300E-01
13.50	-.196457E+00	-.126820E+00	-.672731E-01	-.447811E-01	-.223921E-01	-.130801E-01
14.00	-.195227E+00	-.126965E+00	-.681495E-01	-.474335E-01	-.250865E-01	-.148585E-01
14.50	-.194181E+00	-.126899E+00	-.690401E-01	-.498111E-01	-.275291E-01	-.164991E-01
15.00	-.193298E+00	-.126652E+00	-.699621E-01	-.518981E-01	-.297461E-01	-.180271E-01

16.00	-.191943E+00	-.125738E+00	-.719223E-01	-.551993E-01	-.335933E-01	-.208113E-01
16.50	-.191433E+00	-.125126E+00	-.729434E-01	-.564424E-01	-.352644E-01	-.220914E-01
17.00	-.191012E+00	-.124445E+00	-.739694E-01	-.574504E-01	-.367884E-01	-.233064E-01
17.50	-.190666E+00	-.123716E+00	-.749758E-01	-.582588E-01	-.381818E-01	-.244628E-01
18.00	-.190381E+00	-.122957E+00	-.759400E-01	-.589030E-01	-.394530E-01	-.255620E-01
18.50	-.190146E+00	-.122185E+00	-.768435E-01	-.594135E-01	-.406155E-01	-.266035E-01
19.00	-.189954E+00	-.121414E+00	-.776711E-01	-.598201E-01	-.416761E-01	-.275891E-01
19.50	-.189796E+00	-.120655E+00	-.784129E-01	-.601449E-01	-.426429E-01	-.285179E-01
20.00	-.189664E+00	-.119918E+00	-.790632E-01	-.604082E-01	-.435242E-01	-.293892E-01
20.50	-.189556E+00	-.119211E+00	-.796182E-01	-.606232E-01	-.443242E-01	-.302052E-01
21.00	-.189466E+00	-.118539E+00	-.800781E-01	-.608041E-01	-.450511E-01	-.309651E-01
21.50	-.189390E+00	-.117906E+00	-.804450E-01	-.609590E-01	-.457080E-01	-.316700E-01
22.00	-.189327E+00	-.117316E+00	-.807217E-01	-.610957E-01	-.463027E-01	-.323227E-01
22.50	-.189273E+00	-.116768E+00	-.809134E-01	-.612204E-01	-.468384E-01	-.329254E-01
23.00	-.189227E+00	-.116265E+00	-.810253E-01	-.613363E-01	-.473203E-01	-.334793E-01
23.50	-.189189E+00	-.115806E+00	-.810641E-01	-.614481E-01	-.477541E-01	-.339881E-01
24.00	-.189155E+00	-.115389E+00	-.810353E-01	-.615553E-01	-.481443E-01	-.344523E-01
24.50	-.189126E+00	-.115012E+00	-.809454E-01	-.616614E-01	-.484944E-01	-.348764E-01
25.00	-.189102E+00	-.114674E+00	-.808026E-01	-.617646E-01	-.488106E-01	-.352606E-01
26.00	-.189029E+00	-.112179E+00	-.793146E-01	-.612496E-01	-.486266E-01	-.354856E-01
27.00	-.189029E+00	-.113643E+00	-.798208E-01	-.621518E-01	-.497978E-01	-.364578E-01
28.00	-.189003E+00	-.113282E+00	-.791663E-01	-.623163E-01	-.501713E-01	-.368813E-01
29.00	-.188984E+00	-.112999E+00	-.784576E-01	-.624476E-01	-.504906E-01	-.372116E-01
30.00	-.188967E+00	-.112774E+00	-.777279E-01	-.625379E-01	-.507679E-01	-.374669E-01
32.00	-.188941E+00	-.112454E+00	-.763049E-01	-.625689E-01	-.512299E-01	-.378409E-01
35.00	-.188916E+00	-.112166E+00	-.745182E-01	-.621882E-01	-.517492E-01	-.384072E-01
37.00	-.188905E+00	-.112047E+00	-.736455E-01	-.616685E-01	-.519965E-01	-.390525E-01
40.00	-.188891E+00	-.111923E+00	-.727764E-01	-.606344E-01	-.522194E-01	-.403334E-01
45.00	-.188879E+00	-.111799E+00	-.720840E-01	-.588600E-01	-.522120E-01	-.419370E-01
50.00	-.188872E+00	-.111726E+00	-.718122E-01	-.576352E-01	-.518742E-01	-.423192E-01
55.00	-.188867E+00	-.111679E+00	-.716883E-01	-.569753E-01	-.515133E-01	-.416863E-01
60.00	-.188865E+00	-.111648E+00	-.716224E-01	-.566274E-01	-.512894E-01	-.405174E-01
70.00	-.188862E+00	-.111610E+00	-.715563E-01	-.563013E-01	-.511133E-01	-.385803E-01
80.00	-.188861E+00	-.111590E+00	-.715270E-01	-.561540E-01	-.510510E-01	-.379370E-01
90.00	-.188861E+00	-.111579E+00	-.715270E-01	-.560749E-01	-.510169E-01	-.377419E-01
100.00	-.188861E+00	-.111579E+00	-.715030E-01	-.560300E-01	-.509950E-01	-.376590E-01

TAB. A.2: Orbitales Σ_g , ion Na_2^+ .

R(ua)	(1) ² Σ _g ⁺	(2) ² Σ _g ⁺	(3) ² Σ _g ⁺	(4) ² Σ _g ⁺	(5) ² Σ _g ⁺	(6) ² Σ _g ⁺
5.20	-.149499E+00	-.239171E-01	-.752209E-02	0.379259E-01	0.722089E-01	0.898289E-01
5.40	-.155004E+00	-.263380E-01	-.174740E-01	0.331670E-01	0.669560E-01	0.843030E-01
5.80	-.164981E+00	-.342655E-01	-.310245E-01	0.245755E-01	0.576235E-01	0.739395E-01
6.20	-.173204E+00	-.474115E-01	-.354475E-01	0.170485E-01	0.495385E-01	0.644705E-01
6.40	-.176607E+00	-.529040E-01	-.374940E-01	0.136360E-01	0.458850E-01	0.600520E-01
6.60	-.179547E+00	-.577976E-01	-.394216E-01	0.104354E-01	0.424594E-01	0.558314E-01
6.80	-.182045E+00	-.621764E-01	-.412304E-01	0.742957E-02	0.392396E-01	0.517976E-01
7.00	-.184131E+00	-.661104E-01	-.429234E-01	0.459962E-02	0.362056E-01	0.479426E-01
7.20	-.185838E+00	-.696638E-01	-.445038E-01	0.192722E-02	0.333402E-01	0.442582E-01
7.40	-.187200E+00	-.728894E-01	-.459784E-01	-.601383E-03	0.306256E-01	0.407366E-01
7.60	-.188253E+00	-.758303E-01	-.473513E-01	-.300229E-02	0.280477E-01	0.373717E-01
7.80	-.189030E+00	-.785259E-01	-.486269E-01	-.528491E-02	0.255961E-01	0.341611E-01
8.00	-.189561E+00	-.810080E-01	-.498100E-01	-.746000E-02	0.232590E-01	0.310980E-01
8.20	-.189877E+00	-.833036E-01	-.509076E-01	-.953864E-02	0.210294E-01	0.281804E-01
8.40	-.190003E+00	-.854353E-01	-.519233E-01	-.115303E-01	0.188977E-01	0.254047E-01
8.60	-.189965E+00	-.874228E-01	-.528648E-01	-.134418E-01	0.168562E-01	0.227662E-01
8.80	-.189783E+00	-.892825E-01	-.537395E-01	-.152835E-01	0.148985E-01	0.202625E-01
9.00	-.189478E+00	-.910262E-01	-.545532E-01	-.170612E-01	0.130158E-01	0.178898E-01
9.20	-.189068E+00	-.926662E-01	-.553112E-01	-.187812E-01	0.111998E-01	0.156458E-01
9.40	-.188568E+00	-.942102E-01	-.560202E-01	-.204472E-01	0.944380E-02	0.135258E-01
9.60	-.187992E+00	-.956678E-01	-.566838E-01	-.220648E-01	0.774219E-02	0.115272E-01
9.80	-.187352E+00	-.970430E-01	-.573040E-01	-.236350E-01	0.608798E-02	0.964698E-02
10.00	-.186661E+00	-.983415E-01	-.578855E-01	-.251615E-01	0.447847E-02	0.787847E-02
10.20	-.185927E+00	-.995687E-01	-.584307E-01	-.266457E-01	0.290927E-02	0.621727E-02
10.40	-.185158E+00	-.100729E+00	-.589407E-01	-.280887E-01	0.138032E-02	0.465632E-02
10.60	-.184363E+00	-.101824E+00	-.594162E-01	-.294942E-01	-.109182E-03	0.318782E-02
10.80	-.183549E+00	-.102858E+00	-.598608E-01	-.308618E-01	-.155678E-02	0.180422E-02
11.00	-.182722E+00	-.103834E+00	-.602748E-01	-.321938E-01	-.296178E-02	0.497219E-03
11.40	-.181045E+00	-.105618E+00	-.610162E-01	-.347562E-01	-.564515E-02	-.191315E-02
11.60	-.180206E+00	-.106432E+00	-.613461E-01	-.359891E-01	-.692212E-02	-.302712E-02
11.80	-.179372E+00	-.107196E+00	-.616497E-01	-.371917E-01	-.815870E-02	-.408770E-02
12.00	-.178544E+00	-.107911E+00	-.619293E-01	-.383653E-01	-.935328E-02	-.509828E-02
12.20	-.177727E+00	-.108580E+00	-.621841E-01	-.395091E-01	-.105101E-01	-.606309E-02
12.40	-.176922E+00	-.109203E+00	-.624172E-01	-.406262E-01	-.116292E-01	-.698421E-02
12.60	-.176134E+00	-.109783E+00	-.626296E-01	-.417166E-01	-.127136E-01	-.786462E-02
12.80	-.175361E+00	-.110320E+00	-.628222E-01	-.427812E-01	-.137642E-01	-.870917E-02
13.00	-.174608E+00	-.110816E+00	-.629956E-01	-.438206E-01	-.147826E-01	-.951759E-02
13.50	-.172812E+00	-.111883E+00	-.633543E-01	-.463123E-01	-.171983E-01	-.114033E-01
14.00	-.171157E+00	-.112718E+00	-.636211E-01	-.486641E-01	-.194451E-01	-.131211E-01
14.50	-.169650E+00	-.113337E+00	-.638133E-01	-.508843E-01	-.215373E-01	-.147013E-01
15.00	-.168293E+00	-.113758E+00	-.639433E-01	-.529803E-01	-.234863E-01	-.161713E-01
15.50	-.167084E+00	-.113998E+00	-.640254E-01	-.549604E-01	-.253014E-01	-.175534E-01
16.00	-.166017E+00	-.114074E+00	-.640702E-01	-.568252E-01	-.269902E-01	-.188692E-01
16.50	-.165084E+00	-.114003E+00	-.640924E-01	-.585724E-01	-.285614E-01	-.201364E-01
17.00	-.164276E+00	-.113806E+00	-.641106E-01	-.601916E-01	-.300216E-01	-.213706E-01

17.50	-.163578E+00	-.113499E+00	-.641671E-01	-.616451E-01	-.313781E-01	-.225821E-01
18.00	-.162981E+00	-.113100E+00	-.644162E-01	-.627822E-01	-.326392E-01	-.237772E-01
18.50	-.162473E+00	-.112626E+00	-.651603E-01	-.633053E-01	-.338123E-01	-.249563E-01
19.00	-.162042E+00	-.112094E+00	-.662110E-01	-.634060E-01	-.349040E-01	-.261160E-01
19.50	-.161676E+00	-.111517E+00	-.672744E-01	-.633814E-01	-.359234E-01	-.272454E-01
20.00	-.161369E+00	-.110912E+00	-.682719E-01	-.633149E-01	-.368759E-01	-.283369E-01
20.50	-.161109E+00	-.110287E+00	-.691842E-01	-.632302E-01	-.377702E-01	-.293792E-01
21.00	-.160891E+00	-.109656E+00	-.700068E-01	-.631368E-01	-.386128E-01	-.303638E-01
21.50	-.160707E+00	-.109026E+00	-.707397E-01	-.630407E-01	-.394087E-01	-.312817E-01
22.00	-.160552E+00	-.108405E+00	-.713835E-01	-.629435E-01	-.401645E-01	-.321305E-01
22.50	-.160421E+00	-.107800E+00	-.719416E-01	-.628476E-01	-.408846E-01	-.329076E-01
23.00	-.160310E+00	-.107217E+00	-.724170E-01	-.627550E-01	-.415740E-01	-.336110E-01
23.50	-.160217E+00	-.106659E+00	-.728125E-01	-.626675E-01	-.422345E-01	-.342435E-01
24.00	-.160137E+00	-.106130E+00	-.731336E-01	-.625846E-01	-.428706E-01	-.348076E-01
24.50	-.160069E+00	-.105632E+00	-.733836E-01	-.625066E-01	-.434836E-01	-.353056E-01
26.00	-.159916E+00	-.104334E+00	-.737433E-01	-.623093E-01	-.451923E-01	-.364543E-01
27.00	-.159846E+00	-.103631E+00	-.737031E-01	-.622051E-01	-.462281E-01	-.369731E-01
28.00	-.159791E+00	-.103046E+00	-.734825E-01	-.621225E-01	-.471795E-01	-.373325E-01
29.00	-.159749E+00	-.102568E+00	-.731169E-01	-.620579E-01	-.480459E-01	-.375639E-01
30.00	-.159715E+00	-.102179E+00	-.726393E-01	-.620083E-01	-.488263E-01	-.376953E-01
32.00	-.159665E+00	-.101612E+00	-.714711E-01	-.619451E-01	-.501301E-01	-.377661E-01
35.00	-.159618E+00	-.101110E+00	-.695412E-01	-.619062E-01	-.514752E-01	-.376412E-01
37.00	-.159597E+00	-.100909E+00	-.683268E-01	-.618938E-01	-.519928E-01	-.374978E-01
40.00	-.159574E+00	-.100713E+00	-.667991E-01	-.618711E-01	-.522491E-01	-.373911E-01
45.00	-.159552E+00	-.100526E+00	-.651931E-01	-.617921E-01	-.515851E-01	-.386001E-01
50.00	-.159539E+00	-.100420E+00	-.644659E-01	-.616959E-01	-.502579E-01	-.395749E-01
55.00	-.159531E+00	-.100354E+00	-.641518E-01	-.616198E-01	-.489928E-01	-.396918E-01
60.00	-.159526E+00	-.100310E+00	-.640027E-01	-.615657E-01	-.481267E-01	-.390947E-01
70.00	-.159521E+00	-.100258E+00	-.638715E-01	-.615005E-01	-.473655E-01	-.371725E-01
80.00	-.159518E+00	-.100230E+00	-.638171E-01	-.614631E-01	-.471041E-01	-.358921E-01
90.00	-.159517E+00	-.100214E+00	-.637910E-01	-.614410E-01	-.469790E-01	-.353410E-01
100.00	-.159517E+00	-.100204E+00	-.637761E-01	-.614271E-01	-.469061E-01	-.350801E-01

TAB. A.3: Orbitales Σ_g , ion K_2^+ .

R(ua)	(1) ² Σ _g ⁺	(2) ² Σ _g ⁺	(3) ² Σ _g ⁺	(4) ² Σ _g ⁺	(5) ² Σ _g ⁺	(6) ² Σ _g ⁺
5.00	-.134690E+00	-.397171E-01	0.179549E-01	0.407109E-01	0.768229E-01	0.897829E-01
5.20	-.138212E+00	-.410633E-01	0.923473E-02	0.352547E-01	0.710467E-01	0.852157E-01
5.40	-.142084E+00	-.424811E-01	0.142894E-03	0.304319E-01	0.658739E-01	0.806579E-01
5.60	-.146145E+00	-.439777E-01	-.870668E-02	0.260833E-01	0.611833E-01	0.761503E-01
5.80	-.150254E+00	-.455734E-01	-.169324E-01	0.220836E-01	0.568756E-01	0.717266E-01
6.00	-.154292E+00	-.473003E-01	-.243333E-01	0.183577E-01	0.528807E-01	0.674087E-01
6.20	-.158163E+00	-.492098E-01	-.308048E-01	0.148592E-01	0.491492E-01	0.632112E-01
6.40	-.161789E+00	-.513762E-01	-.362862E-01	0.115608E-01	0.456468E-01	0.591448E-01
6.60	-.165121E+00	-.538749E-01	-.407469E-01	0.844110E-02	0.423511E-01	0.552161E-01
6.80	-.168126E+00	-.567113E-01	-.442393E-01	0.548672E-02	0.392397E-01	0.514277E-01
7.00	-.170792E+00	-.597780E-01	-.469340E-01	0.268702E-02	0.362990E-01	0.477840E-01
7.20	-.173117E+00	-.629073E-01	-.490563E-01	0.297328E-04	0.335147E-01	0.442837E-01
7.40	-.175111E+00	-.659644E-01	-.507964E-01	-.249243E-02	0.308756E-01	0.409266E-01
7.60	-.176789E+00	-.688783E-01	-.522753E-01	-.489034E-02	0.283707E-01	0.377117E-01
7.80	-.178173E+00	-.716182E-01	-.535682E-01	-.717217E-02	0.259888E-01	0.346368E-01
8.00	-.179286E+00	-.741792E-01	-.547192E-01	-.934721E-02	0.237208E-01	0.316988E-01
8.20	-.180151E+00	-.765697E-01	-.557567E-01	-.114237E-01	0.215583E-01	0.288943E-01
8.40	-.180792E+00	-.787997E-01	-.566997E-01	-.134117E-01	0.194933E-01	0.262203E-01
8.60	-.181232E+00	-.808832E-01	-.575592E-01	-.153182E-01	0.175168E-01	0.236738E-01
8.80	-.181494E+00	-.828317E-01	-.583457E-01	-.171497E-01	0.156223E-01	0.212513E-01
9.00	-.181598E+00	-.846589E-01	-.590669E-01	-.189109E-01	0.138031E-01	0.189501E-01
9.20	-.181563E+00	-.863747E-01	-.597267E-01	-.206087E-01	0.120533E-01	0.167663E-01
9.40	-.181406E+00	-.879880E-01	-.603320E-01	-.222460E-01	0.103680E-01	0.146980E-01
9.60	-.181143E+00	-.895076E-01	-.608856E-01	-.238266E-01	0.873942E-02	0.127414E-01
9.80	-.180788E+00	-.909406E-01	-.613916E-01	-.253536E-01	0.716537E-02	0.108934E-01
10.00	-.180353E+00	-.922933E-01	-.618533E-01	-.268283E-01	0.564072E-02	0.914972E-02
10.20	-.179850E+00	-.935704E-01	-.622724E-01	-.282544E-01	0.416060E-02	0.750760E-02
10.40	-.179292E+00	-.947786E-01	-.626536E-01	-.296326E-01	0.272338E-02	0.596238E-02
10.60	-.178684E+00	-.959203E-01	-.629993E-01	-.309663E-01	0.132766E-02	0.450766E-02
10.80	-.178037E+00	-.970008E-01	-.633118E-01	-.322568E-01	-.307664E-04	0.313923E-02
11.00	-.177357E+00	-.980229E-01	-.635939E-01	-.335049E-01	-.134992E-02	0.185008E-02
11.20	-.176653E+00	-.989886E-01	-.638476E-01	-.347136E-01	-.263264E-02	0.634357E-03
11.40	-.175928E+00	-.999016E-01	-.640766E-01	-.358846E-01	-.387759E-02	-.513594E-03
11.60	-.175188E+00	-.100765E+00	-.642823E-01	-.370193E-01	-.508629E-02	-.160029E-02
11.80	-.174439E+00	-.101580E+00	-.644661E-01	-.381181E-01	-.625908E-02	-.263108E-02
12.00	-.173685E+00	-.102348E+00	-.646312E-01	-.391842E-01	-.739621E-02	-.360921E-02
12.20	-.172929E+00	-.103072E+00	-.647788E-01	-.402188E-01	-.849975E-02	-.454175E-02
12.40	-.172175E+00	-.103753E+00	-.649097E-01	-.412227E-01	-.956970E-02	-.543070E-02
12.60	-.171426E+00	-.104392E+00	-.650269E-01	-.421969E-01	-.106079E-01	-.628091E-02
12.80	-.170684E+00	-.104991E+00	-.651311E-01	-.431431E-01	-.116141E-01	-.709513E-02
13.00	-.169952E+00	-.105550E+00	-.652230E-01	-.440610E-01	-.125910E-01	-.787804E-02
13.50	-.168177E+00	-.106785E+00	-.654060E-01	-.462460E-01	-.149090E-01	-.970997E-02
14.00	-.166501E+00	-.107796E+00	-.655327E-01	-.482797E-01	-.170627E-01	-.113947E-01
14.50	-.164942E+00	-.108597E+00	-.656126E-01	-.501766E-01	-.190646E-01	-.129656E-01
15.00	-.163508E+00	-.109199E+00	-.656556E-01	-.519486E-01	-.209276E-01	-.144476E-01

15.50	-.162206E+00	-.109615E+00	-.656677E-01	-.536057E-01	-.226617E-01	-.158647E-01
16.00	-.161037E+00	-.109858E+00	-.656559E-01	-.551559E-01	-.242749E-01	-.172339E-01
16.50	-.159998E+00	-.109944E+00	-.656279E-01	-.566069E-01	-.257759E-01	-.185699E-01
17.00	-.159083E+00	-.109887E+00	-.655928E-01	-.579618E-01	-.271728E-01	-.198828E-01
17.50	-.158285E+00	-.109702E+00	-.655590E-01	-.592190E-01	-.284730E-01	-.211750E-01
18.00	-.156999E+00	-.106363E+00	-.845124E-01	-.638324E-01	-.579844E-01	-.283504E-01
18.50	-.156999E+00	-.109020E+00	-.655605E-01	-.614045E-01	-.308195E-01	-.236755E-01
19.00	-.156492E+00	-.108556E+00	-.656477E-01	-.622897E-01	-.318847E-01	-.248617E-01
19.50	-.156061E+00	-.108030E+00	-.658481E-01	-.629851E-01	-.328941E-01	-.259861E-01
20.00	-.155695E+00	-.107459E+00	-.661978E-01	-.634568E-01	-.338568E-01	-.270368E-01
20.50	-.155387E+00	-.106855E+00	-.666787E-01	-.637267E-01	-.347827E-01	-.280047E-01
21.00	-.155126E+00	-.106232E+00	-.672302E-01	-.638592E-01	-.356802E-01	-.288842E-01
21.50	-.154907E+00	-.105599E+00	-.677913E-01	-.639163E-01	-.365543E-01	-.296733E-01
22.00	-.154722E+00	-.104966E+00	-.683315E-01	-.639335E-01	-.374085E-01	-.303745E-01
22.50	-.154567E+00	-.104341E+00	-.688311E-01	-.639311E-01	-.382431E-01	-.309901E-01
23.00	-.154435E+00	-.103730E+00	-.692822E-01	-.639202E-01	-.390592E-01	-.315282E-01
23.50	-.154324E+00	-.103138E+00	-.696825E-01	-.639055E-01	-.398545E-01	-.319935E-01
24.00	-.154229E+00	-.102569E+00	-.700295E-01	-.638905E-01	-.406255E-01	-.323945E-01
24.50	-.154148E+00	-.102026E+00	-.703236E-01	-.638776E-01	-.413716E-01	-.327386E-01
25.00	-.154078E+00	-.101512E+00	-.705659E-01	-.638659E-01	-.420909E-01	-.330319E-01
26.00	-.153967E+00	-.100574E+00	-.708989E-01	-.638499E-01	-.434409E-01	-.334889E-01
27.00	-.153884E+00	-.997605E-01	-.710465E-01	-.638435E-01	-.446715E-01	-.338125E-01
28.00	-.153820E+00	-.990689E-01	-.710289E-01	-.638429E-01	-.457799E-01	-.340359E-01
29.00	-.153770E+00	-.984894E-01	-.708704E-01	-.638454E-01	-.467684E-01	-.341884E-01
30.00	-.153731E+00	-.980102E-01	-.705992E-01	-.638492E-01	-.476412E-01	-.342932E-01
32.00	-.153674E+00	-.972969E-01	-.698229E-01	-.638489E-01	-.490619E-01	-.344279E-01
35.00	-.153621E+00	-.966498E-01	-.684338E-01	-.637938E-01	-.504628E-01	-.346098E-01
37.00	-.153598E+00	-.963869E-01	-.675719E-01	-.636929E-01	-.509659E-01	-.347959E-01
40.00	-.153573E+00	-.961336E-01	-.665936E-01	-.634236E-01	-.511596E-01	-.352306E-01
45.00	-.153548E+00	-.958970E-01	-.658170E-01	-.628360E-01	-.503410E-01	-.361800E-01
50.00	-.153533E+00	-.957655E-01	-.655675E-01	-.624325E-01	-.488685E-01	-.368095E-01
55.00	-.153525E+00	-.956842E-01	-.654722E-01	-.622282E-01	-.475272E-01	-.369182E-01
60.00	-.153520E+00	-.956310E-01	-.654270E-01	-.621220E-01	-.466370E-01	-.367430E-01
70.00	-.153514E+00	-.955677E-01	-.653817E-01	-.620237E-01	-.458317E-01	-.364627E-01
80.00	-.153511E+00	-.955450E-01	-.653600E-01	-.620000E-01	-.456000E-01	-.364132E-01
90.00	-.153510E+00	-.955140E-01	-.653470E-01	-.619570E-01	-.453690E-01	-.363980E-01
100.00	-.153510E+00	-.955021E-01	-.653391E-01	-.619441E-01	-.452771E-01	-.363961E-01

TAB. A.4: Orbitales Σ_g , ion Rb_2^+ .

R(ua)	(1) ² Σ _g ⁺	(2) ² Σ _g ⁺	(3) ² Σ _g ⁺	(4) ² Σ _g ⁺	(5) ² Σ _g ⁺	(6) ² Σ _g ⁺
5.00	-.131460E+00	-.605802E-01	0.189408E-01	0.310668E-01	0.712968E-01	0.765788E-01
5.20	-.130602E+00	-.643570E-01	0.162190E-01	0.247320E-01	0.662980E-01	0.748060E-01
5.40	-.130595E+00	-.681872E-01	0.102618E-01	0.202958E-01	0.616118E-01	0.724318E-01
5.60	-.131397E+00	-.717801E-01	0.231392E-02	0.173829E-01	0.573259E-01	0.696539E-01
5.80	-.132960E+00	-.749644E-01	-.582344E-02	0.148136E-01	0.534076E-01	0.666276E-01
6.00	-.135197E+00	-.776742E-01	-.134672E-01	0.122948E-01	0.498028E-01	0.634628E-01
6.20	-.137971E+00	-.799256E-01	-.203696E-01	0.978544E-02	0.464594E-01	0.602424E-01
6.40	-.141113E+00	-.817800E-01	-.264680E-01	0.729800E-02	0.433380E-01	0.570190E-01
6.60	-.144447E+00	-.833165E-01	-.317865E-01	0.484752E-02	0.404025E-01	0.538315E-01
6.80	-.147816E+00	-.846094E-01	-.364014E-01	0.245060E-02	0.376266E-01	0.507046E-01
7.00	-.151092E+00	-.857158E-01	-.404068E-01	0.117239E-03	0.349882E-01	0.476532E-01
7.20	-.154179E+00	-.866771E-01	-.439001E-01	-.214708E-02	0.324719E-01	0.446899E-01
7.40	-.157017E+00	-.875219E-01	-.469709E-01	-.433890E-02	0.300641E-01	0.418221E-01
7.60	-.159569E+00	-.882706E-01	-.496956E-01	-.645665E-02	0.277544E-01	0.390544E-01
7.80	-.161817E+00	-.889409E-01	-.521359E-01	-.850290E-02	0.255361E-01	0.363901E-01
8.00	-.163763E+00	-.895458E-01	-.543408E-01	-.104768E-01	0.234032E-01	0.338312E-01
8.20	-.165414E+00	-.900984E-01	-.563474E-01	-.123824E-01	0.213516E-01	0.313786E-01
8.40	-.166789E+00	-.906087E-01	-.581817E-01	-.142207E-01	0.193773E-01	0.290313E-01
8.60	-.167904E+00	-.910863E-01	-.598643E-01	-.159943E-01	0.174787E-01	0.267897E-01
8.80	-.168784E+00	-.915418E-01	-.614098E-01	-.177068E-01	0.156512E-01	0.246522E-01
9.00	-.169448E+00	-.919814E-01	-.628304E-01	-.193594E-01	0.138936E-01	0.226166E-01
9.20	-.169921E+00	-.924112E-01	-.641352E-01	-.209542E-01	0.122028E-01	0.206808E-01
9.40	-.170221E+00	-.928354E-01	-.653304E-01	-.224934E-01	0.105756E-01	0.188436E-01
9.60	-.170368E+00	-.932581E-01	-.664221E-01	-.239771E-01	0.901186E-02	0.171009E-01
9.80	-.170381E+00	-.936816E-01	-.674186E-01	-.254096E-01	0.750642E-02	0.154504E-01
10.00	-.170275E+00	-.941088E-01	-.683228E-01	-.267888E-01	0.605821E-02	0.138872E-01
10.20	-.170066E+00	-.945387E-01	-.691427E-01	-.281187E-01	0.466326E-02	0.124093E-01
10.40	-.169766E+00	-.949733E-01	-.698803E-01	-.293993E-01	0.331969E-02	0.110097E-01
10.60	-.169389E+00	-.954122E-01	-.705432E-01	-.306312E-01	0.202476E-02	0.968476E-02
10.80	-.168945E+00	-.958562E-01	-.711352E-01	-.318162E-01	0.774822E-03	0.842882E-02
11.00	-.168446E+00	-.963057E-01	-.716617E-01	-.329557E-01	-.432660E-03	0.723534E-02
11.20	-.167898E+00	-.967581E-01	-.721281E-01	-.340521E-01	-.160009E-02	0.609791E-02
11.40	-.167311E+00	-.972148E-01	-.725378E-01	-.351048E-01	-.273178E-02	0.501022E-02
11.60	-.166693E+00	-.976729E-01	-.728969E-01	-.361179E-01	-.382889E-02	0.396611E-02
11.80	-.166050E+00	-.981315E-01	-.732095E-01	-.370915E-01	-.489352E-02	0.295848E-02
12.00	-.165387E+00	-.985896E-01	-.734806E-01	-.380276E-01	-.592763E-02	0.198337E-02
12.20	-.164710E+00	-.990461E-01	-.737151E-01	-.389291E-01	-.693511E-02	0.103489E-02
12.40	-.164024E+00	-.994977E-01	-.739167E-01	-.397967E-01	-.791574E-02	0.108263E-03
12.60	-.163332E+00	-.999432E-01	-.740902E-01	-.406332E-01	-.887320E-02	-.798197E-03
12.80	-.162639E+00	-.100380E+00	-.742381E-01	-.414381E-01	-.980610E-02	-.168910E-02
13.00	-.161946E+00	-.100808E+00	-.743640E-01	-.422160E-01	-.107190E-01	-.256596E-02
13.50	-.160235E+00	-.101821E+00	-.746032E-01	-.440412E-01	-.129122E-01	-.469917E-02
14.00	-.158577E+00	-.102738E+00	-.747619E-01	-.457159E-01	-.149939E-01	-.675493E-02
14.50	-.156992E+00	-.103539E+00	-.748665E-01	-.472565E-01	-.169735E-01	-.872947E-02
15.00	-.155498E+00	-.104215E+00	-.749368E-01	-.486748E-01	-.188568E-01	-.106208E-01

15.50	-.154103E+00	-.104756E+00	-.749842E-01	-.499862E-01	-.206432E-01	-.124372E-01
16.00	-.152815E+00	-.105161E+00	-.750181E-01	-.512001E-01	-.223311E-01	-.141981E-01
16.50	-.151636E+00	-.105432E+00	-.750457E-01	-.523267E-01	-.239157E-01	-.159247E-01
17.00	-.150567E+00	-.105572E+00	-.750700E-01	-.533750E-01	-.253960E-01	-.176390E-01
17.50	-.149607E+00	-.105589E+00	-.750948E-01	-.543518E-01	-.267668E-01	-.193568E-01
18.00	-.148752E+00	-.105491E+00	-.751241E-01	-.552651E-01	-.280281E-01	-.210801E-01
18.50	-.147998E+00	-.105289E+00	-.751589E-01	-.561199E-01	-.291779E-01	-.228029E-01
19.00	-.147336E+00	-.104994E+00	-.752018E-01	-.569238E-01	-.302208E-01	-.245118E-01
19.50	-.146759E+00	-.104619E+00	-.752534E-01	-.576804E-01	-.311604E-01	-.261884E-01
20.00	-.146260E+00	-.104176E+00	-.753130E-01	-.583940E-01	-.320010E-01	-.278170E-01
20.50	-.145829E+00	-.103678E+00	-.753822E-01	-.590682E-01	-.327502E-01	-.293852E-01
21.00	-.145460E+00	-.103137E+00	-.754585E-01	-.597045E-01	-.334155E-01	-.308815E-01
21.50	-.145144E+00	-.102564E+00	-.755427E-01	-.603047E-01	-.340037E-01	-.322987E-01
22.00	-.144873E+00	-.101968E+00	-.756314E-01	-.608694E-01	-.345224E-01	-.336334E-01
22.50	-.144644E+00	-.101362E+00	-.757228E-01	-.614008E-01	-.350128E-01	-.348478E-01
23.00	-.144447E+00	-.100750E+00	-.758168E-01	-.618958E-01	-.360728E-01	-.353518E-01
23.50	-.144280E+00	-.100140E+00	-.759103E-01	-.623553E-01	-.371603E-01	-.356933E-01
24.00	-.144138E+00	-.995407E-01	-.760027E-01	-.627787E-01	-.381737E-01	-.359827E-01
24.50	-.144015E+00	-.989534E-01	-.760914E-01	-.631654E-01	-.391164E-01	-.362264E-01
25.00	-.143911E+00	-.983843E-01	-.761763E-01	-.635133E-01	-.399903E-01	-.364293E-01
26.00	-.143746E+00	-.973131E-01	-.763291E-01	-.640971E-01	-.415551E-01	-.367271E-01
27.00	-.143623E+00	-.963428E-01	-.764568E-01	-.645298E-01	-.429028E-01	-.369058E-01
28.00	-.143530E+00	-.954836E-01	-.765576E-01	-.648166E-01	-.440666E-01	-.369916E-01
29.00	-.143459E+00	-.947369E-01	-.766319E-01	-.649649E-01	-.450709E-01	-.370089E-01
30.00	-.143404E+00	-.940965E-01	-.766855E-01	-.649885E-01	-.459395E-01	-.369795E-01
32.00	-.143326E+00	-.931056E-01	-.767426E-01	-.647196E-01	-.473316E-01	-.368566E-01
35.00	-.143254E+00	-.921707E-01	-.767697E-01	-.637747E-01	-.487337E-01	-.367377E-01
37.00	-.143224E+00	-.917871E-01	-.767751E-01	-.629761E-01	-.493001E-01	-.367861E-01
40.00	-.143192E+00	-.914179E-01	-.767819E-01	-.617819E-01	-.496849E-01	-.370289E-01
45.00	-.143160E+00	-.910755E-01	-.767955E-01	-.602675E-01	-.492745E-01	-.375805E-01
50.00	-.143143E+00	-.908874E-01	-.768074E-01	-.594634E-01	-.480354E-01	-.380464E-01
55.00	-.143132E+00	-.907738E-01	-.768148E-01	-.590958E-01	-.466488E-01	-.383788E-01
60.00	-.143126E+00	-.906985E-01	-.768185E-01	-.589235E-01	-.455395E-01	-.386055E-01
70.00	-.143118E+00	-.906119E-01	-.768181E-01	-.587779E-01	-.443229E-01	-.388619E-01
80.00	-.143114E+00	-.905664E-01	-.768181E-01	-.587184E-01	-.438134E-01	-.389944E-01
90.00	-.143113E+00	-.905401E-01	-.768181E-01	-.586881E-01	-.435541E-01	-.390721E-01
100.00	-.143112E+00	-.905242E-01	-.768162E-01	-.586722E-01	-.434022E-01	-.391202E-01

TAB. A.5: Orbitales Σ_g , ion Cs_2^+ .

R(ua)	(1) ² Σ _u ⁺	(2) ² Σ _u ⁺	(3) ² Σ _u ⁺	(4) ² Σ _u ⁺	(5) ² Σ _u ⁺	(6) ² Σ _u ⁺
5.00	-.111722E+00	0.417217E-01	0.601597E-01	0.102678E+00	0.112751E+00	0.137626E+00
5.20	-.117605E+00	0.322749E-01	0.519619E-01	0.937019E-01	0.105166E+00	0.129782E+00
5.40	-.123069E+00	0.227669E-01	0.446489E-01	0.851539E-01	0.982669E-01	0.122284E+00
5.60	-.128164E+00	0.132782E-01	0.381032E-01	0.770842E-01	0.919512E-01	0.115068E+00
5.80	-.132930E+00	0.392756E-02	0.322016E-01	0.695246E-01	0.861356E-01	0.108144E+00
6.00	-.137401E+00	-.516473E-02	0.268323E-01	0.624863E-01	0.807543E-01	0.101564E+00
6.20	-.141603E+00	-.138996E-01	0.219114E-01	0.559574E-01	0.757564E-01	0.953754E-01
6.40	-.145558E+00	-.222053E-01	0.173707E-01	0.499147E-01	0.710967E-01	0.895967E-01
6.60	-.149285E+00	-.300337E-01	0.131593E-01	0.443243E-01	0.667413E-01	0.842163E-01
6.80	-.152797E+00	-.373625E-01	0.923549E-02	0.391505E-01	0.626595E-01	0.792115E-01
7.00	-.156107E+00	-.441863E-01	0.556573E-02	0.343567E-01	0.588237E-01	0.745547E-01
7.20	-.159225E+00	-.505139E-01	0.212308E-02	0.299101E-01	0.552131E-01	0.702161E-01
7.40	-.162159E+00	-.563632E-01	-.111619E-02	0.257778E-01	0.518088E-01	0.661678E-01
7.60	-.164919E+00	-.617588E-01	-.416985E-02	0.219322E-01	0.485922E-01	0.623852E-01
7.80	-.167509E+00	-.667299E-01	-.705495E-02	0.183461E-01	0.455501E-01	0.588471E-01
8.00	-.169937E+00	-.713060E-01	-.978604E-02	0.149980E-01	0.426690E-01	0.555320E-01
8.20	-.172210E+00	-.755174E-01	-.123764E-01	0.118676E-01	0.399376E-01	0.524216E-01
8.40	-.174334E+00	-.793951E-01	-.148341E-01	0.893494E-02	0.373449E-01	0.494999E-01
8.60	-.176315E+00	-.829651E-01	-.171711E-01	0.618487E-02	0.348819E-01	0.467509E-01
8.80	-.178161E+00	-.862557E-01	-.193947E-01	0.360227E-02	0.325383E-01	0.441613E-01
9.00	-.179876E+00	-.892922E-01	-.215132E-01	0.117378E-02	0.303068E-01	0.417208E-01
9.20	-.181469E+00	-.920952E-01	-.235322E-01	-.111321E-02	0.281798E-01	0.394158E-01
9.40	-.182946E+00	-.946877E-01	-.254587E-01	-.326866E-02	0.261503E-01	0.372383E-01
9.60	-.184313E+00	-.970870E-01	-.272980E-01	-.530298E-02	0.242110E-01	0.351780E-01
9.80	-.185576E+00	-.993100E-01	-.290540E-01	-.722503E-02	0.223570E-01	0.332280E-01
10.00	-.186742E+00	-.101373E+00	-.307332E-01	-.904323E-02	0.205818E-01	0.313808E-01
10.20	-.187818E+00	-.103290E+00	-.323375E-01	-.107655E-01	0.188795E-01	0.296285E-01
10.40	-.188807E+00	-.105073E+00	-.338726E-01	-.123976E-01	0.172464E-01	0.279654E-01
10.60	-.189717E+00	-.106732E+00	-.353416E-01	-.139456E-01	0.156774E-01	0.263864E-01
10.80	-.190553E+00	-.108279E+00	-.367475E-01	-.154165E-01	0.141695E-01	0.248845E-01
11.00	-.191319E+00	-.109722E+00	-.380940E-01	-.168150E-01	0.127180E-01	0.234540E-01
11.20	-.192021E+00	-.111069E+00	-.393835E-01	-.181455E-01	0.113195E-01	0.220925E-01
11.40	-.192664E+00	-.112329E+00	-.406191E-01	-.194131E-01	0.996993E-02	0.207939E-01
11.60	-.193252E+00	-.113508E+00	-.418037E-01	-.206207E-01	0.866829E-02	0.195543E-01
11.80	-.193788E+00	-.114611E+00	-.429391E-01	-.217731E-01	0.740986E-02	0.183709E-01
12.00	-.194277E+00	-.115645E+00	-.440279E-01	-.228729E-01	0.619307E-02	0.172381E-01
12.20	-.194722E+00	-.116613E+00	-.450725E-01	-.239245E-01	0.501555E-02	0.161545E-01
12.40	-.195127E+00	-.117522E+00	-.460740E-01	-.249290E-01	0.387404E-02	0.151160E-01
12.60	-.195496E+00	-.118376E+00	-.470365E-01	-.258905E-01	0.276646E-02	0.141195E-01
12.80	-.195829E+00	-.119176E+00	-.479602E-01	-.268112E-01	0.168985E-02	0.131628E-01
13.00	-.196132E+00	-.119928E+00	-.488466E-01	-.276926E-01	0.643356E-03	0.122434E-01
13.50	-.196767E+00	-.121615E+00	-.509157E-01	-.297407E-01	-.185970E-02	0.100873E-01
14.00	-.197256E+00	-.123060E+00	-.527914E-01	-.315904E-01	-.423442E-02	0.809858E-02
14.50	-.197630E+00	-.124299E+00	-.544958E-01	-.332658E-01	-.652582E-02	0.618918E-02
15.00	-.197910E+00	-.125360E+00	-.560501E-01	-.347881E-01	-.878612E-02	0.409788E-02

15.50	-.198118E+00	-.126269E+00	-.574712E-01	-.361792E-01	-.110762E-01	0.156781E-02
16.00	-.198269E+00	-.127045E+00	-.587759E-01	-.374539E-01	-.134539E-01	-.104593E-02
16.50	-.198376E+00	-.127708E+00	-.599775E-01	-.386265E-01	-.159585E-01	-.347953E-02
17.00	-.198448E+00	-.128270E+00	-.610888E-01	-.397098E-01	-.185888E-01	-.565277E-02
17.50	-.198493E+00	-.128747E+00	-.621212E-01	-.407142E-01	-.213072E-01	-.755519E-02
18.00	-.198519E+00	-.129149E+00	-.630823E-01	-.416463E-01	-.240503E-01	-.921627E-02
18.50	-.198531E+00	-.129487E+00	-.639806E-01	-.425146E-01	-.267536E-01	-.106766E-01
19.00	-.198532E+00	-.129768E+00	-.648219E-01	-.433239E-01	-.293639E-01	-.119769E-01
19.50	-.198525E+00	-.130001E+00	-.656123E-01	-.440813E-01	-.318453E-01	-.131483E-01
20.00	-.198512E+00	-.130193E+00	-.663562E-01	-.447902E-01	-.341742E-01	-.142192E-01
20.50	-.198497E+00	-.130349E+00	-.670566E-01	-.454576E-01	-.363376E-01	-.152076E-01
21.00	-.198479E+00	-.130474E+00	-.677159E-01	-.460869E-01	-.383319E-01	-.161279E-01
21.50	-.198459E+00	-.130573E+00	-.683383E-01	-.466853E-01	-.401553E-01	-.169923E-01
22.00	-.198440E+00	-.130650E+00	-.689243E-01	-.472603E-01	-.418113E-01	-.178063E-01
22.50	-.198420E+00	-.130708E+00	-.694753E-01	-.478193E-01	-.433013E-01	-.185783E-01
23.00	-.198401E+00	-.130751E+00	-.699934E-01	-.483734E-01	-.446274E-01	-.193104E-01
23.50	-.198382E+00	-.130781E+00	-.704774E-01	-.489374E-01	-.457864E-01	-.200074E-01
24.00	-.198364E+00	-.130801E+00	-.709309E-01	-.495259E-01	-.467759E-01	-.206719E-01
24.50	-.198347E+00	-.130811E+00	-.713522E-01	-.501492E-01	-.475982E-01	-.213052E-01
25.00	-.198330E+00	-.130814E+00	-.717425E-01	-.508015E-01	-.482695E-01	-.219095E-01
26.00	-.198301E+00	-.130806E+00	-.724369E-01	-.521199E-01	-.492759E-01	-.230389E-01
27.00	-.198275E+00	-.130783E+00	-.730193E-01	-.533423E-01	-.500083E-01	-.240683E-01
28.00	-.198254E+00	-.130752E+00	-.735010E-01	-.544090E-01	-.505880E-01	-.250040E-01
29.00	-.198236E+00	-.130718E+00	-.738895E-01	-.553205E-01	-.510685E-01	-.258455E-01
30.00	-.198221E+00	-.130682E+00	-.741979E-01	-.560909E-01	-.514759E-01	-.265949E-01
32.00	-.198196E+00	-.130613E+00	-.746132E-01	-.572782E-01	-.521332E-01	-.278282E-01
35.00	-.198196E+00	-.130527E+00	-.748777E-01	-.584027E-01	-.528487E-01	-.291047E-01
37.00	-.198196E+00	-.130481E+00	-.749091E-01	-.588391E-01	-.532061E-01	-.296731E-01
40.00	-.198196E+00	-.130428E+00	-.748501E-01	-.591731E-01	-.536271E-01	-.302711E-01
45.00	-.198196E+00	-.130368E+00	-.746648E-01	-.592008E-01	-.541368E-01	-.308908E-01
50.00	-.198196E+00	-.130330E+00	-.745030E-01	-.589280E-01	-.544930E-01	-.311330E-01
55.00	-.198196E+00	-.130306E+00	-.743902E-01	-.585982E-01	-.547482E-01	-.311502E-01
60.00	-.198196E+00	-.130289E+00	-.743163E-01	-.583093E-01	-.549343E-01	-.311063E-01
70.00	-.198196E+00	-.130268E+00	-.743163E-01	-.579053E-01	-.551813E-01	-.310323E-01
80.00	-.198196E+00	-.130268E+00	-.743163E-01	-.576670E-01	-.553250E-01	-.310323E-01
90.00	-.198196E+00	-.130268E+00	-.743163E-01	-.575229E-01	-.554109E-01	-.310323E-01

TAB. A.6: Orbitales Σ_u , ion Li_2^+

R(ua)	(1) ² Σ _u ⁺	(2) ² Σ _u ⁺	(3) ² Σ _u ⁺	(4) ² Σ _u ⁺	(5) ² Σ _u ⁺	(6) ² Σ _u ⁺
5.00	-.954401E-01	0.460889E-01	0.672509E-01	0.105693E+00	0.116687E+00	0.135899E+00
5.20	-.101848E+00	0.382920E-01	0.598330E-01	0.980840E-01	0.109370E+00	0.128366E+00
5.40	-.107807E+00	0.309234E-01	0.529714E-01	0.909554E-01	0.102589E+00	0.121333E+00
5.60	-.113353E+00	0.239462E-01	0.466132E-01	0.842672E-01	0.962902E-01	0.114754E+00
5.80	-.118522E+00	0.173249E-01	0.407089E-01	0.779759E-01	0.904259E-01	0.108587E+00
6.00	-.123347E+00	0.110275E-01	0.352165E-01	0.720455E-01	0.849565E-01	0.102791E+00
6.20	-.127859E+00	0.502545E-02	0.300974E-01	0.664414E-01	0.798434E-01	0.973314E-01
6.40	-.132083E+00	-.705654E-03	0.253163E-01	0.611353E-01	0.750553E-01	0.921793E-01
6.60	-.136039E+00	-.618467E-02	0.208433E-01	0.561033E-01	0.705633E-01	0.873083E-01
6.80	-.139749E+00	-.114274E-01	0.166506E-01	0.513236E-01	0.663396E-01	0.826956E-01
7.00	-.143229E+00	-.164461E-01	0.127129E-01	0.467799E-01	0.623629E-01	0.783229E-01
7.20	-.146494E+00	-.212515E-01	0.900850E-02	0.424575E-01	0.586125E-01	0.741735E-01
7.40	-.149556E+00	-.258504E-01	0.551757E-02	0.383446E-01	0.550676E-01	0.702346E-01
7.60	-.152429E+00	-.302509E-01	0.222210E-02	0.344321E-01	0.517131E-01	0.664941E-01
7.80	-.155121E+00	-.344563E-01	-.892327E-03	0.307097E-01	0.485337E-01	0.629407E-01
8.00	-.157645E+00	-.384738E-01	-.384177E-02	0.271692E-01	0.455162E-01	0.595652E-01
8.20	-.160007E+00	-.423060E-01	-.663603E-02	0.238050E-01	0.426490E-01	0.563580E-01
8.40	-.162218E+00	-.459588E-01	-.928784E-02	0.206082E-01	0.399202E-01	0.533112E-01
8.60	-.164284E+00	-.494380E-01	-.118080E-01	0.175710E-01	0.373210E-01	0.504160E-01
8.80	-.166215E+00	-.527473E-01	-.142023E-01	0.146867E-01	0.348417E-01	0.476637E-01
9.00	-.168017E+00	-.558929E-01	-.164819E-01	0.119491E-01	0.324771E-01	0.450471E-01
9.20	-.169696E+00	-.588813E-01	-.186523E-01	0.934868E-02	0.302167E-01	0.425577E-01
9.40	-.171261E+00	-.617183E-01	-.207203E-01	0.687971E-02	0.280567E-01	0.401887E-01
9.60	-.172716E+00	-.644091E-01	-.226911E-01	0.453491E-02	0.259909E-01	0.379319E-01
9.80	-.174069E+00	-.669615E-01	-.245725E-01	0.230752E-02	0.240115E-01	0.357815E-01
10.00	-.175326E+00	-.693818E-01	-.263668E-01	0.190240E-03	0.221162E-01	0.337312E-01
10.20	-.176492E+00	-.716748E-01	-.280798E-01	-.182282E-02	0.203002E-01	0.317732E-01
10.40	-.177571E+00	-.738482E-01	-.297172E-01	-.373920E-02	0.185568E-01	0.299038E-01
10.60	-.178571E+00	-.759081E-01	-.312811E-01	-.556208E-02	0.168849E-01	0.281159E-01
10.80	-.179495E+00	-.778603E-01	-.327753E-01	-.729933E-02	0.152787E-01	0.264057E-01
11.00	-.180350E+00	-.797096E-01	-.342046E-01	-.895558E-02	0.137344E-01	0.247674E-01
11.20	-.181138E+00	-.814632E-01	-.355722E-01	-.105352E-01	0.122508E-01	0.231958E-01
11.40	-.181865E+00	-.831242E-01	-.368792E-01	-.120432E-01	0.108228E-01	0.216868E-01
11.60	-.182535E+00	-.846996E-01	-.381306E-01	-.134846E-01	0.944743E-02	0.202374E-01
11.80	-.183151E+00	-.861940E-01	-.393290E-01	-.148620E-01	0.812398E-02	0.188420E-01
12.00	-.183717E+00	-.876111E-01	-.404761E-01	-.161811E-01	0.684693E-02	0.174979E-01
12.20	-.184238E+00	-.889541E-01	-.415751E-01	-.174431E-01	0.561492E-02	0.162009E-01
12.40	-.184714E+00	-.902293E-01	-.426273E-01	-.186533E-01	0.442673E-02	0.149467E-01
12.60	-.185152E+00	-.914397E-01	-.436357E-01	-.198137E-01	0.327829E-02	0.137323E-01
12.80	-.185552E+00	-.925883E-01	-.446033E-01	-.209273E-01	0.216765E-02	0.125537E-01
13.00	-.185918E+00	-.936780E-01	-.455300E-01	-.219980E-01	0.109398E-02	0.114080E-01
13.50	-.186699E+00	-.961681E-01	-.476851E-01	-.244971E-01	-.144709E-02	0.865691E-02
14.00	-.187317E+00	-.983555E-01	-.496305E-01	-.267735E-01	-.380449E-02	0.602351E-02
14.50	-.187802E+00	-.100278E+00	-.513891E-01	-.288561E-01	-.600912E-02	0.345088E-02
15.00	-.188179E+00	-.101966E+00	-.529841E-01	-.307691E-01	-.808709E-02	0.911905E-03

16.00	-.188689E+00	-.104748E+00	-.557553E-01	-.341693E-01	-.119743E-01	-.399025E-02
16.50	-.188853E+00	-.105886E+00	-.569634E-01	-.356884E-01	-.138364E-01	-.627842E-02
17.00	-.188974E+00	-.106880E+00	-.580734E-01	-.371064E-01	-.156754E-01	-.841143E-02
17.50	-.189061E+00	-.107748E+00	-.590948E-01	-.384318E-01	-.175058E-01	-.103688E-01
18.00	-.189120E+00	-.108501E+00	-.600380E-01	-.396740E-01	-.193320E-01	-.121460E-01
18.50	-.189159E+00	-.109153E+00	-.609115E-01	-.408415E-01	-.211475E-01	-.137475E-01
19.00	-.189182E+00	-.109717E+00	-.617241E-01	-.419401E-01	-.229381E-01	-.151921E-01
19.50	-.189194E+00	-.110201E+00	-.624799E-01	-.429759E-01	-.246879E-01	-.164969E-01
20.00	-.189196E+00	-.110614E+00	-.631852E-01	-.439522E-01	-.263812E-01	-.176842E-01
20.50	-.189192E+00	-.110967E+00	-.638462E-01	-.448732E-01	-.280042E-01	-.187712E-01
21.00	-.189184E+00	-.111264E+00	-.644651E-01	-.457421E-01	-.295491E-01	-.197721E-01
21.50	-.189172E+00	-.111514E+00	-.650470E-01	-.465620E-01	-.310100E-01	-.206990E-01
22.00	-.189159E+00	-.111722E+00	-.655937E-01	-.473347E-01	-.323857E-01	-.215627E-01
22.50	-.189143E+00	-.111893E+00	-.661074E-01	-.480624E-01	-.336754E-01	-.223694E-01
23.00	-.189128E+00	-.112032E+00	-.665913E-01	-.487483E-01	-.348803E-01	-.231273E-01
23.50	-.189113E+00	-.112144E+00	-.670471E-01	-.493921E-01	-.360041E-01	-.238401E-01
24.00	-.189097E+00	-.112232E+00	-.674753E-01	-.499963E-01	-.370493E-01	-.245133E-01
24.50	-.189082E+00	-.112300E+00	-.678774E-01	-.505634E-01	-.380214E-01	-.251494E-01
25.00	-.189069E+00	-.112351E+00	-.682536E-01	-.510936E-01	-.389236E-01	-.257526E-01
26.00	-.189019E+00	-.110272E+00	-.674396E-01	-.516266E-01	-.396576E-01	-.262956E-01
27.00	-.189019E+00	-.112426E+00	-.695248E-01	-.528868E-01	-.419288E-01	-.278758E-01
28.00	-.188998E+00	-.112414E+00	-.700303E-01	-.536093E-01	-.431293E-01	-.287883E-01
29.00	-.188982E+00	-.112385E+00	-.704576E-01	-.542326E-01	-.441656E-01	-.296156E-01
30.00	-.188967E+00	-.112343E+00	-.708129E-01	-.547689E-01	-.450649E-01	-.303659E-01
32.00	-.188943E+00	-.112244E+00	-.713379E-01	-.556199E-01	-.465259E-01	-.316589E-01
35.00	-.188918E+00	-.112098E+00	-.717682E-01	-.564702E-01	-.480942E-01	-.331722E-01
37.00	-.188908E+00	-.112015E+00	-.718935E-01	-.568215E-01	-.488455E-01	-.339605E-01
40.00	-.188895E+00	-.111913E+00	-.719434E-01	-.571134E-01	-.496644E-01	-.348974E-01
45.00	-.188882E+00	-.111798E+00	-.718680E-01	-.571890E-01	-.504870E-01	-.360290E-01
50.00	-.188873E+00	-.111726E+00	-.717602E-01	-.570142E-01	-.508952E-01	-.368442E-01
55.00	-.188868E+00	-.111679E+00	-.716763E-01	-.567793E-01	-.510683E-01	-.374333E-01
60.00	-.188865E+00	-.111648E+00	-.716194E-01	-.565724E-01	-.511184E-01	-.377954E-01
70.00	-.188862E+00	-.111610E+00	-.715563E-01	-.562973E-01	-.510943E-01	-.379743E-01
80.00	-.188861E+00	-.111590E+00	-.715270E-01	-.561540E-01	-.510490E-01	-.378550E-01
90.00	-.188861E+00	-.111579E+00	-.715030E-01	-.560749E-01	-.510169E-01	-.377329E-01
100.00	-.188861E+00	-.111579E+00	-.715030E-01	-.560300E-01	-.509950E-01	-.376580E-01

TAB. A.7: Orbitales Σ_u , ion Na_2^+

R(ua)	(1) ² Σ _u ⁺	(2) ² Σ _u ⁺	(3) ² Σ _u ⁺	(4) ² Σ _u ⁺	(5) ² Σ _u ⁺	(6) ² Σ _u ⁺
5.20	-.723591E-01	0.221509E-01	0.574929E-01	0.870159E-01	0.104601E+00	0.119048E+00
5.40	-.770940E-01	0.164090E-01	0.522250E-01	0.814780E-01	0.990940E-01	0.113402E+00
5.80	-.858675E-01	0.619947E-02	0.424015E-01	0.713845E-01	0.888445E-01	0.103018E+00
6.20	-.937485E-01	-.255651E-02	0.334995E-01	0.624685E-01	0.795715E-01	0.937555E-01
6.40	-.973800E-01	-.648195E-02	0.293740E-01	0.584020E-01	0.752750E-01	0.895050E-01
6.60	-.100820E+00	-.101506E-01	0.254514E-01	0.545714E-01	0.711894E-01	0.854894E-01
6.80	-.104080E+00	-.135944E-01	0.217196E-01	0.509596E-01	0.673006E-01	0.816916E-01
7.00	-.107172E+00	-.168414E-01	0.181686E-01	0.475456E-01	0.635936E-01	0.780956E-01
7.20	-.110106E+00	-.199158E-01	0.147842E-01	0.443142E-01	0.600562E-01	0.746872E-01
7.40	-.112891E+00	-.228364E-01	0.115566E-01	0.412476E-01	0.566726E-01	0.714536E-01
7.60	-.115538E+00	-.256203E-01	0.847371E-02	0.383337E-01	0.534287E-01	0.683807E-01
7.80	-.118056E+00	-.282789E-01	0.552509E-02	0.355561E-01	0.503091E-01	0.654591E-01
8.00	-.120450E+00	-.308240E-01	0.270100E-02	0.329040E-01	0.472970E-01	0.626780E-01
8.20	-.122729E+00	-.332666E-01	-.864472E-05	0.303604E-01	0.443774E-01	0.600264E-01
8.40	-.124897E+00	-.356173E-01	-.261130E-02	0.279107E-01	0.415297E-01	0.574947E-01
8.60	-.126963E+00	-.378858E-01	-.511583E-02	0.255352E-01	0.387322E-01	0.550652E-01
8.80	-.128929E+00	-.400825E-01	-.752954E-02	0.232135E-01	0.359645E-01	0.525585E-01
9.00	-.130800E+00	-.422162E-01	-.985721E-02	0.209188E-01	0.332038E-01	0.486858E-01
9.20	-.132580E+00	-.442932E-01	-.121062E-01	0.186228E-01	0.304368E-01	0.446288E-01
9.40	-.134272E+00	-.463192E-01	-.142792E-01	0.162928E-01	0.276708E-01	0.407718E-01
9.60	-.135881E+00	-.483008E-01	-.163808E-01	0.138942E-01	0.249432E-01	0.372502E-01
9.80	-.137408E+00	-.502390E-01	-.184130E-01	0.114070E-01	0.223170E-01	0.341040E-01
10.00	-.138857E+00	-.521385E-01	-.203765E-01	0.883047E-02	0.198555E-01	0.313075E-01
10.20	-.140230E+00	-.539987E-01	-.222737E-01	0.619027E-02	0.175973E-01	0.288053E-01
10.40	-.141531E+00	-.558217E-01	-.241037E-01	0.353432E-02	0.155443E-01	0.265393E-01
10.60	-.142762E+00	-.576072E-01	-.258662E-01	0.911818E-03	0.136798E-01	0.244608E-01
10.80	-.143926E+00	-.593548E-01	-.275598E-01	-.163378E-02	0.119752E-01	0.225332E-01
11.00	-.145026E+00	-.610628E-01	-.291848E-01	-.407678E-02	0.104032E-01	0.207272E-01
11.40	-.147041E+00	-.643562E-01	-.322252E-01	-.859315E-02	0.757285E-02	0.174058E-01
11.60	-.147962E+00	-.659401E-01	-.336411E-01	-.106611E-01	0.628288E-02	0.158639E-01
11.80	-.148830E+00	-.674787E-01	-.349887E-01	-.126067E-01	0.506230E-02	0.143883E-01
12.00	-.149644E+00	-.689723E-01	-.362693E-01	-.144373E-01	0.390072E-02	0.129727E-01
12.20	-.150410E+00	-.704201E-01	-.374851E-01	-.161591E-01	0.279191E-02	0.116109E-01
12.40	-.151127E+00	-.718212E-01	-.386372E-01	-.177812E-01	0.173079E-02	0.102988E-01
12.60	-.151801E+00	-.731736E-01	-.397306E-01	-.193116E-01	0.712378E-03	0.903238E-02
12.80	-.152430E+00	-.744792E-01	-.407662E-01	-.207582E-01	-.268166E-03	0.780783E-02
13.00	-.153019E+00	-.757376E-01	-.417476E-01	-.221286E-01	-.121359E-02	0.662441E-02
13.50	-.154326E+00	-.786753E-01	-.439843E-01	-.252633E-01	-.344127E-02	0.382373E-02
14.00	-.155421E+00	-.813281E-01	-.459481E-01	-.280491E-01	-.550614E-02	0.123386E-02
14.50	-.156332E+00	-.837103E-01	-.476763E-01	-.305533E-01	-.743530E-02	-.116630E-02
15.00	-.157084E+00	-.858423E-01	-.492043E-01	-.328273E-01	-.925030E-02	-.338730E-02
15.50	-.157700E+00	-.877444E-01	-.505584E-01	-.349084E-01	-.109684E-01	-.543944E-02
16.00	-.158201E+00	-.894382E-01	-.517592E-01	-.368242E-01	-.126042E-01	-.733019E-02
16.50	-.158606E+00	-.909444E-01	-.528284E-01	-.385984E-01	-.141674E-01	-.906742E-02
17.00	-.158930E+00	-.922816E-01	-.537786E-01	-.402476E-01	-.156686E-01	-.106576E-01

17.50	-.159185E+00	-.934671E-01	-.546261E-01	-.417881E-01	-.171131E-01	-.121101E-01
18.00	-.159385E+00	-.945172E-01	-.553812E-01	-.432302E-01	-.185042E-01	-.134372E-01
18.50	-.159539E+00	-.954443E-01	-.560553E-01	-.445843E-01	-.198433E-01	-.146483E-01
19.00	-.159657E+00	-.962620E-01	-.566580E-01	-.458600E-01	-.211330E-01	-.157570E-01
19.50	-.159744E+00	-.969824E-01	-.571974E-01	-.470634E-01	-.223734E-01	-.167754E-01
20.00	-.159808E+00	-.976139E-01	-.576809E-01	-.481999E-01	-.235639E-01	-.177129E-01
20.50	-.159851E+00	-.981662E-01	-.581152E-01	-.492762E-01	-.247072E-01	-.185822E-01
21.00	-.159880E+00	-.986478E-01	-.585048E-01	-.502948E-01	-.258058E-01	-.193898E-01
21.50	-.159896E+00	-.990657E-01	-.588557E-01	-.512597E-01	-.268597E-01	-.201447E-01
22.00	-.159903E+00	-.994275E-01	-.591725E-01	-.521725E-01	-.278715E-01	-.208535E-01
22.50	-.159903E+00	-.997386E-01	-.594586E-01	-.530356E-01	-.288426E-01	-.215206E-01
23.00	-.159897E+00	-.100005E+00	-.597180E-01	-.538520E-01	-.297740E-01	-.221520E-01
23.50	-.159889E+00	-.100231E+00	-.599535E-01	-.546215E-01	-.306665E-01	-.227495E-01
24.00	-.159876E+00	-.100422E+00	-.601676E-01	-.553456E-01	-.315216E-01	-.233186E-01
24.50	-.159862E+00	-.100581E+00	-.603646E-01	-.560266E-01	-.323386E-01	-.238606E-01
26.00	-.159815E+00	-.100907E+00	-.608723E-01	-.578143E-01	-.345823E-01	-.253523E-01
27.00	-.159783E+00	-.101027E+00	-.611701E-01	-.587961E-01	-.359171E-01	-.262531E-01
28.00	-.159753E+00	-.101093E+00	-.614675E-01	-.596045E-01	-.371335E-01	-.270915E-01
29.00	-.159727E+00	-.101119E+00	-.617929E-01	-.602259E-01	-.382429E-01	-.278739E-01
30.00	-.159703E+00	-.101115E+00	-.621623E-01	-.606633E-01	-.392543E-01	-.286023E-01
32.00	-.159663E+00	-.101055E+00	-.629301E-01	-.611441E-01	-.410161E-01	-.299041E-01
35.00	-.159620E+00	-.100910E+00	-.637902E-01	-.614462E-01	-.431062E-01	-.314662E-01
37.00	-.159600E+00	-.100810E+00	-.641268E-01	-.615448E-01	-.441938E-01	-.322658E-01
40.00	-.159577E+00	-.100678E+00	-.643701E-01	-.616231E-01	-.454531E-01	-.331651E-01
45.00	-.159554E+00	-.100520E+00	-.643901E-01	-.616591E-01	-.467701E-01	-.340911E-01
50.00	-.159541E+00	-.100420E+00	-.642459E-01	-.616379E-01	-.473879E-01	-.345889E-01
55.00	-.159533E+00	-.100354E+00	-.641008E-01	-.615988E-01	-.475758E-01	-.349498E-01
60.00	-.159527E+00	-.100311E+00	-.639927E-01	-.615597E-01	-.475447E-01	-.353697E-01
70.00	-.159522E+00	-.100259E+00	-.638725E-01	-.614995E-01	-.473005E-01	-.357595E-01
80.00	-.159518E+00	-.100230E+00	-.638181E-01	-.614631E-01	-.470991E-01	-.355841E-01
90.00	-.159517E+00	-.100214E+00	-.637910E-01	-.614410E-01	-.469790E-01	-.352970E-01
100.00	-.159516E+00	-.100204E+00	-.637761E-01	-.614271E-01	-.469061E-01	-.350761E-01

TAB. A.8: Orbitales Σ_u , ion K_2^+

R(ua)	(1) ² Σ _u ⁺	(2) ² Σ _u ⁺	(3) ² Σ _u ⁺	(4) ² Σ _u ⁺	(5) ² Σ _u ⁺	(6) ² Σ _u ⁺
5.00	-663421E-01	0.205229E-01	0.579069E-01	0.863359E-01	0.103687E+00	0.117797E+00
5.20	-700903E-01	0.154997E-01	0.538087E-01	0.816827E-01	0.993367E-01	0.113185E+00
5.40	-738851E-01	0.106419E-01	0.496369E-01	0.770949E-01	0.949429E-01	0.108596E+00
5.60	-776507E-01	0.599832E-02	0.454733E-01	0.726303E-01	0.905793E-01	0.104095E+00
5.80	-813374E-01	0.159658E-02	0.413726E-01	0.683226E-01	0.862966E-01	0.997236E-01
6.00	-849153E-01	-.255133E-02	0.373707E-01	0.641937E-01	0.821257E-01	0.955027E-01
6.20	-883668E-01	-.644783E-02	0.334872E-01	0.602502E-01	0.780852E-01	0.914482E-01
6.40	-.916822E-01	-.101002E-01	0.297358E-01	0.564958E-01	0.741848E-01	0.875628E-01
6.60	-.948589E-01	-.135219E-01	0.261221E-01	0.529261E-01	0.704281E-01	0.838491E-01
6.80	-.978953E-01	-.167283E-01	0.226467E-01	0.495347E-01	0.668157E-01	0.803027E-01
7.00	-1.00795E+00	-.197340E-01	0.193070E-01	0.463140E-01	0.633430E-01	0.769190E-01
7.20	-1.03561E+00	-.225553E-01	0.160987E-01	0.432567E-01	0.600047E-01	0.736907E-01
7.40	-1.06201E+00	-.252054E-01	0.130166E-01	0.403536E-01	0.567926E-01	0.706126E-01
7.60	-1.08719E+00	-.276993E-01	0.100537E-01	0.375967E-01	0.536987E-01	0.676767E-01
7.80	-1.11120E+00	-.300482E-01	0.720383E-02	0.349768E-01	0.507118E-01	0.648748E-01
8.00	-1.13411E+00	-.322642E-01	0.445779E-02	0.324858E-01	0.478208E-01	0.621998E-01
8.20	-1.15598E+00	-.343587E-01	0.181032E-02	0.301173E-01	0.450123E-01	0.596453E-01
8.40	-1.17684E+00	-.363427E-01	-.747695E-03	0.278633E-01	0.422683E-01	0.572043E-01
8.60	-1.19675E+00	-.382272E-01	-.322216E-02	0.257158E-01	0.395678E-01	0.548658E-01
8.80	-1.21577E+00	-.400207E-01	-.562075E-02	0.236663E-01	0.368843E-01	0.526213E-01
9.00	-1.23391E+00	-.417339E-01	-.795187E-02	0.217091E-01	0.341811E-01	0.504471E-01
9.20	-1.25124E+00	-.433737E-01	-.102197E-01	0.198353E-01	0.314113E-01	0.482503E-01
9.40	-1.26777E+00	-.449510E-01	-.124320E-01	0.180340E-01	0.285180E-01	0.452720E-01
9.60	-1.28355E+00	-.464716E-01	-.145946E-01	0.162944E-01	0.254504E-01	0.411964E-01
9.80	-1.29860E+00	-.479436E-01	-.167106E-01	0.145954E-01	0.221944E-01	0.373064E-01
10.00	-1.31294E+00	-.493733E-01	-.187853E-01	0.128977E-01	0.188117E-01	0.338777E-01
10.20	-1.32661E+00	-.507664E-01	-.208214E-01	0.111056E-01	0.154806E-01	0.309116E-01
10.40	-1.33964E+00	-.521276E-01	-.228206E-01	0.898738E-02	0.125364E-01	0.283294E-01
10.60	-1.35202E+00	-.534623E-01	-.247823E-01	0.631466E-02	0.102947E-01	0.260427E-01
10.80	-1.36381E+00	-.547738E-01	-.267048E-01	0.330823E-02	0.859623E-02	0.239792E-01
11.00	-1.37500E+00	-.560649E-01	-.285849E-01	0.284077E-03	0.715708E-02	0.220881E-01
11.20	-1.38562E+00	-.573396E-01	-.304196E-01	-.261964E-02	0.585236E-02	0.203324E-01
11.40	-1.39569E+00	-.585996E-01	-.322026E-01	-.535359E-02	0.463441E-02	0.186854E-01
11.60	-1.40523E+00	-.598463E-01	-.339273E-01	-.790729E-02	0.348171E-02	0.171317E-01
11.80	-1.41426E+00	-.610811E-01	-.355891E-01	-.102811E-01	0.238292E-02	0.156559E-01
12.00	-1.42280E+00	-.623042E-01	-.371822E-01	-.124852E-01	0.133179E-02	0.142498E-01
12.20	-1.43086E+00	-.635148E-01	-.387018E-01	-.145308E-01	0.323248E-03	0.129052E-01
12.40	-1.43847E+00	-.647137E-01	-.401457E-01	-.164327E-01	-.645699E-03	0.116163E-01
12.60	-1.44564E+00	-.658999E-01	-.415109E-01	-.182039E-01	-.157891E-02	0.103791E-01
12.80	-1.45238E+00	-.670701E-01	-.427981E-01	-.198571E-01	-.247813E-02	0.918787E-02
13.00	-1.45873E+00	-.682240E-01	-.440070E-01	-.214040E-01	-.334604E-02	0.804196E-02
13.50	-1.47296E+00	-.710220E-01	-.467070E-01	-.248750E-01	-.539097E-02	0.535003E-02
14.00	-1.48506E+00	-.736707E-01	-.489897E-01	-.278857E-01	-.727869E-02	0.287931E-02
14.50	-1.49528E+00	-.761426E-01	-.509206E-01	-.305386E-01	-.903159E-02	0.604408E-03
15.00	-1.50385E+00	-.784236E-01	-.525646E-01	-.329076E-01	-.106646E-01	-.149964E-02

15.50	-.151099E+00	-.805087E-01	-.539747E-01	-.350457E-01	-.121937E-01	-.344971E-02
16.00	-.151689E+00	-.823989E-01	-.551949E-01	-.369919E-01	-.136279E-01	-.526293E-02
16.50	-.152174E+00	-.841039E-01	-.562589E-01	-.387769E-01	-.149769E-01	-.695188E-02
17.00	-.152568E+00	-.856348E-01	-.571918E-01	-.404208E-01	-.162488E-01	-.853185E-02
17.50	-.152886E+00	-.870060E-01	-.580140E-01	-.419420E-01	-.174510E-01	-.100110E-01
18.00	-.153019E+00	-.881124E-01	-.289422E-01	-.429552E-01	-.189633E-01	-.114112E-01
18.50	-.153341E+00	-.893225E-01	-.593815E-01	-.446695E-01	-.196755E-01	-.127035E-01
19.00	-.153498E+00	-.902927E-01	-.599507E-01	-.458977E-01	-.207127E-01	-.139317E-01
19.50	-.153617E+00	-.911531E-01	-.604571E-01	-.470461E-01	-.217081E-01	-.150861E-01
20.00	-.153707E+00	-.919148E-01	-.609068E-01	-.481218E-01	-.226668E-01	-.161728E-01
20.50	-.153773E+00	-.925877E-01	-.613087E-01	-.491317E-01	-.235937E-01	-.171947E-01
21.00	-.153819E+00	-.931792E-01	-.616692E-01	-.500812E-01	-.244922E-01	-.181552E-01
21.50	-.153850E+00	-.936983E-01	-.619913E-01	-.509743E-01	-.253643E-01	-.190573E-01
22.00	-.153869E+00	-.941525E-01	-.622805E-01	-.518135E-01	-.262115E-01	-.199055E-01
22.50	-.153879E+00	-.945481E-01	-.625421E-01	-.526041E-01	-.270331E-01	-.207041E-01
23.00	-.153881E+00	-.948912E-01	-.627772E-01	-.533472E-01	-.278312E-01	-.214562E-01
23.50	-.153878E+00	-.951865E-01	-.629895E-01	-.540455E-01	-.286035E-01	-.221655E-01
24.00	-.153871E+00	-.954395E-01	-.631815E-01	-.547005E-01	-.293525E-01	-.228375E-01
24.50	-.153860E+00	-.956556E-01	-.633566E-01	-.553156E-01	-.300776E-01	-.234746E-01
25.00	-.153848E+00	-.958379E-01	-.635159E-01	-.558919E-01	-.307789E-01	-.240809E-01
26.00	-.153820E+00	-.961169E-01	-.637939E-01	-.569329E-01	-.321129E-01	-.252059E-01
27.00	-.153791E+00	-.963035E-01	-.640305E-01	-.578385E-01	-.333595E-01	-.262305E-01
28.00	-.153761E+00	-.964189E-01	-.642379E-01	-.586199E-01	-.345259E-01	-.271649E-01
29.00	-.153733E+00	-.964804E-01	-.644234E-01	-.592884E-01	-.356174E-01	-.280154E-01
30.00	-.153709E+00	-.965022E-01	-.645922E-01	-.598552E-01	-.366392E-01	-.287882E-01
32.00	-.153667E+00	-.964699E-01	-.648899E-01	-.607299E-01	-.384849E-01	-.301229E-01
35.00	-.153620E+00	-.963308E-01	-.652288E-01	-.615458E-01	-.407928E-01	-.316708E-01
37.00	-.153597E+00	-.962229E-01	-.653789E-01	-.618639E-01	-.420419E-01	-.324569E-01
40.00	-.153573E+00	-.960746E-01	-.655026E-01	-.621296E-01	-.435206E-01	-.333596E-01
45.00	-.153548E+00	-.958860E-01	-.655420E-01	-.622660E-01	-.450940E-01	-.343840E-01
50.00	-.153534E+00	-.957635E-01	-.655035E-01	-.622395E-01	-.458445E-01	-.350815E-01
55.00	-.153526E+00	-.956842E-01	-.654592E-01	-.621712E-01	-.460852E-01	-.355892E-01
60.00	-.153520E+00	-.956310E-01	-.654240E-01	-.621080E-01	-.460580E-01	-.359450E-01
70.00	-.153515E+00	-.955677E-01	-.653817E-01	-.620227E-01	-.457687E-01	-.362957E-01
80.00	-.153511E+00	-.955350E-01	-.653650E-01	-.620007E-01	-.455680E-01	-.363557E-01
90.00	-.153510E+00	-.955140E-01	-.653592E-01	-.619802E-01	-.455212E-01	-.363970E-01
100.00	-.153510E+00	-.955021E-01	-.653391E-01	-.619441E-01	-.452771E-01	-.363970E-01

TAB. A.9: Orbitales Σ_u , ion Rb_2^+

R(ua)	(1) ² Σ _u ⁺	(2) ² Σ _u ⁺	(3) ² Σ _u ⁺	(4) ² Σ _u ⁺	(5) ² Σ _u ⁺	(6) ² Σ _u ⁺
5.00	-.699922E-01	-.614522E-02	0.436388E-01	0.694948E-01	0.886278E-01	0.103373E+00
5.20	-.707520E-01	-.672104E-02	0.427480E-01	0.679940E-01	0.872430E-01	0.101423E+00
5.40	-.722142E-01	-.815920E-02	0.412088E-01	0.658608E-01	0.852628E-01	0.989098E-01
5.60	-.741421E-01	-.102041E-01	0.392099E-01	0.633059E-01	0.828749E-01	0.960389E-01
5.80	-.763674E-01	-.126564E-01	0.368946E-01	0.604836E-01	0.802156E-01	0.929526E-01
6.00	-.787712E-01	-.153642E-01	0.343648E-01	0.575078E-01	0.773848E-01	0.897518E-01
6.20	-.812686E-01	-.182086E-01	0.317014E-01	0.544614E-01	0.744564E-01	0.865114E-01
6.40	-.838000E-01	-.211000E-01	0.289610E-01	0.514040E-01	0.714840E-01	0.832800E-01
6.60	-.863235E-01	-.239685E-01	0.261895E-01	0.483795E-01	0.685065E-01	0.800925E-01
6.80	-.888114E-01	-.267664E-01	0.234206E-01	0.454196E-01	0.655526E-01	0.769736E-01
7.00	-.912438E-01	-.294588E-01	0.206772E-01	0.425422E-01	0.626432E-01	0.739382E-01
7.20	-.936061E-01	-.320241E-01	0.179779E-01	0.397609E-01	0.597909E-01	0.709949E-01
7.40	-.958909E-01	-.344519E-01	0.153341E-01	0.370821E-01	0.570031E-01	0.681461E-01
7.60	-.980926E-01	-.367396E-01	0.127524E-01	0.345064E-01	0.542854E-01	0.653924E-01
7.80	-.100210E+00	-.388899E-01	0.102361E-01	0.320331E-01	0.516361E-01	0.627311E-01
8.00	-.102243E+00	-.409078E-01	0.778725E-02	0.296592E-01	0.490532E-01	0.601542E-01
8.20	-.104191E+00	-.428004E-01	0.540362E-02	0.273796E-01	0.465296E-01	0.576526E-01
8.40	-.106060E+00	-.445767E-01	0.308026E-02	0.251883E-01	0.440553E-01	0.552113E-01
8.60	-.107850E+00	-.462463E-01	0.813718E-03	0.230777E-01	0.416137E-01	0.528047E-01
8.80	-.109567E+00	-.478158E-01	-.140284E-02	0.210412E-01	0.391792E-01	0.503952E-01
9.00	-.111213E+00	-.492924E-01	-.357744E-02	0.190686E-01	0.367126E-01	0.479126E-01
9.20	-.112794E+00	-.506842E-01	-.571923E-02	0.171488E-01	0.341488E-01	0.452468E-01
9.40	-.114311E+00	-.519974E-01	-.783940E-02	0.152666E-01	0.313886E-01	0.422776E-01
9.60	-.115770E+00	-.532371E-01	-.995014E-02	0.133999E-01	0.283119E-01	0.390529E-01
9.80	-.117172E+00	-.544076E-01	-.120646E-01	0.115164E-01	0.248544E-01	0.358844E-01
10.00	-.118519E+00	-.555158E-01	-.141988E-01	0.956321E-02	0.211262E-01	0.330482E-01
10.20	-.119815E+00	-.565637E-01	-.163697E-01	0.745926E-02	0.174143E-01	0.305893E-01
10.40	-.121060E+00	-.575563E-01	-.185943E-01	0.511069E-02	0.140307E-01	0.284327E-01
10.60	-.122258E+00	-.584972E-01	-.208882E-01	0.247576E-02	0.111768E-01	0.264938E-01
10.80	-.123408E+00	-.593902E-01	-.232612E-01	-.358178E-03	0.885982E-02	0.247128E-01
11.00	-.124513E+00	-.602367E-01	-.257147E-01	-.321866E-02	0.695134E-02	0.230533E-01
11.20	-.125572E+00	-.610421E-01	-.282391E-01	-.596209E-02	0.531891E-02	0.214899E-01
11.40	-.126589E+00	-.618078E-01	-.308168E-01	-.851078E-02	0.386822E-02	0.200072E-01
11.60	-.127562E+00	-.625359E-01	-.334219E-01	-.108399E-01	0.254711E-02	0.185941E-01
11.80	-.128495E+00	-.632305E-01	-.360225E-01	-.129555E-01	0.132048E-02	0.172415E-01
12.00	-.129386E+00	-.638926E-01	-.385916E-01	-.148776E-01	0.170366E-03	0.159434E-01
12.20	-.130237E+00	-.645261E-01	-.411051E-01	-.166291E-01	-.917113E-03	0.146959E-01
12.40	-.131050E+00	-.651307E-01	-.435427E-01	-.182367E-01	-.195074E-02	0.134953E-01
12.60	-.131824E+00	-.657112E-01	-.458912E-01	-.197192E-01	-.293820E-02	0.123378E-01
12.80	-.132562E+00	-.662691E-01	-.481421E-01	-.210961E-01	-.388210E-02	0.112219E-01
13.00	-.133264E+00	-.668070E-01	-.502880E-01	-.223820E-01	-.478796E-02	0.101440E-01
13.50	-.134867E+00	-.680792E-01	-.551802E-01	-.252752E-01	-.690317E-02	0.760483E-02
14.00	-.136268E+00	-.692889E-01	-.593969E-01	-.278069E-01	-.883193E-02	0.526807E-02
14.50	-.137482E+00	-.705055E-01	-.629405E-01	-.300625E-01	-.106005E-01	0.311453E-02
15.00	-.138527E+00	-.718278E-01	-.657918E-01	-.320978E-01	-.122308E-01	0.112418E-02

15.50	-.139420E+00	-.733512E-01	-.679322E-01	-.339492E-01	-.137382E-01	-.719174E-03
16.00	-.140179E+00	-.750651E-01	-.694381E-01	-.356431E-01	-.151361E-01	-.242909E-02
16.50	-.140819E+00	-.768397E-01	-.705017E-01	-.372007E-01	-.164387E-01	-.402073E-02
17.00	-.141354E+00	-.785510E-01	-.712950E-01	-.386390E-01	-.176540E-01	-.550702E-02
17.50	-.141799E+00	-.801368E-01	-.719228E-01	-.399708E-01	-.187918E-01	-.689883E-02
18.00	-.142166E+00	-.815801E-01	-.724411E-01	-.412071E-01	-.198601E-01	-.820710E-02
18.50	-.142467E+00	-.828789E-01	-.728799E-01	-.423589E-01	-.208659E-01	-.944295E-02
19.00	-.142712E+00	-.840408E-01	-.732588E-01	-.434328E-01	-.218148E-01	-.106128E-01
19.50	-.142908E+00	-.850774E-01	-.735884E-01	-.444374E-01	-.227134E-01	-.117274E-01
20.00	-.143064E+00	-.859990E-01	-.738790E-01	-.453770E-01	-.235660E-01	-.127920E-01
20.50	-.143186E+00	-.868162E-01	-.741362E-01	-.462592E-01	-.243762E-01	-.138142E-01
21.00	-.143281E+00	-.875395E-01	-.743635E-01	-.470865E-01	-.251495E-01	-.148005E-01
21.50	-.143352E+00	-.881777E-01	-.745677E-01	-.478647E-01	-.258867E-01	-.157547E-01
22.00	-.143404E+00	-.887404E-01	-.747494E-01	-.485974E-01	-.265914E-01	-.166824E-01
22.50	-.143441E+00	-.892328E-01	-.749128E-01	-.492858E-01	-.272668E-01	-.175888E-01
23.00	-.143466E+00	-.896648E-01	-.750598E-01	-.499348E-01	-.279138E-01	-.184778E-01
23.50	-.143480E+00	-.900403E-01	-.751923E-01	-.505453E-01	-.285323E-01	-.193513E-01
24.00	-.143487E+00	-.903667E-01	-.753137E-01	-.511207E-01	-.291247E-01	-.202157E-01
24.50	-.143487E+00	-.906484E-01	-.754234E-01	-.516634E-01	-.296924E-01	-.210714E-01
25.00	-.143483E+00	-.908903E-01	-.755253E-01	-.521753E-01	-.302333E-01	-.219213E-01
26.00	-.143466E+00	-.912701E-01	-.757051E-01	-.531121E-01	-.312431E-01	-.236091E-01
27.00	-.143441E+00	-.915338E-01	-.758608E-01	-.539448E-01	-.321588E-01	-.252798E-01
28.00	-.143412E+00	-.917066E-01	-.759966E-01	-.546836E-01	-.329886E-01	-.269186E-01
29.00	-.143383E+00	-.918079E-01	-.761169E-01	-.553399E-01	-.337449E-01	-.284989E-01
30.00	-.143356E+00	-.918545E-01	-.762215E-01	-.559195E-01	-.344425E-01	-.299875E-01
32.00	-.143307E+00	-.918346E-01	-.763926E-01	-.568786E-01	-.357516E-01	-.325596E-01
35.00	-.143250E+00	-.916637E-01	-.765677E-01	-.578967E-01	-.378677E-01	-.350157E-01
37.00	-.143222E+00	-.915201E-01	-.766431E-01	-.583521E-01	-.393301E-01	-.358551E-01
40.00	-.143192E+00	-.913169E-01	-.767169E-01	-.587809E-01	-.411759E-01	-.365699E-01
45.00	-.143160E+00	-.910545E-01	-.767785E-01	-.590535E-01	-.431615E-01	-.372235E-01
50.00	-.143143E+00	-.908834E-01	-.768034E-01	-.590544E-01	-.441354E-01	-.377054E-01
55.00	-.143133E+00	-.907728E-01	-.768138E-01	-.589738E-01	-.444898E-01	-.381098E-01
60.00	-.143126E+00	-.906985E-01	-.768185E-01	-.588895E-01	-.444995E-01	-.384165E-01
70.00	-.143118E+00	-.906119E-01	-.768199E-01	-.587749E-01	-.441519E-01	-.387819E-01
80.00	-.143114E+00	-.905664E-01	-.768194E-01	-.587184E-01	-.437934E-01	-.389674E-01
90.00	-.143113E+00	-.905401E-01	-.768181E-01	-.586881E-01	-.435531E-01	-.390661E-01
100.00	-.143112E-00	-.905401E-01	-.768181E-01	-.586881E-01	-.435531E-01	-.390661E-01

TAB. A.10: Orbitales Σ_u , ion Cs_2^+

R(ua)	(1) ² Π _g	(2) ² Π _g	(3) ² Π _g	(4) ² Π _g	(5) ² Π _g	(6) ² Π _g
5.00	-.404993E-01	0.696857E-01	0.118483E+00	0.119802E+00	0.150504E+00	0.210917E+00
5.20	-.476511E-01	0.624499E-01	0.111094E+00	0.111767E+00	0.142795E+00	0.203809E+00
5.40	-.541611E-01	0.558019E-01	0.104102E+00	0.104490E+00	0.135668E+00	0.197157E+00
5.60	-.600948E-01	0.496792E-01	0.972222E-01	0.981352E-01	0.129050E+00	0.190918E+00
5.80	-.655134E-01	0.440276E-01	0.907366E-01	0.923146E-01	0.122881E+00	0.185060E+00
6.00	-.704687E-01	0.387983E-01	0.846603E-01	0.869213E-01	0.117107E+00	0.179549E+00
6.20	-.750056E-01	0.339504E-01	0.789594E-01	0.819074E-01	0.111686E+00	0.174362E+00
6.40	-.791643E-01	0.294477E-01	0.735987E-01	0.772357E-01	0.106578E+00	0.169474E+00
6.60	-.829827E-01	0.252573E-01	0.685483E-01	0.728763E-01	0.101750E+00	0.164861E+00
6.80	-.864905E-01	0.213515E-01	0.637775E-01	0.687985E-01	0.971745E-01	0.160505E+00
7.00	-.897163E-01	0.177057E-01	0.592637E-01	0.649797E-01	0.928267E-01	0.156388E+00
7.20	-.926859E-01	0.142961E-01	0.549821E-01	0.613981E-01	0.886861E-01	0.152491E+00
7.40	-.954232E-01	0.111038E-01	0.509138E-01	0.580338E-01	0.847338E-01	0.148799E+00
7.60	-.979468E-01	0.811115E-02	0.470402E-01	0.548702E-01	0.809552E-01	0.145298E+00
7.80	-1.00275E+00	0.530105E-02	0.433461E-01	0.518911E-01	0.773371E-01	0.141977E+00
8.00	-1.02426E+00	0.265996E-02	0.398170E-01	0.490820E-01	0.738660E-01	0.138823E+00
8.20	-1.04413E+00	0.173612E-03	0.364396E-01	0.464306E-01	0.705336E-01	0.135828E+00
8.40	-1.06251E+00	-.216806E-02	0.332029E-01	0.439269E-01	0.673309E-01	0.132981E+00
8.60	-1.07951E+00	-.437613E-02	0.300959E-01	0.415589E-01	0.642499E-01	0.130278E+00
8.80	-1.09525E+00	-.646073E-02	0.271103E-01	0.393173E-01	0.612833E-01	0.127711E+00
9.00	-1.10982E+00	-.843022E-02	0.242378E-01	0.371948E-01	0.584258E-01	0.125277E+00
9.20	-1.12332E+00	-.102932E-01	0.214698E-01	0.351828E-01	0.556728E-01	0.122970E+00
9.40	-1.13585E+00	-.120567E-01	0.188003E-01	0.332743E-01	0.530193E-01	0.120788E+00
9.60	-1.14745E+00	-.137270E-01	0.162240E-01	0.314630E-01	0.504600E-01	0.118728E+00
9.80	-1.15821E+00	-.153110E-01	0.137350E-01	0.297430E-01	0.479930E-01	0.116787E+00
10.00	-1.16820E+00	-.168142E-01	0.113278E-01	0.281088E-01	0.456128E-01	0.114965E+00
10.20	-1.17747E+00	-.182415E-01	0.899946E-02	0.265545E-01	0.433175E-01	0.113259E+00
10.40	-1.18608E+00	-.195976E-01	0.674442E-02	0.250764E-01	0.411044E-01	0.111669E+00
10.60	-1.19407E+00	-.208866E-01	0.456040E-02	0.236694E-01	0.389694E-01	0.110193E+00
10.80	-1.20150E+00	-.221135E-01	0.244447E-02	0.223295E-01	0.369115E-01	0.108828E+00
11.00	-1.20839E+00	-.232820E-01	0.391968E-03	0.210540E-01	0.349260E-01	0.107575E+00
11.20	-1.21479E+00	-.243945E-01	-.159749E-02	0.198385E-01	0.330125E-01	0.106429E+00
11.40	-1.22075E+00	-.254561E-01	-.352807E-02	0.186799E-01	0.311679E-01	0.105387E+00
11.60	-1.22628E+00	-.264677E-01	-.539971E-02	0.175743E-01	0.293893E-01	0.104446E+00
11.80	-1.23143E+00	-.274341E-01	-.721714E-02	0.165199E-01	0.276759E-01	0.103601E+00
12.00	-1.23621E+00	-.283569E-01	-.897993E-02	0.155141E-01	0.260251E-01	0.102847E+00
12.20	-1.24065E+00	-.292395E-01	-.106905E-01	0.145525E-01	0.244345E-01	0.102178E+00
12.40	-1.24479E+00	-.300820E-01	-.123500E-01	0.136350E-01	0.229020E-01	0.101585E+00
12.60	-1.24864E+00	-.308895E-01	-.139595E-01	0.127565E-01	0.214275E-01	0.101061E+00
12.80	-1.25221E+00	-.316622E-01	-.155222E-01	0.119158E-01	0.200078E-01	0.100598E+00
13.00	-1.25555E+00	-.324026E-01	-.170376E-01	0.111104E-01	0.186414E-01	0.100185E+00
13.50	-1.26289E+00	-.341237E-01	-.206277E-01	0.923430E-02	0.154553E-01	0.993113E-01
14.00	-1.26901E+00	-.356794E-01	-.239484E-01	0.752158E-02	0.125836E-01	0.985316E-01
14.50	-1.27413E+00	-.370908E-01	-.270148E-01	0.592318E-02	0.100282E-01	0.976972E-01
15.00	-1.27841E+00	-.383791E-01	-.298391E-01	0.437788E-02	0.780388E-02	0.966869E-01

15.50	-.128199E+00	-.395612E-01	-.324332E-01	0.281981E-02	0.593781E-02	0.954208E-01
16.00	-.128498E+00	-.406559E-01	-.348059E-01	0.122007E-02	0.442407E-02	0.938631E-01
16.50	-.128749E+00	-.416815E-01	-.369625E-01	-.392527E-03	0.320247E-02	0.920125E-01
17.00	-.128958E+00	-.426628E-01	-.389018E-01	-.196577E-02	0.219023E-02	0.898982E-01
17.50	-.129133E+00	-.436322E-01	-.406102E-01	-.346419E-02	0.132781E-02	0.875678E-01
18.00	-.129280E+00	-.446323E-01	-.420663E-01	-.487327E-02	0.575729E-03	0.850747E-01
18.50	-.129404E+00	-.456976E-01	-.432526E-01	-.618858E-02	-.905827E-04	0.824754E-01
19.00	-.129507E+00	-.468139E-01	-.441999E-01	-.741189E-02	-.686892E-03	0.798231E-01
19.50	-.129594E+00	-.479333E-01	-.449733E-01	-.855027E-02	-.122727E-02	0.771647E-01
20.00	-.129668E+00	-.490112E-01	-.456282E-01	-.960720E-02	-.172020E-02	0.745418E-01
20.50	-.129731E+00	-.500256E-01	-.462026E-01	-.105906E-01	-.217360E-02	0.719854E-01
21.00	-.129783E+00	-.509669E-01	-.467159E-01	-.115059E-01	-.259494E-02	0.695241E-01
21.50	-.129827E+00	-.518333E-01	-.471833E-01	-.123593E-01	-.299127E-02	0.671757E-01
22.00	-.129866E+00	-.526263E-01	-.476113E-01	-.131563E-01	-.336727E-02	0.649567E-01
22.50	-.129898E+00	-.533503E-01	-.480053E-01	-.139033E-01	-.372930E-02	0.628777E-01
23.00	-.129927E+00	-.540094E-01	-.483714E-01	-.146034E-01	-.408042E-02	0.609426E-01
23.50	-.129951E+00	-.546074E-01	-.487114E-01	-.152624E-01	-.442744E-02	0.591556E-01
24.00	-.129973E+00	-.551489E-01	-.490289E-01	-.158839E-01	-.477191E-02	0.575161E-01
24.50	-.129991E+00	-.556372E-01	-.493262E-01	-.164722E-01	-.511821E-02	0.560228E-01
25.00	-.130007E+00	-.560785E-01	-.496045E-01	-.170305E-01	-.546649E-02	0.546705E-01
26.00	-.130035E+00	-.568319E-01	-.501129E-01	-.180709E-01	-.617388E-02	0.523611E-01
27.00	-.130057E+00	-.574343E-01	-.505643E-01	-.190293E-01	-.689232E-02	0.505267E-01
28.00	-.130075E+00	-.579100E-01	-.509670E-01	-.199230E-01	-.760903E-02	0.490940E-01
29.00	-.130090E+00	-.582805E-01	-.513285E-01	-.207675E-01	-.830551E-02	0.479895E-01
30.00	-.130103E+00	-.585629E-01	-.516549E-01	-.215689E-01	-.896290E-02	0.471451E-01
32.00	-.130123E+00	-.589192E-01	-.522172E-01	-.230562E-01	-.101072E-01	0.460168E-01
35.00	-.130147E+00	-.590977E-01	-.528857E-01	-.249597E-01	-.113427E-01	0.451543E-01
37.00	-.130158E+00	-.590731E-01	-.532421E-01	-.259621E-01	-.118901E-01	0.448679E-01
40.00	-.130172E+00	-.589251E-01	-.536751E-01	-.270381E-01	-.124281E-01	0.446489E-01
45.00	-.130189E+00	-.585768E-01	-.541988E-01	-.278958E-01	-.128928E-01	0.445262E-01
50.00	-.130200E+00	-.582510E-01	-.545560E-01	-.281110E-01	-.131030E-01	0.445040E-01
55.00	-.130208E+00	-.579962E-01	-.548092E-01	-.281212E-01	-.132062E-01	0.445038E-01
60.00	-.130213E+00	-.578073E-01	-.549913E-01	-.280953E-01	-.132653E-01	0.445067E-01
70.00	-.130221E+00	-.575663E-01	-.552263E-01	-.280493E-01	-.133283E-01	0.445127E-01
80.00	-.130225E+00	-.574340E-01	-.574340E-01	-.280210E-01	-.133630E-01	0.445160E-01
90.00	-.130228E+00	-.573569E-01	-.554339E-01	-.280029E-01	-.133829E-01	0.445191E-01
100.00	-.130229E+00	-.573120E-01	-.554800E-01	-.279900E-01	-.133829E-01	0.445191E-01

TAB. A.11: Orbitales Π_g , ion Li_2^+

R(ua)	(1) ² Π _g	(2) ² Π _g	(3) ² Π _g	(4) ² Π _g	(5) ² Π _g	(6) ² Π _g
5.00	-7.04606E-02	0.836499E-01	0.116749E+00	0.124334E+00	0.142452E+00	0.146493E+00
5.20	-1.139710E-01	0.764330E-01	0.109061E+00	0.117005E+00	0.134808E+00	0.139116E+00
5.40	-2.03776E-01	0.697344E-01	0.101893E+00	0.110196E+00	0.127687E+00	0.132260E+00
5.60	-2.63158E-01	0.635012E-01	0.951962E-01	0.103856E+00	0.121041E+00	0.125876E+00
5.80	-3.18261E-01	0.576919E-01	0.889229E-01	0.979419E-01	0.114826E+00	0.119917E+00
6.00	-3.69485E-01	0.522665E-01	0.830355E-01	0.924125E-01	0.109002E+00	0.114345E+00
6.20	-4.17146E-01	0.471914E-01	0.774994E-01	0.872354E-01	0.103534E+00	0.109124E+00
6.40	-4.61547E-01	0.424363E-01	0.722813E-01	0.823783E-01	0.983933E-01	0.104224E+00
6.60	-5.02957E-01	0.379763E-01	0.673563E-01	0.778163E-01	0.935513E-01	0.996183E-01
6.80	-5.41594E-01	0.337856E-01	0.626976E-01	0.735236E-01	0.889826E-01	0.952816E-01
7.00	-5.77671E-01	0.298449E-01	0.582849E-01	0.694799E-01	0.846659E-01	0.911939E-01
7.20	-6.11385E-01	0.261335E-01	0.540975E-01	0.656665E-01	0.805825E-01	0.873335E-01
7.40	-6.42914E-01	0.226366E-01	0.501176E-01	0.620646E-01	0.767116E-01	0.836856E-01
7.60	-6.72399E-01	0.193361E-01	0.463301E-01	0.586601E-01	0.730401E-01	0.802331E-01
7.80	-6.99983E-01	0.162207E-01	0.427207E-01	0.554387E-01	0.695517E-01	0.769617E-01
8.00	-7.25808E-01	0.132752E-01	0.392762E-01	0.523862E-01	0.662332E-01	0.738592E-01
8.20	-7.49990E-01	0.104890E-01	0.359860E-01	0.494930E-01	0.630740E-01	0.709150E-01
8.40	-7.72638E-01	0.785216E-02	0.328392E-01	0.467472E-01	0.600612E-01	0.681162E-01
8.60	-7.93850E-01	0.535404E-02	0.298260E-01	0.441380E-01	0.571870E-01	0.654540E-01
8.80	-8.13733E-01	0.298572E-02	0.269397E-01	0.416587E-01	0.544427E-01	0.629197E-01
9.00	-8.32369E-01	0.738076E-03	0.241701E-01	0.393001E-01	0.518181E-01	0.605051E-01
9.20	-8.49833E-01	-1.139532E-02	0.215117E-01	0.370547E-01	0.493067E-01	0.582027E-01
9.40	-8.66203E-01	-3.42229E-02	0.189587E-01	0.349147E-01	0.469027E-01	0.560057E-01
9.60	-8.81561E-01	-5.34909E-02	0.165039E-01	0.328739E-01	0.445979E-01	0.539079E-01
9.80	-8.95955E-01	-7.18148E-02	0.141415E-01	0.309275E-01	0.423885E-01	0.519035E-01
10.00	-9.09458E-01	-8.92676E-02	0.118682E-01	0.290692E-01	0.402672E-01	0.499862E-01
10.20	-9.22128E-01	-1.05878E-01	0.967918E-02	0.272942E-01	0.382312E-01	0.481522E-01
10.40	-9.34012E-01	-1.21722E-01	0.756880E-02	0.255968E-01	0.362748E-01	0.463958E-01
10.60	-9.45151E-01	-1.36821E-01	0.553492E-02	0.239739E-01	0.343929E-01	0.447129E-01
10.80	-9.55613E-01	-1.51233E-01	0.357367E-02	0.224197E-01	0.325827E-01	0.430997E-01
11.00	-9.65426E-01	-1.65006E-01	0.168042E-02	0.209314E-01	0.308404E-01	0.415524E-01
11.20	-9.74632E-01	-1.78152E-01	-1.47154E-03	0.195058E-01	0.291628E-01	0.400668E-01
11.40	-9.83272E-01	-1.90732E-01	-1.91118E-02	0.181378E-01	0.275458E-01	0.386408E-01
11.60	-9.91386E-01	-2.02766E-01	-3.61457E-02	0.168264E-01	0.259864E-01	0.372714E-01
11.80	-9.98990E-01	-2.14290E-01	-5.26002E-02	0.155660E-01	0.244830E-01	0.359540E-01
12.00	-1.00613E+00	-2.25331E-01	-6.85007E-02	0.143569E-01	0.230319E-01	0.346869E-01
12.20	-1.01283E+00	-2.35921E-01	-8.38608E-02	0.131939E-01	0.216309E-01	0.334669E-01
12.40	-1.01912E+00	-2.46073E-01	-9.87127E-02	0.120747E-01	0.202777E-01	0.322937E-01
12.60	-1.02503E+00	-2.55837E-01	-1.13057E-01	0.109983E-01	0.189693E-01	0.311623E-01
12.80	-1.03056E+00	-2.65213E-01	-1.26923E-01	0.996165E-02	0.177057E-01	0.300717E-01
13.00	-1.03576E+00	-2.74240E-01	-1.40320E-01	0.896298E-02	0.164830E-01	0.290200E-01
13.50	-1.04741E+00	-2.295371E-01	-1.71871E-01	0.661891E-02	0.135959E-01	0.265489E-01
14.00	-1.05733E+00	-3.14705E-01	-2.00815E-01	0.447051E-02	0.109335E-01	0.242815E-01
14.50	-1.06581E+00	-3.32501E-01	-2.27311E-01	0.249388E-02	0.847388E-02	0.221959E-01
15.00	-1.07303E+00	-3.49001E-01	-2.51511E-01	0.668905E-03	0.619891E-02	0.202719E-01

16.00	-.108443E+00	-.378843E-01	-.293573E-01	-.259525E-02	0.214275E-02	0.168457E-01
16.50	-.108890E+00	-.392494E-01	-.311674E-01	-.406442E-02	0.336577E-03	0.153156E-01
17.00	-.109270E+00	-.405444E-01	-.327984E-01	-.544043E-02	-.133543E-02	0.138906E-01
17.50	-.109594E+00	-.417768E-01	-.342638E-01	-.673479E-02	-.288379E-02	0.125582E-01
18.00	-.109869E+00	-.429510E-01	-.355780E-01	-.795496E-02	-.431496E-02	0.113060E-01
18.50	-.110103E+00	-.440685E-01	-.367545E-01	-.910947E-02	-.563747E-02	0.101155E-01
19.00	-.110301E+00	-.451301E-01	-.378091E-01	-.102041E-01	-.685908E-02	0.896092E-02
19.50	-.110470E+00	-.461359E-01	-.387559E-01	-.112439E-01	-.798885E-02	0.780115E-02
20.00	-.110613E+00	-.470842E-01	-.396082E-01	-.122332E-01	-.903224E-02	0.658476E-02
20.50	-.110734E+00	-.479762E-01	-.403762E-01	-.131742E-01	-.999916E-02	0.528284E-02
21.00	-.110837E+00	-.488111E-01	-.410721E-01	-.140691E-01	-.108961E-01	0.390892E-02
21.50	-.110925E+00	-.495900E-01	-.417050E-01	-.149210E-01	-.117290E-01	0.249996E-02
22.00	-.110999E+00	-.503147E-01	-.422817E-01	-.157297E-01	-.125067E-01	0.108129E-02
22.50	-.111061E+00	-.509864E-01	-.428084E-01	-.164994E-01	-.132334E-01	-.327447E-03
23.00	-.111115E+00	-.516073E-01	-.432923E-01	-.172293E-01	-.139153E-01	-.171730E-02
23.50	-.111161E+00	-.521801E-01	-.437371E-01	-.179211E-01	-.145571E-01	-.307808E-02
24.00	-.111200E+00	-.527063E-01	-.441483E-01	-.185783E-01	-.151623E-01	-.440534E-02
24.50	-.111233E+00	-.531894E-01	-.445284E-01	-.192014E-01	-.157344E-01	-.569544E-02
25.00	-.111262E+00	-.536306E-01	-.448806E-01	-.197916E-01	-.162776E-01	-.694555E-02
26.00	-.109194E+00	-.539716E-01	-.448556E-01	-.207456E-01	-.169906E-01	-.915164E-02
27.00	-.111341E+00	-.550348E-01	-.460618E-01	-.218618E-01	-.182048E-01	-.115018E-01
28.00	-.111367E+00	-.555523E-01	-.465433E-01	-.227383E-01	-.190553E-01	-.135013E-01
29.00	-.111388E+00	-.559686E-01	-.469676E-01	-.235226E-01	-.198546E-01	-.153096E-01
30.00	-.111404E+00	-.562989E-01	-.473429E-01	-.242229E-01	-.206269E-01	-.169209E-01
32.00	-.111428E+00	-.567529E-01	-.479749E-01	-.254009E-01	-.221979E-01	-.195119E-01
35.00	-.111452E+00	-.570672E-01	-.486952E-01	-.267452E-01	-.248092E-01	-.218732E-01
37.00	-.111465E+00	-.571235E-01	-.490635E-01	-.274925E-01	-.264165E-01	-.228485E-01
40.00	-.111479E+00	-.570804E-01	-.494924E-01	-.289304E-01	-.278794E-01	-.239324E-01
45.00	-.111497E+00	-.568700E-01	-.499740E-01	-.312830E-01	-.288510E-01	-.252140E-01
50.00	-.111509E+00	-.566422E-01	-.502682E-01	-.326572E-01	-.293912E-01	-.261152E-01
55.00	-.111518E+00	-.564583E-01	-.504523E-01	-.333143E-01	-.297253E-01	-.267773E-01
60.00	-.111525E+00	-.563234E-01	-.505724E-01	-.335174E-01	-.299474E-01	-.272754E-01
70.00	-.111534E+00	-.561583E-01	-.507143E-01	-.332763E-01	-.302253E-01	-.279463E-01
80.00	-.111540E+00	-.560720E-01	-.507900E-01	-.328380E-01	-.304010E-01	-.283470E-01
90.00	-.111543E+00	-.560239E-01	-.508349E-01	-.324799E-01	-.305289E-01	-.285929E-01
100.00	-.111546E+00	-.559950E-01	-.508620E-01	-.322220E-01	-.306270E-01	-.287500E-01

TAB. A.12: Orbitales Π_g , ion Na_2^+

R(ua)	(1) ² Π _g	(2) ² Π _g	(3) ² Π _g	(4) ² Π _g	(5) ² Π _g	(6) ² Π _g
5.00	-.730307E-02	0.748499E-01	0.102969E+00	0.111994E+00	0.131831E+00	0.160508E+00
5.20	-.108213E-01	0.706747E-01	0.954317E-01	0.107562E+00	0.126914E+00	0.154157E+00
5.40	-.143391E-01	0.664969E-01	0.880199E-01	0.103142E+00	0.121846E+00	0.146685E+00
5.60	-.177927E-01	0.623823E-01	0.807513E-01	0.987943E-01	0.116625E+00	0.138263E+00
5.80	-.211424E-01	0.583696E-01	0.736316E-01	0.945596E-01	0.111211E+00	0.129847E+00
6.00	-.243683E-01	0.544777E-01	0.666667E-01	0.904607E-01	0.105557E+00	0.122174E+00
6.20	-.274598E-01	0.507002E-01	0.598842E-01	0.865132E-01	0.996862E-01	0.115499E+00
6.40	-.304162E-01	0.469898E-01	0.533528E-01	0.827218E-01	0.937318E-01	0.109761E+00
6.60	-.332399E-01	0.431541E-01	0.472881E-01	0.790881E-01	0.878771E-01	0.104759E+00
6.80	-.359353E-01	0.386057E-01	0.423037E-01	0.756057E-01	0.822687E-01	0.100297E+00
7.00	-.385090E-01	0.331870E-01	0.385780E-01	0.722650E-01	0.769870E-01	0.962320E-01
7.20	-.409693E-01	0.275987E-01	0.354307E-01	0.690397E-01	0.720797E-01	0.924707E-01
7.40	-.433224E-01	0.221586E-01	0.325536E-01	0.658386E-01	0.676236E-01	0.889556E-01
7.60	-.455773E-01	0.169587E-01	0.298597E-01	0.623657E-01	0.638887E-01	0.856457E-01
7.80	-.477402E-01	0.120298E-01	0.273168E-01	0.585928E-01	0.608718E-01	0.825168E-01
8.00	-.498172E-01	0.738379E-02	0.249078E-01	0.548948E-01	0.581678E-01	0.795478E-01
8.20	-.518157E-01	0.302132E-02	0.226183E-01	0.513823E-01	0.556333E-01	0.767253E-01
8.40	-.537397E-01	-.106369E-02	0.204403E-01	0.480673E-01	0.532303E-01	0.740383E-01
8.60	-.555932E-01	-.488016E-02	0.183648E-01	0.449388E-01	0.509448E-01	0.714768E-01
8.80	-.573817E-01	-.843975E-02	0.163853E-01	0.419843E-01	0.487653E-01	0.690353E-01
9.00	-.591069E-01	-.117569E-01	0.144951E-01	0.391911E-01	0.466851E-01	0.667041E-01
9.20	-.607727E-01	-.148457E-01	0.126883E-01	0.365473E-01	0.446983E-01	0.644783E-01
9.40	-.623800E-01	-.177190E-01	0.109590E-01	0.340410E-01	0.427990E-01	0.623520E-01
9.60	-.639306E-01	-.203936E-01	0.930142E-02	0.316644E-01	0.409834E-01	0.603204E-01
9.80	-.654266E-01	-.228816E-01	0.771337E-02	0.294064E-01	0.392454E-01	0.583784E-01
10.00	-.668683E-01	-.251973E-01	0.618772E-02	0.272587E-01	0.375817E-01	0.565217E-01
10.20	-.682564E-01	-.273524E-01	0.472260E-02	0.252156E-01	0.359886E-01	0.547456E-01
10.40	-.695926E-01	-.293606E-01	0.331438E-02	0.232704E-01	0.344624E-01	0.530444E-01
10.60	-.708773E-01	-.312323E-01	0.195766E-02	0.214157E-01	0.329987E-01	0.514167E-01
10.80	-.721108E-01	-.329788E-01	0.652234E-03	0.196462E-01	0.315952E-01	0.498562E-01
11.00	-.732939E-01	-.346089E-01	-.606923E-03	0.179561E-01	0.302481E-01	0.483601E-01
11.20	-.744286E-01	-.361326E-01	-.182264E-02	0.163424E-01	0.289554E-01	0.469244E-01
11.40	-.755156E-01	-.375586E-01	-.299459E-02	0.147984E-01	0.277144E-01	0.455474E-01
11.60	-.765543E-01	-.388933E-01	-.412829E-02	0.133217E-01	0.265227E-01	0.442237E-01
11.80	-.775481E-01	-.401461E-01	-.522308E-02	0.119079E-01	0.253769E-01	0.429509E-01
12.00	-.784962E-01	-.413212E-01	-.628221E-02	0.105528E-01	0.242758E-01	0.417268E-01
12.20	-.794008E-01	-.424268E-01	-.730775E-02	0.925425E-02	0.232172E-01	0.405472E-01
12.40	-.802637E-01	-.434677E-01	-.830070E-02	0.800730E-02	0.221993E-01	0.394113E-01
12.60	-.810849E-01	-.444489E-01	-.926191E-02	0.681109E-02	0.212191E-01	0.383151E-01
12.80	-.818661E-01	-.453751E-01	-.101931E-01	0.566187E-02	0.202759E-01	0.372569E-01
13.00	-.826100E-01	-.462500E-01	-.110970E-01	0.455696E-02	0.193680E-01	0.362340E-01
13.50	-.843100E-01	-.482410E-01	-.132380E-01	0.197603E-02	0.172400E-01	0.338200E-01
14.00	-.858027E-01	-.499867E-01	-.152257E-01	-.371687E-03	0.152993E-01	0.315843E-01
14.50	-.871086E-01	-.515286E-01	-.170746E-01	-.251259E-02	0.135254E-01	0.295034E-01
15.00	-.882486E-01	-.528966E-01	-.187956E-01	-.446964E-02	0.119004E-01	0.275534E-01

15.50	-.892407E-01	-.541147E-01	-.204017E-01	-.626271E-02	0.104093E-01	0.257153E-01
16.00	-.901029E-01	-.552029E-01	-.219019E-01	-.790793E-02	0.903907E-02	0.239731E-01
16.50	-.908519E-01	-.561789E-01	-.233059E-01	-.942088E-02	0.777612E-02	0.223161E-01
17.00	-.914998E-01	-.570548E-01	-.246198E-01	-.108148E-01	0.660915E-02	0.207332E-01
17.50	-.920610E-01	-.578430E-01	-.258510E-01	-.121020E-01	0.552903E-02	0.192180E-01
18.00	-.925268E-01	-.585470E-01	-.269570E-01	-.130095E+01	0.206976E-01	0.629486E-01
18.50	-.929635E-01	-.591945E-01	-.280915E-01	-.144005E-01	0.359151E-02	0.163805E-01
19.00	-.933227E-01	-.597747E-01	-.291117E-01	-.154317E-01	0.271626E-02	0.150583E-01
19.50	-.936321E-01	-.603001E-01	-.300701E-01	-.163961E-01	0.189193E-02	0.138019E-01
20.00	-.938978E-01	-.607768E-01	-.309728E-01	-.172998E-01	0.111121E-02	0.126152E-01
20.50	-.941257E-01	-.612097E-01	-.318227E-01	-.181507E-01	0.367268E-03	0.115023E-01
21.00	-.943202E-01	-.616032E-01	-.326242E-01	-.189552E-01	-.348244E-03	0.104658E-01
21.50	-.944873E-01	-.619613E-01	-.333793E-01	-.197173E-01	-.104129E-02	0.950871E-02
22.00	-.946295E-01	-.622865E-01	-.340915E-01	-.204415E-01	-.171649E-02	0.863251E-02
22.50	-.947511E-01	-.625831E-01	-.347641E-01	-.211321E-01	-.237913E-02	0.783687E-02
23.00	-.948542E-01	-.628532E-01	-.353992E-01	-.217922E-01	-.303021E-02	0.711979E-02
23.50	-.949415E-01	-.630995E-01	-.359985E-01	-.224245E-01	-.367051E-02	0.647749E-02
24.00	-.950165E-01	-.633235E-01	-.365655E-01	-.230305E-01	-.430054E-02	0.590646E-02
24.50	-.950796E-01	-.635286E-01	-.371026E-01	-.236126E-01	-.491763E-02	0.539937E-02
25.00	-.951329E-01	-.637149E-01	-.376089E-01	-.241719E-01	-.552093E-02	0.495007E-02
26.00	-.952159E-01	-.640389E-01	-.385429E-01	-.252259E-01	-.667090E-02	0.419710E-02
27.00	-.952745E-01	-.643075E-01	-.393785E-01	-.261985E-01	-.773153E-02	0.359547E-02
28.00	-.953159E-01	-.645289E-01	-.401269E-01	-.270969E-01	-.868489E-02	0.310211E-02
29.00	-.953454E-01	-.647104E-01	-.407954E-01	-.279224E-01	-.952442E-02	0.268358E-02
30.00	-.953652E-01	-.648592E-01	-.413922E-01	-.286802E-01	-.102492E-01	0.231683E-02
32.00	-.953889E-01	-.650739E-01	-.423939E-01	-.300079E-01	-.113769E-01	0.168012E-02
35.00	-.954048E-01	-.652558E-01	-.434998E-01	-.315918E-01	-.124338E-01	0.862233E-03
37.00	-.954099E-01	-.653179E-01	-.440239E-01	-.324299E-01	-.128829E-01	0.390069E-03
40.00	-.954156E-01	-.653626E-01	-.445686E-01	-.334356E-01	-.134386E-01	-.194627E-03
45.00	-.954240E-01	-.653790E-01	-.450340E-01	-.346200E-01	-.144930E-01	-.811040E-03
50.00	-.954315E-01	-.653725E-01	-.451885E-01	-.353635E-01	-.156445E-01	-.110648E-02
55.00	-.954372E-01	-.653632E-01	-.452082E-01	-.358052E-01	-.165512E-01	-.125619E-02
60.00	-.954430E-01	-.653550E-01	-.451820E-01	-.360520E-01	-.170930E-01	-.134805E-02
70.00	-.954517E-01	-.653427E-01	-.451227E-01	-.362567E-01	-.174377E-01	-.145767E-02
80.00	-.954572E-01	-.653362E-01	-.450892E-01	-.363202E-01	-.174422E-01	-.151723E-02
90.00	-.954610E-01	-.653310E-01	-.450740E-01	-.363450E-01	-.174110E-01	-.155203E-02
100.00	-.954631E-01	-.653281E-01	-.450671E-01	-.363571E-01	-.173871E-01	-.155203E-02

TAB. A.13: Orbitales Π_g , ion Rb_2^+

R(ua)	(1) ² Π _g	(2) ² Π _g	(3) ² Π _g	(4) ² Π _g	(5) ² Π _g	(6) ² Π _g
5.00	-.228152E-01	0.586858E-01	0.905418E-01	0.100448E+00	0.116938E+00	0.161480E+00
5.20	-.232160E-01	0.572660E-01	0.858580E-01	0.973780E-01	0.114933E+00	0.159442E+00
5.40	-.243232E-01	0.551528E-01	0.801588E-01	0.943988E-01	0.112355E+00	0.151216E+00
5.60	-.258981E-01	0.525249E-01	0.739999E-01	0.913639E-01	0.109372E+00	0.142068E+00
5.80	-.277694E-01	0.494756E-01	0.677136E-01	0.882466E-01	0.106097E+00	0.133385E+00
6.00	-.298122E-01	0.460128E-01	0.615458E-01	0.850718E-01	0.102602E+00	0.125394E+00
6.20	-.319386E-01	0.420624E-01	0.557424E-01	0.818744E-01	0.989304E-01	0.118217E+00
6.40	-.340840E-01	0.375170E-01	0.505410E-01	0.786860E-01	0.951160E-01	0.111900E+00
6.60	-.362085E-01	0.323645E-01	0.460585E-01	0.755305E-01	0.911995E-01	0.106415E+00
6.80	-.382814E-01	0.267676E-01	0.422156E-01	0.724246E-01	0.872436E-01	0.101673E+00
7.00	-.402848E-01	0.209602E-01	0.388472E-01	0.693812E-01	0.833252E-01	0.975532E-01
7.20	-.422101E-01	0.151349E-01	0.358099E-01	0.664059E-01	0.795139E-01	0.939309E-01
7.40	-.440509E-01	0.941910E-02	0.330161E-01	0.635051E-01	0.758591E-01	0.907031E-01
7.60	-.458066E-01	0.388735E-02	0.304104E-01	0.606794E-01	0.723834E-01	0.877924E-01
7.80	-.474779E-01	-.141490E-02	0.279611E-01	0.579301E-01	0.690921E-01	0.851451E-01
8.00	-.490678E-01	-.646375E-02	0.256462E-01	0.552562E-01	0.659792E-01	0.827242E-01
8.20	-.505804E-01	-.112494E-01	0.234516E-01	0.526556E-01	0.630336E-01	0.805036E-01
8.40	-.520197E-01	-.157667E-01	0.213663E-01	0.501273E-01	0.602413E-01	0.784633E-01
8.60	-.533913E-01	-.200203E-01	0.193807E-01	0.476667E-01	0.575897E-01	0.765877E-01
8.80	-.546988E-01	-.240158E-01	0.174892E-01	0.452712E-01	0.550662E-01	0.748642E-01
9.00	-.559484E-01	-.277614E-01	0.156826E-01	0.429376E-01	0.526616E-01	0.732816E-01
9.20	-.571462E-01	-.312672E-01	0.139578E-01	0.406628E-01	0.503658E-01	0.718288E-01
9.40	-.582974E-01	-.345434E-01	0.123086E-01	0.384436E-01	0.481736E-01	0.704966E-01
9.60	-.594061E-01	-.375991E-01	0.107309E-01	0.362769E-01	0.460769E-01	0.692769E-01
9.80	-.604786E-01	-.404446E-01	0.921842E-02	0.341624E-01	0.440714E-01	0.681594E-01
10.00	-.615198E-01	-.430888E-01	0.776921E-02	0.320962E-01	0.421532E-01	0.671372E-01
10.20	-.625357E-01	-.455407E-01	0.637826E-02	0.300803E-01	0.403183E-01	0.662023E-01
10.40	-.635313E-01	-.478093E-01	0.504269E-02	0.281117E-01	0.385607E-01	0.653467E-01
10.60	-.645112E-01	-.499022E-01	0.375976E-02	0.261918E-01	0.368788E-01	0.645648E-01
10.80	-.654792E-01	-.518262E-01	0.252582E-02	0.243198E-01	0.352678E-01	0.638488E-01
11.00	-.664397E-01	-.535887E-01	0.133734E-02	0.224973E-01	0.337243E-01	0.631923E-01
11.20	-.673941E-01	-.552001E-01	0.192906E-03	0.207239E-01	0.322449E-01	0.625899E-01
11.40	-.683448E-01	-.566668E-01	-.910775E-03	0.190002E-01	0.308262E-01	0.620362E-01
11.60	-.692899E-01	-.579999E-01	-.197589E-02	0.173261E-01	0.294641E-01	0.615251E-01
11.80	-.702295E-01	-.592085E-01	-.300352E-02	0.157025E-01	0.281565E-01	0.610525E-01
12.00	-.711596E-01	-.603036E-01	-.399663E-02	0.141284E-01	0.269004E-01	0.606134E-01
12.20	-.720781E-01	-.612971E-01	-.495611E-02	0.126039E-01	0.256929E-01	0.602029E-01
12.40	-.729797E-01	-.621987E-01	-.588574E-02	0.111293E-01	0.245313E-01	0.598163E-01
12.60	-.738612E-01	-.630192E-01	-.678420E-02	0.970280E-02	0.234128E-01	0.594498E-01
12.80	-.747191E-01	-.637691E-01	-.765510E-02	0.832390E-02	0.223359E-01	0.590989E-01
13.00	-.755510E-01	-.644550E-01	-.849896E-02	0.699104E-02	0.212980E-01	0.587610E-01
13.50	-.775032E-01	-.659422E-01	-.104992E-01	0.385783E-02	0.188598E-01	0.579478E-01
14.00	-.792609E-01	-.671739E-01	-.123579E-01	0.990067E-03	0.166261E-01	0.571481E-01
14.50	-.808235E-01	-.682125E-01	-.140905E-01	-.163247E-02	0.145735E-01	0.563295E-01
15.00	-.822008E-01	-.691028E-01	-.157088E-01	-.403082E-02	0.126812E-01	0.554712E-01

15.50	-.834072E-01	-.698752E-01	-.172252E-01	-.622517E-02	0.109318E-01	0.545598E-01
16.00	-.844591E-01	-.705511E-01	-.186481E-01	-.823609E-02	0.931191E-02	0.535859E-01
16.50	-.853737E-01	-.711467E-01	-.199867E-01	-.100827E-01	0.780627E-02	0.525503E-01
17.00	-.861660E-01	-.716740E-01	-.212470E-01	-.117810E-01	0.640398E-02	0.514620E-01
17.50	-.868508E-01	-.721438E-01	-.224358E-01	-.133488E-01	0.509417E-02	0.503422E-01
18.00	-.874421E-01	-.725641E-01	-.235571E-01	-.148021E-01	0.386790E-02	0.492229E-01
18.50	-.879509E-01	-.729409E-01	-.246179E-01	-.161529E-01	0.271705E-02	0.481411E-01
19.00	-.883868E-01	-.732798E-01	-.256198E-01	-.174148E-01	0.163322E-02	0.471312E-01
19.50	-.887604E-01	-.735854E-01	-.265684E-01	-.185984E-01	0.609625E-03	0.462166E-01
20.00	-.890790E-01	-.738620E-01	-.274670E-01	-.197120E-01	-.358951E-03	0.454110E-01
20.50	-.893502E-01	-.741122E-01	-.283192E-01	-.207642E-01	-.127824E-02	0.447178E-01
21.00	-.895805E-01	-.743395E-01	-.291275E-01	-.217605E-01	-.215253E-02	0.441325E-01
21.50	-.897747E-01	-.745467E-01	-.298967E-01	-.227057E-01	-.298672E-02	0.436423E-01
22.00	-.899384E-01	-.747364E-01	-.306294E-01	-.236034E-01	-.378238E-02	0.432326E-01
22.50	-.900758E-01	-.749088E-01	-.313278E-01	-.244558E-01	-.454276E-02	0.428902E-01
23.00	-.901898E-01	-.750668E-01	-.319948E-01	-.252658E-01	-.527083E-02	0.425992E-01
23.50	-.902843E-01	-.752113E-01	-.326333E-01	-.260333E-01	-.596731E-02	0.423477E-01
24.00	-.903627E-01	-.753437E-01	-.332447E-01	-.267597E-01	-.663372E-02	0.421243E-01
24.50	-.904254E-01	-.754654E-01	-.338314E-01	-.274464E-01	-.727136E-02	0.419226E-01
25.00	-.904773E-01	-.755773E-01	-.343943E-01	-.280933E-01	-.788235E-02	0.417347E-01
26.00	-.905501E-01	-.757741E-01	-.354551E-01	-.292741E-01	-.902305E-02	0.413879E-01
27.00	-.905928E-01	-.759388E-01	-.364338E-01	-.303098E-01	-.100618E-01	0.410622E-01
28.00	-.906156E-01	-.760776E-01	-.373346E-01	-.312126E-01	-.110036E-01	0.407494E-01
29.00	-.906239E-01	-.761939E-01	-.381579E-01	-.319959E-01	-.118539E-01	0.404451E-01
30.00	-.906225E-01	-.762905E-01	-.389075E-01	-.326745E-01	-.126175E-01	0.401495E-01
32.00	-.906046E-01	-.764386E-01	-.401856E-01	-.337706E-01	-.139076E-01	0.395854E-01
35.00	-.905667E-01	-.765797E-01	-.416047E-01	-.349487E-01	-.153577E-01	0.388333E-01
37.00	-.905441E-01	-.766391E-01	-.422711E-01	-.355331E-01	-.160981E-01	0.384139E-01
40.00	-.905169E-01	-.766979E-01	-.429519E-01	-.362279E-01	-.170279E-01	0.379271E-01
45.00	-.904905E-01	-.767515E-01	-.435125E-01	-.370995E-01	-.184235E-01	0.374475E-01
50.00	-.904784E-01	-.767774E-01	-.436694E-01	-.377284E-01	-.197174E-01	0.372366E-01
55.00	-.904738E-01	-.767918E-01	-.436428E-01	-.381698E-01	-.207698E-01	0.371492E-01
60.00	-.904715E-01	-.767995E-01	-.435515E-01	-.384695E-01	-.215005E-01	0.371095E-01
70.00	-.904719E-01	-.768069E-01	-.433629E-01	-.388119E-01	-.221709E-01	0.370721E-01
80.00	-.904744E-01	-.768104E-01	-.432404E-01	-.389784E-01	-.223124E-01	0.370526E-01
90.00	-.904761E-01	-.768111E-01	-.431701E-01	-.390651E-01	-.223151E-01	0.370409E-01
100.00	-.904782E-01	-.768112E-01	-.431292E-01	-.391142E-01	-.222982E-01	0.370328E-01

TAB. A.14: Orbitales Π_g , ion Cs_2^+

R(ua)	(1) ² Π _u	(2) ² Π _u	(3) ² Π _u	(4) ² Π _u	(5) ² Π _u	(6) ² Π _u
5.00	-.130131E+00	0.320307E-01	0.668347E-01	0.986807E-01	0.116535E+00	0.176878E+00
5.20	-.132055E+00	0.264679E-01	0.585729E-01	0.920069E-01	0.108623E+00	0.170554E+00
5.40	-.133657E+00	0.213999E-01	0.508709E-01	0.858759E-01	0.101292E+00	0.163533E+00
5.60	-.134986E+00	0.167692E-01	0.436762E-01	0.802262E-01	0.944872E-01	0.156263E+00
5.80	-.136078E+00	0.125266E-01	0.369426E-01	0.750096E-01	0.881596E-01	0.149169E+00
6.00	-.136968E+00	0.862727E-02	0.306313E-01	0.701813E-01	0.822693E-01	0.142406E+00
6.20	-.137682E+00	0.503738E-02	0.247084E-01	0.657034E-01	0.767814E-01	0.136022E+00
6.40	-.138244E+00	0.172074E-02	0.191487E-01	0.615427E-01	0.716657E-01	0.130018E+00
6.60	-.138674E+00	-.134970E-02	0.139283E-01	0.576683E-01	0.668973E-01	0.124384E+00
6.80	-.138989E+00	-.420551E-02	0.903149E-02	0.540525E-01	0.624565E-01	0.119105E+00
7.00	-.139203E+00	-.687427E-02	0.444673E-02	0.506697E-01	0.583257E-01	0.114166E+00
7.20	-.139329E+00	-.938992E-02	0.172081E-03	0.474941E-01	0.544961E-01	0.109548E+00
7.40	-.139380E+00	-.117952E-01	-.378119E-02	0.444968E-01	0.509598E-01	0.105237E+00
7.60	-.139364E+00	-.141478E-01	-.738585E-02	0.416532E-01	0.477142E-01	0.101217E+00
7.80	-.139290E+00	-.165239E-01	-.105909E-01	0.389361E-01	0.447571E-01	0.974771E-01
8.00	-.139168E+00	-.189970E-01	-.133490E-01	0.363230E-01	0.420850E-01	0.940030E-01
8.20	-.139003E+00	-.215884E-01	-.156624E-01	0.337996E-01	0.396906E-01	0.907856E-01
8.40	-.138802E+00	-.242471E-01	-.176011E-01	0.313589E-01	0.375559E-01	0.878139E-01
8.60	-.138572E+00	-.269001E-01	-.192601E-01	0.290019E-01	0.356619E-01	0.850809E-01
8.80	-.138318E+00	-.294937E-01	-.207127E-01	0.267313E-01	0.339813E-01	0.825783E-01
9.00	-.138043E+00	-.319962E-01	-.220092E-01	0.245508E-01	0.324908E-01	0.802988E-01
9.20	-.137754E+00	-.343912E-01	-.231822E-01	0.224618E-01	0.311668E-01	0.782368E-01
9.40	-.137455E+00	-.366747E-01	-.242557E-01	0.204653E-01	0.299863E-01	0.763853E-01
9.60	-.137146E+00	-.388440E-01	-.252440E-01	0.185590E-01	0.289280E-01	0.747370E-01
9.80	-.136834E+00	-.409030E-01	-.261620E-01	0.167410E-01	0.279710E-01	0.732840E-01
10.00	-.136520E+00	-.428532E-01	-.270202E-01	0.150078E-01	0.270968E-01	0.720138E-01
10.20	-.136209E+00	-.446995E-01	-.278275E-01	0.133565E-01	0.262845E-01	0.709165E-01
10.40	-.135900E+00	-.464466E-01	-.285906E-01	0.117834E-01	0.255174E-01	0.699734E-01
10.60	-.135596E+00	-.480986E-01	-.293156E-01	0.102844E-01	0.247794E-01	0.691694E-01
10.80	-.135298E+00	-.496595E-01	-.300095E-01	0.885547E-02	0.240575E-01	0.684825E-01
11.00	-.135009E+00	-.511360E-01	-.306740E-01	0.749397E-02	0.233400E-01	0.678890E-01
11.20	-.134728E+00	-.525305E-01	-.313145E-01	0.619551E-02	0.226185E-01	0.673675E-01
11.40	-.134458E+00	-.538471E-01	-.319331E-01	0.495693E-02	0.218869E-01	0.668929E-01
11.60	-.134198E+00	-.550897E-01	-.325317E-01	0.377629E-02	0.211423E-01	0.664433E-01
11.80	-.133947E+00	-.562621E-01	-.331111E-01	0.264886E-02	0.203819E-01	0.659989E-01
12.00	-.133709E+00	-.573679E-01	-.336749E-01	0.157307E-02	0.196071E-01	0.655421E-01
12.20	-.133480E+00	-.584095E-01	-.342215E-01	0.546546E-03	0.188185E-01	0.650595E-01
12.40	-.133263E+00	-.593910E-01	-.347530E-01	-.432960E-03	0.180170E-01	0.645420E-01
12.60	-.133056E+00	-.603145E-01	-.352695E-01	-.136954E-02	0.172055E-01	0.639835E-01
12.80	-.132859E+00	-.611822E-01	-.357712E-01	-.226315E-02	0.163858E-01	0.633808E-01
13.00	-.132673E+00	-.619966E-01	-.362586E-01	-.311664E-02	0.155614E-01	0.627334E-01
13.50	-.132249E+00	-.638187E-01	-.374177E-01	-.508770E-02	0.134923E-01	0.609393E-01
14.00	-.131880E+00	-.653574E-01	-.384934E-01	-.684642E-02	0.114386E-01	0.589536E-01
14.50	-.131564E+00	-.666458E-01	-.394898E-01	-.841882E-02	0.942418E-02	0.568722E-01
15.00	-.131292E+00	-.677101E-01	-.404131E-01	-.982712E-02	0.746588E-02	0.547879E-01

15.50	-.131062E+00	-.685772E-01	-.412672E-01	-.110942E-01	0.557581E-02	0.527808E-01
16.00	-.130867E+00	-.692699E-01	-.420569E-01	-.122389E-01	0.376107E-02	0.509141E-01
16.50	-.130705E+00	-.698085E-01	-.427895E-01	-.132825E-01	0.202647E-02	0.492325E-01
17.00	-.130569E+00	-.702118E-01	-.434698E-01	-.142438E-01	0.378233E-03	0.477612E-01
17.50	-.130457E+00	-.704972E-01	-.441022E-01	-.151402E-01	-.118019E-02	0.465108E-01
18.00	-.130365E+00	-.706793E-01	-.446903E-01	-.159903E-01	-.264127E-02	0.454797E-01
18.50	-.130292E+00	-.707726E-01	-.452396E-01	-.168116E-01	-.399958E-02	0.446554E-01
19.00	-.130232E+00	-.707869E-01	-.457529E-01	-.176179E-01	-.524789E-02	0.440171E-01
19.50	-.130184E+00	-.707333E-01	-.462343E-01	-.184223E-01	-.638127E-02	0.435427E-01
20.00	-.130148E+00	-.706222E-01	-.466852E-01	-.192342E-01	-.739720E-02	0.432058E-01
20.50	-.130120E+00	-.704606E-01	-.471086E-01	-.200566E-01	-.829360E-02	0.429814E-01
21.00	-.130098E+00	-.702549E-01	-.475069E-01	-.208909E-01	-.907494E-02	0.428441E-01
21.50	-.130082E+00	-.700133E-01	-.478823E-01	-.217333E-01	-.974727E-02	0.427737E-01
22.00	-.130071E+00	-.697403E-01	-.482353E-01	-.225773E-01	-.103213E-01	0.427537E-01
22.50	-.130064E+00	-.694403E-01	-.485693E-01	-.234133E-01	-.108083E-01	0.427667E-01
23.00	-.130060E+00	-.691184E-01	-.488844E-01	-.242344E-01	-.112174E-01	0.428036E-01
23.50	-.130058E+00	-.687774E-01	-.491814E-01	-.250314E-01	-.115624E-01	0.428546E-01
24.00	-.130058E+00	-.684219E-01	-.494629E-01	-.257969E-01	-.118509E-01	0.429141E-01
24.50	-.130059E+00	-.680552E-01	-.497292E-01	-.265252E-01	-.120922E-01	0.429768E-01
25.00	-.130062E+00	-.676795E-01	-.499815E-01	-.272095E-01	-.122945E-01	0.430395E-01
26.00	-.130069E+00	-.669109E-01	-.504469E-01	-.284379E-01	-.126049E-01	0.431621E-01
27.00	-.130078E+00	-.661353E-01	-.508643E-01	-.294623E-01	-.128223E-01	0.432767E-01
28.00	-.130088E+00	-.653680E-01	-.512400E-01	-.302760E-01	-.129740E-01	0.433830E-01
29.00	-.130098E+00	-.646225E-01	-.515775E-01	-.308815E-01	-.130805E-01	0.434855E-01
30.00	-.130108E+00	-.639099E-01	-.518809E-01	-.312889E-01	-.131549E-01	0.435861E-01
32.00	-.130125E+00	-.626192E-01	-.524012E-01	-.315782E-01	-.132382E-01	0.437828E-01
35.00	-.130147E+00	-.610887E-01	-.530107E-01	-.310767E-01	-.132697E-01	0.440523E-01
37.00	-.130158E+00	-.603351E-01	-.533311E-01	-.304501E-01	-.132551E-01	0.441959E-01
40.00	-.130172E+00	-.595291E-01	-.537221E-01	-.295211E-01	-.132141E-01	0.443469E-01
45.00	-.130189E+00	-.587338E-01	-.542098E-01	-.285758E-01	-.131728E-01	0.444592E-01
50.00	-.130200E+00	-.582880E-01	-.545570E-01	-.282420E-01	-.131890E-01	0.444920E-01
55.00	-.130208E+00	-.580042E-01	-.548082E-01	-.281402E-01	-.132292E-01	0.445018E-01
60.00	-.130213E+00	-.578093E-01	-.549913E-01	-.280973E-01	-.132703E-01	0.445067E-01
70.00	-.130221E+00	-.575663E-01	-.552263E-01	-.280493E-01	-.133293E-01	0.445127E-01
80.00	-.130225E+00	-.574340E-01	-.553580E-01	-.280210E-01	-.133630E-01	0.445160E-01
90.00	-.130228E+00	-.573569E-01	-.554339E-01	-.280029E-01	-.133630E-01	0.445191E-01
100.00	-.130228E+00	-.573569E-01	-.554339E-01	-.280029E-01	-.133630E-01	0.445191E-01

TAB. A.15: Orbitales Π_u , ion Li_2^+

R(ua)	(1) ² Π _u	(2) ² Π _u	(3) ² Π _u	(4) ² Π _u	(5) ² Π _u	(6) ² Π _u
5.00	-.938711E-01	0.406319E-01	0.676109E-01	0.102029E+00	0.116319E+00	0.135179E+00
5.20	-.979370E-01	0.343350E-01	0.600810E-01	0.951400E-01	0.108919E+00	0.128021E+00
5.40	-.101472E+00	0.285874E-01	0.530864E-01	0.887954E-01	0.102046E+00	0.121399E+00
5.60	-.104540E+00	0.233292E-01	0.465772E-01	0.829412E-01	0.956512E-01	0.115258E+00
5.80	-.107198E+00	0.185099E-01	0.405099E-01	0.775289E-01	0.896859E-01	0.109552E+00
6.00	-.109494E+00	0.140805E-01	0.348455E-01	0.725165E-01	0.841115E-01	0.104239E+00
6.20	-.111474E+00	0.100004E-01	0.295514E-01	0.678654E-01	0.788924E-01	0.992804E-01
6.40	-.113173E+00	0.623335E-02	0.245973E-01	0.635423E-01	0.739973E-01	0.946463E-01
6.60	-.114626E+00	0.274433E-02	0.199593E-01	0.595173E-01	0.694003E-01	0.903073E-01
6.80	-.115861E+00	-.496438E-03	0.156166E-01	0.557656E-01	0.650746E-01	0.862376E-01
7.00	-.116905E+00	-.351610E-02	0.115489E-01	0.522619E-01	0.609989E-01	0.824149E-01
7.20	-.117779E+00	-.634250E-02	0.774250E-02	0.489855E-01	0.571535E-01	0.788175E-01
7.40	-.118503E+00	-.899743E-02	0.418357E-02	0.459176E-01	0.535216E-01	0.754286E-01
7.60	-.119097E+00	-.115069E-01	0.863103E-03	0.430401E-01	0.500871E-01	0.722321E-01
7.80	-.119574E+00	-.138913E-01	-.222933E-02	0.403377E-01	0.468357E-01	0.692107E-01
8.00	-.119950E+00	-.161718E-01	-.509777E-02	0.377942E-01	0.437562E-01	0.663522E-01
8.20	-.120236E+00	-.183680E-01	-.775103E-02	0.353950E-01	0.408380E-01	0.636440E-01
8.40	-.120443E+00	-.204948E-01	-.101938E-01	0.331272E-01	0.380702E-01	0.610732E-01
8.60	-.120582E+00	-.225660E-01	-.124360E-01	0.309770E-01	0.354470E-01	0.586280E-01
8.80	-.120661E+00	-.245893E-01	-.144873E-01	0.289297E-01	0.329627E-01	0.562977E-01
9.00	-.120688E+00	-.265699E-01	-.163619E-01	0.269731E-01	0.306121E-01	0.540691E-01
9.20	-.120671E+00	-.285083E-01	-.180733E-01	0.250927E-01	0.283947E-01	0.519267E-01
9.40	-.120615E+00	-.304033E-01	-.196393E-01	0.232727E-01	0.263087E-01	0.498467E-01
9.60	-.120526E+00	-.322521E-01	-.210751E-01	0.214999E-01	0.243559E-01	0.477939E-01
9.80	-.120409E+00	-.340515E-01	-.223955E-01	0.197635E-01	0.225355E-01	0.457245E-01
10.00	-.120268E+00	-.357978E-01	-.236148E-01	0.180572E-01	0.208412E-01	0.436252E-01
10.20	-.120107E+00	-.374888E-01	-.247448E-01	0.163792E-01	0.192652E-01	0.415282E-01
10.40	-.119929E+00	-.391242E-01	-.257972E-01	0.147338E-01	0.177938E-01	0.394638E-01
10.60	-.119737E+00	-.407021E-01	-.267791E-01	0.131239E-01	0.164159E-01	0.374489E-01
10.80	-.119533E+00	-.422223E-01	-.276993E-01	0.115557E-01	0.151167E-01	0.354907E-01
11.00	-.119321E+00	-.436846E-01	-.285636E-01	0.100324E-01	0.138884E-01	0.335904E-01
11.20	-.119101E+00	-.450892E-01	-.293782E-01	0.855485E-02	0.127208E-01	0.317478E-01
11.40	-.118875E+00	-.464362E-01	-.301472E-01	0.712382E-02	0.116088E-01	0.299618E-01
11.60	-.118645E+00	-.477286E-01	-.308756E-01	0.574043E-02	0.105464E-01	0.282294E-01
11.80	-.118411E+00	-.489660E-01	-.315650E-01	0.440298E-02	0.952998E-02	0.265490E-01
12.00	-.118176E+00	-.501501E-01	-.322201E-01	0.311093E-02	0.855493E-02	0.249179E-01
12.20	-.117940E+00	-.512811E-01	-.328431E-01	0.186392E-02	0.761792E-02	0.233349E-01
12.40	-.117704E+00	-.523613E-01	-.334353E-01	0.658733E-03	0.671773E-02	0.217967E-01
12.60	-.117470E+00	-.533917E-01	-.339997E-01	-.503708E-03	0.585029E-02	0.203023E-01
12.80	-.117235E+00	-.543743E-01	-.345383E-01	-.162535E-02	0.501465E-02	0.188497E-01
13.00	-.117004E+00	-.553090E-01	-.350520E-01	-.270802E-02	0.420898E-02	0.174360E-01
13.50	-.116439E+00	-.574501E-01	-.362371E-01	-.525309E-02	0.231291E-02	0.140639E-01
14.00	-.115898E+00	-.593255E-01	-.372965E-01	-.758149E-02	0.568507E-03	0.109045E-01
14.50	-.115388E+00	-.609551E-01	-.382461E-01	-.971012E-02	-.104212E-02	0.793888E-02
15.00	-.114912E+00	-.623611E-01	-.390991E-01	-.116581E-01	-.253609E-02	0.515091E-02

16.00	-.114071E+00	-.645693E-01	-.405623E-01	-.150663E-01	-.524025E-02	0.677452E-04
16.50	-.113708E+00	-.654084E-01	-.411914E-01	-.165524E-01	-.648842E-02	-.223042E-02
17.00	-.113383E+00	-.660914E-01	-.417624E-01	-.179084E-01	-.770643E-02	-.435143E-02
17.50	-.113095E+00	-.666348E-01	-.422838E-01	-.191458E-01	-.894879E-02	-.625479E-02
18.00	-.112840E+00	-.670520E-01	-.427620E-01	-.202720E-01	-.102940E-01	-.787496E-02
18.50	-.112617E+00	-.673575E-01	-.432005E-01	-.212965E-01	-.117795E-01	-.918447E-02
19.00	-.112424E+00	-.675631E-01	-.436061E-01	-.222261E-01	-.133521E-01	-.102481E-01
19.50	-.112258E+00	-.676799E-01	-.439829E-01	-.230689E-01	-.149319E-01	-.111529E-01
20.00	-.112115E+00	-.677202E-01	-.443332E-01	-.238302E-01	-.164712E-01	-.119552E-01
20.50	-.111994E+00	-.676922E-01	-.446612E-01	-.245172E-01	-.179502E-01	-.126842E-01
21.00	-.111891E+00	-.676051E-01	-.449701E-01	-.251341E-01	-.193581E-01	-.133561E-01
21.50	-.111805E+00	-.674670E-01	-.452610E-01	-.256870E-01	-.206930E-01	-.139800E-01
22.00	-.111733E+00	-.672847E-01	-.455367E-01	-.261827E-01	-.219517E-01	-.145627E-01
22.50	-.111672E+00	-.670654E-01	-.457984E-01	-.266274E-01	-.231344E-01	-.151104E-01
23.00	-.111622E+00	-.668153E-01	-.460473E-01	-.270293E-01	-.242383E-01	-.156263E-01
23.50	-.111582E+00	-.665381E-01	-.462851E-01	-.274031E-01	-.252581E-01	-.161141E-01
24.00	-.111548E+00	-.662403E-01	-.465113E-01	-.277753E-01	-.261723E-01	-.165763E-01
24.50	-.111521E+00	-.659254E-01	-.467284E-01	-.282024E-01	-.269324E-01	-.170154E-01
25.00	-.111500E+00	-.655976E-01	-.469366E-01	-.287576E-01	-.274726E-01	-.174336E-01
26.00	-.109382E+00	-.645836E-01	-.468436E-01	-.298136E-01	-.278086E-01	-.180336E-01
27.00	-.111451E+00	-.642208E-01	-.476818E-01	-.315048E-01	-.283448E-01	-.189288E-01
28.00	-.111441E+00	-.635313E-01	-.480063E-01	-.327533E-01	-.285413E-01	-.195873E-01
29.00	-.111437E+00	-.628616E-01	-.482996E-01	-.338686E-01	-.286846E-01	-.201946E-01
30.00	-.111437E+00	-.622209E-01	-.485639E-01	-.348579E-01	-.287989E-01	-.207549E-01
32.00	-.111442E+00	-.610529E-01	-.490099E-01	-.364899E-01	-.289809E-01	-.217509E-01
35.00	-.111456E+00	-.596162E-01	-.494952E-01	-.381682E-01	-.291892E-01	-.229802E-01
37.00	-.111467E+00	-.588695E-01	-.497195E-01	-.388395E-01	-.292925E-01	-.236565E-01
40.00	-.111479E+00	-.580264E-01	-.499514E-01	-.392864E-01	-.294104E-01	-.245064E-01
45.00	-.111497E+00	-.571760E-01	-.501870E-01	-.389010E-01	-.295670E-01	-.255980E-01
50.00	-.111509E+00	-.567322E-01	-.503512E-01	-.376862E-01	-.297262E-01	-.263992E-01
55.00	-.111518E+00	-.564833E-01	-.504813E-01	-.362473E-01	-.298853E-01	-.269913E-01
60.00	-.111525E+00	-.563304E-01	-.505824E-01	-.350164E-01	-.300264E-01	-.274294E-01
70.00	-.111534E+00	-.561593E-01	-.507153E-01	-.335523E-01	-.302463E-01	-.280093E-01
80.00	-.111540E+00	-.560720E-01	-.507910E-01	-.328730E-01	-.304060E-01	-.283650E-01
90.00	-.111543E+00	-.560239E-01	-.508349E-01	-.324829E-01	-.305289E-01	-.285969E-01
100.00	-.111546E+00	-.559950E-01	-.508620E-01	-.322230E-01	-.306270E-01	-.287500E-01

TAB. A.16: Orbitales Π_u , ion Na_2^+

R(ua)	(1) ² Π _u	(2) ² Π _u	(3) ² Π _u	(4) ² Π _u	(5) ² Π _u	(6) ² Π _u
5.00	-.820491E-01	-.354491E-01	0.569889E-01	0.687989E-01	0.102409E+00	0.109486E+00
5.20	-.848013E-01	-.358453E-01	0.529307E-01	0.651377E-01	0.981687E-01	0.105317E+00
5.40	-.875141E-01	-.364101E-01	0.488139E-01	0.615299E-01	0.939009E-01	0.101195E+00
5.60	-.900967E-01	-.370907E-01	0.447143E-01	0.580283E-01	0.896743E-01	0.971833E-01
5.80	-.925004E-01	-.378474E-01	0.406876E-01	0.546626E-01	0.855326E-01	0.933206E-01
6.00	-.947023E-01	-.386503E-01	0.367677E-01	0.514437E-01	0.815087E-01	0.896217E-01
6.20	-.966958E-01	-.394768E-01	0.329802E-01	0.483762E-01	0.776192E-01	0.860932E-01
6.40	-.984842E-01	-.403122E-01	0.293388E-01	0.454558E-01	0.738788E-01	0.827308E-01
6.60	-.100074E+00	-.411459E-01	0.258511E-01	0.426771E-01	0.702921E-01	0.795251E-01
6.80	-.101479E+00	-.419703E-01	0.225207E-01	0.400317E-01	0.668627E-01	0.764647E-01
7.00	-.102712E+00	-.427830E-01	0.193480E-01	0.375110E-01	0.635890E-01	0.735390E-01
7.20	-.103787E+00	-.435813E-01	0.163297E-01	0.351047E-01	0.604697E-01	0.707347E-01
7.40	-.104719E+00	-.443644E-01	0.134616E-01	0.328036E-01	0.575006E-01	0.680426E-01
7.60	-.105520E+00	-.451343E-01	0.107387E-01	0.306017E-01	0.546757E-01	0.654547E-01
7.80	-.106204E+00	-.458902E-01	0.815483E-02	0.284898E-01	0.519898E-01	0.629638E-01
8.00	-.106783E+00	-.466342E-01	0.570379E-02	0.264618E-01	0.494368E-01	0.605638E-01
8.20	-.107266E+00	-.473657E-01	0.337932E-02	0.245123E-01	0.470103E-01	0.582513E-01
8.40	-.107664E+00	-.480867E-01	0.117431E-02	0.226373E-01	0.447043E-01	0.560223E-01
8.60	-.107985E+00	-.487972E-01	-.917161E-03	0.208318E-01	0.425118E-01	0.538738E-01
8.80	-.108238E+00	-.494967E-01	-.290075E-02	0.190923E-01	0.404273E-01	0.518043E-01
9.00	-.108429E+00	-.501869E-01	-.478387E-02	0.174161E-01	0.384441E-01	0.498111E-01
9.20	-.108564E+00	-.508647E-01	-.657168E-02	0.158003E-01	0.365553E-01	0.478923E-01
9.40	-.108649E+00	-.515320E-01	-.827005E-02	0.142440E-01	0.347550E-01	0.460460E-01
9.60	-.108689E+00	-.521866E-01	-.988358E-02	0.127424E-01	0.330374E-01	0.442694E-01
9.80	-.108688E+00	-.528286E-01	-.114166E-01	0.112954E-01	0.313964E-01	0.425634E-01
10.00	-.108649E+00	-.534583E-01	-.128763E-01	0.990072E-02	0.298267E-01	0.409227E-01
10.20	-.108578E+00	-.540724E-01	-.142654E-01	0.855660E-02	0.283226E-01	0.393486E-01
10.40	-.108477E+00	-.546726E-01	-.155876E-01	0.726138E-02	0.268784E-01	0.378374E-01
10.60	-.108347E+00	-.552573E-01	-.168483E-01	0.601266E-02	0.254907E-01	0.363877E-01
10.80	-.108195E+00	-.558268E-01	-.180508E-01	0.480923E-02	0.241522E-01	0.349962E-01
11.00	-.108020E+00	-.563799E-01	-.191979E-01	0.364908E-02	0.228601E-01	0.336641E-01
11.20	-.107825E+00	-.569166E-01	-.202926E-01	0.253036E-02	0.216094E-01	0.323864E-01
11.40	-.107613E+00	-.574356E-01	-.213386E-01	0.145241E-02	0.203974E-01	0.311624E-01
11.60	-.107385E+00	-.579383E-01	-.223393E-01	0.413714E-03	0.192187E-01	0.299887E-01
11.80	-.107143E+00	-.584241E-01	-.232971E-01	-.589082E-03	0.180709E-01	0.288659E-01
12.00	-.106890E+00	-.588932E-01	-.242132E-01	-.155621E-02	0.169508E-01	0.277888E-01
12.20	-.106627E+00	-.593458E-01	-.250918E-01	-.248875E-02	0.158572E-01	0.267572E-01
12.40	-.106355E+00	-.597807E-01	-.259337E-01	-.338970E-02	0.147873E-01	0.257683E-01
12.60	-.106075E+00	-.601989E-01	-.267419E-01	-.425991E-02	0.137391E-01	0.248191E-01
12.80	-.105790E+00	-.606011E-01	-.275181E-01	-.510113E-02	0.127129E-01	0.239089E-01
13.00	-.105500E+00	-.609870E-01	-.282640E-01	-.591404E-02	0.117060E-01	0.230350E-01
13.50	-.104764E+00	-.618850E-01	-.300090E-01	-.783397E-02	0.927603E-02	0.209970E-01
14.00	-.104023E+00	-.626897E-01	-.315997E-01	-.960969E-02	0.696631E-02	0.191493E-01
14.50	-.103293E+00	-.634096E-01	-.330586E-01	-.112606E-01	0.478241E-02	0.174704E-01
15.00	-.102584E+00	-.640496E-01	-.344016E-01	-.128016E-01	0.272936E-02	0.159444E-01

15.50	-.101905E+00	-.646177E-01	-.356447E-01	-.142477E-01	0.811288E-03	0.145573E-01
16.00	-.101262E+00	-.651189E-01	-.367979E-01	-.156089E-01	-.969929E-03	0.132991E-01
16.50	-.100659E+00	-.655579E-01	-.378719E-01	-.168949E-01	-.261488E-02	0.121591E-01
17.00	-.100100E+00	-.659408E-01	-.388748E-01	-.181088E-01	-.412685E-02	0.111282E-01
17.50	-.995840E-01	-.662710E-01	-.398120E-01	-.192560E-01	-.550997E-02	0.101950E-01
18.00	-.990102E-01	-.664113E-01	-.406555E-01	-.208935E-01	-.671668E-02	-.515542E-02
18.50	-.986805E-01	-.667835E-01	-.415085E-01	-.213555E-01	-.791449E-02	0.858851E-02
19.00	-.982907E-01	-.669727E-01	-.422747E-01	-.223107E-01	-.894774E-02	0.789726E-02
19.50	-.979381E-01	-.671211E-01	-.429891E-01	-.232041E-01	-.987707E-02	0.726893E-02
20.00	-.976228E-01	-.672308E-01	-.436548E-01	-.240378E-01	-.107068E-01	0.669621E-02
20.50	-.973397E-01	-.673047E-01	-.442717E-01	-.248147E-01	-.114437E-01	0.617227E-02
21.00	-.970882E-01	-.673482E-01	-.448412E-01	-.255362E-01	-.120932E-01	0.569076E-02
21.50	-.968653E-01	-.673623E-01	-.453663E-01	-.262063E-01	-.126603E-01	0.524671E-02
22.00	-.966685E-01	-.673515E-01	-.458465E-01	-.268285E-01	-.131495E-01	0.483351E-02
22.50	-.964951E-01	-.673191E-01	-.462841E-01	-.274081E-01	-.135671E-01	0.444887E-02
23.00	-.963442E-01	-.672692E-01	-.466792E-01	-.279472E-01	-.139182E-01	0.408779E-02
23.50	-.962115E-01	-.672045E-01	-.470355E-01	-.284505E-01	-.142095E-01	0.374849E-02
24.00	-.960965E-01	-.671285E-01	-.473525E-01	-.289205E-01	-.144465E-01	0.342846E-02
24.50	-.959966E-01	-.670446E-01	-.476326E-01	-.293626E-01	-.146356E-01	0.312637E-02
25.00	-.959099E-01	-.669539E-01	-.478789E-01	-.297789E-01	-.147839E-01	0.284007E-02
26.00	-.957719E-01	-.667639E-01	-.482719E-01	-.305439E-01	-.149869E-01	0.231310E-02
27.00	-.956695E-01	-.665745E-01	-.485475E-01	-.312335E-01	-.151095E-01	0.184347E-02
28.00	-.955949E-01	-.663959E-01	-.487209E-01	-.318599E-01	-.152039E-01	0.142911E-02
29.00	-.955414E-01	-.662324E-01	-.488074E-01	-.324324E-01	-.153124E-01	0.106958E-02
30.00	-.955022E-01	-.660882E-01	-.488192E-01	-.329572E-01	-.154652E-01	0.761831E-03
32.00	-.954559E-01	-.658579E-01	-.486709E-01	-.338769E-01	-.159519E-01	0.287123E-03
35.00	-.954268E-01	-.656348E-01	-.481628E-01	-.349558E-01	-.170448E-01	-.167767E-03
37.00	-.954199E-01	-.655449E-01	-.477289E-01	-.354859E-01	-.178379E-01	-.369931E-03
40.00	-.954186E-01	-.654646E-01	-.470596E-01	-.360196E-01	-.188386E-01	-.602627E-03
45.00	-.954240E-01	-.654040E-01	-.461520E-01	-.363660E-01	-.195930E-01	-.896040E-03
50.00	-.954315E-01	-.653785E-01	-.456185E-01	-.363595E-01	-.193345E-01	-.110448E-02
55.00	-.954372E-01	-.653642E-01	-.453532E-01	-.362912E-01	-.186742E-01	-.124619E-02
60.00	-.954430E-01	-.653550E-01	-.452270E-01	-.362610E-01	-.181010E-01	-.134305E-02
70.00	-.954517E-01	-.653427E-01	-.451257E-01	-.362847E-01	-.175797E-01	-.145667E-02
80.00	-.954572E-01	-.653362E-01	-.450892E-01	-.363222E-01	-.174542E-01	-.151723E-02
90.00	-.954610E-01	-.653310E-01	-.450740E-01	-.363450E-01	-.174110E-01	-.155203E-02
100.00	-.954631E-01	-.653281E-01	-.450740E-01	-.363571E-01	-.173871E-01	-.157409E-02

TAB. A.17: Orbitales Π_u , ion Rb_2^+

R(ua)	(1) ² Π _u	(2) ² Π _u	(3) ² Π _u	(4) ² Π _u	(5) ² Π _u	(6) ² Π _u
5.00	-.116740E+00	-.494492E-01	0.515828E-01	0.524848E-01	0.940548E-01	0.977058E-01
5.20	-.115073E+00	-.493650E-01	0.500580E-01	0.512030E-01	0.931440E-01	0.957760E-01
5.40	-.113989E+00	-.496292E-01	0.476488E-01	0.497658E-01	0.917608E-01	0.933548E-01
5.60	-.113331E+00	-.501081E-01	0.448679E-01	0.480279E-01	0.900289E-01	0.906859E-01
5.80	-.112978E+00	-.507184E-01	0.418956E-01	0.460656E-01	0.875506E-01	0.884136E-01
6.00	-.112832E+00	-.514102E-01	0.388338E-01	0.439548E-01	0.845878E-01	0.864458E-01
6.20	-.112821E+00	-.521526E-01	0.357524E-01	0.417544E-01	0.815694E-01	0.844614E-01
6.40	-.112887E+00	-.529250E-01	0.326960E-01	0.395080E-01	0.785680E-01	0.824620E-01
6.60	-.112987E+00	-.537145E-01	0.296985E-01	0.372475E-01	0.756185E-01	0.804605E-01
6.80	-.113095E+00	-.545104E-01	0.267786E-01	0.349966E-01	0.727416E-01	0.784666E-01
7.00	-.113190E+00	-.553038E-01	0.239512E-01	0.327722E-01	0.699482E-01	0.764892E-01
7.20	-.113257E+00	-.560891E-01	0.212249E-01	0.305879E-01	0.672469E-01	0.745389E-01
7.40	-.113290E+00	-.568609E-01	0.186051E-01	0.284521E-01	0.646401E-01	0.726271E-01
7.60	-.113284E+00	-.576156E-01	0.160914E-01	0.263714E-01	0.621264E-01	0.707654E-01
7.80	-.113239E+00	-.583489E-01	0.136851E-01	0.243491E-01	0.597041E-01	0.689661E-01
8.00	-.113154E+00	-.590598E-01	0.113842E-01	0.223902E-01	0.573712E-01	0.672422E-01
8.20	-.113032E+00	-.597464E-01	0.918762E-02	0.204936E-01	0.551216E-01	0.656016E-01
8.40	-.112874E+00	-.604087E-01	0.709026E-02	0.186603E-01	0.529523E-01	0.640543E-01
8.60	-.112683E+00	-.610463E-01	0.508972E-02	0.168907E-01	0.508577E-01	0.626057E-01
8.80	-.112462E+00	-.616598E-01	0.318016E-02	0.151822E-01	0.488322E-01	0.612592E-01
9.00	-.112213E+00	-.622484E-01	0.135856E-02	0.135336E-01	0.468726E-01	0.600146E-01
9.20	-.111940E+00	-.628142E-01	-.381231E-03	0.119448E-01	0.449738E-01	0.588728E-01
9.40	-.111645E+00	-.633564E-01	-.204340E-02	0.104106E-01	0.431316E-01	0.578296E-01
9.60	-.111331E+00	-.638771E-01	-.363314E-02	0.893186E-02	0.413429E-01	0.568789E-01
9.80	-.111001E+00	-.643766E-01	-.515458E-02	0.750442E-02	0.396044E-01	0.560154E-01
10.00	-.110657E+00	-.648568E-01	-.661379E-02	0.612721E-02	0.379132E-01	0.552302E-01
10.20	-.110302E+00	-.653167E-01	-.801474E-02	0.479726E-02	0.362683E-01	0.545163E-01
10.40	-.109936E+00	-.657583E-01	-.936031E-02	0.351269E-02	0.346657E-01	0.538647E-01
10.60	-.109564E+00	-.661822E-01	-.106552E-01	0.227076E-02	0.331038E-01	0.532678E-01
10.80	-.109187E+00	-.665902E-01	-.119022E-01	0.107082E-02	0.315818E-01	0.527158E-01
11.00	-.108805E+00	-.669807E-01	-.131047E-01	-.906605E-04	0.300983E-01	0.522013E-01
11.20	-.108419E+00	-.673561E-01	-.142651E-01	-.121609E-02	0.286519E-01	0.517159E-01
11.40	-.108032E+00	-.677178E-01	-.153868E-01	-.230478E-02	0.272402E-01	0.512522E-01
11.60	-.107643E+00	-.680639E-01	-.164709E-01	-.336089E-02	0.258631E-01	0.508021E-01
11.80	-.107253E+00	-.683975E-01	-.175195E-01	-.438452E-02	0.245195E-01	0.503545E-01
12.00	-.106863E+00	-.687176E-01	-.185346E-01	-.537863E-02	0.232084E-01	0.499004E-01
12.20	-.106472E+00	-.690261E-01	-.195191E-01	-.634411E-02	0.219289E-01	0.494279E-01
12.40	-.106083E+00	-.693217E-01	-.204727E-01	-.728174E-02	0.206803E-01	0.489243E-01
12.60	-.105694E+00	-.696062E-01	-.213982E-01	-.819320E-02	0.194628E-01	0.483808E-01
12.80	-.105307E+00	-.698801E-01	-.222971E-01	-.907910E-02	0.182759E-01	0.477919E-01
13.00	-.104922E+00	-.701430E-01	-.231710E-01	-.994196E-02	0.171180E-01	0.471640E-01
13.50	-.103967E+00	-.707572E-01	-.252532E-01	-.120002E-01	0.143548E-01	0.455208E-01
14.00	-.103032E+00	-.713169E-01	-.272059E-01	-.139249E-01	0.117751E-01	0.440021E-01
14.50	-.102120E+00	-.718265E-01	-.290455E-01	-.157235E-01	0.937253E-02	0.427735E-01
15.00	-.101240E+00	-.722918E-01	-.307848E-01	-.174008E-01	0.714218E-02	0.418612E-01

15.50	-.100392E+00	-.727182E-01	-.324342E-01	-.189602E-01	0.507383E-02	0.412218E-01
16.00	-.995841E-01	-.731101E-01	-.340001E-01	-.204021E-01	0.315591E-02	0.407879E-01
16.50	-.988157E-01	-.734717E-01	-.354857E-01	-.217307E-01	0.137627E-02	0.404963E-01
17.00	-.980910E-01	-.738040E-01	-.368910E-01	-.229490E-01	-.274017E-03	0.402940E-01
17.50	-.974098E-01	-.741088E-01	-.382158E-01	-.240618E-01	-.180583E-02	0.401472E-01
18.00	-.967721E-01	-.743901E-01	-.394601E-01	-.250761E-01	-.322810E-02	0.400319E-01
18.50	-.961769E-01	-.746459E-01	-.406199E-01	-.259959E-01	-.454795E-02	0.399321E-01
19.00	-.956248E-01	-.748798E-01	-.416958E-01	-.268288E-01	-.577178E-02	0.398402E-01
19.50	-.951134E-01	-.750904E-01	-.426874E-01	-.275824E-01	-.690437E-02	0.397516E-01
20.00	-.946420E-01	-.752800E-01	-.435930E-01	-.282610E-01	-.795095E-02	0.396640E-01
20.50	-.942092E-01	-.754492E-01	-.444142E-01	-.288732E-01	-.891724E-02	0.395758E-01
21.00	-.938135E-01	-.756005E-01	-.451535E-01	-.294245E-01	-.980753E-02	0.394855E-01
21.50	-.934527E-01	-.757327E-01	-.458127E-01	-.299197E-01	-.106257E-01	0.393933E-01
22.00	-.931264E-01	-.758494E-01	-.463954E-01	-.303664E-01	-.113754E-01	0.392986E-01
22.50	-.928308E-01	-.759498E-01	-.469048E-01	-.307698E-01	-.120618E-01	0.392012E-01
23.00	-.925648E-01	-.760378E-01	-.473458E-01	-.311328E-01	-.126888E-01	0.390982E-01
23.50	-.923263E-01	-.761133E-01	-.477223E-01	-.314623E-01	-.132593E-01	0.389917E-01
24.00	-.921137E-01	-.761787E-01	-.480397E-01	-.317627E-01	-.137807E-01	0.388803E-01
24.50	-.919244E-01	-.762344E-01	-.483024E-01	-.320374E-01	-.142544E-01	0.387636E-01
25.00	-.917553E-01	-.762833E-01	-.485153E-01	-.322893E-01	-.146863E-01	0.386437E-01
26.00	-.914751E-01	-.763601E-01	-.488121E-01	-.327431E-01	-.154431E-01	0.383969E-01
27.00	-.912558E-01	-.764188E-01	-.489638E-01	-.331458E-01	-.160898E-01	0.381542E-01
28.00	-.910866E-01	-.764646E-01	-.490036E-01	-.335156E-01	-.166626E-01	0.379294E-01
29.00	-.909559E-01	-.765019E-01	-.489569E-01	-.338639E-01	-.171949E-01	0.377361E-01
30.00	-.908555E-01	-.765335E-01	-.488465E-01	-.341985E-01	-.177125E-01	0.375775E-01
32.00	-.907176E-01	-.765846E-01	-.484936E-01	-.348366E-01	-.187636E-01	0.373614E-01
35.00	-.906037E-01	-.766437E-01	-.477847E-01	-.357117E-01	-.203947E-01	0.372173E-01
37.00	-.905621E-01	-.766751E-01	-.472621E-01	-.362241E-01	-.214311E-01	0.371849E-01
40.00	-.905229E-01	-.767129E-01	-.464799E-01	-.368719E-01	-.227329E-01	0.371731E-01
45.00	-.904925E-01	-.767535E-01	-.453345E-01	-.376425E-01	-.239715E-01	0.371705E-01
50.00	-.904794E-01	-.767774E-01	-.445114E-01	-.381124E-01	-.241734E-01	0.371556E-01
55.00	-.904738E-01	-.767918E-01	-.439938E-01	-.384028E-01	-.238018E-01	0.371312E-01
60.00	-.904715E-01	-.767995E-01	-.436855E-01	-.385975E-01	-.232915E-01	0.371075E-01
70.00	-.904719E-01	-.768069E-01	-.433789E-01	-.388449E-01	-.226109E-01	0.370721E-01
80.00	-.904744E-01	-.768104E-01	-.432414E-01	-.389854E-01	-.223854E-01	0.370526E-01
90.00	-.904761E-01	-.768111E-01	-.431701E-01	-.390661E-01	-.223231E-01	0.370409E-01
100.00	-.904782E-01	-.768112E-01	-.431292E-01	-.391142E-01	-.222992E-01	0.370328E-01

TAB. A.18: Orbitales Π_u , ion Cs_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_g	(2) ² Δ_g	(3) ² Δ_g	(4) ² Δ_g
5.00	0.229697E-01	0.993007E-01	0.124970E+00	0.499661E+00
5.20	0.174209E-01	0.934849E-01	0.117270E+00	0.500427E+00
5.40	0.123979E-01	0.883059E-01	0.110133E+00	0.500993E+00
5.60	0.783723E-02	0.837012E-01	0.103499E+00	0.501298E+00
5.80	0.368256E-02	0.796156E-01	0.973206E-01	0.501322E+00
6.00	-.114734E-03	0.759993E-01	0.915523E-01	0.501071E+00
6.20	-.359662E-02	0.728024E-01	0.861604E-01	0.500574E+00
6.40	-.679926E-02	0.699787E-01	0.811177E-01	0.499872E+00
6.60	-.975670E-02	0.674763E-01	0.764083E-01	0.499012E+00
6.80	-.124945E-01	0.652275E-01	0.720355E-01	0.498046E+00
7.00	-.150383E-01	0.631147E-01	0.680617E-01	0.497023E+00
7.20	-.174079E-01	0.608741E-01	0.646981E-01	0.495985E+00
7.40	-.196212E-01	0.581368E-01	0.622648E-01	0.494975E+00
7.60	-.216928E-01	0.549922E-01	0.606302E-01	0.494021E+00
7.80	-.236379E-01	0.517651E-01	0.594261E-01	0.493149E+00
8.00	-.254660E-01	0.486030E-01	0.584690E-01	0.492376E+00
8.20	-.271874E-01	0.455486E-01	0.576826E-01	0.491712E+00
8.40	-.288111E-01	0.426149E-01	0.570229E-01	0.491162E+00
8.60	-.303441E-01	0.398019E-01	0.564629E-01	0.490724E+00
8.80	-.317937E-01	0.371053E-01	0.559803E-01	0.490395E+00
9.00	-.331642E-01	0.345208E-01	0.555578E-01	0.490166E+00
9.20	-.344622E-01	0.320418E-01	0.551838E-01	0.490027E+00
9.40	-.356917E-01	0.296643E-01	0.548443E-01	0.489965E+00
9.60	-.368570E-01	0.273810E-01	0.545310E-01	0.489969E+00
9.80	-.379600E-01	0.251890E-01	0.542360E-01	0.490026E+00
10.00	-.390072E-01	0.230808E-01	0.539528E-01	0.490123E+00
10.20	-.399995E-01	0.210545E-01	0.536785E-01	0.490249E+00
10.40	-.409406E-01	0.191034E-01	0.534064E-01	0.490394E+00
10.60	-.418326E-01	0.172264E-01	0.531374E-01	0.490548E+00
10.80	-.426775E-01	0.154175E-01	0.528665E-01	0.490705E+00
11.00	-.434790E-01	0.136750E-01	0.525950E-01	0.490858E+00
11.20	-.442395E-01	0.119945E-01	0.523215E-01	0.491002E+00
11.40	-.449591E-01	0.103749E-01	0.520469E-01	0.491133E+00
11.60	-.456417E-01	0.881129E-02	0.517703E-01	0.491248E+00
11.80	-.462871E-01	0.730286E-02	0.514929E-01	0.491347E+00
12.00	-.468999E-01	0.584607E-02	0.512161E-01	0.491428E+00
12.20	-.474785E-01		0.509405E-01	0.491492E+00
12.40	-.480270E-01	0.308104E-02	0.506670E-01	0.491538E+00
12.60	-.485455E-01	0.176846E-02	0.503965E-01	0.491568E+00
12.80	-.490352E-01	0.500849E-03	0.501298E-01	0.491584E+00
13.00	-.494986E-01	-.724644E-03	0.498684E-01	0.491585E+00
13.50	-.505477E-01	-.361270E-02	0.492443E-01	0.491542E+00
14.00	-.514544E-01	-.626642E-02	0.486686E-01	0.491451E+00
14.50	-.522348E-01	-.870482E-02	0.481482E-01	0.491331E+00
15.00	-.529051E-01	-.109471E-01	0.476869E-01	0.491205E+00

15.50	-.534752E-01	-.130062E-01	0.472838E-01	0.491083E+00
16.00	-.539589E-01	-.148969E-01	0.469361E-01	0.490973E+00
16.50	-.543655E-01	-.166305E-01	0.466395E-01	0.490879E+00
17.00	-.547028E-01	-.182178E-01	0.463882E-01	0.490804E+00
17.50	-.549812E-01	-.196682E-01	0.461768E-01	0.490746E+00
18.00	-.552063E-01	-.209913E-01	0.459987E-01	0.490704E+00
18.50	-.553846E-01	-.221936E-01	0.458484E-01	0.490675E+00
19.00	-.555229E-01	-.232849E-01	0.457221E-01	0.490659E+00
19.50	-.556263E-01	-.242693E-01	0.456147E-01	0.490652E+00
20.00	-.556992E-01	-.251542E-01	0.455238E-01	0.490652E+00
20.50	-.557466E-01	-.259456E-01	0.454444E-01	0.490658E+00
21.00	-.557729E-01	-.266489E-01	0.453771E-01	0.490668E+00
21.50	-.557803E-01	-.272683E-01	0.453177E-01	0.490682E+00
22.00	-.557733E-01	-.278093E-01	0.452657E-01	0.490699E+00
22.50	-.557553E-01	-.282773E-01	0.452207E-01	0.490716E+00
23.00	-.557274E-01	-.286764E-01	0.451796E-01	0.490736E+00
23.50	-.556934E-01	-.290114E-01	0.451446E-01	0.490755E+00
24.00	-.556539E-01	-.292859E-01	0.451131E-01	0.490775E+00
24.50	-.556122E-01	-.295052E-01	0.450858E-01	0.490795E+00
25.00	-.555695E-01	-.296745E-01	0.450615E-01	0.490815E+00
26.00	-.554839E-01	-.298789E-01	0.450201E-01	0.490853E+00
27.00	-.554053E-01	-.299343E-01	0.449887E-01	0.490889E+00
28.00	-.553380E-01	-.298750E-01	0.449630E-01	0.490920E+00
29.00	-.552845E-01	-.297335E-01	0.449425E-01	0.490947E+00
30.00	-.552429E-01	-.295399E-01	0.449241E-01	0.490971E+00
32.00	-.551962E-01	-.290882E-01	0.448918E-01	0.491005E+00
35.00	-.551897E-01	-.284757E-01	0.448443E-01	0.491028E+00
37.00	-.552081E-01	-.281891E-01	0.448119E-01	0.491031E+00
40.00	-.552491E-01	-.279421E-01	0.447649E-01	0.491027E+00
45.00	-.553208E-01	-.278278E-01	0.447002E-01	0.491013E+00
50.00	-.553780E-01	-.278440E-01	0.446540E-01	0.491001E+00
55.00	-.554202E-01	-.278752E-01	0.446228E-01	0.490992E+00
60.00	-.554513E-01	-.278983E-01	0.446007E-01	0.490985E+00
70.00	-.554913E-01	-.278983E-01	0.445727E-01	0.490977E+00
80.00	-.555160E-01	-.279370E-01	0.445570E-01	0.490973E+00
90.00	-.555309E-01	-.279370E-01	0.445570E-01	0.490973E+00
100.00	-.555309E-01	-.279370E-01	0.445570E-01	0.490973E+00

TAB. A.19: Orbitales Δ_g , ion Li_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_g	(2) ² Δ_g	(3) ² Δ_g	(4) ² Δ_g	(5) ² Δ_g	(6) ² Δ_g
5.00	0.131069E-01	0.899109E-01	0.119448E+00	0.128391E+00	0.144660E+00	0.160776E+00
5.20	0.771602E-02	0.834500E-01	0.111936E+00	0.121474E+00	0.137183E+00	0.155006E+00
5.40	0.281736E-02	0.775004E-01	0.104947E+00	0.115067E+00	0.130228E+00	0.149854E+00
5.60	-.164283E-02	0.720092E-01	0.984292E-01	0.109119E+00	0.123746E+00	0.145261E+00
5.80	-.571307E-02	0.669269E-01	0.923359E-01	0.103582E+00	0.117690E+00	0.141172E+00
6.00	-.943649E-02	0.622135E-01	0.866275E-01	0.984155E-01	0.112020E+00	0.137537E+00
6.20	-.128516E-01	0.578294E-01	0.812694E-01	0.935844E-01	0.106700E+00	0.134306E+00
6.40	-.159887E-01	0.537443E-01	0.762303E-01	0.890573E-01	0.101701E+00	0.131437E+00
6.60	-.188767E-01	0.499283E-01	0.714833E-01	0.848073E-01	0.969943E-01	0.128888E+00
6.80	-.215424E-01	0.463566E-01	0.670026E-01	0.808096E-01	0.925546E-01	0.126620E+00
7.00	-.240061E-01	0.430079E-01	0.627669E-01	0.770429E-01	0.883609E-01	0.124596E+00
7.20	-.262875E-01	0.398625E-01	0.587565E-01	0.734895E-01	0.843935E-01	0.122782E+00
7.40	-.284034E-01	0.369026E-01	0.549536E-01	0.701306E-01	0.806346E-01	0.121150E+00
7.60	-.303689E-01	0.341131E-01	0.513431E-01	0.669531E-01	0.770681E-01	0.119670E+00
7.80	-.321973E-01	0.314807E-01	0.479117E-01	0.639427E-01	0.736797E-01	0.118320E+00
8.00	-.338998E-01	0.289932E-01	0.446452E-01	0.610862E-01	0.704582E-01	0.117076E+00
8.20	-.354860E-01	0.266400E-01	0.415330E-01	0.583750E-01	0.673900E-01	0.115922E+00
8.40	-.369668E-01	0.244112E-01	0.385652E-01	0.557982E-01	0.644662E-01	0.114839E+00
8.60	-.383490E-01	0.222980E-01	0.357310E-01	0.533460E-01	0.616760E-01	0.113817E+00
8.80	-.396393E-01	0.202917E-01	0.330237E-01	0.510117E-01	0.590117E-01	0.112843E+00
9.00	-.408459E-01	0.183861E-01	0.304341E-01	0.487871E-01	0.564651E-01	0.111909E+00
9.20	-.419743E-01	0.165747E-01	0.279557E-01	0.466647E-01	0.540297E-01	0.111008E+00
9.40	-.430303E-01	0.148507E-01	0.255827E-01	0.446397E-01	0.516977E-01	0.110136E+00
9.60	-.440171E-01	0.132089E-01	0.233079E-01	0.427059E-01	0.494639E-01	0.109288E+00
9.80	-.449405E-01	0.116445E-01	0.211285E-01	0.408575E-01	0.473225E-01	0.108463E+00
10.00	-.458048E-01	0.101522E-01	0.190372E-01	0.390892E-01	0.452692E-01	0.107657E+00
10.20	-.466138E-01	0.872718E-02	0.170302E-01	0.373982E-01	0.432982E-01	0.106873E+00
10.40	-.473702E-01	0.736580E-02	0.151048E-01	0.357778E-01	0.414068E-01	0.106109E+00
10.60	-.480781E-01	0.606392E-02	0.132569E-01	0.342249E-01	0.395899E-01	0.105364E+00
10.80	-.487393E-01	0.481667E-02	0.114827E-01	0.327367E-01	0.378447E-01	0.104642E+00
11.00	-.493586E-01	0.362042E-02	0.977942E-02	0.313084E-01	0.361674E-01	0.103940E+00
11.20	-.499372E-01	0.247285E-02	0.814585E-02	0.299378E-01	0.345558E-01	0.103262E+00
11.40	-.504772E-01	0.136882E-02	0.657882E-02	0.286198E-01	0.330068E-01	0.102608E+00
11.60	-.509826E-01	0.304431E-03	0.507743E-02	0.273524E-01	0.315174E-01	0.101978E+00
11.80	-.514530E-01	-.723021E-03	0.364098E-02	0.261330E-01	0.300870E-01	0.101374E+00
12.00	-.518931E-01	-.172007E-02	0.226993E-02	0.249569E-01	0.287119E-01	0.100796E+00
12.20	-.523021E-01	-.269008E-02	0.962921E-03	0.238239E-01	0.273919E-01	0.100245E+00
12.40	-.526843E-01	-.363827E-02	-.278267E-03	0.227287E-01	0.261247E-01	0.997207E-01
12.60	-.530387E-01	-.457071E-02	-.145271E-02	0.216703E-01	0.249093E-01	0.992243E-01
12.80	-.533693E-01	-.549335E-02	-.255635E-02	0.206457E-01	0.237447E-01	0.987547E-01
13.00	-.536760E-01	-.640802E-02	-.359102E-02	0.196520E-01	0.226290E-01	0.983110E-01
13.50	-.543491E-01	-.868309E-02	-.587709E-02	0.172879E-01	0.200509E-01	0.973199E-01
14.00	-.549035E-01	-.109205E-01	-.778949E-02	0.150725E-01	0.177575E-01	0.964855E-01
14.50	-.553541E-01	-.130681E-01	-.941912E-02	0.129889E-01	0.157259E-01	0.957929E-01
15.00	-.557151E-01	-.150871E-01	-.108401E-01	0.110299E-01	0.139269E-01	0.952249E-01

16.00	-.562183E-01	-.186903E-01	-.132243E-01	0.748475E-02	0.109007E-01	0.943867E-01
16.50	-.563794E-01	-.202774E-01	-.142364E-01	0.589958E-02	0.961858E-02	0.940776E-01
17.00	-.564934E-01	-.217304E-01	-.151504E-01	0.443557E-02	0.846157E-02	0.938186E-01
17.50	-.565658E-01	-.230578E-01	-.159758E-01	0.309121E-02	0.741521E-02	0.935942E-01
18.00	-.566030E-01	-.242690E-01	-.167240E-01	0.186004E-02	0.646404E-02	0.933930E-01
18.50	-.566125E-01	-.253725E-01	-.174015E-01	0.736530E-03	0.559653E-02	0.932065E-01
19.00	-.565991E-01	-.263781E-01	-.180151E-01	-.283081E-03	0.480392E-02	0.930269E-01
19.50	-.565679E-01	-.272929E-01	-.185729E-01	-.120585E-02	0.407615E-02	0.928511E-01
20.00	-.565222E-01	-.281262E-01	-.190812E-01	-.203624E-02	0.340676E-02	0.926758E-01
20.50	-.564672E-01	-.288842E-01	-.195442E-01	-.278116E-02	0.278884E-02	0.925018E-01
21.00	-.564051E-01	-.295761E-01	-.199681E-01	-.344708E-02	0.221492E-02	0.923289E-01
21.50	-.563390E-01	-.302060E-01	-.203590E-01	-.403904E-02	0.167996E-02	0.921600E-01
22.00	-.562707E-01	-.307807E-01	-.207207E-01	-.456571E-02	0.117929E-02	0.919953E-01
22.50	-.562034E-01	-.313064E-01	-.210574E-01	-.503245E-02	0.708553E-03	0.918386E-01
23.00	-.561363E-01	-.317863E-01	-.213733E-01	-.544630E-02	0.263698E-03	0.916907E-01
23.50	-.560731E-01	-.322241E-01	-.216711E-01	-.581508E-02	-.158078E-03	0.915529E-01
24.00	-.560133E-01	-.326253E-01	-.219543E-01	-.614434E-02	-.561338E-03	0.914287E-01
24.50	-.559574E-01	-.329904E-01	-.222254E-01	-.644244E-02	-.946440E-03	0.913166E-01
25.00	-.559056E-01	-.333246E-01	-.224846E-01	-.671355E-02	-.131655E-02	0.912174E-01
26.00	-.555646E-01	-.337526E-01	-.229096E-01	-.695064E-02	-.190164E-02	0.945354E-01
27.00	-.557438E-01	-.343758E-01	-.234348E-01	-.764184E-02	-.265784E-02	0.909432E-01
28.00	-.556883E-01	-.347533E-01	-.238653E-01	-.806634E-02	-.324734E-02	0.908657E-01
29.00	-.556466E-01	-.350456E-01	-.242676E-01	-.848865E-02	-.377965E-02	0.908144E-01
30.00	-.556169E-01	-.352609E-01	-.246459E-01	-.891490E-02	-.425090E-02	0.907791E-01
32.00	-.555849E-01	-.354909E-01	-.253269E-01	-.975995E-02	-.502095E-02	0.907271E-01
35.00	-.555852E-01	-.354392E-01	-.261872E-01	-.108512E-01	-.583323E-02	0.906438E-01
37.00	-.556015E-01	-.352215E-01	-.266685E-01	-.113565E-01	-.622650E-02	0.905795E-01
40.00	-.556364E-01	-.347444E-01	-.272784E-01	-.117324E-01	-.668839E-02	0.904856E-01
45.00	-.556980E-01	-.338720E-01	-.280680E-01	-.115760E-01	-.725902E-02	0.903920E-01
50.00	-.557502E-01	-.331872E-01	-.286542E-01	-.110312E-01	-.768516E-02	0.903738E-01
55.00	-.557893E-01	-.327423E-01	-.290973E-01	-.105623E-01	-.801329E-02	0.903817E-01
60.00	-.558184E-01	-.324654E-01	-.294384E-01	-.102784E-01	-.826541E-02	0.903846E-01
70.00	-.558573E-01	-.321543E-01	-.299163E-01	-.100363E-01	-.861033E-02	0.903687E-01
80.00	-.558810E-01	-.319670E-01	-.302250E-01	-.992902E-02	-.882702E-02	0.903490E-01
90.00	-.558959E-01	-.318349E-01	-.304349E-01	-.985590E-02	-.897290E-02	0.903361E-01
100.00	-.559050E-01	-.317360E-01	-.305830E-01	-.979901E-02	-.907501E-02	0.903270E-01

TAB. A.20: Orbitales Δ_g , ion Na_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_g	(2) ² Δ_g	(3) ² Δ_g	(4) ² Δ_g	(5) ² Δ_g
5.00	-.502151E-01	0.530799E-01	0.100465E+00	0.127531E+00	0.483058E+00
5.20	-.498133E-01	0.501537E-01	0.967017E-01	0.123882E+00	0.477420E+00
5.40	-.497231E-01	0.471559E-01	0.928969E-01	0.120274E+00	0.473655E+00
5.60	-.498557E-01	0.441503E-01	0.891143E-01	0.116770E+00	0.471769E+00
5.80	-.501474E-01	0.411786E-01	0.853936E-01	0.113405E+00	0.471668E+00
6.00	-.505503E-01	0.382687E-01	0.817597E-01	0.110198E+00	0.473176E+00
6.20	-.510308E-01	0.354352E-01	0.782292E-01	0.107155E+00	0.476058E+00
6.40	-.515632E-01	0.326888E-01	0.748088E-01	0.104277E+00	0.480039E+00
6.60	-.521279E-01	0.300341E-01	0.715051E-01	0.101558E+00	0.484822E+00
6.80	-.527113E-01	0.274747E-01	0.683187E-01	0.989907E-01	0.490116E+00
7.00	-.533000E-01	0.250110E-01	0.652490E-01	0.965660E-01	0.495648E+00
7.20	-.538873E-01	0.226407E-01	0.622957E-01	0.942757E-01	0.501182E+00
7.40	-.544664E-01	0.203646E-01	0.594556E-01	0.921136E-01	0.506523E+00
7.60	-.550303E-01	0.181787E-01	0.567257E-01	0.900697E-01	0.511526E+00
7.80	-.555772E-01	0.160808E-01	0.541028E-01	0.881408E-01	0.516089E+00
8.00	-.561022E-01	0.140698E-01	0.515828E-01	0.863188E-01	0.520156E+00
8.20	-.566037E-01	0.121403E-01	0.491623E-01	0.846013E-01	0.523704E+00
8.40	-.570817E-01	0.102913E-01	0.468383E-01	0.829833E-01	0.526740E+00
8.60	-.575342E-01	0.851884E-02	0.446058E-01	0.814618E-01	0.529291E+00
8.80	-.579617E-01	0.681925E-02	0.424613E-01	0.800343E-01	0.531399E+00
9.00	-.583629E-01	0.519113E-02	0.404011E-01	0.786961E-01	0.533113E+00
9.20	-.587387E-01	0.362932E-02	0.384213E-01	0.774463E-01	0.534485E+00
9.40	-.590910E-01	0.213295E-02	0.365190E-01	0.762810E-01	0.535569E+00
9.60	-.594196E-01	0.698421E-03	0.346894E-01	0.751974E-01	0.536410E+00
9.80	-.597256E-01	-.676626E-03	0.329314E-01	0.741934E-01	0.537056E+00
10.00	-.600103E-01	-.199628E-02	0.312397E-01	0.732647E-01	0.537545E+00
10.20	-.602744E-01	-.326240E-02	0.296126E-01	0.724086E-01	0.537910E+00
10.40	-.605186E-01	-.447662E-02	0.280474E-01	0.716214E-01	0.538178E+00
10.60	-.607463E-01	-.564234E-02	0.265407E-01	0.708997E-01	0.538375E+00
10.80	-.609568E-01	-.676077E-02	0.250892E-01	0.702402E-01	0.538516E+00
11.00	-.611519E-01	-.783592E-02	0.236921E-01	0.696381E-01	0.538617E+00
11.20	-.613326E-01	-.886864E-02	0.223464E-01	0.690914E-01	0.538688E+00
11.40	-.614996E-01	-.986059E-02	0.210494E-01	0.685954E-01	0.538739E+00
11.60	-.616553E-01	-.108143E-01	0.198007E-01	0.681457E-01	0.538777E+00
11.80	-.617991E-01	-.117301E-01	0.185959E-01	0.677399E-01	0.538803E+00
12.00	-.619322E-01	-.126122E-01	0.174348E-01	0.673738E-01	0.538824E+00
12.20	-.620568E-01	-.134598E-01	0.163152E-01	0.670442E-01	0.538839E+00
12.40	-.621717E-01	-.142757E-01	0.152363E-01	0.667463E-01	0.538852E+00
12.60	-.622799E-01	-.150609E-01	0.141951E-01	0.664781E-01	0.538864E+00
12.80	-.623801E-01	-.158161E-01	0.131909E-01	0.662369E-01	0.538874E+00
13.00	-.624730E-01	-.165440E-01	0.122230E-01	0.660180E-01	0.538884E+00
13.50	-.626810E-01	-.182470E-01	0.994803E-02	0.655540E-01	0.538906E+00
14.00	-.628587E-01	-.197967E-01	0.786731E-02	0.651783E-01	0.538926E+00
14.50	-.630106E-01	-.212076E-01	0.596541E-02	0.648594E-01	0.538944E+00
15.00	-.631426E-01	-.224926E-01	0.422436E-02	0.645734E-01	0.538959E+00

15.50	-.632577E-01	-.236627E-01	0.263329E-02	0.643033E-01	0.538971E+00
16.00	-.633589E-01	-.247279E-01	0.117707E-02	0.640391E-01	0.538982E+00
16.50	-.634489E-01	-.256969E-01	-.153880E-03	0.637731E-01	0.538990E+00
17.00	-.635298E-01	-.265788E-01	-.137085E-02	0.635062E-01	0.538997E+00
17.50	-.636040E-01	-.273800E-01	-.248397E-02	0.632370E-01	0.539003E+00
18.00	-.626704E-01	-.262254E-01	-.238342E-02	0.640476E-01	0.539009E+00
18.50	-.637335E-01	-.287685E-01	-.443549E-02	0.627045E-01	0.539013E+00
19.00	-.637927E-01	-.293697E-01	-.528974E-02	0.624493E-01	0.539016E+00
19.50	-.638471E-01	-.299151E-01	-.607407E-02	0.622059E-01	0.539020E+00
20.00	-.638998E-01	-.304108E-01	-.679479E-02	0.619782E-01	0.539023E+00
20.50	-.639497E-01	-.308607E-01	-.745773E-02	0.617673E-01	0.539026E+00
21.00	-.639982E-01	-.312702E-01	-.807024E-02	0.615758E-01	0.539029E+00
21.50	-.640443E-01	-.316423E-01	-.863729E-02	0.614037E-01	0.539032E+00
22.00	-.640895E-01	-.319805E-01	-.916249E-02	0.612535E-01	0.539034E+00
22.50	-.641331E-01	-.322881E-01	-.965213E-02	0.611219E-01	0.539036E+00
23.00	-.641752E-01	-.325692E-01	-.101082E-01	0.610098E-01	0.539038E+00
23.50	-.642165E-01	-.328245E-01	-.105355E-01	0.609145E-01	0.539039E+00
24.00	-.642565E-01	-.330565E-01	-.109355E-01	0.608355E-01	0.539041E+00
24.50	-.642956E-01	-.332686E-01	-.113126E-01	0.607694E-01	0.539042E+00
25.00	-.643329E-01	-.334619E-01	-.116679E-01	0.607161E-01	0.539044E+00
26.00	-.644049E-01	-.337979E-01	-.123209E-01	0.606361E-01	0.539046E+00
27.00	-.644725E-01	-.340765E-01	-.129075E-01	0.605805E-01	0.539048E+00
28.00	-.645359E-01	-.343069E-01	-.134349E-01	0.605371E-01	0.539050E+00
29.00	-.645954E-01	-.344974E-01	-.139084E-01	0.604986E-01	0.539052E+00
30.00	-.646502E-01	-.346542E-01	-.143322E-01	0.604588E-01	0.539052E+00
32.00	-.647469E-01	-.348929E-01	-.150419E-01	0.603701E-01	0.539054E+00
35.00	-.648658E-01	-.351258E-01	-.157998E-01	0.602222E-01	0.539056E+00
37.00	-.649299E-01	-.352329E-01	-.161319E-01	0.601351E-01	0.539057E+00
40.00	-.650066E-01	-.353616E-01	-.164366E-01	0.600424E-01	0.539057E+00
45.00	-.650960E-01	-.355390E-01	-.166390E-01	0.599880E-01	0.539059E+00
50.00	-.651555E-01	-.356965E-01	-.167085E-01	0.599925E-01	0.539060E+00
55.00	-.651962E-01	-.358302E-01	-.167732E-01	0.599988E-01	0.539060E+00
60.00	-.652240E-01	-.359390E-01	-.168510E-01	0.599930E-01	0.539060E+00
70.00	-.652587E-01	-.360897E-01	-.170007E-01	0.599663E-01	0.539060E+00
80.00	-.652782E-01	-.361792E-01	-.171032E-01	0.599438E-01	0.539061E-00
90.00	-.652910E-01	-.362340E-01	-.171670E-01	0.599290E-01	0.539061E-00
100.00	-.652981E-01	-.362691E-01	-.172091E-01	0.599199E-01	0.539061E-00

TAB. A.21: Orbitales Δ_g , ion Rb_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_g	(2) ² Δ_g	(3) ² Δ_g	(4) ² Δ_g	(5) ² Δ_g
5.00	-.894002E-01	0.360938E-01	0.879228E-01	0.112747E+00	0.221234E+00
5.20	-.860550E-01	0.353870E-01	0.866470E-01	0.111666E+00	0.216139E+00
5.40	-.835282E-01	0.341028E-01	0.847908E-01	0.110092E+00	0.210614E+00
5.60	-.816111E-01	0.324319E-01	0.825439E-01	0.108210E+00	0.204929E+00
5.80	-.801514E-01	0.305086E-01	0.800416E-01	0.106148E+00	0.199292E+00
6.00	-.790372E-01	0.284278E-01	0.773788E-01	0.103989E+00	0.193859E+00
6.20	-.781836E-01	0.262574E-01	0.746254E-01	0.101790E+00	0.188754E+00
6.40	-.775300E-01	0.240470E-01	0.718300E-01	0.995870E-01	0.184070E+00
6.60	-.770275E-01	0.218295E-01	0.690295E-01	0.973995E-01	0.179876E+00
6.80	-.766414E-01	0.196286E-01	0.662486E-01	0.952416E-01	0.176220E+00
7.00	-.763438E-01	0.174612E-01	0.635072E-01	0.931212E-01	0.173133E+00
7.20	-.761131E-01	0.153399E-01	0.608179E-01	0.910439E-01	0.170629E+00
7.40	-.759349E-01	0.132711E-01	0.581911E-01	0.890151E-01	0.168705E+00
7.60	-.757956E-01	0.112604E-01	0.556324E-01	0.870404E-01	0.167345E+00
7.80	-.756869E-01	0.931010E-02	0.531451E-01	0.851261E-01	0.166521E+00
8.00	-.756008E-01	0.742325E-02	0.507342E-01	0.832792E-01	0.166194E+00
8.20	-.755334E-01	0.559862E-02	0.483996E-01	0.815076E-01	0.166318E+00
8.40	-.754787E-01	0.383626E-02	0.461423E-01	0.798163E-01	0.166839E+00
8.60	-.754343E-01	0.213672E-02	0.439617E-01	0.782117E-01	0.167702E+00
8.80	-.753978E-01	0.498160E-03	0.418562E-01	0.766972E-01	0.168849E+00
9.00	-.753674E-01	-.108044E-02	0.398256E-01	0.752746E-01	0.170223E+00
9.20	-.753422E-01	-.260023E-02	0.378668E-01	0.739458E-01	0.171767E+00
9.40	-.753214E-01	-.406440E-02	0.359786E-01	0.727096E-01	0.173431E+00
9.60	-.753031E-01	-.547314E-02	0.341589E-01	0.715649E-01	0.175165E+00
9.80	-.752876E-01	-.682858E-02	0.324054E-01	0.705104E-01	0.176926E+00
10.00	-.752738E-01	-.813179E-02	0.307152E-01	0.695402E-01	0.178680E+00
10.20	-.752627E-01	-.938574E-02	0.290853E-01	0.686533E-01	0.180393E+00
10.40	-.752523E-01	-.105903E-01	0.275157E-01	0.678437E-01	0.182041E+00
10.60	-.752442E-01	-.117482E-01	0.260018E-01	0.671078E-01	0.183603E+00
10.80	-.752372E-01	-.128612E-01	0.245428E-01	0.664398E-01	0.185067E+00
11.00	-.752317E-01	-.139307E-01	0.231353E-01	0.658363E-01	0.186421E+00
11.20	-.752281E-01	-.149581E-01	0.217779E-01	0.652909E-01	0.187663E+00
11.40	-.752248E-01	-.159448E-01	0.204682E-01	0.648002E-01	0.188789E+00
11.60	-.752229E-01	-.168929E-01	0.192041E-01	0.643581E-01	0.189801E+00
11.80	-.752225E-01	-.178025E-01	0.179845E-01	0.639615E-01	0.190703E+00
12.00	-.752226E-01	-.186756E-01	0.168074E-01	0.636044E-01	0.191501E+00
12.20	-.752241E-01	-.195141E-01	0.156699E-01	0.632839E-01	0.192201E+00
12.40	-.752267E-01	-.203177E-01	0.145723E-01	0.629963E-01	0.192810E+00
12.60	-.752312E-01	-.210892E-01	0.135108E-01	0.627358E-01	0.193338E+00
12.80	-.752361E-01	-.218281E-01	0.124859E-01	0.625009E-01	0.193791E+00
13.00	-.752410E-01	-.225380E-01	0.114950E-01	0.622870E-01	0.194178E+00
13.50	-.752602E-01	-.241832E-01	0.916083E-02	0.618278E-01	0.194903E+00
14.00	-.752829E-01	-.256589E-01	0.701407E-02	0.614441E-01	0.195365E+00
14.50	-.753115E-01	-.269815E-01	0.503753E-02	0.611065E-01	0.195649E+00
15.00	-.753428E-01	-.281628E-01	0.321618E-02	0.607912E-01	0.195814E+00

15.50	-753782E-01	-.292152E-01	0.153683E-02	0.604858E-01	0.195907E+00
16.00	-.754151E-01	-.301511E-01	-.130903E-04	0.601789E-01	0.195954E+00
16.50	-.754547E-01	-.309817E-01	-.144473E-02	0.598683E-01	0.195974E+00
17.00	-.754950E-01	-.317170E-01	-.276802E-02	0.595530E-01	0.195981E+00
17.50	-.755368E-01	-.323678E-01	-.399283E-02	0.592362E-01	0.195979E+00
18.00	-.755781E-01	-.329421E-01	-.512710E-02	0.589199E-01	0.195975E+00
18.50	-.756209E-01	-.334489E-01	-.617895E-02	0.586101E-01	0.195970E+00
19.00	-.756628E-01	-.338958E-01	-.715578E-02	0.583112E-01	0.195966E+00
19.50	-.757054E-01	-.342904E-01	-.806437E-02	0.580276E-01	0.195962E+00
20.00	-.757470E-01	-.346400E-01	-.890995E-02	0.577630E-01	0.195959E+00
20.50	-.757882E-01	-.349482E-01	-.969924E-02	0.575208E-01	0.195958E+00
21.00	-.758285E-01	-.352225E-01	-.104355E-01	0.573015E-01	0.195957E+00
21.50	-.758687E-01	-.354667E-01	-.111247E-01	0.571073E-01	0.195957E+00
22.00	-.759064E-01	-.356854E-01	-.117714E-01	0.569376E-01	0.195958E+00
22.50	-.759448E-01	-.358808E-01	-.123778E-01	0.567922E-01	0.195958E+00
23.00	-.759808E-01	-.360578E-01	-.129488E-01	0.566702E-01	0.195958E+00
23.50	-.760163E-01	-.362173E-01	-.134863E-01	0.565687E-01	0.195960E+00
24.00	-.760497E-01	-.363627E-01	-.139937E-01	0.564853E-01	0.195960E+00
24.50	-.760824E-01	-.364954E-01	-.144724E-01	0.564186E-01	0.195962E+00
25.00	-.761143E-01	-.366173E-01	-.149253E-01	0.563647E-01	0.195962E+00
26.00	-.761731E-01	-.368331E-01	-.157591E-01	0.562879E-01	0.195963E+00
27.00	-.762278E-01	-.370198E-01	-.165068E-01	0.562382E-01	0.195964E+00
28.00	-.762766E-01	-.371826E-01	-.171776E-01	0.562004E-01	0.195965E+00
29.00	-.763219E-01	-.373259E-01	-.177779E-01	0.561631E-01	0.195966E+00
30.00	-.763625E-01	-.374535E-01	-.183135E-01	0.561225E-01	0.195966E+00
32.00	-.764336E-01	-.376676E-01	-.192096E-01	0.560214E-01	0.195966E+00
35.00	-.765157E-01	-.379157E-01	-.201757E-01	0.558383E-01	0.195967E+00
37.00	-.765591E-01	-.380461E-01	-.206151E-01	0.557219E-01	0.195968E+00
40.00	-.766089E-01	-.382069E-01	-.210459E-01	0.555851E-01	0.195968E+00
45.00	-.766675E-01	-.384135E-01	-.213845E-01	0.554745E-01	0.195970E+00
50.00	-.767054E-01	-.385744E-01	-.215134E-01	0.554546E-01	0.195970E+00
55.00	-.767308E-01	-.387028E-01	-.215928E-01	0.554602E-01	0.554602E-01
60.00	-.767495E-01	-.388025E-01	-.216705E-01	0.554625E-01	0.195969E+00
70.00	-.767719E-01	-.389409E-01	-.218279E-01	0.554461E-01	0.195970E+00
80.00	-.767844E-01	-.390234E-01	-.219514E-01	0.554226E-01	0.195971E+00
90.00	-.767921E-01	-.391072E-01	-.220331E-01	0.554069E-01	0.195970E+00
100.00	-.767972E-01	-.391072E-01	-.220331E-01	0.553958E-01	0.195970E+00

TAB. A.22: Orbitales Δ_g , ion Cs_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_u	(2) ² Δ_u	(3) ² Δ_u	(4) ² Δ_u
5.00	0.759377E-01	0.122111E+00	0.205415E+00	0.586006E+00
5.20	0.684319E-01	0.114568E+00	0.197675E+00	0.579590E+00
5.40	0.614989E-01	0.107598E+00	0.190513E+00	0.574072E+00
5.60	0.550802E-01	0.101142E+00	0.183868E+00	0.569352E+00
5.80	0.491236E-01	0.951476E-01	0.177688E+00	0.565337E+00
6.00	0.435853E-01	0.895713E-01	0.171926E+00	0.561927E+00
6.20	0.384254E-01	0.843744E-01	0.166543E+00	0.559032E+00
6.40	0.336097E-01	0.795217E-01	0.161503E+00	0.556560E+00
6.60	0.291083E-01	0.749843E-01	0.156771E+00	0.554426E+00
6.80	0.248935E-01	0.707345E-01	0.152322E+00	0.552553E+00
7.00	0.209427E-01	0.667507E-01	0.148128E+00	0.550871E+00
7.20	0.172341E-01	0.630101E-01	0.144166E+00	0.549319E+00
7.40	0.137488E-01	0.594948E-01	0.140416E+00	0.547846E+00
7.60	0.104692E-01	0.561872E-01	0.136858E+00	0.546412E+00
7.80	0.738105E-02	0.530731E-01	0.133475E+00	0.544987E+00
8.00	0.446896E-02	0.501390E-01	0.130251E+00	0.543548E+00
8.20	0.172061E-02	0.473706E-01	0.127172E+00	0.542082E+00
8.40	-8.75062E-03	0.447589E-01	0.124225E+00	0.540581E+00
8.60	-3.32813E-02	0.422919E-01	0.121398E+00	0.539045E+00
8.80	-5.64973E-02	0.399603E-01	0.118681E+00	0.537475E+00
9.00	-7.84722E-02	0.377568E-01	0.116066E+00	0.535879E+00
9.20	-9.92921E-02	0.356708E-01	0.113542E+00	0.534264E+00
9.40	-1.19027E-01	0.336973E-01	0.111102E+00	0.532639E+00
9.60	-1.37750E-01	0.318290E-01	0.108741E+00	0.531015E+00
9.80	-1.55520E-01	0.300580E-01	0.106453E+00	0.529401E+00
10.00	-1.72402E-01	0.283788E-01	0.104233E+00	0.527806E+00
10.20	-1.88445E-01	0.267855E-01	0.102075E+00	0.526238E+00
10.40	-2.03706E-01	0.252734E-01	0.999794E-01	0.524704E+00
10.60	-2.18216E-01	0.238374E-01	0.979404E-01	0.523210E+00
10.80	-2.32035E-01	0.224715E-01	0.959565E-01	0.521762E+00
11.00	-2.45190E-01	0.211720E-01	0.940270E-01	0.520362E+00
11.20	-2.57725E-01	0.199345E-01	0.921485E-01	0.519014E+00
11.40	-2.69681E-01	0.187539E-01	0.903209E-01	0.517718E+00
11.60	-2.81087E-01	0.176273E-01	0.885433E-01	0.516475E+00
11.80	-2.91971E-01	0.165499E-01	0.868149E-01	0.515287E+00
12.00	-3.02359E-01	0.155191E-01	0.851351E-01	0.514152E+00
12.20	-3.12285E-01	0.145315E-01	0.835035E-01	0.513070E+00
12.40	-3.21770E-01	0.135830E-01	0.819210E-01	0.512037E+00
12.60	-3.30835E-01	0.126705E-01	0.803855E-01	0.511054E+00
12.80	-3.39502E-01	0.117918E-01	0.788988E-01	0.510120E+00
13.00	-3.47806E-01	0.109444E-01	0.774584E-01	0.509229E+00
13.50	-3.67027E-01	0.894430E-02	0.740633E-01	0.507190E+00
14.00	-3.84304E-01	0.708658E-02	0.709556E-01	0.505389E+00
14.50	-3.99858E-01	0.534418E-02	0.681252E-01	0.503795E+00
15.00	-4.13881E-01	0.369488E-02	0.655609E-01	0.502383E+00

15.50	-.426562E-01	0.212281E-02	0.632468E-01	0.501128E+00
16.00	-.438029E-01	0.615073E-03	0.611671E-01	0.500011E+00
16.50	-.448415E-01	-.836527E-03	0.593055E-01	0.499015E+00
17.00	-.457838E-01	-.223777E-02	0.576432E-01	0.498127E+00
17.50	-.466392E-01	-.359119E-02	0.561628E-01	0.497335E+00
18.00	-.474163E-01	-.489827E-02	0.548477E-01	0.496628E+00
18.50	-.481226E-01	-.616158E-02	0.536824E-01	0.495997E+00
19.00	-.487659E-01	-.738089E-02	0.526501E-01	0.495436E+00
19.50	-.493503E-01	-.855527E-02	0.517377E-01	0.494936E+00
20.00	-.498832E-01	-.968620E-02	0.509328E-01	0.494491E+00
20.50	-.503676E-01	-.107726E-01	0.502224E-01	0.494095E+00
21.00	-.508099E-01	-.118149E-01	0.495971E-01	0.493744E+00
21.50	-.512123E-01	-.128133E-01	0.490457E-01	0.493434E+00
22.00	-.515783E-01	-.137673E-01	0.485597E-01	0.493158E+00
22.50	-.519123E-01	-.146783E-01	0.481327E-01	0.492914E+00
23.00	-.522164E-01	-.155474E-01	0.477566E-01	0.492698E+00
23.50	-.524934E-01	-.163744E-01	0.474256E-01	0.492506E+00
24.00	-.527459E-01	-.171599E-01	0.471331E-01	0.492337E+00
24.50	-.529752E-01	-.179062E-01	0.468758E-01	0.492187E+00
25.00	-.531845E-01	-.186135E-01	0.466485E-01	0.492055E+00
26.00	-.535489E-01	-.199139E-01	0.462691E-01	0.491834E+00
27.00	-.538503E-01	-.210723E-01	0.459707E-01	0.491662E+00
28.00	-.541010E-01	-.220980E-01	0.457350E-01	0.491526E+00
29.00	-.543075E-01	-.229985E-01	0.455465E-01	0.491420E+00
30.00	-.544799E-01	-.237859E-01	0.453961E-01	0.491336E+00
32.00	-.547402E-01	-.250542E-01	0.451738E-01	0.491218E+00
35.00	-.549897E-01	-.263347E-01	0.449673E-01	0.491117E+00
37.00	-.550971E-01	-.268741E-01	0.448799E-01	0.491080E+00
40.00	-.552061E-01	-.273661E-01	0.447919E-01	0.491045E+00
45.00	-.553128E-01	-.277138E-01	0.447052E-01	0.491016E+00
50.00	-.553770E-01	-.278280E-01	0.446550E-01	0.491001E+00
55.00	-.554202E-01	-.278732E-01	0.446228E-01	0.490992E+00
60.00	-.554513E-01	-.278983E-01	0.446007E-01	0.490985E+00
70.00	-.554913E-01	-.278983E-01	0.445727E-01	0.490977E+00
80.00	-.555160E-01	-.279370E-01	0.445570E-01	0.490973E+00
90.00	-.555309E-01	-.279370E-01	0.445570E-01	0.490970E+00
100.00	-.555309E-01	-.279370E-01	0.445570E-01	0.490970E+00

TAB. A.23: Orbitales Δ_u , ion Li_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_u	(2) ² Δ_u	(3) ² Δ_u	(4) ² Δ_u	(5) ² Δ_u	(6) ² Δ_u
5.00	0.731939E-01	0.118325E+00	0.142803E+00	0.159249E+00	0.173386E+00	0.227473E+00
5.20	0.658810E-01	0.110973E+00	0.135422E+00	0.151781E+00	0.164166E+00	0.218051E+00
5.40	0.591094E-01	0.104157E+00	0.128573E+00	0.144815E+00	0.155442E+00	0.209431E+00
5.60	0.528252E-01	0.978242E-01	0.122205E+00	0.138282E+00	0.147220E+00	0.201554E+00
5.80	0.469829E-01	0.919289E-01	0.116271E+00	0.132106E+00	0.139523E+00	0.194358E+00
6.00	0.415435E-01	0.864295E-01	0.110731E+00	0.126200E+00	0.132394E+00	0.187780E+00
6.20	0.364684E-01	0.812914E-01	0.105547E+00	0.120458E+00	0.125888E+00	0.181759E+00
6.40	0.317273E-01	0.764823E-01	0.100691E+00	0.114802E+00	0.120047E+00	0.176239E+00
6.60	0.272923E-01	0.719743E-01	0.961313E-01	0.109227E+00	0.114829E+00	0.171167E+00
6.80	0.231366E-01	0.677406E-01	0.918446E-01	0.103802E+00	0.110123E+00	0.166497E+00
7.00	0.192389E-01	0.637599E-01	0.878079E-01	0.985929E-01	0.105814E+00	0.162186E+00
7.20	0.155775E-01	0.600115E-01	0.840005E-01	0.936405E-01	0.101822E+00	0.158197E+00
7.40	0.121346E-01	0.564786E-01	0.804046E-01	0.889546E-01	0.980946E-01	0.154501E+00
7.60	0.889310E-02	0.531421E-01	0.770031E-01	0.845331E-01	0.945951E-01	0.151065E+00
7.80	0.583967E-02	0.499897E-01	0.737827E-01	0.803637E-01	0.912947E-01	0.147867E+00
8.00	0.295923E-02	0.470062E-01	0.707272E-01	0.764332E-01	0.881742E-01	0.144881E+00
8.20	0.239970E-03	0.441800E-01	0.678260E-01	0.727260E-01	0.852160E-01	0.142091E+00
8.40	-.232884E-02	0.415012E-01	0.650662E-01	0.692272E-01	0.824042E-01	0.139477E+00
8.60	-.475896E-02	0.389580E-01	0.624380E-01	0.659210E-01	0.797270E-01	0.137024E+00
8.80	-.705828E-02	0.365417E-01	0.599287E-01	0.627957E-01	0.771727E-01	0.134719E+00
9.00	-.923592E-02	0.342451E-01	0.575261E-01	0.598421E-01	0.747321E-01	0.132547E+00
9.20	-.112993E-01	0.320587E-01	0.552167E-01	0.570537E-01	0.723947E-01	0.130499E+00
9.40	-.132573E-01	0.299757E-01	0.529787E-01	0.544337E-01	0.701517E-01	0.128564E+00
9.60	-.151151E-01	0.279909E-01	0.507819E-01	0.519959E-01	0.679969E-01	0.126734E+00
9.80	-.168785E-01	0.260965E-01	0.485935E-01	0.497565E-01	0.659225E-01	0.125000E+00
10.00	-.185548E-01	0.242882E-01	0.464092E-01	0.477052E-01	0.639222E-01	0.123355E+00
10.20	-.201488E-01	0.225602E-01	0.442562E-01	0.458052E-01	0.619902E-01	0.121795E+00
10.40	-.216642E-01	0.209088E-01	0.421578E-01	0.440178E-01	0.601208E-01	0.120313E+00
10.60	-.231071E-01	0.193279E-01	0.401259E-01	0.423229E-01	0.583099E-01	0.118904E+00
10.80	-.244803E-01	0.178147E-01	0.381637E-01	0.407077E-01	0.565537E-01	0.117564E+00
11.00	-.257896E-01	0.163644E-01	0.362694E-01	0.391624E-01	0.548474E-01	0.116289E+00
11.20	-.270362E-01	0.149748E-01	0.344428E-01	0.376818E-01	0.531878E-01	0.115077E+00
11.40	-.282262E-01	0.136418E-01	0.326788E-01	0.362628E-01	0.515718E-01	0.113924E+00
11.60	-.293606E-01	0.123624E-01	0.309764E-01	0.348994E-01	0.499984E-01	0.112826E+00
11.80	-.304430E-01	0.111340E-01	0.293310E-01	0.335900E-01	0.484640E-01	0.111782E+00
12.00	-.314771E-01	0.995393E-02	0.277399E-01	0.323299E-01	0.469669E-01	0.110790E+00
12.20	-.324641E-01	0.881892E-02	0.262019E-01	0.311189E-01	0.455049E-01	0.109846E+00
12.40	-.334073E-01	0.772773E-02	0.247127E-01	0.299517E-01	0.440787E-01	0.108949E+00
12.60	-.343077E-01	0.667729E-02	0.232703E-01	0.288293E-01	0.426853E-01	0.108096E+00
12.80	-.351703E-01	0.566665E-02	0.218737E-01	0.277467E-01	0.413247E-01	0.107287E+00
13.00	-.359940E-01	0.469198E-02	0.205190E-01	0.267040E-01	0.399950E-01	0.106517E+00
13.50	-.379011E-01	0.240891E-02	0.173079E-01	0.242569E-01	0.368069E-01	0.104760E+00
14.00	-.396115E-01	0.320507E-03	0.143265E-01	0.220195E-01	0.338055E-01	0.103218E+00
14.50	-.411471E-01	-.159212E-02	0.115509E-01	0.199699E-01	0.309829E-01	0.101863E+00
15.00	-.425271E-01	-.335009E-02	0.896091E-02	0.180889E-01	0.283339E-01	0.100674E+00

16.00	-.448903E-01	-.646125E-02	0.427575E-02	0.147697E-01	0.235287E-01	0.987157E-01
16.50	-.459004E-01	-.784142E-02	0.215158E-02	0.133036E-01	0.213566E-01	0.979146E-01
17.00	-.468124E-01	-.911943E-02	0.156566E-03	0.119506E-01	0.193286E-01	0.972146E-01
17.50	-.476368E-01	-.103048E-01	-.171779E-02	0.107012E-01	0.174342E-01	0.966062E-01
18.00	-.483810E-01	-.114050E-01	-.348196E-02	0.954504E-02	0.156680E-01	0.960770E-01
18.50	-.490555E-01	-.124285E-01	-.514347E-02	0.847453E-02	0.140195E-01	0.956195E-01
19.00	-.496651E-01	-.133821E-01	-.671008E-02	0.748092E-02	0.124829E-01	0.952249E-01
19.50	-.502179E-01	-.142709E-01	-.818685E-02	0.655915E-02	0.110511E-01	0.948851E-01
20.00	-.507172E-01	-.151002E-01	-.958124E-02	0.570176E-02	0.971676E-02	0.945908E-01
20.50	-.511712E-01	-.158762E-01	-.108962E-01	0.490384E-02	0.847484E-02	0.943368E-01
21.00	-.515821E-01	-.166011E-01	-.121371E-01	0.415892E-02	0.731992E-02	0.941159E-01
21.50	-.519540E-01	-.172810E-01	-.133080E-01	0.346496E-02	0.624696E-02	0.939210E-01
22.00	-.522917E-01	-.179177E-01	-.144137E-01	0.281429E-02	0.525029E-02	0.937473E-01
22.50	-.525984E-01	-.185164E-01	-.154554E-01	0.220555E-02	0.432855E-02	0.935906E-01
23.00	-.528763E-01	-.190803E-01	-.164373E-01	0.163370E-02	0.347570E-02	0.934477E-01
23.50	-.531281E-01	-.196121E-01	-.173621E-01	0.109392E-02	0.268892E-02	0.933139E-01
24.00	-.533563E-01	-.201163E-01	-.182303E-01	0.584662E-03	0.196666E-02	0.931877E-01
24.50	-.535644E-01	-.205964E-01	-.190434E-01	0.100560E-03	0.130656E-02	0.930676E-01
25.00	-.537526E-01	-.210596E-01	-.198006E-01	-.361552E-03	0.705448E-03	0.929504E-01
26.00	-.537766E-01	-.217836E-01	-.210746E-01	-.938642E-03	-.299642E-03	0.961964E-01
27.00	-.543488E-01	-.229638E-01	-.221208E-01	-.202984E-02	-.117184E-02	0.925142E-01
28.00	-.545713E-01	-.239943E-01	-.228643E-01	-.275334E-02	-.186434E-02	0.923127E-01
29.00	-.547556E-01	-.249706E-01	-.234716E-01	-.339465E-02	-.244965E-02	0.921244E-01
30.00	-.549079E-01	-.258619E-01	-.239979E-01	-.395890E-02	-.295590E-02	0.919521E-01
32.00	-.551419E-01	-.273839E-01	-.248869E-01	-.488895E-02	-.381095E-02	0.916581E-01
35.00	-.553702E-01	-.291172E-01	-.259322E-01	-.595223E-02	-.486923E-02	0.913398E-01
37.00	-.554715E-01	-.299775E-01	-.264925E-01	-.653750E-02	-.548450E-02	0.911895E-01
40.00	-.555764E-01	-.309274E-01	-.271804E-01	-.734039E-02	-.626439E-02	0.910166E-01
45.00	-.556820E-01	-.318490E-01	-.280360E-01	-.854302E-02	-.713702E-02	0.907970E-01
50.00	-.557462E-01	-.322442E-01	-.286452E-01	-.938516E-02	-.766116E-02	0.906298E-01
55.00	-.557883E-01	-.323523E-01	-.290963E-01	-.982829E-02	-.801129E-02	0.905137E-01
60.00	-.558184E-01	-.323214E-01	-.294384E-01	-.999941E-02	-.826541E-02	0.904426E-01
70.00	-.558573E-01	-.321393E-01	-.299163E-01	-.100093E-01	-.860933E-02	0.903767E-01
80.00	-.558810E-01	-.319660E-01	-.302250E-01	-.992802E-02	-.882702E-02	0.903500E-01
90.00	-.558959E-01	-.318339E-01	-.304349E-01	-.985590E-02	-.897290E-02	0.903361E-01
100.00	-.559050E-01	-.317360E-01	-.305830E-01	-.979901E-02	-.907501E-02	0.903270E-01

TAB. A.24: Orbitales Δ_u , ion Na_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_u	(2) ² Δ_u	(3) ² Δ_u	(4) ² Δ_u	(5) ² Δ_u
5.00	0.201319E-01	0.837079E-01	0.116912E+00	0.144276E+00	0.727065E+00
5.20	0.155827E-01	0.792997E-01	0.112417E+00	0.140121E+00	0.710675E+00
5.40	0.111999E-01	0.749339E-01	0.107934E+00	0.136031E+00	0.694666E+00
5.60	0.701732E-02	0.706653E-01	0.103526E+00	0.132063E+00	0.679176E+00
5.80	0.305158E-02	0.665306E-01	0.992326E-01	0.128256E+00	0.664327E+00
6.00	-.691332E-03	0.625487E-01	0.950777E-01	0.124629E+00	0.650224E+00
6.20	-.421483E-02	0.587312E-01	0.910752E-01	0.121193E+00	0.636956E+00
6.40	-.752616E-02	0.550818E-01	0.872308E-01	0.117953E+00	0.624595E+00
6.60	-.106349E-01	0.516001E-01	0.835471E-01	0.114907E+00	0.613191E+00
6.80	-.135503E-01	0.482837E-01	0.800207E-01	0.112050E+00	0.602776E+00
7.00	-.162860E-01	0.451250E-01	0.766500E-01	0.109374E+00	0.593360E+00
7.20	-.188523E-01	0.421197E-01	0.734277E-01	0.106872E+00	0.584936E+00
7.40	-.212614E-01	0.392596E-01	0.703496E-01	0.104535E+00	0.577479E+00
7.60	-.235223E-01	0.365387E-01	0.674077E-01	0.102352E+00	0.570947E+00
7.80	-.256462E-01	0.339478E-01	0.645968E-01	0.100312E+00	0.565288E+00
8.00	-.276432E-01	0.314818E-01	0.619088E-01	0.984068E-01	0.560437E+00
8.20	-.295207E-01	0.291323E-01	0.593393E-01	0.966263E-01	0.556323E+00
8.40	-.312887E-01	0.268933E-01	0.568803E-01	0.949593E-01	0.552872E+00
8.60	-.329542E-01	0.247588E-01	0.545268E-01	0.933978E-01	0.550008E+00
8.80	-.345237E-01	0.227213E-01	0.522723E-01	0.919333E-01	0.547655E+00
9.00	-.360049E-01	0.207771E-01	0.501131E-01	0.905551E-01	0.545743E+00
9.20	-.374027E-01	0.189193E-01	0.480423E-01	0.892583E-01	0.544203E+00
9.40	-.387230E-01	0.171440E-01	0.460560E-01	0.880340E-01	0.542977E+00
9.60	-.399706E-01	0.154464E-01	0.441504E-01	0.868764E-01	0.542008E+00
9.80	-.411506E-01	0.138214E-01	0.423194E-01	0.857784E-01	0.541251E+00
10.00	-.422673E-01	0.122657E-01	0.405607E-01	0.847357E-01	0.540665E+00
10.20	-.433244E-01	0.107756E-01	0.388706E-01	0.837426E-01	0.540215E+00
10.40	-.443256E-01	0.934638E-02	0.372444E-01	0.827944E-01	0.539871E+00
10.60	-.452753E-01	0.797666E-02	0.356807E-01	0.818887E-01	0.539613E+00
10.80	-.461758E-01	0.666223E-02	0.341742E-01	0.810202E-01	0.539418E+00
11.00	-.470299E-01	0.540008E-02	0.327231E-01	0.801871E-01	0.539275E+00
11.20	-.478406E-01	0.418736E-02	0.313254E-01	0.793874E-01	0.539169E+00
11.40	-.486096E-01	0.302241E-02	0.299774E-01	0.786174E-01	0.539092E+00
11.60	-.493403E-01	0.190171E-02	0.286767E-01	0.778767E-01	0.539038E+00
11.80	-.500351E-01	0.823918E-03	0.274229E-01	0.771639E-01	0.539000E+00
12.00	-.506952E-01	-.212205E-03	0.262118E-01	0.764768E-01	0.538974E+00
12.20	-.513238E-01	-.121075E-02	0.250422E-01	0.758142E-01	0.538956E+00
12.40	-.519207E-01	-.217270E-02	0.239123E-01	0.751753E-01	0.538945E+00
12.60	-.524889E-01	-.309891E-02	0.228201E-01	0.745611E-01	0.538939E+00
12.80	-.530301E-01	-.399213E-02	0.217639E-01	0.739689E-01	0.538937E+00
13.00	-.535440E-01	-.485404E-02	0.207430E-01	0.733990E-01	0.538937E+00
13.50	-.547270E-01	-.687797E-02	0.183310E-01	0.720710E-01	0.538943E+00
14.00	-.557747E-01	-.873369E-02	0.161053E-01	0.708743E-01	0.538952E+00
14.50	-.567036E-01	-.104376E-01	0.140474E-01	0.698064E-01	0.538962E+00
15.00	-.575306E-01	-.120086E-01	0.121404E-01	0.688594E-01	0.538972E+00

15.50	-.582657E-01	-.134577E-01	0.103703E-01	0.680293E-01	0.538980E+00
16.00	-.589209E-01	-.147999E-01	0.872507E-02	0.673051E-01	0.538988E+00
16.50	-.595059E-01	-.160439E-01	0.719312E-02	0.666801E-01	0.538994E+00
17.00	-.600288E-01	-.172008E-01	0.576515E-02	0.661422E-01	0.538999E+00
17.50	-.604960E-01	-.182780E-01	0.443103E-02	0.656810E-01	0.539004E+00
18.00	-.553794E-01	-.170024E-01	0.461158E-02	0.773426E-01	0.539009E+00
18.50	-.612925E-01	-.202235E-01	0.202051E-02	0.649475E-01	0.539013E+00
19.00	-.616307E-01	-.211047E-01	0.930262E-03	0.646533E-01	0.539016E+00
19.50	-.619351E-01	-.219301E-01	-.900664E-04	0.643949E-01	0.539020E+00
20.00	-.622098E-01	-.227058E-01	-.104579E-02	0.641652E-01	0.539023E+00
20.50	-.624577E-01	-.234357E-01	-.194073E-02	0.639573E-01	0.539026E+00
21.00	-.626822E-01	-.241222E-01	-.278024E-02	0.637638E-01	0.539029E+00
21.50	-.628853E-01	-.247693E-01	-.356529E-02	0.635827E-01	0.539032E+00
22.00	-.630685E-01	-.253795E-01	-.430149E-02	0.634105E-01	0.539034E+00
22.50	-.632361E-01	-.259551E-01	-.499013E-02	0.632439E-01	0.539036E+00
23.00	-.633872E-01	-.264992E-01	-.563521E-02	0.630818E-01	0.539038E+00
23.50	-.635245E-01	-.270125E-01	-.623951E-02	0.629225E-01	0.539039E+00
24.00	-.636505E-01	-.274975E-01	-.680554E-02	0.627685E-01	0.539041E+00
24.50	-.637646E-01	-.279556E-01	-.733463E-02	0.626174E-01	0.539043E+00
25.00	-.638689E-01	-.283889E-01	-.782993E-02	0.624701E-01	0.539044E+00
26.00	-.640509E-01	-.291859E-01	-.872690E-02	0.621911E-01	0.539046E+00
27.00	-.642045E-01	-.298985E-01	-.951353E-02	0.619355E-01	0.539048E+00
28.00	-.643329E-01	-.305369E-01	-.102049E-01	0.617071E-01	0.539050E+00
29.00	-.644424E-01	-.311084E-01	-.108144E-01	0.615066E-01	0.539052E+00
30.00	-.645352E-01	-.316202E-01	-.113542E-01	0.613358E-01	0.539053E+00
32.00	-.646839E-01	-.324889E-01	-.122679E-01	0.610721E-01	0.539054E+00
35.00	-.648408E-01	-.334818E-01	-.133408E-01	0.608192E-01	0.539056E+00
37.00	-.649159E-01	-.339839E-01	-.139209E-01	0.607031E-01	0.539057E+00
40.00	-.650006E-01	-.345596E-01	-.146486E-01	0.605614E-01	0.539057E+00
45.00	-.650950E-01	-.351850E-01	-.155610E-01	0.603560E-01	0.539059E+00
50.00	-.651555E-01	-.355525E-01	-.161655E-01	0.601945E-01	0.539060E+00
55.00	-.651962E-01	-.357762E-01	-.165402E-01	0.600888E-01	0.539060E+00
60.00	-.652240E-01	-.359200E-01	-.167640E-01	0.600260E-01	0.539060E+00
70.00	-.652587E-01	-.360877E-01	-.169917E-01	0.599693E-01	0.539060E+00
80.00	-.652782E-01	-.361000E-01	-.171022E-01	0.599438E+00	0.539060E+00
90.00	-.652910E-01	-.362340E-01	-.171670E-01	0.599290E-01	0.539060E+00
100.00	-.652981E-01	-.362691E-01	-.172091E-01	0.599199E-01	0.539060E+00

TAB. A.25: Orbitales Δ_u , ion Rb_2^+

R(ua)	(1) ² Δ_u	(2) ² Δ_u	(3) ² Δ_u	(4) ² Δ_u	(5) ² Δ_u
5.00	-.967122E-02	0.673288E-01	0.104342E+00	0.132371E+00	0.369321E+00
5.20	-.124770E-01	0.653220E-01	0.102331E+00	0.130547E+00	0.362968E+00
5.40	-.155522E-01	0.628308E-01	0.997978E-01	0.128282E+00	0.356373E+00
5.60	-.187301E-01	0.600409E-01	0.969329E-01	0.125757E+00	0.349612E+00
5.80	-.219054E-01	0.570806E-01	0.938686E-01	0.123096E+00	0.342740E+00
6.00	-.250112E-01	0.540398E-01	0.906998E-01	0.120384E+00	0.335799E+00
6.20	-.280036E-01	0.509794E-01	0.874914E-01	0.117681E+00	0.328826E+00
6.40	-.308610E-01	0.479440E-01	0.842900E-01	0.115030E+00	0.321854E+00
6.60	-.335705E-01	0.449615E-01	0.811275E-01	0.112455E+00	0.314912E+00
6.80	-.361274E-01	0.420536E-01	0.780256E-01	0.109974E+00	0.308027E+00
7.00	-.385328E-01	0.392322E-01	0.750002E-01	0.107597E+00	0.301227E+00
7.20	-.407911E-01	0.365039E-01	0.720599E-01	0.105331E+00	0.294537E+00
7.40	-.429069E-01	0.338741E-01	0.692101E-01	0.103175E+00	0.287982E+00
7.60	-.448866E-01	0.313444E-01	0.664544E-01	0.101129E+00	0.281584E+00
7.80	-.467399E-01	0.289151E-01	0.637931E-01	0.991921E-01	0.275365E+00
8.00	-.484728E-01	0.265832E-01	0.612262E-01	0.973582E-01	0.269345E+00
8.20	-.500944E-01	0.243476E-01	0.587526E-01	0.956226E-01	0.263542E+00
8.40	-.516097E-01	0.222053E-01	0.563693E-01	0.939813E-01	0.257970E+00
8.60	-.530283E-01	0.201517E-01	0.540747E-01	0.924267E-01	0.252646E+00
8.80	-.543548E-01	0.181852E-01	0.518652E-01	0.909552E-01	0.247580E+00
9.00	-.555974E-01	0.163006E-01	0.497366E-01	0.895596E-01	0.242782E+00
9.20	-.567602E-01	0.144958E-01	0.476888E-01	0.882338E-01	0.238258E+00
9.40	-.578504E-01	0.127666E-01	0.457156E-01	0.869726E-01	0.234015E+00
9.60	-.588721E-01	0.111079E-01	0.438149E-01	0.857719E-01	0.230052E+00
9.80	-.598306E-01	0.951842E-02	0.419834E-01	0.846244E-01	0.226371E+00
10.00	-.607298E-01	0.799421E-02	0.402192E-01	0.835272E-01	0.222970E+00
10.20	-.615747E-01	0.653126E-02	0.385183E-01	0.824763E-01	0.219843E+00
10.40	-.623673E-01	0.512769E-02	0.368777E-01	0.814657E-01	0.216985E+00
10.60	-.631132E-01	0.377976E-02	0.352948E-01	0.804938E-01	0.214386E+00
10.80	-.638142E-01	0.248482E-02	0.337678E-01	0.795568E-01	0.212035E+00
11.00	-.644737E-01	0.124034E-02	0.322933E-01	0.786523E-01	0.209921E+00
11.20	-.650941E-01	0.449063E-04	0.308699E-01	0.777769E-01	0.208033E+00
11.40	-.656788E-01	-.110578E-02	0.294942E-01	0.769312E-01	0.206353E+00
11.60	-.662289E-01	-.221289E-02	0.281651E-01	0.761111E-01	0.204870E+00
11.80	-.667475E-01	-.327852E-02	0.268805E-01	0.753175E-01	0.203567E+00
12.00	-.672366E-01	-.430463E-02	0.256374E-01	0.745484E-01	0.202429E+00
12.20	-.676981E-01	-.529411E-02	0.244349E-01	0.738029E-01	0.201442E+00
12.40	-.681337E-01	-.624774E-02	0.232713E-01	0.730813E-01	0.200589E+00
12.60	-.685452E-01	-.716720E-02	0.221448E-01	0.723828E-01	0.199858E+00
12.80	-.689341E-01	-.805410E-02	0.210529E-01	0.717079E-01	0.199234E+00
13.00	-.693010E-01	-.891096E-02	0.199960E-01	0.710560E-01	0.198704E+00
13.50	-.701332E-01	-.109252E-01	0.174928E-01	0.695278E-01	0.197718E+00
14.00	-.708569E-01	-.127769E-01	0.151731E-01	0.681451E-01	0.197091E+00
14.50	-.714895E-01	-.144815E-01	0.130205E-01	0.669065E-01	0.196703E+00
15.00	-.720428E-01	-.160558E-01	0.110192E-01	0.658082E-01	0.196463E+00

15.50	-.725272E-01	-.175122E-01	0.915583E-02	0.648448E-01	0.196316E+00
16.00	-.729531E-01	-.188621E-01	0.741691E-02	0.640069E-01	0.196223E+00
16.50	-.733287E-01	-.201167E-01	0.579427E-02	0.632833E-01	0.196160E+00
17.00	-.736590E-01	-.212830E-01	0.427798E-02	0.626620E-01	0.196115E+00
17.50	-.739518E-01	-.223698E-01	0.285817E-02	0.621302E-01	0.196081E+00
18.00	-.742111E-01	-.233831E-01	0.152790E-02	0.616749E-01	0.196055E+00
18.50	-.744419E-01	-.243299E-01	0.282054E-03	0.612821E-01	0.196033E+00
19.00	-.746468E-01	-.252148E-01	-.887780E-03	0.609412E-01	0.196016E+00
19.50	-.748294E-01	-.260424E-01	-.198437E-02	0.606406E-01	0.196003E+00
20.00	-.749930E-01	-.268170E-01	-.301495E-02	0.603710E-01	0.195992E+00
20.50	-.751392E-01	-.275422E-01	-.398324E-02	0.601258E-01	0.195984E+00
21.00	-.752705E-01	-.282205E-01	-.489353E-02	0.598975E-01	0.195977E+00
21.50	-.753887E-01	-.288567E-01	-.574872E-02	0.596813E-01	0.195973E+00
22.00	-.754954E-01	-.294514E-01	-.655238E-02	0.594746E-01	0.195971E+00
22.50	-.755918E-01	-.300098E-01	-.730976E-02	0.592742E-01	0.195968E+00
23.00	-.756778E-01	-.305318E-01	-.802083E-02	0.590792E-01	0.195966E+00
23.50	-.757573E-01	-.310213E-01	-.869131E-02	0.588887E-01	0.195966E+00
24.00	-.758287E-01	-.314797E-01	-.932172E-02	0.587033E-01	0.195965E+00
24.50	-.758934E-01	-.319094E-01	-.991636E-02	0.585216E-01	0.195965E+00
25.00	-.759523E-01	-.323123E-01	-.104763E-01	0.583457E-01	0.195965E+00
26.00	-.760561E-01	-.330421E-01	-.115011E-01	0.580119E-01	0.195965E+00
27.00	-.761428E-01	-.336838E-01	-.124138E-01	0.577072E-01	0.195965E+00
28.00	-.762156E-01	-.342476E-01	-.132286E-01	0.574374E-01	0.195965E+00
29.00	-.762789E-01	-.347429E-01	-.139589E-01	0.572031E-01	0.195965E+00
30.00	-.763315E-01	-.351805E-01	-.146145E-01	0.570035E-01	0.195965E+00
32.00	-.764176E-01	-.359096E-01	-.157456E-01	0.566994E-01	0.195966E+00
35.00	-.765107E-01	-.367257E-01	-.170967E-01	0.564163E-01	0.195967E+00
37.00	-.765561E-01	-.371351E-01	-.178301E-01	0.562929E-01	0.195968E+00
40.00	-.766089E-01	-.376059E-01	-.187419E-01	0.561471E-01	0.195968E+00
45.00	-.766675E-01	-.381295E-01	-.198775E-01	0.559365E-01	0.195970E+00
50.00	-.767054E-01	-.384484E-01	-.206454E-01	0.557596E-01	0.195970E+00
55.00	-.767308E-01	-.386488E-01	-.211448E-01	0.556292E-01	0.195970E+00
60.00	-.767495E-01	-.387815E-01	-.214615E-01	0.555435E-01	0.195969E+00
70.00	-.767719E-01	-.389369E-01	-.217929E-01	0.554591E-01	0.195970E+00
80.00	-.767844E-01	-.390224E-01	-.219474E-01	0.554246E-01	0.195971E+00
90.00	-.767921E-01	-.390741E-01	-.220331E-01	0.554069E-01	0.195970E+00
100.00	-.767972E-01	-.391072E-01	-.220872E-01	0.553958E-01	0.195970E+00

TAB. A.26: Orbitales Δ_u , ion Cs_2^+

Annexe B

Courbes de potentiel des ions alcalins hétéronucléaires

Nous donnons dans cette annexe les courbes de potentiel pour les symétries ${}^2\Sigma^+$, ${}^2\Pi$ et ${}^2\Delta$ pour les distances internucléaires comprises entre 5 ua et 100 ua des ions moléculaires alcalins hétéronucléaires. Les énergies sont exprimées en ua.

R(ua)	(1) ${}^2\Sigma^+$	(2) ${}^2\Sigma^+$	(3) ${}^2\Sigma^+$	(4) ${}^2\Sigma^+$	(5) ${}^2\Sigma^+$	(6) ${}^2\Sigma^+$
5.00	-.224753E+00	-.105538E+00	-.641705E-01	0.973949E-02	0.443545E-01	0.538635E-01
5.20	-.228155E+00	-.111380E+00	-.705589E-01	0.315906E-02	0.360391E-01	0.473571E-01
5.40	-.230741E+00	-.116826E+00	-.762687E-01	-.286265E-02	0.280773E-01	0.414003E-01
5.60	-.232636E+00	-.121918E+00	-.813976E-01	-.837456E-02	0.204334E-01	0.359154E-01
5.80	-.233944E+00	-.126690E+00	-.860263E-01	-.134203E-01	0.130807E-01	0.308417E-01
6.00	-.234761E+00	-.131171E+00	-.902205E-01	-.180405E-01	0.600248E-02	0.261305E-01
6.20	-.235164E+00	-.135381E+00	-.940354E-01	-.222754E-01	-.810441E-03	0.217386E-01
6.40	-.235224E+00	-.139344E+00	-.975190E-01	-.261630E-01	-.735696E-02	0.176300E-01
6.60	-.234998E+00	-.143075E+00	-.100711E+00	-.297421E-01	-.136301E-01	0.137729E-01
6.80	-.234536E+00	-.146589E+00	-.103644E+00	-.330507E-01	-.196167E-01	0.101413E-01
7.00	-.233880E+00	-.149897E+00	-.106345E+00	-.361335E-01	-.252955E-01	0.671052E-02
7.20	-.233068E+00	-.153012E+00	-.108843E+00	-.390480E-01	-.306290E-01	0.346100E-02
7.40	-.232129E+00	-.155942E+00	-.111156E+00	-.418935E-01	-.355375E-01	0.376486E-03
7.60	-.231088E+00	-.158695E+00	-.113301E+00	-.448644E-01	-.398454E-01	-.255741E-02
7.80	-.229969E+00	-.161281E+00	-.115295E+00	-.482195E-01	-.433165E-01	-.535046E-02
8.00	-.228792E+00	-.163706E+00	-.117152E+00	-.519440E-01	-.459860E-01	-.801397E-02
8.20	-.227570E+00	-.165977E+00	-.118880E+00	-.557660E-01	-.481470E-01	-.105560E-01
8.40	-.226318E+00	-.168101E+00	-.120490E+00	-.595014E-01	-.500054E-01	-.129824E-01
8.60	-.225050E+00	-.170084E+00	-.121992E+00	-.630771E-01	-.516581E-01	-.153011E-01
8.80	-.223773E+00	-.171932E+00	-.123391E+00	-.664682E-01	-.531502E-01	-.175162E-01
9.00	-.222498E+00	-.173653E+00	-.124695E+00	-.696689E-01	-.545089E-01	-.196349E-01
9.20	-.221231E+00	-.175251E+00	-.125909E+00	-.726836E-01	-.557516E-01	-.216606E-01
9.40	-.219979E+00	-.176733E+00	-.127037E+00	-.755184E-01	-.568924E-01	-.235984E-01
9.60	-.218749E+00	-.178106E+00	-.128085E+00	-.781826E-01	-.579406E-01	-.254516E-01
9.80	-.217543E+00	-.179374E+00	-.129056E+00	-.806838E-01	-.589058E-01	-.272248E-01
10.00	-.216368E+00	-.180543E+00	-.129954E+00	-.830336E-01	-.597966E-01	-.289226E-01

10.20	-.215225E+00	-.181619E+00	-.130782E+00	-.852398E-01	-.606188E-01	-.305478E-01
10.40	-.214119E+00	-.182607E+00	-.131543E+00	-.873121E-01	-.613811E-01	-.321031E-01
10.60	-.213053E+00	-.183513E+00	-.132241E+00	-.892576E-01	-.620896E-01	-.335926E-01
10.80	-.212027E+00	-.184339E+00	-.132877E+00	-.910862E-01	-.627492E-01	-.350192E-01
11.00	-.211045E+00	-.185093E+00	-.133455E+00	-.928036E-01	-.633676E-01	-.363856E-01
11.20	-.210106E+00	-.185776E+00	-.133976E+00	-.944171E-01	-.639481E-01	-.376941E-01
11.40	-.209214E+00	-.186395E+00	-.134443E+00	-.959340E-01	-.644980E-01	-.389490E-01
11.60	-.208368E+00	-.186953E+00	-.134859E+00	-.973590E-01	-.650210E-01	-.401510E-01
11.80	-.207569E+00	-.187453E+00	-.135226E+00	-.986999E-01	-.655219E-01	-.413029E-01
12.00	-.206817E+00	-.187899E+00	-.135546E+00	-.999594E-01	-.660074E-01	-.424074E-01
12.20	-.206112E+00	-.188295E+00	-.135822E+00	-.101144E+00	-.664787E-01	-.434667E-01
12.40	-.205454E+00	-.188643E+00	-.136055E+00	-.102257E+00	-.669420E-01	-.444830E-01
12.60	-.204842E+00	-.188948E+00	-.136248E+00	-.103304E+00	-.673985E-01	-.454575E-01
12.80	-.204274E+00	-.189211E+00	-.136403E+00	-.104286E+00	-.678542E-01	-.463932E-01
13.00	-.203751E+00	-.189437E+00	-.136523E+00	-.105209E+00	-.683098E-01	-.472908E-01
13.50	-.202622E+00	-.189854E+00	-.136681E+00	-.107274E+00	-.694668E-01	-.493818E-01
14.00	-.201727E+00	-.190097E+00	-.136665E+00	-.109028E+00	-.706659E-01	-.512719E-01
14.50	-.201029E+00	-.190209E+00	-.136507E+00	-.110507E+00	-.719179E-01	-.529829E-01
15.00	-.200491E+00	-.190227E+00	-.136240E+00	-.111740E+00	-.732161E-01	-.545331E-01
15.50	-.200079E+00	-.190184E+00	-.135895E+00	-.112754E+00	-.745382E-01	-.559432E-01
16.00	-.199760E+00	-.190106E+00	-.135497E+00	-.113571E+00	-.758571E-01	-.572331E-01
16.50	-.199513E+00	-.190010E+00	-.135073E+00	-.114212E+00	-.771390E-01	-.584230E-01
17.00	-.199317E+00	-.189909E+00	-.134643E+00	-.114695E+00	-.783546E-01	-.595256E-01
17.50	-.199160E+00	-.189808E+00	-.134221E+00	-.115038E+00	-.794815E-01	-.605475E-01
18.00	-.199032E+00	-.189715E+00	-.133821E+00	-.115260E+00	-.805011E-01	-.614971E-01
18.50	-.198926E+00	-.189629E+00	-.133451E+00	-.115377E+00	-.814050E-01	-.623800E-01
19.00	-.198838E+00	-.189551E+00	-.133115E+00	-.115406E+00	-.821870E-01	-.632020E-01
19.50	-.198762E+00	-.189481E+00	-.132814E+00	-.115366E+00	-.828451E-01	-.639711E-01
20.00	-.198698E+00	-.189420E+00	-.132548E+00	-.115270E+00	-.833817E-01	-.646897E-01
20.50	-.198642E+00	-.189365E+00	-.132314E+00	-.115133E+00	-.838019E-01	-.653649E-01
21.00	-.198593E+00	-.189317E+00	-.132110E+00	-.114968E+00	-.841100E-01	-.659980E-01
21.50	-.198550E+00	-.189274E+00	-.131932E+00	-.114786E+00	-.843152E-01	-.665932E-01
22.00	-.198513E+00	-.189236E+00	-.131777E+00	-.114595E+00	-.844250E-01	-.671520E-01
22.50	-.198480E+00	-.189202E+00	-.131642E+00	-.114402E+00	-.844469E-01	-.676779E-01
23.00	-.198450E+00	-.189172E+00	-.131523E+00	-.114213E+00	-.843919E-01	-.681709E-01
23.50	-.198424E+00	-.189146E+00	-.131419E+00	-.114030E+00	-.842668E-01	-.686328E-01
24.00	-.198400E+00	-.189121E+00	-.131326E+00	-.113856E+00	-.840811E-01	-.690661E-01
24.50	-.198379E+00	-.189100E+00	-.131244E+00	-.113693E+00	-.838433E-01	-.694693E-01
25.00	-.198361E+00	-.189081E+00	-.131172E+00	-.113542E+00	-.835605E-01	-.698455E-01
26.00	-.198328E+00	-.189048E+00	-.131047E+00	-.113272E+00	-.828928E-01	-.705158E-01
27.00	-.198301E+00	-.189020E+00	-.130945E+00	-.113044E+00	-.821281E-01	-.710831E-01
28.00	-.198279E+00	-.188998E+00	-.130861E+00	-.112854E+00	-.813117E-01	-.715537E-01
29.00	-.198260E+00	-.188979E+00	-.130790E+00	-.112694E+00	-.804811E-01	-.719331E-01
30.00	-.198245E+00	-.188964E+00	-.130729E+00	-.112559E+00	-.796664E-01	-.722284E-01
32.00	-.198221E+00	-.188940E+00	-.130634E+00	-.112349E+00	-.781806E-01	-.725956E-01
35.00	-.198197E+00	-.188915E+00	-.130533E+00	-.112132E+00	-.765250E-01	-.727010E-01
37.00	-.198185E+00	-.188903E+00	-.130483E+00	-.112030E+00	-.758313E-01	-.725813E-01

40.00	-.198173E+00	-.188891E+00	-.130428E+00	-.111918E+00	-.752222E-01	-.723172E-01
45.00	-.198161E+00	-.188879E+00	-.130368E+00	-.111799E+00	-.747479E-01	-.719729E-01
50.00	-.198154E+00	-.188872E+00	-.130330E+00	-.111726E+00	-.745231E-01	-.717861E-01
55.00	-.198149E+00	-.188868E+00	-.130306E+00	-.111679E+00	-.743982E-01	-.716822E-01
60.00	-.198147E+00	-.188865E+00	-.130289E+00	-.111648E+00	-.743224E-01	-.716204E-01
70.00	-.198144E+00	-.188862E+00	-.130268E+00	-.111610E+00	-.742424E-01	-.715563E-01
80.00	-.198142E+00	-.188861E+00	-.130257E+00	-.111590E+00	-.742041E-01	-.715270E-01
90.00	-.198142E+00	-.188860E+00	-.130250E+00	-.111579E+00	-.741849E-01	-.715109E-01
100.00	-.198141E+00	-.188860E+00	-.130246E+00	-.111571E+00	-.741730E-01	-.715030E-01

TAB. B.1: Orbitales Σ , ion LiNa^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.193700E+00	-.911534E-01	-.568554E-01	-.842239E-02	0.339496E-01	0.523526E-01
5.20	-.199575E+00	-.967526E-01	-.627276E-01	-.128396E-01	0.281644E-01	0.458624E-01
5.40	-.204487E+00	-.101907E+00	-.679667E-01	-.169457E-01	0.227183E-01	0.398163E-01
5.60	-.208533E+00	-.106664E+00	-.726790E-01	-.207650E-01	0.175720E-01	0.341770E-01
5.80	-.211813E+00	-.111068E+00	-.769476E-01	-.243206E-01	0.126914E-01	0.289064E-01
6.00	-.214422E+00	-.115157E+00	-.808389E-01	-.276339E-01	0.804508E-02	0.239691E-01
6.20	-.216448E+00	-.118963E+00	-.844064E-01	-.307234E-01	0.359956E-02	0.193336E-01
6.40	-.217972E+00	-.122518E+00	-.876941E-01	-.336051E-01	-.672103E-03	0.149699E-01
6.60	-.219067E+00	-.125844E+00	-.907364E-01	-.362954E-01	-.480144E-02	0.108506E-01
6.80	-.219796E+00	-.128962E+00	-.935638E-01	-.388098E-01	-.881278E-02	0.695422E-02
7.00	-.220213E+00	-.131887E+00	-.961984E-01	-.411624E-01	-.127324E-01	0.326155E-02
7.20	-.220369E+00	-.134637E+00	-.986620E-01	-.433690E-01	-.165800E-01	-.241960E-03
7.40	-.220305E+00	-.137221E+00	-.100970E+00	-.454442E-01	-.203722E-01	-.356724E-02
7.60	-.220059E+00	-.139651E+00	-.103138E+00	-.474027E-01	-.241137E-01	-.672473E-02
7.80	-.219660E+00	-.141936E+00	-.105178E+00	-.492636E-01	-.278016E-01	-.972058E-02
8.00	-.219138E+00	-.144082E+00	-.107100E+00	-.510448E-01	-.314178E-01	-.125608E-01
8.20	-.218515E+00	-.146095E+00	-.108914E+00	-.527712E-01	-.349362E-01	-.152512E-01
8.40	-.217814E+00	-.147982E+00	-.110629E+00	-.544709E-01	-.383169E-01	-.177979E-01
8.60	-.217052E+00	-.149744E+00	-.112251E+00	-.561760E-01	-.415130E-01	-.202070E-01
8.80	-.216244E+00	-.151388E+00	-.113787E+00	-.579247E-01	-.444717E-01	-.224867E-01
9.00	-.215405E+00	-.152914E+00	-.115241E+00	-.597539E-01	-.471449E-01	-.246429E-01
9.20	-.214547E+00	-.154326E+00	-.116617E+00	-.616885E-01	-.494985E-01	-.266855E-01
9.40	-.213680E+00	-.155629E+00	-.117921E+00	-.637340E-01	-.515230E-01	-.286220E-01
9.60	-.212813E+00	-.156824E+00	-.119153E+00	-.658664E-01	-.532394E-01	-.304584E-01
9.80	-.211954E+00	-.157914E+00	-.120319E+00	-.680482E-01	-.546882E-01	-.322032E-01
10.00	-.211110E+00	-.158904E+00	-.121421E+00	-.702375E-01	-.559175E-01	-.338615E-01
10.20	-.210286E+00	-.159794E+00	-.122459E+00	-.723971E-01	-.569721E-01	-.354401E-01
10.40	-.209488E+00	-.160591E+00	-.123437E+00	-.745012E-01	-.578862E-01	-.369452E-01
10.60	-.208719E+00	-.161297E+00	-.124358E+00	-.765309E-01	-.586879E-01	-.383809E-01
10.80	-.207983E+00	-.161915E+00	-.125223E+00	-.784760E-01	-.593980E-01	-.397520E-01
11.00	-.207281E+00	-.162451E+00	-.126035E+00	-.803310E-01	-.600340E-01	-.410630E-01
11.20	-.206617E+00	-.162909E+00	-.126794E+00	-.820941E-01	-.606061E-01	-.423181E-01
11.40	-.205991E+00	-.163293E+00	-.127504E+00	-.837654E-01	-.611274E-01	-.435214E-01
11.60	-.205405E+00	-.163610E+00	-.128166E+00	-.853468E-01	-.616038E-01	-.446748E-01
11.80	-.204856E+00	-.163861E+00	-.128781E+00	-.868407E-01	-.620427E-01	-.457817E-01
12.00	-.204346E+00	-.164055E+00	-.129351E+00	-.882508E-01	-.624508E-01	-.468458E-01
12.20	-.203873E+00	-.164194E+00	-.129877E+00	-.895803E-01	-.628323E-01	-.478673E-01
12.40	-.203436E+00	-.164285E+00	-.130362E+00	-.908335E-01	-.631925E-01	-.488495E-01
12.60	-.203034E+00	-.164333E+00	-.130807E+00	-.920122E-01	-.635352E-01	-.497922E-01
12.80	-.202664E+00	-.164344E+00	-.131213E+00	-.931226E-01	-.638646E-01	-.506986E-01
13.00	-.202324E+00	-.164320E+00	-.131581E+00	-.941663E-01	-.641843E-01	-.515683E-01
13.50	-.201598E+00	-.164146E+00	-.132349E+00	-.965066E-01	-.649616E-01	-.535846E-01
14.00	-.201017E+00	-.163854E+00	-.132916E+00	-.984998E-01	-.657508E-01	-.553708E-01
14.50	-.200553E+00	-.163498E+00	-.133305E+00	-.100184E+00	-.666013E-01	-.569153E-01
15.00	-.200182E+00	-.163117E+00	-.133543E+00	-.101594E+00	-.675502E-01	-.582062E-01

15.50	-.199884E+00	-.162739E+00	-.133654E+00	-.102759E+00	-.686080E-01	-.592460E-01
16.00	-.199641E+00	-.162378E+00	-.133663E+00	-.103701E+00	-.697614E-01	-.600584E-01
16.50	-.199441E+00	-.162048E+00	-.133594E+00	-.104446E+00	-.709724E-01	-.606834E-01
17.00	-.199277E+00	-.161751E+00	-.133468E+00	-.105014E+00	-.721977E-01	-.611657E-01
17.50	-.199139E+00	-.161488E+00	-.133302E+00	-.105423E+00	-.733988E-01	-.615438E-01
18.00	-.199023E+00	-.161257E+00	-.133113E+00	-.105692E+00	-.745459E-01	-.618489E-01
18.50	-.198924E+00	-.161056E+00	-.132914E+00	-.105840E+00	-.756166E-01	-.621076E-01
19.00	-.198839E+00	-.160882E+00	-.132714E+00	-.105883E+00	-.765997E-01	-.623387E-01
19.50	-.198765E+00	-.160730E+00	-.132518E+00	-.105838E+00	-.774851E-01	-.625601E-01
20.00	-.198702E+00	-.160599E+00	-.132333E+00	-.105722E+00	-.782693E-01	-.627903E-01
21.00	-.198598E+00	-.160386E+00	-.132001E+00	-.105335E+00	-.795312E-01	-.633322E-01
21.50	-.198555E+00	-.160300E+00	-.131856E+00	-.105090E+00	-.800124E-01	-.636554E-01
22.00	-.198518E+00	-.160224E+00	-.131725E+00	-.104825E+00	-.803993E-01	-.640083E-01
22.50	-.198484E+00	-.160157E+00	-.131606E+00	-.104550E+00	-.806964E-01	-.643764E-01
23.00	-.198455E+00	-.160099E+00	-.131500E+00	-.104274E+00	-.809087E-01	-.647487E-01
23.50	-.198428E+00	-.160047E+00	-.131404E+00	-.104000E+00	-.810429E-01	-.651159E-01
24.00	-.198405E+00	-.160001E+00	-.131318E+00	-.103735E+00	-.811057E-01	-.654707E-01
24.50	-.198383E+00	-.159959E+00	-.131239E+00	-.103481E+00	-.811034E-01	-.658104E-01
25.00	-.198364E+00	-.159923E+00	-.131169E+00	-.103242E+00	-.810431E-01	-.661301E-01
26.00	-.198331E+00	-.159861E+00	-.131048E+00	-.102811E+00	-.807755E-01	-.667055E-01
27.00	-.198303E+00	-.159809E+00	-.130946E+00	-.102443E+00	-.803552E-01	-.671852E-01
28.00	-.198281E+00	-.159768E+00	-.130862E+00	-.102135E+00	-.798352E-01	-.675642E-01
29.00	-.198262E+00	-.159733E+00	-.130792E+00	-.101879E+00	-.792582E-01	-.678392E-01
30.00	-.198247E+00	-.159705E+00	-.130732E+00	-.101665E+00	-.786651E-01	-.680061E-01
32.00	-.198223E+00	-.159661E+00	-.130636E+00	-.101337E+00	-.775456E-01	-.680286E-01
35.00	-.198197E+00	-.159615E+00	-.130533E+00	-.101007E+00	-.762744E-01	-.674184E-01
37.00	-.198186E+00	-.159595E+00	-.130484E+00	-.100857E+00	-.757205E-01	-.667775E-01
40.00	-.198174E+00	-.159573E+00	-.130429E+00	-.100694E+00	-.751971E-01	-.658291E-01
45.00	-.198161E+00	-.159551E+00	-.130368E+00	-.100522E+00	-.747465E-01	-.648125E-01
50.00	-.198154E+00	-.159538E+00	-.130330E+00	-.100419E+00	-.745234E-01	-.643504E-01
55.00	-.198149E+00	-.159531E+00	-.130306E+00	-.100354E+00	-.743985E-01	-.641225E-01
60.00	-.198147E+00	-.159527E+00	-.130290E+00	-.100310E+00	-.743225E-01	-.639966E-01
70.00	-.198144E+00	-.159521E+00	-.130268E+00	-.100258E+00	-.742424E-01	-.638715E-01
80.00	-.198142E+00	-.159518E+00	-.130257E+00	-.100230E+00	-.742041E-01	-.638171E-01
90.00	-.198142E+00	-.159517E+00	-.130250E+00	-.100214E+00	-.741849E-01	-.637910E-01
100.00	-.198141E+00	-.159516E+00	-.130246E+00	-.100204E+00	-.741730E-01	-.637760E-01

TAB. B.2: Orbitales Σ , ion LiK^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.184268E+00	-.883772E-01	-.580072E-01	-.122822E-01	0.322738E-01	0.518208E-01
5.20	-.190757E+00	-.937779E-01	-.634089E-01	-.166869E-01	0.268041E-01	0.457101E-01
5.40	-.196343E+00	-.987891E-01	-.682241E-01	-.207231E-01	0.216349E-01	0.399579E-01
5.60	-.201077E+00	-.103439E+00	-.725560E-01	-.244360E-01	0.167490E-01	0.345410E-01
5.80	-.205028E+00	-.107755E+00	-.764863E-01	-.278583E-01	0.121277E-01	0.294357E-01
6.00	-.208272E+00	-.111767E+00	-.800791E-01	-.310181E-01	0.775486E-02	0.246149E-01
6.20	-.210889E+00	-.115503E+00	-.833834E-01	-.339404E-01	0.361256E-02	0.200496E-01
6.40	-.212955E+00	-.118988E+00	-.864379E-01	-.366459E-01	-.313935E-03	0.157111E-01
6.60	-.214541E+00	-.122244E+00	-.892763E-01	-.391543E-01	-.404326E-02	0.115697E-01
6.80	-.215714E+00	-.125292E+00	-.919238E-01	-.414808E-01	-.759279E-02	0.759621E-02
7.00	-.216532E+00	-.128148E+00	-.944027E-01	-.436427E-01	-.109827E-01	0.375930E-02
7.20	-.217047E+00	-.130827E+00	-.967299E-01	-.456529E-01	-.142339E-01	0.330594E-04
7.40	-.217305E+00	-.133342E+00	-.989223E-01	-.475243E-01	-.173723E-01	-.360430E-02
7.60	-.217349E+00	-.135706E+00	-.100993E+00	-.492705E-01	-.204255E-01	-.716652E-02
7.80	-.217211E+00	-.137924E+00	-.102950E+00	-.509023E-01	-.234233E-01	-.106553E-01
8.00	-.216925E+00	-.140006E+00	-.104805E+00	-.524314E-01	-.263994E-01	-.140554E-01
8.20	-.216517E+00	-.141959E+00	-.106567E+00	-.538698E-01	-.293848E-01	-.173368E-01
8.40	-.216010E+00	-.143787E+00	-.108239E+00	-.552317E-01	-.324037E-01	-.204567E-01
8.60	-.215424E+00	-.145494E+00	-.109829E+00	-.565304E-01	-.354604E-01	-.233794E-01
8.80	-.214779E+00	-.147086E+00	-.111342E+00	-.577826E-01	-.385346E-01	-.260816E-01
9.00	-.214088E+00	-.148564E+00	-.112780E+00	-.590097E-01	-.415837E-01	-.285617E-01
9.20	-.213365E+00	-.149931E+00	-.114149E+00	-.602352E-01	-.445472E-01	-.308322E-01
9.40	-.212622E+00	-.151193E+00	-.115451E+00	-.614912E-01	-.473572E-01	-.329182E-01
9.60	-.211869E+00	-.152349E+00	-.116688E+00	-.628134E-01	-.499464E-01	-.348414E-01
9.80	-.211116E+00	-.153405E+00	-.117865E+00	-.642369E-01	-.522579E-01	-.366259E-01
10.00	-.210368E+00	-.154363E+00	-.118983E+00	-.657868E-01	-.542508E-01	-.382898E-01
10.20	-.209633E+00	-.155223E+00	-.120043E+00	-.674654E-01	-.559194E-01	-.398484E-01
10.40	-.208916E+00	-.155993E+00	-.121049E+00	-.692480E-01	-.572860E-01	-.413140E-01
10.60	-.208221E+00	-.156672E+00	-.122001E+00	-.710935E-01	-.583955E-01	-.426975E-01
10.80	-.207552E+00	-.157266E+00	-.122903E+00	-.729575E-01	-.592995E-01	-.440065E-01
11.00	-.206912E+00	-.157779E+00	-.123755E+00	-.748023E-01	-.600433E-01	-.452483E-01
11.20	-.206303E+00	-.158214E+00	-.124560E+00	-.766021E-01	-.606621E-01	-.464301E-01
11.40	-.205726E+00	-.158576E+00	-.125318E+00	-.783400E-01	-.611840E-01	-.475560E-01
11.60	-.205182E+00	-.158869E+00	-.126030E+00	-.800045E-01	-.616295E-01	-.486295E-01
11.80	-.204671E+00	-.159098E+00	-.126701E+00	-.815913E-01	-.620153E-01	-.496573E-01
12.00	-.204195E+00	-.159268E+00	-.127329E+00	-.830989E-01	-.623529E-01	-.506399E-01
12.20	-.203750E+00	-.159383E+00	-.127917E+00	-.845254E-01	-.626524E-01	-.515824E-01
12.40	-.203338E+00	-.159450E+00	-.128466E+00	-.858739E-01	-.629209E-01	-.524849E-01
12.60	-.202956E+00	-.159471E+00	-.128976E+00	-.871466E-01	-.631676E-01	-.533516E-01
12.80	-.202603E+00	-.159453E+00	-.129450E+00	-.883462E-01	-.633952E-01	-.541842E-01
13.00	-.202279E+00	-.159401E+00	-.129889E+00	-.894755E-01	-.636095E-01	-.549825E-01
13.50	-.201576E+00	-.159146E+00	-.130835E+00	-.920113E-01	-.641153E-01	-.568373E-01
14.00	-.201011E+00	-.158768E+00	-.131587E+00	-.941755E-01	-.646225E-01	-.584895E-01
14.50	-.200555E+00	-.158318E+00	-.132158E+00	-.960094E-01	-.651914E-01	-.599234E-01
15.00	-.200189E+00	-.157843E+00	-.132572E+00	-.975507E-01	-.658827E-01	-.611057E-01

15.50	-.199893E+00	-.157371E+00	-.132846E+00	-.988308E-01	-.667388E-01	-.620148E-01
16.00	-.199650E+00	-.156923E+00	-.133003E+00	-.998741E-01	-.677521E-01	-.626711E-01
16.50	-.199451E+00	-.156512E+00	-.133064E+00	-.100706E+00	-.688677E-01	-.631357E-01
17.00	-.199286E+00	-.156142E+00	-.133048E+00	-.101347E+00	-.700260E-01	-.634730E-01
17.50	-.199148E+00	-.155817E+00	-.132977E+00	-.101818E+00	-.711805E-01	-.637285E-01
18.00	-.199030E+00	-.155531E+00	-.132864E+00	-.102135E+00	-.722994E-01	-.639324E-01
18.50	-.198931E+00	-.155286E+00	-.132726E+00	-.102318E+00	-.733623E-01	-.641043E-01
19.00	-.198846E+00	-.155074E+00	-.132574E+00	-.102386E+00	-.743557E-01	-.642547E-01
19.50	-.198773E+00	-.154892E+00	-.132417E+00	-.102354E+00	-.752706E-01	-.643916E-01
20.00	-.198709E+00	-.154736E+00	-.132260E+00	-.102240E+00	-.761025E-01	-.645235E-01
20.50	-.198652E+00	-.154600E+00	-.132108E+00	-.102056E+00	-.768463E-01	-.646533E-01
21.00	-.198603E+00	-.154484E+00	-.131965E+00	-.101821E+00	-.775012E-01	-.647862E-01
21.50	-.198560E+00	-.154384E+00	-.131831E+00	-.101546E+00	-.780695E-01	-.649255E-01
22.00	-.198523E+00	-.154297E+00	-.131709E+00	-.101244E+00	-.785506E-01	-.650736E-01
22.50	-.198489E+00	-.154221E+00	-.131596E+00	-.100923E+00	-.789490E-01	-.652320E-01
23.00	-.198459E+00	-.154155E+00	-.131494E+00	-.100596E+00	-.792666E-01	-.654026E-01
23.50	-.198432E+00	-.154095E+00	-.131400E+00	-.100266E+00	-.795093E-01	-.655833E-01
24.00	-.198408E+00	-.154044E+00	-.131316E+00	-.999436E-01	-.796806E-01	-.657716E-01
24.50	-.198386E+00	-.153998E+00	-.131239E+00	-.996318E-01	-.797858E-01	-.659648E-01
25.00	-.198367E+00	-.153957E+00	-.131169E+00	-.993331E-01	-.798301E-01	-.661591E-01
26.00	-.198334E+00	-.153888E+00	-.131048E+00	-.987888E-01	-.797608E-01	-.665318E-01
27.00	-.198306E+00	-.153831E+00	-.130948E+00	-.983188E-01	-.795188E-01	-.668628E-01
28.00	-.198283E+00	-.153785E+00	-.130864E+00	-.979224E-01	-.791554E-01	-.671304E-01
29.00	-.198265E+00	-.153748E+00	-.130793E+00	-.975929E-01	-.787139E-01	-.673229E-01
30.00	-.198248E+00	-.153716E+00	-.130732E+00	-.973195E-01	-.782365E-01	-.674335E-01
32.00	-.198224E+00	-.153668E+00	-.130637E+00	-.969025E-01	-.772955E-01	-.674135E-01
35.00	-.198199E+00	-.153618E+00	-.130535E+00	-.964907E-01	-.761797E-01	-.669317E-01
37.00	-.198194E+00	-.153602E+00	-.130485E+00	-.963045E-01	-.756735E-01	-.665125E-01
40.00	-.198175E+00	-.153572E+00	-.130430E+00	-.961028E-01	-.751788E-01	-.660318E-01
45.00	-.198162E+00	-.153547E+00	-.130369E+00	-.961020E-01	-.747419E-01	-.656699E-01
50.00	-.198155E+00	-.153533E+00	-.130331E+00	-.961003E-01	-.745218E-01	-.655338E-01
55.00	-.198150E+00	-.153527E+00	-.130307E+00	-.960976E-01	-.743977E-01	-.654647E-01
60.00	-.198147E+00	-.153520E+00	-.130289E+00	-.960960E-01	-.743227E-01	-.654640E-01
70.00	-.198144E+00	-.153519E+00	-.130268E+00	-.960900E-01	-.742425E-01	-.654637E-01
80.00	-.198142E+00	-.153518E+00	-.130257E+00	-.960898E-01	-.742041E-01	-.654636E-01
90.00	-.198142E+00	-.153518E+00	-.130250E+00	-.960897E-01	-.741850E-01	-.654635E-01
100.00	-.198141E+00	-.153518E+00	-.130246E+00	-.960897E-01	-.741730E-01	-.654635E-01

TAB. B.3: Orbitales Σ , ion LiRb⁺

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.173718E+00	-.823273E-01	-.744563E-01	-.183573E-01	0.300937E-01	0.521467E-01
5.20	-.180881E+00	-.878890E-01	-.777670E-01	-.225150E-01	0.250370E-01	0.465530E-01
5.40	-.187188E+00	-.930249E-01	-.806699E-01	-.263499E-01	0.201841E-01	0.411801E-01
5.60	-.192654E+00	-.977581E-01	-.832641E-01	-.299041E-01	0.155419E-01	0.360439E-01
5.80	-.197323E+00	-.102124E+00	-.856120E-01	-.332090E-01	0.111120E-01	0.311460E-01
6.00	-.201259E+00	-.106162E+00	-.877598E-01	-.362888E-01	0.689015E-02	0.264782E-01
6.20	-.204529E+00	-.109904E+00	-.897427E-01	-.391607E-01	0.287431E-02	0.220253E-01
6.40	-.207205E+00	-.113380E+00	-.915860E-01	-.418410E-01	-.945050E-03	0.177660E-01
6.60	-.209355E+00	-.116616E+00	-.933141E-01	-.443391E-01	-.457315E-02	0.136729E-01
6.80	-.211044E+00	-.119632E+00	-.949465E-01	-.466645E-01	-.801646E-02	0.971354E-02
7.00	-.212331E+00	-.122449E+00	-.964964E-01	-.488274E-01	-.112824E-01	0.584764E-02
7.20	-.213271E+00	-.125082E+00	-.979769E-01	-.508359E-01	-.143779E-01	0.203109E-02
7.40	-.213913E+00	-.127545E+00	-.994007E-01	-.526987E-01	-.173087E-01	-.178974E-02
7.60	-.214300E+00	-.129850E+00	-.100775E+00	-.544239E-01	-.200829E-01	-.567295E-02
7.80	-.214472E+00	-.132006E+00	-.102107E+00	-.560191E-01	-.227081E-01	-.967010E-02
8.00	-.214463E+00	-.134023E+00	-.103401E+00	-.574932E-01	-.251912E-01	-.138162E-01
8.20	-.214304E+00	-.135908E+00	-.104663E+00	-.588536E-01	-.275436E-01	-.181096E-01
8.40	-.214019E+00	-.137666E+00	-.105893E+00	-.601083E-01	-.297793E-01	-.225053E-01
8.60	-.213635E+00	-.139304E+00	-.107096E+00	-.612637E-01	-.319277E-01	-.269147E-01
8.80	-.213170E+00	-.140825E+00	-.108271E+00	-.623275E-01	-.340865E-01	-.311675E-01
9.00	-.212642E+00	-.142235E+00	-.109420E+00	-.633062E-01	-.367722E-01	-.346872E-01
9.20	-.212068E+00	-.143537E+00	-.110543E+00	-.642048E-01	-.404688E-01	-.369408E-01
9.40	-.211459E+00	-.144732E+00	-.111640E+00	-.650288E-01	-.443498E-01	-.387258E-01
9.60	-.210827E+00	-.145825E+00	-.112710E+00	-.657844E-01	-.481004E-01	-.403424E-01
9.80	-.210184E+00	-.146819E+00	-.113754E+00	-.664764E-01	-.516574E-01	-.418484E-01
10.00	-.209537E+00	-.147716E+00	-.114771E+00	-.671094E-01	-.550054E-01	-.432654E-01
10.20	-.208895E+00	-.148520E+00	-.115760E+00	-.676896E-01	-.581406E-01	-.446026E-01
10.40	-.208261E+00	-.149232E+00	-.116720E+00	-.682228E-01	-.610658E-01	-.458678E-01
10.60	-.207643E+00	-.149857E+00	-.117651E+00	-.687198E-01	-.637828E-01	-.470658E-01
10.80	-.207043E+00	-.150397E+00	-.118551E+00	-.692119E-01	-.662769E-01	-.482009E-01
11.00	-.206465E+00	-.150855E+00	-.119420E+00	-.698574E-01	-.684004E-01	-.492784E-01
11.20	-.205913E+00	-.151236E+00	-.120259E+00	-.713273E-01	-.695023E-01	-.503013E-01
11.40	-.205388E+00	-.151544E+00	-.121065E+00	-.732573E-01	-.699583E-01	-.512733E-01
11.60	-.204891E+00	-.151784E+00	-.121840E+00	-.751441E-01	-.702851E-01	-.521961E-01
11.80	-.204422E+00	-.151958E+00	-.122582E+00	-.769261E-01	-.705611E-01	-.530751E-01
12.00	-.203982E+00	-.152072E+00	-.123293E+00	-.785978E-01	-.708028E-01	-.539128E-01
12.20	-.203570E+00	-.152130E+00	-.123970E+00	-.801612E-01	-.710182E-01	-.547112E-01
12.40	-.203186E+00	-.152138E+00	-.124616E+00	-.816254E-01	-.712134E-01	-.554744E-01
12.60	-.202830E+00	-.152100E+00	-.125230E+00	-.829944E-01	-.713904E-01	-.562034E-01
12.80	-.202500E+00	-.152022E+00	-.125813E+00	-.842768E-01	-.715518E-01	-.569028E-01
13.00	-.202194E+00	-.151906E+00	-.126365E+00	-.854765E-01	-.717025E-01	-.575735E-01
13.50	-.201529E+00	-.151484E+00	-.127612E+00	-.881529E-01	-.720359E-01	-.591429E-01
14.00	-.200988E+00	-.150923E+00	-.128679E+00	-.904241E-01	-.723301E-01	-.605821E-01
14.50	-.200549E+00	-.150278E+00	-.129577E+00	-.923450E-01	-.725980E-01	-.619170E-01
15.00	-.200192E+00	-.149593E+00	-.130317E+00	-.939608E-01	-.728498E-01	-.631678E-01

15.50	-.199900E+00	-.148902E+00	-.130912E+00	-.953077E-01	-.730897E-01	-.643517E-01
16.00	-.199661E+00	-.148233E+00	-.131375E+00	-.964160E-01	-.733200E-01	-.654810E-01
16.50	-.199463E+00	-.147605E+00	-.131720E+00	-.973104E-01	-.735434E-01	-.665644E-01
17.00	-.199298E+00	-.147032E+00	-.131961E+00	-.980132E-01	-.737612E-01	-.676072E-01
17.50	-.199160E+00	-.146519E+00	-.132114E+00	-.985439E-01	-.739759E-01	-.686109E-01
18.00	-.199042E+00	-.146068E+00	-.132192E+00	-.989194E-01	-.741904E-01	-.695724E-01
18.50	-.198942E+00	-.145678E+00	-.132213E+00	-.991584E-01	-.744104E-01	-.704854E-01
19.00	-.198856E+00	-.145343E+00	-.132188E+00	-.992742E-01	-.746402E-01	-.713392E-01
19.50	-.198782E+00	-.145059E+00	-.132131E+00	-.992839E-01	-.748919E-01	-.721189E-01
20.00	-.198718E+00	-.144818E+00	-.132052E+00	-.991999E-01	-.751769E-01	-.728059E-01
20.50	-.198661E+00	-.144613E+00	-.131959E+00	-.990379E-01	-.755089E-01	-.733819E-01
21.00	-.198611E+00	-.144439E+00	-.131859E+00	-.988103E-01	-.758913E-01	-.738393E-01
21.50	-.198568E+00	-.144292E+00	-.131758E+00	-.985302E-01	-.763092E-01	-.741912E-01
22.00	-.198529E+00	-.144165E+00	-.131658E+00	-.982082E-01	-.767352E-01	-.744622E-01
22.50	-.198495E+00	-.144056E+00	-.131562E+00	-.978554E-01	-.771444E-01	-.746774E-01
23.00	-.198465E+00	-.143963E+00	-.131471E+00	-.974821E-01	-.775191E-01	-.748541E-01
23.50	-.198438E+00	-.143881E+00	-.131386E+00	-.970969E-01	-.778469E-01	-.750049E-01
24.00	-.198413E+00	-.143810E+00	-.131307E+00	-.967074E-01	-.781244E-01	-.751364E-01
24.50	-.198391E+00	-.143747E+00	-.131234E+00	-.963209E-01	-.783489E-01	-.752529E-01
25.00	-.198372E+00	-.143692E+00	-.131168E+00	-.959426E-01	-.785196E-01	-.753586E-01
26.00	-.198337E+00	-.143599E+00	-.131049E+00	-.952272E-01	-.787112E-01	-.754222E-01
27.00	-.198309E+00	-.143524E+00	-.130950E+00	-.945844E-01	-.787244E-01	-.756964E-01
28.00	-.198287E+00	-.143464E+00	-.130866E+00	-.940252E-01	-.785932E-01	-.758282E-01
29.00	-.198267E+00	-.143415E+00	-.130796E+00	-.935481E-01	-.783581E-01	-.759381E-01
30.00	-.198251E+00	-.143374E+00	-.130735E+00	-.931461E-01	-.780571E-01	-.760271E-01
32.00	-.198226E+00	-.143311E+00	-.130638E+00	-.925283E-01	-.774113E-01	-.761283E-01
35.00	-.198201E+00	-.143249E+00	-.130536E+00	-.919227E-01	-.768167E-01	-.759277E-01
37.00	-.198188E+00	-.143220E+00	-.130486E+00	-.916521E-01	-.767451E-01	-.755941E-01
40.00	-.198175E+00	-.143190E+00	-.130431E+00	-.913630E-01	-.767530E-01	-.751640E-01
45.00	-.198163E+00	-.143160E+00	-.130370E+00	-.910627E-01	-.767856E-01	-.747416E-01
50.00	-.198155E+00	-.143141E+00	-.130331E+00	-.908853E-01	-.768043E-01	-.745222E-01
55.00	-.198150E+00	-.143132E+00	-.130306E+00	-.907721E-01	-.768131E-01	-.743980E-01
60.00	-.198147E+00	-.143125E+00	-.130289E+00	-.906980E-01	-.768180E-01	-.743229E-01
70.00	-.198145E+00	-.143118E+00	-.130269E+00	-.906117E-01	-.768197E-01	-.742426E-01
80.00	-.198142E+00	-.143114E+00	-.130257E+00	-.905662E-01	-.768192E-01	-.742042E-01
90.00	-.198142E+00	-.143113E+00	-.130250E+00	-.905401E-01	-.768181E-01	-.741850E-01
100.00	-.198141E+00	-.143112E+00	-.130246E+00	-.905240E-01	-.768160E-01	-.741731E-01

TAB. B.4: Orbitales Σ , ion LiCs^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.177410E+00	-.786533E-01	-.231773E-01	-.685727E-02	0.371437E-01	0.586087E-01
5.20	-.183409E+00	-.843052E-01	-.317112E-01	-.111842E-01	0.310428E-01	0.518198E-01
5.40	-.188652E+00	-.896352E-01	-.393202E-01	-.152242E-01	0.253298E-01	0.454488E-01
5.60	-.193168E+00	-.946604E-01	-.461064E-01	-.190034E-01	0.199676E-01	0.394796E-01
5.80	-.197005E+00	-.993949E-01	-.521729E-01	-.225399E-01	0.149211E-01	0.338901E-01
6.00	-.200215E+00	-.103857E+00	-.576113E-01	-.258503E-01	0.101527E-01	0.286557E-01
6.40	-.204990E+00	-.112029E+00	-.669253E-01	-.318413E-01	0.132570E-02	0.191477E-01
6.60	-.206670E+00	-.115770E+00	-.709343E-01	-.345413E-01	-.278733E-02	0.148257E-01
6.80	-.207951E+00	-.119298E+00	-.745873E-01	-.370573E-01	-.673228E-02	0.107607E-01
7.00	-.208884E+00	-.122627E+00	-.779294E-01	-.393974E-01	-.105284E-01	0.693359E-02
7.20	-.209514E+00	-.125767E+00	-.809984E-01	-.415724E-01	-.141934E-01	0.332661E-02
7.40	-.209881E+00	-.128728E+00	-.838295E-01	-.435925E-01	-.177415E-01	-.784551E-04
7.60	-.210026E+00	-.131521E+00	-.864505E-01	-.454655E-01	-.211825E-01	-.329551E-02
7.80	-.209976E+00	-.134150E+00	-.888842E-01	-.472042E-01	-.245252E-01	-.633625E-02
8.00	-.209766E+00	-.136627E+00	-.911523E-01	-.488183E-01	-.277743E-01	-.921329E-02
8.20	-.209419E+00	-.138956E+00	-.932702E-01	-.503212E-01	-.309302E-01	-.119382E-01
8.40	-.208959E+00	-.141144E+00	-.952539E-01	-.517249E-01	-.339929E-01	-.145189E-01
8.60	-.208405E+00	-.143196E+00	-.971160E-01	-.530440E-01	-.369560E-01	-.169670E-01
8.80	-.207776E+00	-.145118E+00	-.988660E-01	-.542940E-01	-.398120E-01	-.192890E-01
9.00	-.207088E+00	-.146913E+00	-.100513E+00	-.554942E-01	-.425482E-01	-.214942E-01
9.20	-.206355E+00	-.148588E+00	-.102066E+00	-.566647E-01	-.451477E-01	-.235917E-01
9.40	-.205588E+00	-.150146E+00	-.103531E+00	-.578357E-01	-.475877E-01	-.255857E-01
9.60	-.204799E+00	-.151590E+00	-.104914E+00	-.590372E-01	-.498392E-01	-.274852E-01
9.80	-.203998E+00	-.152927E+00	-.106221E+00	-.603086E-01	-.518696E-01	-.292936E-01
10.00	-.203192E+00	-.154158E+00	-.107453E+00	-.616810E-01	-.536490E-01	-.310190E-01
10.20	-.202389E+00	-.155289E+00	-.108617E+00	-.631700E-01	-.551660E-01	-.326650E-01
10.40	-.201596E+00	-.156324E+00	-.109715E+00	-.647659E-01	-.564349E-01	-.342359E-01
10.60	-.200817E+00	-.157265E+00	-.110750E+00	-.664368E-01	-.574928E-01	-.357368E-01
10.80	-.200058E+00	-.158118E+00	-.111724E+00	-.681432E-01	-.583812E-01	-.371702E-01
11.00	-.199324E+00	-.158885E+00	-.112640E+00	-.698529E-01	-.591399E-01	-.385419E-01
11.20	-.198616E+00	-.159572E+00	-.113499E+00	-.715398E-01	-.597978E-01	-.398538E-01
11.40	-.197938E+00	-.160181E+00	-.114303E+00	-.731882E-01	-.603762E-01	-.411092E-01
11.60	-.197293E+00	-.160717E+00	-.115055E+00	-.747867E-01	-.608917E-01	-.423127E-01
11.80	-.196680E+00	-.161183E+00	-.115754E+00	-.763290E-01	-.613560E-01	-.434660E-01
12.00	-.196103E+00	-.161586E+00	-.116404E+00	-.778116E-01	-.617776E-01	-.445726E-01
12.20	-.195561E+00	-.161927E+00	-.117005E+00	-.792338E-01	-.621628E-01	-.456348E-01
12.40	-.195053E+00	-.162211E+00	-.117558E+00	-.805956E-01	-.625166E-01	-.466556E-01
12.60	-.194580E+00	-.162443E+00	-.118065E+00	-.818963E-01	-.628443E-01	-.476363E-01
12.80	-.194142E+00	-.162628E+00	-.118529E+00	-.831375E-01	-.631495E-01	-.485805E-01
13.00	-.193736E+00	-.162769E+00	-.118948E+00	-.843222E-01	-.634352E-01	-.494882E-01
13.50	-.192856E+00	-.162959E+00	-.119815E+00	-.870444E-01	-.640824E-01	-.516134E-01
14.00	-.192148E+00	-.162967E+00	-.120441E+00	-.894518E-01	-.646658E-01	-.535438E-01
14.50	-.191582E+00	-.162848E+00	-.120845E+00	-.915759E-01	-.652229E-01	-.552869E-01
15.00	-.191133E+00	-.162649E+00	-.121051E+00	-.934455E-01	-.657925E-01	-.568385E-01
15.50	-.190774E+00	-.162406E+00	-.121080E+00	-.950873E-01	-.664103E-01	-.581853E-01

16.00	-.190488E+00	-.162147E+00	-.120961E+00	-.965248E-01	-.671068E-01	-.593128E-01
16.50	-.190257E+00	-.161888E+00	-.120715E+00	-.977770E-01	-.678990E-01	-.602150E-01
17.00	-.190069E+00	-.161642E+00	-.120367E+00	-.988627E-01	-.687777E-01	-.609047E-01
17.50	-.189914E+00	-.161414E+00	-.119939E+00	-.997972E-01	-.697172E-01	-.614132E-01
18.00	-.189785E+00	-.161208E+00	-.119455E+00	-.100595E+00	-.706808E-01	-.617808E-01
18.50	-.189677E+00	-.161023E+00	-.118933E+00	-.101266E+00	-.716332E-01	-.620432E-01
19.00	-.189586E+00	-.160861E+00	-.118392E+00	-.101824E+00	-.725489E-01	-.622309E-01
19.50	-.189508E+00	-.160717E+00	-.117846E+00	-.102277E+00	-.734080E-01	-.623690E-01
20.00	-.189441E+00	-.160591E+00	-.117309E+00	-.102634E+00	-.741979E-01	-.624759E-01
20.50	-.189383E+00	-.160481E+00	-.116792E+00	-.102905E+00	-.749096E-01	-.625676E-01
21.00	-.189332E+00	-.160384E+00	-.116303E+00	-.103097E+00	-.755403E-01	-.626593E-01
21.50	-.189287E+00	-.160299E+00	-.115848E+00	-.103220E+00	-.760883E-01	-.627663E-01
22.00	-.189248E+00	-.160224E+00	-.115430E+00	-.103283E+00	-.765531E-01	-.629051E-01
22.50	-.189214E+00	-.160158E+00	-.115052E+00	-.103293E+00	-.769370E-01	-.630890E-01
23.00	-.189183E+00	-.160100E+00	-.114713E+00	-.103261E+00	-.772421E-01	-.633211E-01
23.50	-.189155E+00	-.160048E+00	-.114411E+00	-.103193E+00	-.774743E-01	-.635943E-01
24.00	-.189131E+00	-.160003E+00	-.114144E+00	-.103099E+00	-.776359E-01	-.638939E-01
24.50	-.189109E+00	-.159962E+00	-.113910E+00	-.102987E+00	-.777325E-01	-.642055E-01
25.00	-.189089E+00	-.159925E+00	-.113702E+00	-.102860E+00	-.777681E-01	-.645171E-01
26.00	-.189054E+00	-.159862E+00	-.113359E+00	-.102589E+00	-.776814E-01	-.651124E-01
27.00	-.189027E+00	-.159812E+00	-.113091E+00	-.102319E+00	-.774180E-01	-.656450E-01
28.00	-.189004E+00	-.159770E+00	-.112879E+00	-.102068E+00	-.770239E-01	-.661009E-01
29.00	-.188985E+00	-.159736E+00	-.112708E+00	-.101844E+00	-.765387E-01	-.664727E-01
30.00	-.188969E+00	-.159707E+00	-.112568E+00	-.101648E+00	-.760026E-01	-.667556E-01
32.00	-.188944E+00	-.159662E+00	-.112352E+00	-.101334E+00	-.749080E-01	-.670500E-01
35.00	-.188919E+00	-.159617E+00	-.112134E+00	-.101009E+00	-.735547E-01	-.668667E-01
37.00	-.188908E+00	-.159597E+00	-.112032E+00	-.100859E+00	-.729507E-01	-.664507E-01
40.00	-.188894E+00	-.159574E+00	-.111919E+00	-.100695E+00	-.724042E-01	-.657122E-01
45.00	-.188882E+00	-.159552E+00	-.111800E+00	-.100523E+00	-.719796E-01	-.648096E-01
50.00	-.188874E+00	-.159540E+00	-.111727E+00	-.100420E+00	-.717865E-01	-.643565E-01
55.00	-.188869E+00	-.159532E+00	-.111680E+00	-.100354E+00	-.716825E-01	-.641255E-01
60.00	-.188866E+00	-.159527E+00	-.111649E+00	-.100310E+00	-.716206E-01	-.639976E-01
70.00	-.188862E+00	-.159521E+00	-.111610E+00	-.100257E+00	-.715564E-01	-.638714E-01
80.00	-.188861E+00	-.159518E+00	-.111590E+00	-.100230E+00	-.715271E-01	-.638170E-01
90.00	-.188860E+00	-.159517E+00	-.111579E+00	-.100214E+00	-.715109E-01	-.637909E-01
100.00	-.188860E+00	-.159516E+00	-.111571E+00	-.100204E+00	-.715030E-01	-.637760E-01

TAB. B.5: Orbitales Σ , ion NaK^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.169304E+00	-.768429E-01	-.231359E-01	-.111879E-01	0.357291E-01	0.573791E-01
5.20	-.175506E+00	-.819515E-01	-.306015E-01	-.161495E-01	0.299355E-01	0.510695E-01
5.40	-.181071E+00	-.868165E-01	-.376995E-01	-.203195E-01	0.244795E-01	0.450655E-01
5.60	-.185986E+00	-.914484E-01	-.442234E-01	-.240084E-01	0.193426E-01	0.393636E-01
5.80	-.190265E+00	-.958550E-01	-.501420E-01	-.273530E-01	0.145060E-01	0.339540E-01
6.00	-.193933E+00	-.100046E+00	-.554898E-01	-.304248E-01	0.995024E-02	0.288242E-01
6.20	-.197033E+00	-.104028E+00	-.603218E-01	-.332678E-01	0.565624E-02	0.239582E-01
6.40	-.199610E+00	-.107809E+00	-.646969E-01	-.359089E-01	0.160406E-02	0.193381E-01
6.60	-.201715E+00	-.111398E+00	-.686687E-01	-.383687E-01	-.222874E-02	0.149423E-01
6.80	-.203397E+00	-.114801E+00	-.722879E-01	-.406619E-01	-.586087E-02	0.107551E-01
7.00	-.204703E+00	-.118027E+00	-.755972E-01	-.427972E-01	-.931216E-02	0.675784E-02
7.20	-.205680E+00	-.121082E+00	-.786345E-01	-.447865E-01	-.126025E-01	0.293448E-02
7.40	-.206367E+00	-.123973E+00	-.814339E-01	-.466359E-01	-.157489E-01	-.726925E-03
7.60	-.206804E+00	-.126707E+00	-.840224E-01	-.483524E-01	-.187694E-01	-.423642E-02
7.80	-.207026E+00	-.129290E+00	-.864252E-01	-.499452E-01	-.216832E-01	-.760019E-02
8.00	-.207064E+00	-.131728E+00	-.886626E-01	-.514196E-01	-.245036E-01	-.108226E-01
8.20	-.206944E+00	-.134024E+00	-.907512E-01	-.527852E-01	-.272472E-01	-.139022E-01
8.40	-.206692E+00	-.136186E+00	-.927078E-01	-.540478E-01	-.299268E-01	-.168378E-01
8.60	-.206330E+00	-.138218E+00	-.945437E-01	-.552167E-01	-.325547E-01	-.196277E-01
8.80	-.205877E+00	-.140122E+00	-.962714E-01	-.563024E-01	-.351364E-01	-.222674E-01
9.00	-.205351E+00	-.141905E+00	-.978998E-01	-.573128E-01	-.376758E-01	-.247558E-01
9.20	-.204768E+00	-.143569E+00	-.994366E-01	-.582586E-01	-.401716E-01	-.270956E-01
9.40	-.204139E+00	-.145119E+00	-.100890E+00	-.591516E-01	-.426156E-01	-.292906E-01
9.60	-.203478E+00	-.146556E+00	-.102264E+00	-.600044E-01	-.449974E-01	-.313474E-01
9.80	-.202795E+00	-.147887E+00	-.103566E+00	-.608332E-01	-.473002E-01	-.332742E-01
10.00	-.202100E+00	-.149114E+00	-.104800E+00	-.616538E-01	-.495028E-01	-.350808E-01
10.20	-.201400E+00	-.150241E+00	-.105968E+00	-.624896E-01	-.515826E-01	-.367766E-01
10.40	-.200702E+00	-.151270E+00	-.107076E+00	-.633668E-01	-.535088E-01	-.383718E-01
10.60	-.200012E+00	-.152206E+00	-.108124E+00	-.643131E-01	-.552521E-01	-.398741E-01
10.80	-.199336E+00	-.153051E+00	-.109117E+00	-.653573E-01	-.567853E-01	-.412913E-01
11.00	-.198679E+00	-.153812E+00	-.110056E+00	-.665126E-01	-.580936E-01	-.426316E-01
11.20	-.198042E+00	-.154489E+00	-.110942E+00	-.677761E-01	-.591801E-01	-.439011E-01
11.40	-.197430E+00	-.155088E+00	-.111778E+00	-.691259E-01	-.600719E-01	-.451059E-01
11.60	-.196844E+00	-.155612E+00	-.112564E+00	-.705295E-01	-.608025E-01	-.462495E-01
11.80	-.196289E+00	-.156067E+00	-.113303E+00	-.719546E-01	-.614066E-01	-.473386E-01
12.00	-.195762E+00	-.156455E+00	-.113996E+00	-.733765E-01	-.619135E-01	-.483765E-01
12.20	-.195265E+00	-.156781E+00	-.114643E+00	-.747776E-01	-.623456E-01	-.493676E-01
12.40	-.194799E+00	-.157049E+00	-.115245E+00	-.761438E-01	-.627188E-01	-.503148E-01
12.60	-.194362E+00	-.157264E+00	-.115804E+00	-.774683E-01	-.630453E-01	-.512203E-01
12.80	-.193957E+00	-.157432E+00	-.116322E+00	-.787457E-01	-.633347E-01	-.520887E-01
13.00	-.193580E+00	-.157553E+00	-.116797E+00	-.799730E-01	-.635940E-01	-.529220E-01
13.50	-.192758E+00	-.157694E+00	-.117814E+00	-.828215E-01	-.641385E-01	-.548635E-01
14.00	-.192088E+00	-.157647E+00	-.118593E+00	-.853599E-01	-.645769E-01	-.566289E-01
14.50	-.191548E+00	-.157470E+00	-.119155E+00	-.876063E-01	-.649473E-01	-.582363E-01
15.00	-.191115E+00	-.157212E+00	-.119516E+00	-.895862E-01	-.652832E-01	-.596962E-01

15.50	-.190767E+00	-.156911E+00	-.119698E+00	-.913242E-01	-.656242E-01	-.609992E-01
16.00	-.190487E+00	-.156594E+00	-.119722E+00	-.928426E-01	-.660236E-01	-.621176E-01
16.50	-.190258E+00	-.156280E+00	-.119610E+00	-.941615E-01	-.665475E-01	-.630035E-01
17.00	-.190072E+00	-.155983E+00	-.119387E+00	-.953001E-01	-.672381E-01	-.636281E-01
17.50	-.189918E+00	-.155709E+00	-.119075E+00	-.962730E-01	-.680700E-01	-.640260E-01
18.00	-.189789E+00	-.155460E+00	-.118696E+00	-.970955E-01	-.689775E-01	-.642675E-01
18.50	-.189681E+00	-.155241E+00	-.118271E+00	-.977799E-01	-.699009E-01	-.644169E-01
19.00	-.189590E+00	-.155046E+00	-.117818E+00	-.983389E-01	-.708049E-01	-.645119E-01
19.50	-.189512E+00	-.154876E+00	-.117353E+00	-.987815E-01	-.716655E-01	-.645755E-01
20.00	-.189443E+00	-.154726E+00	-.116889E+00	-.991191E-01	-.724681E-01	-.646221E-01
20.50	-.189385E+00	-.154597E+00	-.116438E+00	-.993606E-01	-.732056E-01	-.646616E-01
21.00	-.189333E+00	-.154483E+00	-.116008E+00	-.995174E-01	-.738724E-01	-.646984E-01
21.50	-.189288E+00	-.154385E+00	-.115605E+00	-.995974E-01	-.744644E-01	-.647374E-01
22.00	-.189249E+00	-.154299E+00	-.115234E+00	-.996134E-01	-.749824E-01	-.647814E-01
22.50	-.189215E+00	-.154224E+00	-.114896E+00	-.995736E-01	-.754256E-01	-.648346E-01
23.00	-.189183E+00	-.154157E+00	-.114590E+00	-.994891E-01	-.757961E-01	-.648971E-01
23.50	-.189156E+00	-.154099E+00	-.114316E+00	-.993686E-01	-.760956E-01	-.649726E-01
24.00	-.189131E+00	-.154047E+00	-.114071E+00	-.992218E-01	-.763278E-01	-.650598E-01
24.50	-.189109E+00	-.154001E+00	-.113854E+00	-.990559E-01	-.764969E-01	-.651609E-01
25.00	-.189089E+00	-.153960E+00	-.113660E+00	-.988791E-01	-.766051E-01	-.652741E-01
26.00	-.189055E+00	-.153891E+00	-.113337E+00	-.985137E-01	-.766627E-01	-.65297E-01
27.00	-.189027E+00	-.153835E+00	-.113080E+00	-.981586E-01	-.765396E-01	-.653056E-01
28.00	-.189004E+00	-.153788E+00	-.112873E+00	-.978331E-01	-.762761E-01	-.660751E-01
29.00	-.188984E+00	-.153750E+00	-.112705E+00	-.975445E-01	-.759135E-01	-.663145E-01
30.00	-.188969E+00	-.153718E+00	-.112567E+00	-.972950E-01	-.754890E-01	-.665070E-01
32.00	-.188944E+00	-.153669E+00	-.112353E+00	-.968979E-01	-.745859E-01	-.667159E-01
35.00	-.188918E+00	-.153619E+00	-.112134E+00	-.964930E-01	-.734310E-01	-.666110E-01
37.00	-.188907E+00	-.153597E+00	-.112033E+00	-.963057E-01	-.728957E-01	-.663757E-01
40.00	-.188894E+00	-.153572E+00	-.111920E+00	-.961040E-01	-.723910E-01	-.660190E-01
45.00	-.188880E+00	-.153547E+00	-.111800E+00	-.958910E-01	-.719780E-01	-.656790E-01
50.00	-.188873E+00	-.153534E+00	-.111727E+00	-.957638E-01	-.717868E-01	-.655358E-01
55.00	-.188869E+00	-.153525E+00	-.111680E+00	-.956837E-01	-.716827E-01	-.654657E-01
60.00	-.188866E+00	-.153520E+00	-.111649E+00	-.956307E-01	-.716207E-01	-.654247E-01
70.00	-.188862E+00	-.153514E+00	-.111610E+00	-.955674E-01	-.715565E-01	-.653814E-01
80.00	-.188861E+00	-.153511E+00	-.111590E+00	-.955331E-01	-.715271E-01	-.653591E-01
90.00	-.188860E+00	-.153510E+00	-.111579E+00	-.955139E-01	-.715110E-01	-.653469E-01
100.00	-.188860E+00	-.153509E+00	-.111571E+00	-.955020E-01	-.715031E-01	-.653390E-01

TAB. B.6: Orbitales Σ , ion NaRb⁺

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.159358E+00	-.755602E-01	-.410052E-01	-.113492E-01	0.333808E-01	0.562208E-01
5.20	-.165916E+00	-.793796E-01	-.467676E-01	-.172786E-01	0.281954E-01	0.508184E-01
5.40	-.171941E+00	-.830280E-01	-.523610E-01	-.223300E-01	0.232030E-01	0.454620E-01
5.60	-.177376E+00	-.865587E-01	-.575987E-01	-.267217E-01	0.184153E-01	0.401893E-01
5.80	-.182202E+00	-.900139E-01	-.623839E-01	-.306159E-01	0.138411E-01	0.350361E-01
6.00	-.186429E+00	-.934186E-01	-.666886E-01	-.341216E-01	0.948042E-02	0.300324E-01
6.20	-.190082E+00	-.967788E-01	-.705268E-01	-.373088E-01	0.533318E-02	0.251972E-01
6.40	-.193199E+00	-.100086E+00	-.739374E-01	-.402294E-01	0.139256E-02	0.205396E-01
6.60	-.195823E+00	-.103327E+00	-.769709E-01	-.429159E-01	-.234485E-02	0.160581E-01
6.80	-.197996E+00	-.106484E+00	-.796763E-01	-.453953E-01	-.588634E-02	0.117427E-01
7.00	-.199764E+00	-.109544E+00	-.821016E-01	-.476886E-01	-.924159E-02	0.758041E-02
7.20	-.201168E+00	-.112491E+00	-.842903E-01	-.498103E-01	-.124163E-01	0.355368E-02
7.40	-.202251E+00	-.115319E+00	-.862781E-01	-.517741E-01	-.154181E-01	-.353120E-03
7.60	-.203050E+00	-.118021E+00	-.880972E-01	-.535912E-01	-.182572E-01	-.415825E-02
7.80	-.203604E+00	-.120594E+00	-.897746E-01	-.552706E-01	-.209386E-01	-.787760E-02
8.00	-.203942E+00	-.123036E+00	-.913306E-01	-.568216E-01	-.234716E-01	-.115246E-01
8.20	-.204097E+00	-.125348E+00	-.927853E-01	-.582523E-01	-.258643E-01	-.151073E-01
8.40	-.204095E+00	-.127531E+00	-.941521E-01	-.595691E-01	-.281221E-01	-.186331E-01
8.60	-.203960E+00	-.129587E+00	-.954442E-01	-.607802E-01	-.302542E-01	-.221032E-01
8.80	-.203714E+00	-.131518E+00	-.966712E-01	-.618922E-01	-.322672E-01	-.255152E-01
9.00	-.203377E+00	-.133327E+00	-.978413E-01	-.629113E-01	-.341703E-01	-.288623E-01
9.20	-.202966E+00	-.135017E+00	-.989613E-01	-.638443E-01	-.359743E-01	-.321323E-01
9.40	-.202496E+00	-.136591E+00	-.100036E+00	-.646975E-01	-.376985E-01	-.353045E-01
9.60	-.201980E+00	-.138051E+00	-.101068E+00	-.654762E-01	-.394352E-01	-.382822E-01
9.80	-.201430E+00	-.139402E+00	-.102063E+00	-.661869E-01	-.417539E-01	-.404949E-01
10.00	-.200858E+00	-.140646E+00	-.103022E+00	-.668352E-01	-.445602E-01	-.420342E-01
10.20	-.200271E+00	-.141787E+00	-.103948E+00	-.674261E-01	-.473441E-01	-.434121E-01
10.40	-.199679E+00	-.142828E+00	-.104843E+00	-.679655E-01	-.500335E-01	-.446995E-01
10.60	-.199087E+00	-.143772E+00	-.105707E+00	-.684571E-01	-.526161E-01	-.459131E-01
10.80	-.198502E+00	-.144624E+00	-.106540E+00	-.689071E-01	-.550861E-01	-.470601E-01
11.00	-.197928E+00	-.145387E+00	-.107345E+00	-.693198E-01	-.574438E-01	-.481468E-01
11.20	-.197370E+00	-.146064E+00	-.108119E+00	-.696991E-01	-.596871E-01	-.491771E-01
11.40	-.196831E+00	-.146660E+00	-.108865E+00	-.700519E-01	-.618189E-01	-.501549E-01
11.60	-.196313E+00	-.147180E+00	-.109581E+00	-.703826E-01	-.638366E-01	-.510836E-01
11.80	-.195818E+00	-.147625E+00	-.110268E+00	-.707008E-01	-.657398E-01	-.519658E-01
12.00	-.195348E+00	-.148002E+00	-.110925E+00	-.710247E-01	-.675157E-01	-.528057E-01
12.20	-.194904E+00	-.148315E+00	-.111553E+00	-.714065E-01	-.691185E-01	-.536045E-01
12.40	-.194484E+00	-.148566E+00	-.112149E+00	-.720223E-01	-.703773E-01	-.543653E-01
12.60	-.194092E+00	-.148763E+00	-.112717E+00	-.730989E-01	-.710729E-01	-.550899E-01
12.80	-.193724E+00	-.148908E+00	-.113254E+00	-.744132E-01	-.714342E-01	-.557822E-01
13.00	-.193382E+00	-.149006E+00	-.113761E+00	-.757468E-01	-.716848E-01	-.564428E-01
13.50	-.192628E+00	-.149073E+00	-.114895E+00	-.788747E-01	-.721527E-01	-.579697E-01
14.00	-.192008E+00	-.148937E+00	-.115840E+00	-.816359E-01	-.725199E-01	-.593419E-01
14.50	-.191502E+00	-.148656E+00	-.116601E+00	-.840512E-01	-.728332E-01	-.605822E-01
15.00	-.191091E+00	-.148281E+00	-.117185E+00	-.861557E-01	-.731067E-01	-.617127E-01

15.50	-.190757E+00	-.147851E+00	-.117599E+00	-.879844E-01	-.733514E-01	-.627524E-01
16.00	-.190485E+00	-.147403E+00	-.117860E+00	-.895677E-01	-.735737E-01	-.637157E-01
16.50	-.190262E+00	-.146958E+00	-.117979E+00	-.909323E-01	-.737783E-01	-.646183E-01
17.00	-.190078E+00	-.146535E+00	-.117974E+00	-.921015E-01	-.739715E-01	-.654725E-01
17.50	-.189926E+00	-.146144E+00	-.117867E+00	-.930925E-01	-.741545E-01	-.662875E-01
18.50	-.189690E+00	-.145474E+00	-.117414E+00	-.946101E-01	-.745061E-01	-.678231E-01
19.00	-.189599E+00	-.145197E+00	-.117108E+00	-.951645E-01	-.746785E-01	-.685475E-01
19.50	-.189519E+00	-.144954E+00	-.116770E+00	-.955989E-01	-.748499E-01	-.692409E-01
20.00	-.189452E+00	-.144745E+00	-.116418E+00	-.959226E-01	-.750226E-01	-.698996E-01
20.50	-.189392E+00	-.144562E+00	-.116060E+00	-.961473E-01	-.751963E-01	-.705193E-01
21.00	-.189341E+00	-.144405E+00	-.115711E+00	-.962835E-01	-.753715E-01	-.710935E-01
21.50	-.189295E+00	-.144268E+00	-.115374E+00	-.963392E-01	-.755472E-01	-.716192E-01
22.00	-.189256E+00	-.144150E+00	-.115056E+00	-.963260E-01	-.757230E-01	-.720920E-01
22.50	-.189220E+00	-.144046E+00	-.114761E+00	-.962531E-01	-.758951E-01	-.725121E-01
23.00	-.189189E+00	-.143957E+00	-.114489E+00	-.961296E-01	-.760626E-01	-.728796E-01
23.50	-.189161E+00	-.143877E+00	-.114241E+00	-.959653E-01	-.762213E-01	-.731973E-01
24.00	-.189136E+00	-.143808E+00	-.114017E+00	-.957697E-01	-.763667E-01	-.734687E-01
24.50	-.189113E+00	-.143746E+00	-.113815E+00	-.955501E-01	-.764971E-01	-.736981E-01
25.00	-.189094E+00	-.143692E+00	-.113634E+00	-.953157E-01	-.766087E-01	-.738887E-01
26.00	-.189059E+00	-.143599E+00	-.113324E+00	-.948241E-01	-.767691E-01	-.741721E-01
27.00	-.189030E+00	-.143525E+00	-.113075E+00	-.943362E-01	-.768482E-01	-.743442E-01
28.00	-.189007E+00	-.143465E+00	-.112872E+00	-.938798E-01	-.768598E-01	-.744198E-01
29.00	-.188988E+00	-.143416E+00	-.112706E+00	-.934687E-01	-.768297E-01	-.744047E-01
30.00	-.188972E+00	-.143375E+00	-.112568E+00	-.931076E-01	-.767856E-01	-.743066E-01
32.00	-.188946E+00	-.143312E+00	-.112354E+00	-.925287E-01	-.767187E-01	-.739257E-01
35.00	-.188920E+00	-.143249E+00	-.112136E+00	-.919369E-01	-.767049E-01	-.732059E-01
37.00	-.188907E+00	-.143220E+00	-.112033E+00	-.916663E-01	-.767213E-01	-.728003E-01
40.00	-.188894E+00	-.143187E+00	-.111921E+00	-.913732E-01	-.767512E-01	-.723682E-01
45.00	-.188881E+00	-.143158E+00	-.111800E+00	-.910657E-01	-.767857E-01	-.719767E-01
50.00	-.188873E+00	-.143141E+00	-.111727E+00	-.908853E-01	-.768043E-01	-.717863E-01
55.00	-.188869E+00	-.143131E+00	-.111680E+00	-.907722E-01	-.768131E-01	-.716831E-01
60.00	-.188866E+00	-.143124E+00	-.111649E+00	-.906974E-01	-.768174E-01	-.716210E-01
70.00	-.188863E+00	-.143117E+00	-.111611E+00	-.906113E-01	-.768193E-01	-.715566E-01
80.00	-.188861E+00	-.143114E+00	-.111590E+00	-.905660E-01	-.768190E-01	-.715272E-01
90.00	-.188860E+00	-.143113E+00	-.111579E+00	-.905399E-01	-.768179E-01	-.715110E-01
100.00	-.188860E+00	-.143112E+00	-.111571E+00	-.905240E-01	-.768160E-01	-.715031E-01

TAB. B.7: Orbitales Σ , ion NaCs^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.119226E+00	-.474020E-01	-.116490E-01	0.283300E-01	0.462960E-01	0.608520E-01
5.20	-.130576E+00	-.583906E-01	-.200686E-01	0.118014E-01	0.337574E-01	0.491354E-01
5.40	-.139747E+00	-.670126E-01	-.263756E-01	-.194959E-02	0.238414E-01	0.401234E-01
5.60	-.147370E+00	-.740073E-01	-.313663E-01	-.133703E-01	0.157917E-01	0.329427E-01
5.80	-.153838E+00	-.798640E-01	-.356430E-01	-.227440E-01	0.908696E-02	0.270220E-01
6.00	-.159391E+00	-.849098E-01	-.397748E-01	-.301398E-01	0.337122E-02	0.219892E-01
6.20	-.164185E+00	-.893602E-01	-.442772E-01	-.355102E-01	-.160324E-02	0.175998E-01
6.40	-.168324E+00	-.933630E-01	-.491370E-01	-.392120E-01	-.601002E-02	0.136900E-01
6.60	-.171882E+00	-.970180E-01	-.539190E-01	-.419340E-01	-.997103E-02	0.101510E-01
6.80	-.174919E+00	-.100393E+00	-.583654E-01	-.441304E-01	-.135764E-01	0.690664E-02
7.00	-.177486E+00	-.103538E+00	-.624158E-01	-.460068E-01	-.168908E-01	0.390319E-02
7.20	-.179628E+00	-.106485E+00	-.660877E-01	-.476617E-01	-.199637E-01	0.110235E-02
7.40	-.181387E+00	-.109261E+00	-.694201E-01	-.491481E-01	-.228311E-01	-.152714E-02
7.60	-.182802E+00	-.111885E+00	-.724544E-01	-.504944E-01	-.255214E-01	-.400744E-02
7.80	-.183912E+00	-.114373E+00	-.752295E-01	-.517225E-01	-.280575E-01	-.635851E-02
8.00	-.184748E+00	-.116732E+00	-.777784E-01	-.528454E-01	-.304554E-01	-.859545E-02
8.20	-.185343E+00	-.118977E+00	-.801312E-01	-.538732E-01	-.327322E-01	-.107322E-01
8.40	-.185724E+00	-.121113E+00	-.823104E-01	-.548154E-01	-.349014E-01	-.127804E-01
8.60	-.185920E+00	-.123147E+00	-.843392E-01	-.556802E-01	-.369732E-01	-.147492E-01
8.80	-.185951E+00	-.125084E+00	-.862332E-01	-.564752E-01	-.389612E-01	-.166492E-01
9.00	-.185841E+00	-.126929E+00	-.880080E-01	-.572080E-01	-.408750E-01	-.184870E-01
9.20	-.185609E+00	-.128687E+00	-.896759E-01	-.578849E-01	-.427249E-01	-.202699E-01
9.40	-.185271E+00	-.130361E+00	-.912455E-01	-.585125E-01	-.445185E-01	-.220025E-01
9.60	-.184842E+00	-.131954E+00	-.927260E-01	-.590950E-01	-.462630E-01	-.236910E-01
9.80	-.184336E+00	-.133469E+00	-.941242E-01	-.596382E-01	-.479662E-01	-.253382E-01
10.00	-.183767E+00	-.134911E+00	-.954457E-01	-.601447E-01	-.496307E-01	-.269477E-01
10.20	-.183145E+00	-.136280E+00	-.966955E-01	-.606185E-01	-.512625E-01	-.285205E-01
10.40	-.182477E+00	-.137579E+00	-.978777E-01	-.610627E-01	-.528637E-01	-.300577E-01
10.60	-.181775E+00	-.138811E+00	-.989958E-01	-.614808E-01	-.544338E-01	-.315608E-01
10.80	-.181043E+00	-.139978E+00	-.100053E+00	-.618762E-01	-.559742E-01	-.330282E-01
11.00	-.180291E+00	-.141083E+00	-.101053E+00	-.622561E-01	-.574801E-01	-.344601E-01
11.20	-.179524E+00	-.142127E+00	-.101998E+00	-.626325E-01	-.589405E-01	-.358525E-01
11.40	-.178746E+00	-.143113E+00	-.102888E+00	-.630332E-01	-.603282E-01	-.372042E-01
11.60	-.177963E+00	-.144044E+00	-.103729E+00	-.635367E-01	-.615667E-01	-.385127E-01
11.80	-.177179E+00	-.144920E+00	-.104521E+00	-.643096E-01	-.624866E-01	-.397756E-01
12.00	-.176397E+00	-.145744E+00	-.105265E+00	-.654042E-01	-.630362E-01	-.409912E-01
12.20	-.175620E+00	-.146518E+00	-.105964E+00	-.666525E-01	-.633845E-01	-.421575E-01
12.40	-.174854E+00	-.147245E+00	-.106620E+00	-.679397E-01	-.636427E-01	-.432747E-01
12.60	-.174098E+00	-.147926E+00	-.107232E+00	-.692226E-01	-.638546E-01	-.443426E-01
12.80	-.173355E+00	-.148562E+00	-.107802E+00	-.704871E-01	-.640341E-01	-.453631E-01
13.00	-.172628E+00	-.149157E+00	-.108333E+00	-.717228E-01	-.641898E-01	-.463368E-01
13.50	-.170891E+00	-.150470E+00	-.109490E+00	-.746653E-01	-.644983E-01	-.485813E-01
14.00	-.169287E+00	-.151560E+00	-.110421E+00	-.773748E-01	-.647158E-01	-.505898E-01
14.50	-.167827E+00	-.152447E+00	-.111138E+00	-.798429E-01	-.648619E-01	-.524059E-01
15.00	-.166522E+00	-.153157E+00	-.111656E+00	-.820741E-01	-.649511E-01	-.540711E-01

15.50	-.165375E+00	-.153710E+00	-.111992E+00	-.840792E-01	-.649952E-01	-.556212E-01
16.00	-.164385E+00	-.154124E+00	-.112162E+00	-.858738E-01	-.650058E-01	-.570838E-01
16.50	-.163545E+00	-.154418E+00	-.112179E+00	-.874754E-01	-.649914E-01	-.584764E-01
17.00	-.162846E+00	-.154611E+00	-.112065E+00	-.889005E-01	-.649615E-01	-.598095E-01
17.50	-.162273E+00	-.154719E+00	-.111833E+00	-.901664E-01	-.649264E-01	-.610794E-01
18.00	-.161811E+00	-.154762E+00	-.111503E+00	-.912882E-01	-.649052E-01	-.622722E-01
18.50	-.161441E+00	-.154755E+00	-.111092E+00	-.922803E-01	-.649463E-01	-.633353E-01
19.00	-.161146E+00	-.154714E+00	-.110615E+00	-.931553E-01	-.652433E-01	-.640733E-01
19.50	-.160911E+00	-.154652E+00	-.110087E+00	-.939252E-01	-.659772E-01	-.643052E-01
20.00	-.160723E+00	-.154578E+00	-.109523E+00	-.945983E-01	-.668503E-01	-.643243E-01
20.50	-.160570E+00	-.154499E+00	-.108935E+00	-.951854E-01	-.677004E-01	-.642924E-01
21.00	-.160445E+00	-.154421E+00	-.108335E+00	-.956930E-01	-.684910E-01	-.642450E-01
21.50	-.160342E+00	-.154345E+00	-.107733E+00	-.961279E-01	-.692109E-01	-.641959E-01
22.00	-.160254E+00	-.154274E+00	-.107139E+00	-.964980E-01	-.698570E-01	-.641480E-01
22.50	-.160180E+00	-.154208E+00	-.106559E+00	-.968073E-01	-.704283E-01	-.641063E-01
23.00	-.160116E+00	-.154148E+00	-.106002E+00	-.970611E-01	-.709261E-01	-.640711E-01
23.50	-.160061E+00	-.154094E+00	-.105473E+00	-.972650E-01	-.713510E-01	-.640440E-01
24.00	-.160013E+00	-.154045E+00	-.104976E+00	-.974225E-01	-.717075E-01	-.640255E-01
24.50	-.159969E+00	-.154000E+00	-.104515E+00	-.975381E-01	-.719961E-01	-.640161E-01
25.00	-.159932E+00	-.153961E+00	-.104092E+00	-.976159E-01	-.722209E-01	-.640159E-01
26.00	-.159868E+00	-.153893E+00	-.103363E+00	-.976736E-01	-.724936E-01	-.640416E-01
27.00	-.159816E+00	-.153836E+00	-.102784E+00	-.976278E-01	-.725528E-01	-.640968E-01
28.00	-.159773E+00	-.153790E+00	-.102336E+00	-.975127E-01	-.724307E-01	-.641757E-01
29.00	-.159739E+00	-.153752E+00	-.101993E+00	-.973596E-01	-.721616E-01	-.642706E-01
30.00	-.159709E+00	-.153720E+00	-.101729E+00	-.971907E-01	-.717757E-01	-.643767E-01
32.00	-.159664E+00	-.153670E+00	-.101356E+00	-.968680E-01	-.707760E-01	-.646020E-01
35.00	-.159618E+00	-.153619E+00	-.101012E+00	-.964895E-01	-.690665E-01	-.649025E-01
37.00	-.159597E+00	-.153597E+00	-.100860E+00	-.963059E-01	-.679949E-01	-.650349E-01
40.00	-.159575E+00	-.153573E+00	-.100696E+00	-.961039E-01	-.667129E-01	-.650959E-01
45.00	-.159553E+00	-.153548E+00	-.100524E+00	-.958916E-01	-.657386E-01	-.647666E-01
50.00	-.159539E+00	-.153534E+00	-.100420E+00	-.957642E-01	-.655392E-01	-.643532E-01
55.00	-.159531E+00	-.153526E+00	-.100354E+00	-.956840E-01	-.654660E-01	-.641240E-01
60.00	-.159527E+00	-.153520E+00	-.100310E+00	-.956309E-01	-.654249E-01	-.639969E-01
70.00	-.159521E+00	-.153515E+00	-.100258E+00	-.955676E-01	-.653816E-01	-.638716E-01
80.00	-.159518E+00	-.153511E+00	-.100230E+00	-.955332E-01	-.653592E-01	-.638172E-01
90.00	-.159517E+00	-.153510E+00	-.100214E+00	-.955140E-01	-.653470E-01	-.637910E-01
100.00	-.159516E+00	-.153509E+00	-.100204E+00	-.955021E-01	-.653391E-01	-.637760E-01

TAB. B.8: Orbitales Σ , ion KRb^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.921622E-01	-.295672E-01	-.742419E-02	0.428958E-01	0.670988E-01	0.762958E-01
5.20	-.112085E+00	-.492773E-01	-.262093E-01	0.187297E-01	0.452837E-01	0.544317E-01
5.40	-.125560E+00	-.620357E-01	-.382527E-01	0.160734E-02	0.301033E-01	0.405143E-01
5.60	-.135335E+00	-.707266E-01	-.464886E-01	-.109616E-01	0.191274E-01	0.311394E-01
5.80	-.142921E+00	-.770179E-01	-.525709E-01	-.204189E-01	0.108421E-01	0.243671E-01
6.00	-.149135E+00	-.818787E-01	-.574077E-01	-.276797E-01	0.428830E-02	0.191243E-01
6.20	-.154410E+00	-.858756E-01	-.614766E-01	-.333676E-01	-.113063E-02	0.148104E-01
6.40	-.158975E+00	-.893386E-01	-.650226E-01	-.379286E-01	-.577559E-02	0.110824E-01
6.60	-.162954E+00	-.924611E-01	-.681691E-01	-.416781E-01	-.986910E-02	0.774290E-02
6.80	-.166422E+00	-.953528E-01	-.709898E-01	-.448368E-01	-.135488E-01	0.467424E-02
7.00	-.169427E+00	-.980785E-01	-.735335E-01	-.475555E-01	-.169025E-01	0.180553E-02
7.20	-.172008E+00	-.100672E+00	-.758408E-01	-.499388E-01	-.199878E-01	-.906827E-03
7.40	-.174198E+00	-.103153E+00	-.779446E-01	-.520576E-01	-.228436E-01	-.349160E-02
7.60	-.176031E+00	-.105532E+00	-.798746E-01	-.539596E-01	-.254996E-01	-.596963E-02
7.80	-.177537E+00	-.107816E+00	-.816522E-01	-.556792E-01	-.279782E-01	-.835422E-02
8.00	-.178747E+00	-.110011E+00	-.833000E-01	-.572420E-01	-.302960E-01	-.106590E-01
8.20	-.179691E+00	-.112117E+00	-.848330E-01	-.586640E-01	-.324680E-01	-.128910E-01
8.40	-.180396E+00	-.114139E+00	-.862652E-01	-.599612E-01	-.345072E-01	-.150612E-01
8.60	-.180888E+00	-.116079E+00	-.876090E-01	-.611440E-01	-.364260E-01	-.171770E-01
8.80	-.181191E+00	-.117939E+00	-.888761E-01	-.622201E-01	-.382361E-01	-.192441E-01
9.00	-.181328E+00	-.119721E+00	-.900741E-01	-.632001E-01	-.399471E-01	-.212721E-01
9.20	-.181321E+00	-.121427E+00	-.912130E-01	-.640920E-01	-.415700E-01	-.232650E-01
9.40	-.181187E+00	-.123059E+00	-.922995E-01	-.649025E-01	-.431135E-01	-.252305E-01
9.60	-.180943E+00	-.124617E+00	-.933373E-01	-.656403E-01	-.445903E-01	-.271703E-01
9.80	-.180605E+00	-.126105E+00	-.943335E-01	-.663135E-01	-.460085E-01	-.290895E-01
10.00	-.180189E+00	-.127524E+00	-.952891E-01	-.669281E-01	-.473781E-01	-.309851E-01
10.20	-.179705E+00	-.128875E+00	-.962089E-01	-.674899E-01	-.487089E-01	-.328579E-01
10.40	-.179165E+00	-.130160E+00	-.970935E-01	-.680045E-01	-.500115E-01	-.347005E-01
10.60	-.178578E+00	-.131379E+00	-.979452E-01	-.684772E-01	-.512952E-01	-.365062E-01
10.80	-.177955E+00	-.132537E+00	-.987642E-01	-.689122E-01	-.525702E-01	-.382652E-01
11.00	-.177303E+00	-.133632E+00	-.995523E-01	-.693113E-01	-.538463E-01	-.399643E-01
11.20	-.176630E+00	-.134668E+00	-.100309E+00	-.696795E-01	-.551295E-01	-.415925E-01
11.40	-.175941E+00	-.135645E+00	-.101036E+00	-.700172E-01	-.564272E-01	-.431382E-01
11.60	-.175243E+00	-.136566E+00	-.101734E+00	-.703281E-01	-.577431E-01	-.445931E-01
11.80	-.174540E+00	-.137430E+00	-.102402E+00	-.706144E-01	-.590764E-01	-.459494E-01
12.00	-.173838E+00	-.138241E+00	-.103042E+00	-.708782E-01	-.604242E-01	-.472072E-01
12.20	-.173140E+00	-.138999E+00	-.103654E+00	-.711218E-01	-.617818E-01	-.483658E-01
12.40	-.172449E+00	-.139705E+00	-.104236E+00	-.713460E-01	-.631420E-01	-.494300E-01
12.60	-.171770E+00	-.140363E+00	-.104790E+00	-.715537E-01	-.644967E-01	-.504067E-01
12.80	-.171104E+00	-.140971E+00	-.105316E+00	-.717455E-01	-.658375E-01	-.513015E-01
13.00	-.170453E+00	-.141532E+00	-.105814E+00	-.719243E-01	-.671573E-01	-.521233E-01
13.50	-.168913E+00	-.142740E+00	-.106935E+00	-.723244E-01	-.703204E-01	-.539014E-01
14.00	-.167511E+00	-.143688E+00	-.107883E+00	-.733172E-01	-.725982E-01	-.553592E-01
14.50	-.166265E+00	-.144402E+00	-.108660E+00	-.759578E-01	-.729188E-01	-.565678E-01
15.00	-.165178E+00	-.144906E+00	-.109269E+00	-.783620E-01	-.731740E-01	-.575770E-01

15.50	-.164250E+00	-.145233E+00	-.109717E+00	-.805147E-01	-.734007E-01	-.584287E-01
16.00	-.163471E+00	-.145410E+00	-.110012E+00	-.824329E-01	-.736069E-01	-.591509E-01
16.50	-.162827E+00	-.145470E+00	-.110163E+00	-.841361E-01	-.737981E-01	-.597721E-01
17.00	-.162301E+00	-.145443E+00	-.110185E+00	-.856446E-01	-.739776E-01	-.603136E-01
17.50	-.161872E+00	-.145354E+00	-.110088E+00	-.869785E-01	-.741495E-01	-.607985E-01
18.00	-.161526E+00	-.145227E+00	-.109890E+00	-.881548E-01	-.743158E-01	-.612518E-01
18.50	-.161244E+00	-.145078E+00	-.109604E+00	-.891889E-01	-.744769E-01	-.616999E-01
19.00	-.161013E+00	-.144921E+00	-.109246E+00	-.900953E-01	-.746333E-01	-.621733E-01
19.50	-.160824E+00	-.144766E+00	-.108831E+00	-.908859E-01	-.747859E-01	-.627009E-01
20.00	-.160667E+00	-.144616E+00	-.108372E+00	-.915699E-01	-.749349E-01	-.632979E-01
20.50	-.160535E+00	-.144476E+00	-.107883E+00	-.921563E-01	-.750793E-01	-.639533E-01
21.00	-.160424E+00	-.144348E+00	-.107376E+00	-.926543E-01	-.752173E-01	-.646373E-01
21.50	-.160330E+00	-.144231E+00	-.106863E+00	-.930689E-01	-.753509E-01	-.653199E-01
22.00	-.160249E+00	-.144126E+00	-.106353E+00	-.934077E-01	-.754777E-01	-.659777E-01
22.50	-.160178E+00	-.144032E+00	-.105853E+00	-.936770E-01	-.755980E-01	-.665930E-01
23.00	-.160117E+00	-.143948E+00	-.105373E+00	-.938797E-01	-.757117E-01	-.671577E-01
23.50	-.160063E+00	-.143873E+00	-.104918E+00	-.940237E-01	-.758187E-01	-.676687E-01
24.00	-.160015E+00	-.143806E+00	-.104492E+00	-.941135E-01	-.759185E-01	-.681215E-01
24.50	-.159972E+00	-.143745E+00	-.104097E+00	-.941544E-01	-.760104E-01	-.685164E-01
25.00	-.159934E+00	-.143691E+00	-.103738E+00	-.941525E-01	-.760955E-01	-.688555E-01
26.00	-.159870E+00	-.143601E+00	-.103120E+00	-.940431E-01	-.762421E-01	-.693721E-01
27.00	-.159818E+00	-.143527E+00	-.102628E+00	-.938334E-01	-.763584E-01	-.696874E-01
28.00	-.159775E+00	-.143466E+00	-.102242E+00	-.935675E-01	-.764475E-01	-.698255E-01
29.00	-.159741E+00	-.143418E+00	-.101939E+00	-.932808E-01	-.765128E-01	-.698078E-01
30.00	-.159711E+00	-.143376E+00	-.101699E+00	-.929974E-01	-.765614E-01	-.696584E-01
32.00	-.159666E+00	-.143313E+00	-.101348E+00	-.924938E-01	-.766258E-01	-.690658E-01
35.00	-.159619E+00	-.143249E+00	-.101012E+00	-.919324E-01	-.766864E-01	-.677984E-01
37.00	-.159598E+00	-.143221E+00	-.100860E+00	-.916655E-01	-.767165E-01	-.669355E-01
40.00	-.159576E+00	-.143191E+00	-.100696E+00	-.913730E-01	-.767510E-01	-.658630E-01
45.00	-.159553E+00	-.143159E+00	-.100523E+00	-.910663E-01	-.767863E-01	-.648203E-01
50.00	-.159540E+00	-.143143E+00	-.100421E+00	-.908856E-01	-.768046E-01	-.643546E-01
55.00	-.159531E+00	-.143132E+00	-.100354E+00	-.907733E-01	-.768133E-01	-.641243E-01
60.00	-.159527E+00	-.143125E+00	-.100310E+00	-.906981E-01	-.768181E-01	-.639971E-01
70.00	-.159521E+00	-.143118E+00	-.100258E+00	-.906117E-01	-.768197E-01	-.638717E-01
80.00	-.159518E+00	-.143114E+00	-.100230E+00	-.905663E-01	-.768193E-01	-.638173E-01
90.00	-.159517E+00	-.143113E+00	-.100214E+00	-.905400E-01	-.768180E-01	-.637911E-01
100.00	-.159516E+00	-.143112E+00	-.100204E+00	-.905241E-01	-.768161E-01	-.637761E-01

TAB. B.9: Orbitales Σ , ion KCs^+

R(ua)	(1) ² Σ ⁺	(2) ² Σ ⁺	(3) ² Σ ⁺	(4) ² Σ ⁺	(5) ² Σ ⁺	(6) ² Σ ⁺
5.00	-.311918E-01	0.300872E-01	0.471372E-01	0.107529E+00	0.122358E+00	0.134977E+00
5.20	-.664208E-01	-.599378E-02	0.115902E-01	0.692252E-01	0.834592E-01	0.957512E-01
5.40	-.910607E-01	-.309347E-01	-.127107E-01	0.412863E-01	0.549223E-01	0.690583E-01
5.60	-.108782E+00	-.484443E-01	-.295723E-01	0.200157E-01	0.342117E-01	0.506077E-01
5.80	-.121953E+00	-.609882E-01	-.415182E-01	0.341583E-02	0.192628E-01	0.374748E-01
6.00	-.132082E+00	-.702091E-01	-.502081E-01	-.958809E-02	0.825991E-02	0.278219E-01
6.20	-.140120E+00	-.772009E-01	-.567249E-01	-.197709E-01	-.101947E-03	0.204841E-01
6.40	-.146668E+00	-.826951E-01	-.617701E-01	-.277711E-01	-.667507E-02	0.147079E-01
6.60	-.152103E+00	-.871764E-01	-.657964E-01	-.341124E-01	-.120114E-01	0.999956E-02
6.80	-.156671E+00	-.909640E-01	-.691000E-01	-.392040E-01	-.164720E-01	0.603100E-02
7.00	-.160534E+00	-.942695E-01	-.718795E-01	-.433595E-01	-.202975E-01	0.258654E-02
7.20	-.163806E+00	-.972297E-01	-.742687E-01	-.468077E-01	-.236467E-01	-.479707E-03
7.40	-.166569E+00	-.999352E-01	-.763632E-01	-.497202E-01	-.266292E-01	-.326522E-02
7.60	-.168891E+00	-.102445E+00	-.782295E-01	-.522185E-01	-.293205E-01	-.583552E-02
7.80	-.170820E+00	-.104797E+00	-.799183E-01	-.543913E-01	-.317723E-01	-.823828E-02
8.00	-.172405E+00	-.107019E+00	-.814641E-01	-.563041E-01	-.340241E-01	-.105041E-01
8.20	-.173683E+00	-.109128E+00	-.828919E-01	-.580039E-01	-.361039E-01	-.126569E-01
8.40	-.174689E+00	-.111136E+00	-.842236E-01	-.595236E-01	-.380326E-01	-.147126E-01
8.60	-.175452E+00	-.113054E+00	-.854717E-01	-.608897E-01	-.398307E-01	-.166857E-01
8.80	-.175999E+00	-.114886E+00	-.866495E-01	-.621205E-01	-.415115E-01	-.185855E-01
9.00	-.176359E+00	-.116641E+00	-.877678E-01	-.632328E-01	-.430878E-01	-.204208E-01
9.20	-.176552E+00	-.118320E+00	-.888323E-01	-.642373E-01	-.445693E-01	-.221993E-01
9.40	-.176599E+00	-.119927E+00	-.898524E-01	-.651454E-01	-.459674E-01	-.239274E-01
9.60	-.176519E+00	-.121466E+00	-.908312E-01	-.659642E-01	-.472892E-01	-.256122E-01
9.80	-.176328E+00	-.122938E+00	-.917740E-01	-.667020E-01	-.485420E-01	-.272590E-01
10.00	-.176042E+00	-.124346E+00	-.926849E-01	-.673669E-01	-.497349E-01	-.288749E-01
10.20	-.175674E+00	-.125692E+00	-.935657E-01	-.679647E-01	-.508727E-01	-.304647E-01
10.40	-.175236E+00	-.126978E+00	-.944188E-01	-.685018E-01	-.519618E-01	-.320338E-01
10.60	-.174740E+00	-.128206E+00	-.952445E-01	-.689845E-01	-.530105E-01	-.335875E-01
10.80	-.174194E+00	-.129376E+00	-.960448E-01	-.694188E-01	-.540238E-01	-.351308E-01
11.00	-.173607E+00	-.130492E+00	-.968185E-01	-.698075E-01	-.550075E-01	-.366675E-01
11.20	-.172987E+00	-.131553E+00	-.975674E-01	-.701574E-01	-.559684E-01	-.381994E-01
11.40	-.172342E+00	-.132562E+00	-.982908E-01	-.704728E-01	-.569118E-01	-.397258E-01
11.60	-.171675E+00	-.133520E+00	-.989882E-01	-.707562E-01	-.578462E-01	-.412432E-01
11.80	-.170995E+00	-.134429E+00	-.996599E-01	-.710129E-01	-.587759E-01	-.427459E-01
12.00	-.170305E+00	-.135290E+00	-.100305E+00	-.712449E-01	-.597069E-01	-.442229E-01
12.20	-.169609E+00	-.136103E+00	-.100924E+00	-.714563E-01	-.606443E-01	-.456623E-01
12.40	-.168912E+00	-.136871E+00	-.101517E+00	-.716488E-01	-.615938E-01	-.470508E-01
12.60	-.168216E+00	-.137594E+00	-.102082E+00	-.718245E-01	-.625575E-01	-.483765E-01
12.80	-.167526E+00	-.138275E+00	-.102622E+00	-.719858E-01	-.635378E-01	-.496288E-01
13.00	-.166843E+00	-.138913E+00	-.103133E+00	-.721354E-01	-.645344E-01	-.507984E-01
13.50	-.165187E+00	-.140333E+00	-.104293E+00	-.724654E-01	-.670814E-01	-.533484E-01
14.00	-.163626E+00	-.141517E+00	-.105284E+00	-.727529E-01	-.696439E-01	-.553819E-01
14.50	-.162184E+00	-.142485E+00	-.106106E+00	-.730609E-01	-.720869E-01	-.569819E-01
15.00	-.160878E+00	-.143255E+00	-.106762E+00	-.746158E-01	-.731248E-01	-.582428E-01

15.50	-.159717E+00	-.143846E+00	-.107255E+00	-.767842E-01	-.733552E-01	-.592452E-01
16.00	-.158706E+00	-.144279E+00	-.107594E+00	-.787869E-01	-.735479E-01	-.600489E-01
16.50	-.157842E+00	-.144573E+00	-.107784E+00	-.806023E-01	-.737253E-01	-.606983E-01
17.00	-.157117E+00	-.144752E+00	-.107838E+00	-.822385E-01	-.738925E-01	-.612275E-01
17.50	-.156518E+00	-.144835E+00	-.107765E+00	-.837055E-01	-.740525E-01	-.616605E-01
18.00	-.156029E+00	-.144846E+00	-.107578E+00	-.850185E-01	-.742085E-01	-.620165E-01
18.50	-.155634E+00	-.144805E+00	-.107293E+00	-.861895E-01	-.743585E-01	-.623125E-01
19.00	-.155316E+00	-.144729E+00	-.106924E+00	-.872320E-01	-.745060E-01	-.625630E-01
19.50	-.155060E+00	-.144632E+00	-.106484E+00	-.881570E-01	-.746500E-01	-.627850E-01
20.00	-.154853E+00	-.144525E+00	-.105989E+00	-.889757E-01	-.747907E-01	-.629967E-01
20.50	-.154683E+00	-.144415E+00	-.105451E+00	-.896978E-01	-.749278E-01	-.632368E-01
21.00	-.154544E+00	-.144307E+00	-.104884E+00	-.903308E-01	-.750618E-01	-.635778E-01
21.50	-.154427E+00	-.144204E+00	-.104298E+00	-.908824E-01	-.751914E-01	-.640644E-01
22.00	-.154329E+00	-.144108E+00	-.103705E+00	-.913593E-01	-.753163E-01	-.646253E-01
22.50	-.154247E+00	-.144021E+00	-.103115E+00	-.917689E-01	-.754369E-01	-.651849E-01
23.00	-.154175E+00	-.143941E+00	-.102533E+00	-.921160E-01	-.755520E-01	-.657130E-01
23.50	-.154113E+00	-.143869E+00	-.101967E+00	-.924063E-01	-.756613E-01	-.661983E-01
24.00	-.154059E+00	-.143804E+00	-.101425E+00	-.926446E-01	-.757636E-01	-.666366E-01
24.50	-.154011E+00	-.143745E+00	-.100908E+00	-.928339E-01	-.758609E-01	-.670259E-01
25.00	-.153969E+00	-.143692E+00	-.100422E+00	-.929796E-01	-.759506E-01	-.673666E-01
26.00	-.153897E+00	-.143601E+00	-.995524E-01	-.931534E-01	-.761104E-01	-.679054E-01
27.00	-.153840E+00	-.143528E+00	-.988271E-01	-.931941E-01	-.762431E-01	-.682631E-01
28.00	-.153794E+00	-.143468E+00	-.982437E-01	-.931317E-01	-.763507E-01	-.684577E-01
29.00	-.153755E+00	-.143419E+00	-.977856E-01	-.929966E-01	-.764346E-01	-.685096E-01
30.00	-.153722E+00	-.143378E+00	-.974308E-01	-.928178E-01	-.765008E-01	-.684418E-01
32.00	-.153672E+00	-.143314E+00	-.969377E-01	-.924237E-01	-.765927E-01	-.680447E-01
35.00	-.153622E+00	-.143251E+00	-.964987E-01	-.919107E-01	-.766757E-01	-.671597E-01
37.00	-.153599E+00	-.143222E+00	-.963085E-01	-.916525E-01	-.767115E-01	-.666155E-01
40.00	-.153574E+00	-.143191E+00	-.961048E-01	-.913668E-01	-.767498E-01	-.660668E-01
45.00	-.153549E+00	-.143160E+00	-.958918E-01	-.910648E-01	-.767868E-01	-.656788E-01
50.00	-.153534E+00	-.143143E+00	-.957650E-01	-.908850E-01	-.768050E-01	-.655360E-01
55.00	-.153526E+00	-.143133E+00	-.957650E-01	-.907725E-01	-.768135E-01	-.654655E-01
60.00	-.153520E+00	-.143125E+00	-.957650E-01	-.906983E-01	-.768183E-01	-.654253E-01
70.00	-.153520E+00	-.143118E+00	-.957650E-01	-.906118E-01	-.768198E-01	-.654253E-01
80.00	-.153520E+00	-.143114E+00	-.957650E-01	-.905663E-01	-.768193E-01	-.654253E-01
90.00	-.153520E+00	-.143113E+00	-.957650E-01	-.905401E-01	-.768181E-01	-.654253E-01
100.00	-.153520E+00	-.143112E+00	-.957650E-01	-.905241E-01	-.768161E-01	-.654253E-01

TAB. B.10: Orbitales Σ , ion RbCs^+

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	-.115579E+00	-.205585E-01	0.369605E-01	0.653085E-01	0.783005E-01	0.100675E+00
5.20	-.118468E+00	-.276299E-01	0.310631E-01	0.573051E-01	0.710471E-01	0.938931E-01
5.40	-.120939E+00	-.341437E-01	0.256903E-01	0.498693E-01	0.643363E-01	0.876513E-01
5.60	-.123047E+00	-.401486E-01	0.207824E-01	0.429464E-01	0.581154E-01	0.818954E-01
5.80	-.124841E+00	-.456913E-01	0.162907E-01	0.364877E-01	0.523377E-01	0.765737E-01
6.00	-.126363E+00	-.508115E-01	0.121715E-01	0.304525E-01	0.469605E-01	0.716445E-01
6.20	-.127647E+00	-.555444E-01	0.838756E-02	0.248036E-01	0.419496E-01	0.670706E-01
6.40	-.128726E+00	-.599220E-01	0.490504E-02	0.195070E-01	0.372720E-01	0.628190E-01
6.60	-.129624E+00	-.639721E-01	0.169488E-02	0.145339E-01	0.328989E-01	0.588619E-01
6.80	-.130366E+00	-.677217E-01	-.126766E-02	0.986034E-02	0.288053E-01	0.551743E-01
7.00	-.130969E+00	-.711935E-01	-.400648E-02	0.546452E-02	0.249695E-01	0.517325E-01
7.20	-.131454E+00	-.744100E-01	-.654300E-02	0.132600E-02	0.213690E-01	0.485170E-01
7.40	-.131835E+00	-.773885E-01	-.889951E-02	-.256751E-02	0.179875E-01	0.455075E-01
7.60	-.132124E+00	-.801494E-01	-.111014E-01	-.622541E-02	0.148066E-01	0.426816E-01
7.80	-.132336E+00	-.827065E-01	-.131855E-01	-.963846E-02	0.118125E-01	0.400155E-01
8.00	-.132480E+00	-.850750E-01	-.152310E-01	-.127570E-01	0.899203E-02	0.374660E-01
8.20	-.132566E+00	-.872690E-01	-.174270E-01	-.154160E-01	0.633203E-02	0.349430E-01
8.40	-.132602E+00	-.893014E-01	-.199294E-01	-.174814E-01	0.382162E-02	0.322876E-01
8.60	-.132597E+00	-.911821E-01	-.225611E-01	-.191531E-01	0.144989E-02	0.294719E-01
8.80	-.132558E+00	-.929232E-01	-.251532E-01	-.206182E-01	-.793194E-03	0.266328E-01
9.00	-.132491E+00	-.945329E-01	-.276519E-01	-.219499E-01	-.291486E-02	0.238501E-01
9.20	-.132401E+00	-.960206E-01	-.300426E-01	-.231786E-01	-.492264E-02	0.211514E-01
9.40	-.132293E+00	-.973954E-01	-.323234E-01	-.243224E-01	-.682643E-02	0.185416E-01
9.60	-.132173E+00	-.986646E-01	-.344976E-01	-.253916E-01	-.863055E-02	0.160204E-01
9.80	-.132043E+00	-.998348E-01	-.365678E-01	-.263958E-01	-.103428E-01	0.135872E-01
10.00	-.131908E+00	-.100914E+00	-.385396E-01	-.273416E-01	-.119686E-01	0.112364E-01
10.20	-.131769E+00	-.101907E+00	-.404158E-01	-.282368E-01	-.135138E-01	0.896615E-02
10.40	-.131629E+00	-.102819E+00	-.422031E-01	-.290841E-01	-.149821E-01	0.677291E-02
10.60	-.131492E+00	-.103658E+00	-.439036E-01	-.298906E-01	-.163796E-01	0.465243E-02
10.80	-.131356E+00	-.104426E+00	-.455212E-01	-.306582E-01	-.177092E-01	0.260281E-02
11.00	-.131226E+00	-.105131E+00	-.470596E-01	-.313906E-01	-.189756E-01	0.621409E-03
11.20	-.131100E+00	-.105774E+00	-.485221E-01	-.320911E-01	-.201831E-01	-.129613E-02
11.40	-.130981E+00	-.106362E+00	-.499130E-01	-.327610E-01	-.213350E-01	-.315096E-02
11.60	-.130868E+00	-.106898E+00	-.512340E-01	-.334040E-01	-.224340E-01	-.494499E-02
11.80	-.130762E+00	-.107385E+00	-.524879E-01	-.340199E-01	-.234829E-01	-.668194E-02
12.00	-.130663E+00	-.107827E+00	-.536774E-01	-.346114E-01	-.244854E-01	-.836337E-02
12.20	-.130573E+00	-.108228E+00	-.548057E-01	-.351797E-01	-.254437E-01	-.998965E-02
12.40	-.130488E+00	-.108590E+00	-.558740E-01	-.357260E-01	-.263600E-01	-.115640E-01
12.60	-.130411E+00	-.108916E+00	-.568855E-01	-.362515E-01	-.272385E-01	-.130885E-01
12.80	-.130340E+00	-.109210E+00	-.578422E-01	-.367572E-01	-.280792E-01	-.145632E-01
13.00	-.130277E+00	-.109474E+00	-.587458E-01	-.372438E-01	-.288848E-01	-.159908E-01
13.50	-.130144E+00	-.110017E+00	-.607858E-01	-.383828E-01	-.307598E-01	-.193588E-01
14.00	-.130044E+00	-.110422E+00	-.625369E-01	-.394219E-01	-.324589E-01	-.224569E-01
14.50	-.129973E+00	-.110719E+00	-.640259E-01	-.403719E-01	-.340069E-01	-.252999E-01
15.00	-.129924E+00	-.110933E+00	-.652801E-01	-.412461E-01	-.354281E-01	-.278991E-01

15.50	-.129893E+00	-.111083E+00	-.663232E-01	-.420552E-01	-.367472E-01	-.302632E-01
16.00	-.129875E+00	-.111186E+00	-.671761E-01	-.428081E-01	-.379851E-01	-.323951E-01
16.50	-.129867E+00	-.111256E+00	-.678610E-01	-.435160E-01	-.391670E-01	-.342960E-01
17.00	-.129867E+00	-.111302E+00	-.683956E-01	-.441896E-01	-.403116E-01	-.359646E-01
17.50	-.129871E+00	-.111329E+00	-.687985E-01	-.448405E-01	-.414325E-01	-.374035E-01
18.00	-.129880E+00	-.111346E+00	-.690841E-01	-.454831E-01	-.425231E-01	-.386271E-01
18.50	-.129890E+00	-.111356E+00	-.692680E-01	-.461380E-01	-.435600E-01	-.396640E-01
19.00	-.129902E+00	-.111360E+00	-.693620E-01	-.468260E-01	-.445060E-01	-.405470E-01
19.50	-.129915E+00	-.111362E+00	-.693791E-01	-.475621E-01	-.453301E-01	-.413081E-01
20.00	-.129928E+00	-.111363E+00	-.693287E-01	-.483427E-01	-.460267E-01	-.419747E-01
20.50	-.129941E+00	-.111363E+00	-.692199E-01	-.491439E-01	-.466149E-01	-.425649E-01
21.00	-.129954E+00	-.111363E+00	-.690620E-01	-.499370E-01	-.471220E-01	-.430940E-01
21.50	-.129966E+00	-.111363E+00	-.688612E-01	-.507002E-01	-.475702E-01	-.435732E-01
22.00	-.129978E+00	-.111365E+00	-.686250E-01	-.514210E-01	-.479740E-01	-.440110E-01
22.50	-.129990E+00	-.111366E+00	-.683589E-01	-.520949E-01	-.483429E-01	-.444119E-01
23.00	-.130000E+00	-.111368E+00	-.680679E-01	-.527189E-01	-.486839E-01	-.447819E-01
23.50	-.130011E+00	-.111370E+00	-.677568E-01	-.532928E-01	-.490008E-01	-.451238E-01
24.00	-.130021E+00	-.111373E+00	-.674291E-01	-.538191E-01	-.492971E-01	-.454421E-01
24.50	-.130030E+00	-.111376E+00	-.670903E-01	-.542983E-01	-.495743E-01	-.457393E-01
25.00	-.130040E+00	-.111380E+00	-.667425E-01	-.547345E-01	-.498355E-01	-.460175E-01
26.00	-.130056E+00	-.111387E+00	-.660298E-01	-.554868E-01	-.503128E-01	-.465218E-01
27.00	-.130070E+00	-.111395E+00	-.653141E-01	-.560951E-01	-.507381E-01	-.469671E-01
28.00	-.130084E+00	-.111404E+00	-.646107E-01	-.565807E-01	-.511197E-01	-.473617E-01
29.00	-.130096E+00	-.111412E+00	-.639321E-01	-.569601E-01	-.514631E-01	-.477121E-01
30.00	-.130106E+00	-.111419E+00	-.632884E-01	-.572494E-01	-.517724E-01	-.480234E-01
32.00	-.130126E+00	-.111435E+00	-.621316E-01	-.576096E-01	-.523086E-01	-.485456E-01
35.00	-.130147E+00	-.111454E+00	-.607650E-01	-.577560E-01	-.529470E-01	-.491250E-01
37.00	-.130159E+00	-.111465E+00	-.600943E-01	-.576843E-01	-.532873E-01	-.494083E-01
40.00	-.130173E+00	-.111479E+00	-.593832E-01	-.574482E-01	-.537012E-01	-.497252E-01
45.00	-.130189E+00	-.111497E+00	-.586849E-01	-.570089E-01	-.542059E-01	-.500779E-01
50.00	-.130200E+00	-.111509E+00	-.582741E-01	-.566851E-01	-.545581E-01	-.503081E-01
55.00	-.130208E+00	-.111518E+00	-.580012E-01	-.564702E-01	-.548092E-01	-.504662E-01
60.00	-.130213E+00	-.111525E+00	-.578084E-01	-.563264E-01	-.548092E-01	-.505774E-01
70.00	-.130221E+00	-.111534E+00	-.575664E-01	-.561583E-01	-.548092E-01	-.507153E-01
80.00	-.130225E+00	-.111540E+00	-.574341E-01	-.560720E-01	-.548092E-01	-.507910E-01
90.00	-.130228E+00	-.111543E+00	-.573569E-01	-.560239E-01	-.558959E-01	-.508349E-01
100.00	-.130229E+00	-.111546E+00	-.573120E-01	-.554800E-01	-.559050E-01	-.508620E-01

TAB. B.11: Orbitales II, ion LiNa⁺

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	-.114263E+00	-.149634E-01	0.213356E-01	0.503296E-01	0.783516E-01	0.900326E-01
5.20	-.116929E+00	-.198896E-01	0.149644E-01	0.435704E-01	0.723804E-01	0.830854E-01
5.40	-.119246E+00	-.247107E-01	0.922526E-02	0.373623E-01	0.667563E-01	0.766863E-01
5.60	-.121255E+00	-.294200E-01	0.407098E-02	0.316540E-01	0.614290E-01	0.708100E-01
5.80	-.122991E+00	-.340026E-01	-.553634E-03	0.263974E-01	0.563604E-01	0.654254E-01
6.00	-.124483E+00	-.384389E-01	-.470692E-02	0.215501E-01	0.515221E-01	0.604981E-01
6.20	-.125759E+00	-.427124E-01	-.844744E-02	0.170746E-01	0.468966E-01	0.559836E-01
6.40	-.126847E+00	-.468051E-01	-.118301E-01	0.129359E-01	0.424729E-01	0.518379E-01
6.60	-.127767E+00	-.507054E-01	-.149044E-01	0.910556E-02	0.382486E-01	0.480136E-01
6.80	-.128541E+00	-.544058E-01	-.177138E-01	0.555622E-02	0.342172E-01	0.444672E-01
7.00	-.129184E+00	-.579034E-01	-.202974E-01	0.226455E-02	0.303766E-01	0.411576E-01
7.20	-.129716E+00	-.611980E-01	-.226860E-01	-.788960E-03	0.267190E-01	0.380530E-01
7.40	-.130148E+00	-.642932E-01	-.249072E-01	-.362424E-02	0.232368E-01	0.351218E-01
7.60	-.130495E+00	-.671927E-01	-.269837E-01	-.625673E-02	0.199223E-01	0.323393E-01
7.80	-.130766E+00	-.699056E-01	-.289346E-01	-.870258E-02	0.167664E-01	0.296844E-01
8.00	-.130973E+00	-.724378E-01	-.307758E-01	-.109758E-01	0.137602E-01	0.271372E-01
8.20	-.131123E+00	-.747972E-01	-.325222E-01	-.130882E-01	0.108948E-01	0.246828E-01
8.40	-.131227E+00	-.769939E-01	-.341839E-01	-.150519E-01	0.816010E-02	0.223081E-01
8.60	-.131290E+00	-.790360E-01	-.357700E-01	-.168780E-01	0.554905E-02	0.200020E-01
8.80	-.131320E+00	-.809307E-01	-.372897E-01	-.185787E-01	0.305428E-02	0.177583E-01
9.00	-.131321E+00	-.826889E-01	-.387489E-01	-.201619E-01	0.669119E-03	0.155701E-01
9.20	-.131299E+00	-.843165E-01	-.401535E-01	-.216395E-01	-.161448E-02	0.134345E-01
9.40	-.131260E+00	-.858220E-01	-.415060E-01	-.230200E-01	-.380100E-02	0.113500E-01
9.60	-.131206E+00	-.872134E-01	-.428114E-01	-.243114E-01	-.589541E-02	0.931759E-02
9.80	-.131142E+00	-.884962E-01	-.440722E-01	-.255222E-01	-.790422E-02	0.733678E-02
10.00	-.131070E+00	-.896795E-01	-.452905E-01	-.266595E-01	-.982954E-02	0.540946E-02
10.20	-.130992E+00	-.907681E-01	-.464681E-01	-.277311E-01	-.116761E-01	0.353793E-02
10.40	-.130912E+00	-.917682E-01	-.476062E-01	-.287432E-01	-.134472E-01	0.172283E-02
10.60	-.130830E+00	-.926859E-01	-.487059E-01	-.297019E-01	-.151449E-01	-.338973E-04
10.80	-.130749E+00	-.935270E-01	-.497680E-01	-.306110E-01	-.167740E-01	-.173201E-02
11.00	-.130669E+00	-.942950E-01	-.507940E-01	-.314770E-01	-.183360E-01	-.337201E-02
11.20	-.130592E+00	-.949971E-01	-.517831E-01	-.323021E-01	-.198331E-01	-.495414E-02
11.40	-.130517E+00	-.956364E-01	-.527384E-01	-.330924E-01	-.212684E-01	-.647745E-02
11.60	-.130448E+00	-.962178E-01	-.536588E-01	-.338498E-01	-.226418E-01	-.794476E-02
11.80	-.130382E+00	-.967457E-01	-.545447E-01	-.345777E-01	-.239577E-01	-.935672E-02
12.00	-.130320E+00	-.972228E-01	-.553968E-01	-.352788E-01	-.252158E-01	-.107148E-01
12.20	-.130262E+00	-.976543E-01	-.562173E-01	-.359553E-01	-.264193E-01	-.120193E-01
12.40	-.130210E+00	-.980425E-01	-.570045E-01	-.366105E-01	-.275695E-01	-.132745E-01
12.60	-.130162E+00	-.983912E-01	-.577602E-01	-.372452E-01	-.286672E-01	-.144792E-01
12.80	-.130119E+00	-.987026E-01	-.584856E-01	-.378626E-01	-.297136E-01	-.156376E-01
13.00	-.130079E+00	-.989813E-01	-.591793E-01	-.384643E-01	-.307123E-01	-.167503E-01
13.50	-.130000E+00	-.995476E-01	-.607856E-01	-.399086E-01	-.330016E-01	-.193426E-01
14.00	-.129942E+00	-.999588E-01	-.622158E-01	-.412858E-01	-.350128E-01	-.216878E-01
14.50	-.129901E+00	-.100248E+00	-.634783E-01	-.426133E-01	-.367693E-01	-.238103E-01
15.00	-.129877E+00	-.100441E+00	-.645842E-01	-.438992E-01	-.382942E-01	-.257332E-01

15.50	-.129864E+00	-.100561E+00	-.655420E-01	-.451440E-01	-.396170E-01	-.274790E-01
16.00	-.129859E+00	-.100625E+00	-.663614E-01	-.463424E-01	-.407684E-01	-.290664E-01
16.50	-.129860E+00	-.100650E+00	-.670504E-01	-.474874E-01	-.417774E-01	-.305124E-01
17.00	-.129867E+00	-.100647E+00	-.676187E-01	-.485747E-01	-.426687E-01	-.318347E-01
17.50	-.129876E+00	-.100623E+00	-.680758E-01	-.495998E-01	-.434648E-01	-.330458E-01
18.00	-.129887E+00	-.100588E+00	-.684299E-01	-.505599E-01	-.441799E-01	-.341589E-01
18.50	-.129899E+00	-.100545E+00	-.686906E-01	-.514556E-01	-.448286E-01	-.351856E-01
19.00	-.129912E+00	-.100500E+00	-.688647E-01	-.522897E-01	-.454207E-01	-.361347E-01
19.50	-.129925E+00	-.100453E+00	-.689631E-01	-.530631E-01	-.459631E-01	-.370151E-01
20.00	-.129937E+00	-.100409E+00	-.689923E-01	-.537793E-01	-.464633E-01	-.378353E-01
21.00	-.129963E+00	-.100329E+00	-.688782E-01	-.550522E-01	-.473542E-01	-.393142E-01
21.50	-.129974E+00	-.100294E+00	-.687484E-01	-.556144E-01	-.477524E-01	-.399834E-01
22.00	-.129986E+00	-.100264E+00	-.685803E-01	-.561313E-01	-.481243E-01	-.406103E-01
22.50	-.129997E+00	-.100236E+00	-.683774E-01	-.566064E-01	-.484714E-01	-.411984E-01
23.00	-.130008E+00	-.100213E+00	-.681477E-01	-.570407E-01	-.487967E-01	-.417507E-01
23.50	-.130018E+00	-.100193E+00	-.678949E-01	-.574379E-01	-.491019E-01	-.422689E-01
24.00	-.130027E+00	-.100175E+00	-.676247E-01	-.577997E-01	-.493887E-01	-.427547E-01
24.50	-.130036E+00	-.100160E+00	-.673404E-01	-.581284E-01	-.496584E-01	-.432094E-01
25.00	-.130044E+00	-.100147E+00	-.670451E-01	-.584271E-01	-.499121E-01	-.436341E-01
26.00	-.130061E+00	-.100128E+00	-.664385E-01	-.589385E-01	-.503785E-01	-.444005E-01
27.00	-.130074E+00	-.100113E+00	-.658292E-01	-.593492E-01	-.507952E-01	-.450612E-01
28.00	-.130087E+00	-.100104E+00	-.652352E-01	-.596692E-01	-.511692E-01	-.456232E-01
29.00	-.130099E+00	-.100098E+00	-.646732E-01	-.599092E-01	-.515062E-01	-.460942E-01
30.00	-.130109E+00	-.100095E+00	-.641541E-01	-.600781E-01	-.518101E-01	-.464801E-01
32.00	-.130128E+00	-.100094E+00	-.632856E-01	-.602206E-01	-.523366E-01	-.470276E-01
35.00	-.130148E+00	-.100097E+00	-.624544E-01	-.600324E-01	-.529644E-01	-.473924E-01
37.00	-.130160E+00	-.100102E+00	-.621615E-01	-.597465E-01	-.532985E-01	-.474235E-01
40.00	-.130174E+00	-.100110E+00	-.619241E-01	-.592831E-01	-.537071E-01	-.473081E-01
45.00	-.130189E+00	-.100123E+00	-.617285E-01	-.586775E-01	-.542075E-01	-.470445E-01
50.00	-.130200E+00	-.100133E+00	-.616214E-01	-.582764E-01	-.545584E-01	-.468794E-01
55.00	-.130208E+00	-.100143E+00	-.615555E-01	-.580035E-01	-.548095E-01	-.467955E-01
60.00	-.130214E+00	-.100149E+00	-.615126E-01	-.578095E-01	-.549925E-01	-.467536E-01
70.00	-.130221E+00	-.100158E+00	-.614625E-01	-.575664E-01	-.552264E-01	-.467225E-01
80.00	-.130225E+00	-.100164E+00	-.614361E-01	-.574341E-01	-.553581E-01	-.467161E-01
90.00	-.130228E+00	-.100168E+00	-.614221E-01	-.573569E-01	-.554339E-01	-.467180E-01
100.00	-.130229E+00	-.100170E+00	-.614130E-01	-.573120E-01	-.554800E-01	-.467200E-01

TAB. B.12: Orbitales Π , ion LiK^+

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	-.115235E+00	-.161272E-01	0.192978E-01	0.477868E-01	0.767948E-01	0.898898E-01
5.20	-.117677E+00	-.198279E-01	0.119951E-01	0.414521E-01	0.714371E-01	0.830011E-01
5.40	-.119824E+00	-.234531E-01	0.524892E-02	0.356149E-01	0.663819E-01	0.765539E-01
5.60	-.121702E+00	-.270320E-01	-.914038E-03	0.302350E-01	0.616000E-01	0.705360E-01
5.80	-.123333E+00	-.305963E-01	-.647826E-02	0.252697E-01	0.570567E-01	0.649397E-01
6.00	-.124743E+00	-.341691E-01	-.114451E-01	0.206819E-01	0.527149E-01	0.597569E-01
6.20	-.125953E+00	-.377584E-01	-.158324E-01	0.164386E-01	0.485356E-01	0.549796E-01
6.40	-.126986E+00	-.413519E-01	-.196809E-01	0.125071E-01	0.444861E-01	0.505961E-01
6.60	-.127861E+00	-.449223E-01	-.230493E-01	0.886274E-02	0.405457E-01	0.465847E-01
6.80	-.128597E+00	-.484328E-01	-.260058E-01	0.547921E-02	0.367112E-01	0.429092E-01
7.00	-.129209E+00	-.518487E-01	-.286167E-01	0.233530E-02	0.329893E-01	0.395243E-01
7.20	-.129713E+00	-.551399E-01	-.309409E-01	-.588941E-03	0.293881E-01	0.363851E-01
7.40	-.130122E+00	-.582843E-01	-.330303E-01	-.330930E-02	0.259177E-01	0.334487E-01
7.60	-.130449E+00	-.612695E-01	-.349255E-01	-.584352E-02	0.225785E-01	0.306835E-01
7.80	-.130704E+00	-.640873E-01	-.366593E-01	-.820430E-02	0.193697E-01	0.280617E-01
8.00	-.130898E+00	-.667354E-01	-.382584E-01	-.104064E-01	0.162876E-01	0.255606E-01
8.20	-.131039E+00	-.692178E-01	-.397438E-01	-.124628E-01	0.133262E-01	0.231632E-01
8.40	-.131135E+00	-.715377E-01	-.411327E-01	-.143827E-01	0.104803E-01	0.208563E-01
8.60	-.131193E+00	-.736994E-01	-.424384E-01	-.161784E-01	0.774165E-02	0.186266E-01
8.80	-.131220E+00	-.757106E-01	-.436716E-01	-.178606E-01	0.510435E-02	0.164684E-01
9.00	-.131220E+00	-.775787E-01	-.448417E-01	-.194367E-01	0.256327E-02	0.143733E-01
9.20	-.131199E+00	-.793112E-01	-.459572E-01	-.209172E-01	0.113794E-03	0.123388E-01
9.40	-.131162E+00	-.809152E-01	-.470222E-01	-.223092E-01	-.224920E-02	0.103628E-01
9.60	-.131111E+00	-.823974E-01	-.480424E-01	-.236224E-01	-.452936E-02	0.844364E-02
9.80	-.131052E+00	-.837649E-01	-.490219E-01	-.248619E-01	-.672894E-02	0.658206E-02
10.00	-.130985E+00	-.850268E-01	-.499638E-01	-.260358E-01	-.885079E-02	0.477821E-02
10.20	-.130913E+00	-.861864E-01	-.508704E-01	-.271494E-01	-.108954E-01	0.303357E-02
10.40	-.130839E+00	-.872530E-01	-.517450E-01	-.282110E-01	-.128640E-01	0.134697E-02
10.60	-.130764E+00	-.882305E-01	-.525885E-01	-.292235E-01	-.147595E-01	-.279494E-03
10.80	-.130689E+00	-.891255E-01	-.534025E-01	-.301925E-01	-.165795E-01	-.184645E-02
11.00	-.130616E+00	-.899443E-01	-.541883E-01	-.311243E-01	-.183253E-01	-.335628E-02
11.20	-.130545E+00	-.906901E-01	-.549471E-01	-.320231E-01	-.199971E-01	-.480714E-02
11.40	-.130478E+00	-.913690E-01	-.556790E-01	-.328920E-01	-.215950E-01	-.620296E-02
11.60	-.130413E+00	-.919845E-01	-.563845E-01	-.337365E-01	-.231195E-01	-.754450E-02
11.80	-.130352E+00	-.925423E-01	-.570663E-01	-.345593E-01	-.245693E-01	-.883333E-02
12.00	-.130296E+00	-.930469E-01	-.577229E-01	-.353649E-01	-.259449E-01	-.100719E-01
12.20	-.130243E+00	-.935004E-01	-.583564E-01	-.361564E-01	-.272464E-01	-.112614E-01
12.40	-.130195E+00	-.939069E-01	-.589659E-01	-.369369E-01	-.284749E-01	-.124039E-01
12.60	-.130151E+00	-.942716E-01	-.595526E-01	-.377086E-01	-.296296E-01	-.135016E-01
12.80	-.130110E+00	-.945962E-01	-.601182E-01	-.384732E-01	-.307142E-01	-.145572E-01
13.00	-.130074E+00	-.948835E-01	-.606605E-01	-.392315E-01	-.317285E-01	-.155725E-01
13.50	-.129999E+00	-.954623E-01	-.619243E-01	-.411073E-01	-.339763E-01	-.179423E-01
14.00	-.129946E+00	-.958705E-01	-.630615E-01	-.429395E-01	-.358605E-01	-.200975E-01
14.50	-.129908E+00	-.961454E-01	-.640764E-01	-.447054E-01	-.374454E-01	-.220624E-01
15.00	-.129885E+00	-.963157E-01	-.649747E-01	-.463767E-01	-.387977E-01	-.238577E-01

15.50	-.129873E+00	-.964068E-01	-.657628E-01	-.479368E-01	-.399678E-01	-.255048E-01
16.00	-.129868E+00	-.964381E-01	-.664451E-01	-.493761E-01	-.409971E-01	-.270211E-01
16.50	-.129869E+00	-.964277E-01	-.670277E-01	-.506947E-01	-.419137E-01	-.284207E-01
17.00	-.129875E+00	-.963870E-01	-.675150E-01	-.518970E-01	-.427390E-01	-.297180E-01
17.50	-.129884E+00	-.963275E-01	-.679125E-01	-.529895E-01	-.434865E-01	-.309245E-01
18.00	-.129893E+00	-.962574E-01	-.682274E-01	-.539804E-01	-.441694E-01	-.320504E-01
18.50	-.129905E+00	-.961813E-01	-.684653E-01	-.548783E-01	-.447953E-01	-.331033E-01
19.00	-.129918E+00	-.961037E-01	-.686317E-01	-.556907E-01	-.453727E-01	-.340907E-01
19.50	-.129930E+00	-.960276E-01	-.687336E-01	-.564256E-01	-.459076E-01	-.350186E-01
20.00	-.129943E+00	-.959565E-01	-.687785E-01	-.570895E-01	-.464025E-01	-.358925E-01
20.50	-.129954E+00	-.958903E-01	-.687703E-01	-.576893E-01	-.468643E-01	-.367163E-01
21.00	-.129966E+00	-.958292E-01	-.687172E-01	-.582292E-01	-.472942E-01	-.374932E-01
21.50	-.129978E+00	-.957735E-01	-.686255E-01	-.587155E-01	-.476955E-01	-.382265E-01
22.00	-.129990E+00	-.957246E-01	-.684996E-01	-.591516E-01	-.480716E-01	-.389166E-01
22.50	-.130000E+00	-.956810E-01	-.683470E-01	-.595420E-01	-.484240E-01	-.395670E-01
23.00	-.130011E+00	-.956426E-01	-.681726E-01	-.598886E-01	-.487546E-01	-.401786E-01
23.50	-.130020E+00	-.956093E-01	-.679803E-01	-.601953E-01	-.490653E-01	-.407513E-01
24.00	-.130030E+00	-.955806E-01	-.677776E-01	-.604636E-01	-.493576E-01	-.412876E-01
24.50	-.130038E+00	-.955548E-01	-.675678E-01	-.606958E-01	-.496328E-01	-.417868E-01
25.00	-.130046E+00	-.955331E-01	-.673561E-01	-.608931E-01	-.498921E-01	-.422521E-01
26.00	-.130062E+00	-.954978E-01	-.669418E-01	-.611898E-01	-.503678E-01	-.430778E-01
27.00	-.130076E+00	-.954728E-01	-.665638E-01	-.613618E-01	-.507918E-01	-.437748E-01
28.00	-.130089E+00	-.954534E-01	-.662434E-01	-.614184E-01	-.511714E-01	-.443514E-01
29.00	-.130101E+00	-.954399E-01	-.659909E-01	-.613749E-01	-.515109E-01	-.448169E-01
30.00	-.130110E+00	-.954305E-01	-.658045E-01	-.612515E-01	-.518165E-01	-.451845E-01
32.00	-.130129E+00	-.954185E-01	-.655855E-01	-.608565E-01	-.523415E-01	-.456675E-01
35.00	-.130150E+00	-.954127E-01	-.654637E-01	-.601717E-01	-.529637E-01	-.459417E-01
37.00	-.130160E+00	-.954124E-01	-.654335E-01	-.597615E-01	-.532965E-01	-.459425E-01
40.00	-.130174E+00	-.954148E-01	-.654118E-01	-.592578E-01	-.537038E-01	-.458258E-01
45.00	-.130190E+00	-.954229E-01	-.653899E-01	-.586639E-01	-.542059E-01	-.455789E-01
50.00	-.130201E+00	-.954307E-01	-.653747E-01	-.582718E-01	-.545578E-01	-.453958E-01
55.00	-.130209E+00	-.954366E-01	-.653636E-01	-.580007E-01	-.548097E-01	-.452787E-01
60.00	-.130214E+00	-.954426E-01	-.653546E-01	-.578087E-01	-.549917E-01	-.463376E-01
70.00	-.130221E+00	-.954514E-01	-.653424E-01	-.575665E-01	-.552265E-01	-.457994E-01
80.00	-.130225E+00	-.954571E-01	-.653361E-01	-.574341E-01	-.553581E-01	-.455231E-01
90.00	-.130228E+00	-.954610E-01	-.657240E-01	-.573570E-01	-.554340E-01	-.453689E-01
100.00	-.130229E+00	-.954630E-01	-.653280E-01	-.573120E-01	-.554800E-01	-.453690E-01

TAB. B.13: Orbitales II, ion LiRb⁺

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	-.885783E-01	-.936327E-02	0.195127E-01	0.604527E-01	0.809827E-01	0.899987E-01
5.20	-.926182E-01	-.137892E-01	0.135618E-01	0.540378E-01	0.751618E-01	0.832468E-01
5.40	-.961712E-01	-.180922E-01	0.816283E-02	0.480298E-01	0.697088E-01	0.769408E-01
5.60	-.992884E-01	-.222794E-01	0.327963E-02	0.424066E-01	0.645726E-01	0.710646E-01
5.80	-.102017E+00	-.263559E-01	-.112993E-02	0.371451E-01	0.596981E-01	0.656071E-01
6.00	-.104398E+00	-.303183E-01	-.511134E-02	0.322237E-01	0.550317E-01	0.605627E-01
6.40	-.108268E+00	-.378763E-01	-.119743E-01	0.233117E-01	0.461617E-01	0.516647E-01
6.60	-.109821E+00	-.414573E-01	-.149433E-01	0.192817E-01	0.419217E-01	0.477547E-01
6.80	-.111157E+00	-.448973E-01	-.176563E-01	0.155107E-01	0.378127E-01	0.441477E-01
7.00	-.112300E+00	-.481924E-01	-.201474E-01	0.119806E-01	0.338446E-01	0.407986E-01
7.20	-.113273E+00	-.513404E-01	-.224464E-01	0.867761E-02	0.300236E-01	0.376676E-01
7.40	-.114095E+00	-.543405E-01	-.245795E-01	0.558554E-02	0.263525E-01	0.347205E-01
7.60	-.114783E+00	-.571945E-01	-.265695E-01	0.269049E-02	0.228315E-01	0.319335E-01
7.80	-.115353E+00	-.599042E-01	-.284352E-01	-.202466E-04	0.194568E-01	0.292828E-01
8.00	-.115818E+00	-.624753E-01	-.301933E-01	-.255829E-02	0.162267E-01	0.267527E-01
8.20	-.116192E+00	-.649102E-01	-.318562E-01	-.493525E-02	0.131358E-01	0.243268E-01
8.40	-.116486E+00	-.672139E-01	-.334379E-01	-.716186E-02	0.101781E-01	0.219961E-01
8.60	-.116708E+00	-.693920E-01	-.349450E-01	-.924804E-02	0.734996E-02	0.197500E-01
8.80	-.116868E+00	-.714500E-01	-.363880E-01	-.112030E-01	0.464601E-02	0.175820E-01
9.00	-.116974E+00	-.733922E-01	-.377722E-01	-.130372E-01	0.206078E-02	0.154868E-01
9.20	-.117033E+00	-.752247E-01	-.391027E-01	-.147577E-01	-.409657E-03	0.134603E-01
9.40	-.117049E+00	-.769517E-01	-.403847E-01	-.163727E-01	-.277069E-02	0.115013E-01
9.60	-.117030E+00	-.785792E-01	-.416212E-01	-.178902E-01	-.502821E-02	0.960479E-02
9.80	-.116980E+00	-.801116E-01	-.428156E-01	-.193186E-01	-.718464E-02	0.777136E-02
10.00	-.116902E+00	-.815550E-01	-.439690E-01	-.206630E-01	-.924502E-02	0.599798E-02
10.20	-.116802E+00	-.829120E-01	-.450850E-01	-.219300E-01	-.112140E-01	0.428400E-02
10.40	-.116682E+00	-.841879E-01	-.461629E-01	-.231259E-01	-.130949E-01	0.262709E-02
10.60	-.116545E+00	-.853868E-01	-.472068E-01	-.242568E-01	-.148918E-01	0.102625E-02
10.80	-.116394E+00	-.865122E-01	-.482152E-01	-.253272E-01	-.166082E-01	-.519250E-03
11.00	-.116233E+00	-.875689E-01	-.491919E-01	-.263419E-01	-.182469E-01	-.201287E-02
11.20	-.116061E+00	-.885608E-01	-.501348E-01	-.273048E-01	-.198108E-01	-.345385E-02
11.40	-.115882E+00	-.894892E-01	-.510462E-01	-.282222E-01	-.213032E-01	-.484619E-02
11.60	-.115699E+00	-.903597E-01	-.519267E-01	-.290967E-01	-.227267E-01	-.618971E-02
11.80	-.115510E+00	-.911740E-01	-.527780E-01	-.299340E-01	-.240830E-01	-.748703E-02
12.00	-.115320E+00	-.919356E-01	-.535986E-01	-.307356E-01	-.253736E-01	-.873962E-02
12.20	-.115128E+00	-.926468E-01	-.543898E-01	-.315078E-01	-.266008E-01	-.994977E-02
12.40	-.114936E+00	-.933106E-01	-.551526E-01	-.322546E-01	-.277646E-01	-.111176E-01
12.60	-.114745E+00	-.939293E-01	-.558873E-01	-.329803E-01	-.288663E-01	-.122463E-01
12.80	-.114557E+00	-.945045E-01	-.565945E-01	-.336885E-01	-.299055E-01	-.133365E-01
13.00	-.114370E+00	-.950402E-01	-.572752E-01	-.343852E-01	-.308802E-01	-.143892E-01
13.50	-.113922E+00	-.962154E-01	-.588604E-01	-.361044E-01	-.330374E-01	-.168714E-01
14.00	-.113509E+00	-.971808E-01	-.602868E-01	-.378258E-01	-.348028E-01	-.191538E-01
14.50	-.113134E+00	-.979629E-01	-.615619E-01	-.395379E-01	-.362359E-01	-.212529E-01
15.00	-.112803E+00	-.985885E-01	-.626935E-01	-.411935E-01	-.374225E-01	-.231865E-01
15.50	-.112516E+00	-.990783E-01	-.636863E-01	-.427593E-01	-.384343E-01	-.249673E-01

16.00	-.112275E+00	-.994548E-01	-.645498E-01	-.442188E-01	-.393158E-01	-.266098E-01
16.50	-.112075E+00	-.997360E-01	-.652900E-01	-.455700E-01	-.400960E-01	-.281240E-01
17.00	-.111912E+00	-.999407E-01	-.659137E-01	-.468157E-01	-.407957E-01	-.295237E-01
17.50	-.111782E+00	-.100084E+00	-.664292E-01	-.479622E-01	-.414282E-01	-.308162E-01
18.00	-.111680E+00	-.100180E+00	-.668448E-01	-.490168E-01	-.420038E-01	-.320128E-01
18.50	-.111600E+00	-.100240E+00	-.671672E-01	-.499862E-01	-.425322E-01	-.331212E-01
19.00	-.111540E+00	-.100273E+00	-.674049E-01	-.508769E-01	-.430179E-01	-.341509E-01
19.50	-.111494E+00	-.100287E+00	-.675650E-01	-.516950E-01	-.434680E-01	-.351070E-01
20.00	-.111459E+00	-.100288E+00	-.676549E-01	-.524459E-01	-.438869E-01	-.359969E-01
20.50	-.111435E+00	-.100280E+00	-.676826E-01	-.531356E-01	-.442786E-01	-.368266E-01
21.00	-.111416E+00	-.100266E+00	-.676543E-01	-.537673E-01	-.446453E-01	-.376023E-01
21.50	-.111403E+00	-.100250E+00	-.675773E-01	-.543463E-01	-.449903E-01	-.383263E-01
22.00	-.111394E+00	-.100233E+00	-.674581E-01	-.548751E-01	-.453161E-01	-.390041E-01
22.50	-.111389E+00	-.100216E+00	-.673020E-01	-.553580E-01	-.456240E-01	-.396380E-01
23.00	-.111386E+00	-.100199E+00	-.671151E-01	-.557981E-01	-.459161E-01	-.402331E-01
23.50	-.111384E+00	-.100183E+00	-.669023E-01	-.561983E-01	-.461933E-01	-.407903E-01
24.00	-.111385E+00	-.100170E+00	-.666689E-01	-.565599E-01	-.464549E-01	-.413119E-01
24.50	-.111386E+00	-.100157E+00	-.664195E-01	-.568855E-01	-.467045E-01	-.418005E-01
25.00	-.111388E+00	-.100146E+00	-.661591E-01	-.571781E-01	-.469411E-01	-.422581E-01
26.00	-.111393E+00	-.100127E+00	-.656184E-01	-.576714E-01	-.473774E-01	-.430864E-01
27.00	-.111400E+00	-.100115E+00	-.650770E-01	-.580530E-01	-.477660E-01	-.438100E-01
28.00	-.111408E+00	-.100106E+00	-.645589E-01	-.583329E-01	-.481109E-01	-.444389E-01
29.00	-.111415E+00	-.100100E+00	-.640797E-01	-.585217E-01	-.484117E-01	-.449827E-01
30.00	-.111423E+00	-.100097E+00	-.636536E-01	-.586296E-01	-.486726E-01	-.454526E-01
32.00	-.111437E+00	-.100094E+00	-.629800E-01	-.586360E-01	-.490810E-01	-.461950E-01
35.00	-.111456E+00	-.100099E+00	-.623667E-01	-.583067E-01	-.494727E-01	-.468957E-01
37.00	-.111467E+00	-.100103E+00	-.621357E-01	-.579997E-01	-.496397E-01	-.471357E-01
40.00	-.111480E+00	-.100111E+00	-.619222E-01	-.575632E-01	-.498312E-01	-.472372E-01
45.00	-.111498E+00	-.100124E+00	-.617296E-01	-.570256E-01	-.500996E-01	-.470766E-01
50.00	-.111510E+00	-.100134E+00	-.616225E-01	-.566875E-01	-.503125E-01	-.468975E-01
55.00	-.111519E+00	-.100143E+00	-.615556E-01	-.564705E-01	-.504675E-01	-.468005E-01
60.00	-.111526E+00	-.100149E+00	-.615126E-01	-.563266E-01	-.505776E-01	-.467546E-01
70.00	-.111534E+00	-.100158E+00	-.614625E-01	-.561584E-01	-.507154E-01	-.467225E-01
80.00	-.111540E+00	-.100164E-01	-.614625E-01	-.560721E-01	-.507911E-01	-.467161E-01
90.00	-.111543E+00	-.100168E+00	-.614220E-01	-.560239E-01	-.508349E-01	-.467180E-01
100.00	-.111546E+00	-.100170E+00	-.613700E-01	-.559950E-01	-.508620E-01	-.467200E-01

TAB. B.14: Orbitales II, ion NaK⁺

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	-883119E-01	-142569E-01	0.184461E-01	0.587051E-01	0.779131E-01	0.896231E-01
5.20	-.921845E-01	-.175985E-01	0.120365E-01	0.526435E-01	0.726475E-01	0.831645E-01
5.40	-.956225E-01	-.208165E-01	0.605950E-02	0.469215E-01	0.676905E-01	0.770335E-01
5.60	-.986604E-01	-.239234E-01	0.508612E-03	0.415336E-01	0.630246E-01	0.712156E-01
5.80	-.101335E+00	-.269380E-01	-.461799E-02	0.364690E-01	0.586300E-01	0.656950E-01
6.00	-.103680E+00	-.298848E-01	-.932676E-02	0.317152E-01	0.544812E-01	0.604592E-01
6.20	-.105728E+00	-.327848E-01	-.136218E-01	0.272582E-01	0.505482E-01	0.554992E-01
6.40	-.107509E+00	-.356579E-01	-.175099E-01	0.230811E-01	0.467921E-01	0.508181E-01
6.60	-.109051E+00	-.385187E-01	-.210077E-01	0.191683E-01	0.431533E-01	0.464413E-01
6.80	-.110380E+00	-.413699E-01	-.241349E-01	0.155051E-01	0.395501E-01	0.424191E-01
7.00	-.111518E+00	-.442042E-01	-.269252E-01	0.120758E-01	0.359028E-01	0.388018E-01
7.20	-.112488E+00	-.470085E-01	-.294155E-01	0.886548E-02	0.322115E-01	0.355625E-01
7.40	-.113307E+00	-.497649E-01	-.316449E-01	0.586108E-02	0.285441E-01	0.326101E-01
7.60	-.113993E+00	-.524554E-01	-.336544E-01	0.304758E-02	0.249556E-01	0.298696E-01
7.80	-.114563E+00	-.550662E-01	-.354772E-01	0.412807E-03	0.214738E-01	0.272918E-01
8.00	-.115029E+00	-.575846E-01	-.371436E-01	-.205359E-02	0.181114E-01	0.248494E-01
8.20	-.115404E+00	-.600032E-01	-.386802E-01	-.436518E-02	0.148708E-01	0.225228E-01
8.40	-.115700E+00	-.623168E-01	-.401068E-01	-.653082E-02	0.117542E-01	0.202982E-01
8.60	-.115926E+00	-.645237E-01	-.414397E-01	-.856269E-02	0.875831E-02	0.181663E-01
8.80	-.116091E+00	-.666224E-01	-.426934E-01	-.104684E-01	0.587964E-02	0.161186E-01
9.00	-.116204E+00	-.686158E-01	-.438778E-01	-.122568E-01	0.311618E-02	0.141502E-01
9.20	-.116270E+00	-.705046E-01	-.450036E-01	-.139386E-01	0.464445E-03	0.122544E-01
9.40	-.116297E+00	-.722926E-01	-.460756E-01	-.155206E-01	-.208056E-02	0.104274E-01
9.60	-.116288E+00	-.739814E-01	-.471004E-01	-.170094E-01	-.452039E-02	0.866661E-02
9.80	-.116251E+00	-.755752E-01	-.480812E-01	-.184132E-01	-.686021E-02	0.696679E-02
10.00	-.116188E+00	-.770788E-01	-.490238E-01	-.197378E-01	-.910380E-02	0.532620E-02
10.20	-.116103E+00	-.784946E-01	-.499296E-01	-.209896E-01	-.112526E-01	0.374239E-02
10.40	-.115999E+00	-.798268E-01	-.508008E-01	-.221748E-01	-.133118E-01	0.221123E-02
10.60	-.115880E+00	-.810801E-01	-.516401E-01	-.232981E-01	-.152831E-01	0.732869E-03
10.80	-.115747E+00	-.822563E-01	-.524493E-01	-.243653E-01	-.171703E-01	-.696286E-03
11.00	-.115605E+00	-.833596E-01	-.532286E-01	-.253816E-01	-.189756E-01	-.207658E-02
11.20	-.115452E+00	-.843951E-01	-.539801E-01	-.263521E-01	-.206991E-01	-.341213E-02
11.40	-.115294E+00	-.853639E-01	-.547039E-01	-.272829E-01	-.223429E-01	-.470285E-02
11.60	-.115129E+00	-.862695E-01	-.554025E-01	-.281795E-01	-.239065E-01	-.595049E-02
11.80	-.114963E+00	-.871156E-01	-.560756E-01	-.290516E-01	-.253866E-01	-.715758E-02
12.00	-.114793E+00	-.879055E-01	-.567235E-01	-.299085E-01	-.267785E-01	-.832452E-02
12.20	-.114621E+00	-.886416E-01	-.573486E-01	-.307666E-01	-.280726E-01	-.945357E-02
12.40	-.114450E+00	-.893258E-01	-.579498E-01	-.316438E-01	-.292538E-01	-.105438E-01
12.60	-.114280E+00	-.899613E-01	-.585293E-01	-.325593E-01	-.303083E-01	-.115993E-01
12.80	-.114112E+00	-.905507E-01	-.590867E-01	-.335197E-01	-.312327E-01	-.126197E-01
13.00	-.113947E+00	-.910960E-01	-.596220E-01	-.345150E-01	-.320420E-01	-.136060E-01
13.50	-.113552E+00	-.922815E-01	-.608715E-01	-.370275E-01	-.337145E-01	-.159325E-01
14.00	-.113187E+00	-.932389E-01	-.619969E-01	-.394159E-01	-.350839E-01	-.180709E-01
14.50	-.112860E+00	-.939993E-01	-.630053E-01	-.416113E-01	-.362683E-01	-.200393E-01
15.00	-.112575E+00	-.945892E-01	-.639022E-01	-.436072E-01	-.373142E-01	-.218522E-01

15.50	-.112330E+00	-.950362E-01	-.646912E-01	-.454142E-01	-.382492E-01	-.235242E-01
16.00	-.112126E+00	-.953646E-01	-.653786E-01	-.470466E-01	-.390916E-01	-.250696E-01
16.50	-.111957E+00	-.955955E-01	-.659695E-01	-.485205E-01	-.398545E-01	-.265025E-01
17.00	-.111822E+00	-.957481E-01	-.664661E-01	-.498481E-01	-.405501E-01	-.278331E-01
17.50	-.111714E+00	-.958420E-01	-.668770E-01	-.510460E-01	-.411870E-01	-.290750E-01
18.00	-.111629E+00	-.958905E-01	-.672055E-01	-.521265E-01	-.417735E-01	-.302365E-01
18.50	-.111564E+00	-.959059E-01	-.674589E-01	-.530989E-01	-.423149E-01	-.313259E-01
19.00	-.111514E+00	-.958989E-01	-.676429E-01	-.539759E-01	-.428169E-01	-.323509E-01
19.50	-.111476E+00	-.958765E-01	-.677635E-01	-.547645E-01	-.432855E-01	-.333175E-01
20.00	-.111447E+00	-.958441E-01	-.678291E-01	-.554731E-01	-.437221E-01	-.342301E-01
20.50	-.111427E+00	-.958076E-01	-.678456E-01	-.561086E-01	-.441316E-01	-.350936E-01
21.00	-.111411E+00	-.957684E-01	-.678194E-01	-.566774E-01	-.445174E-01	-.359104E-01
21.50	-.111401E+00	-.957304E-01	-.677574E-01	-.571854E-01	-.448794E-01	-.366824E-01
22.00	-.111394E+00	-.956934E-01	-.676664E-01	-.576354E-01	-.452204E-01	-.374124E-01
22.50	-.111390E+00	-.956586E-01	-.675516E-01	-.580326E-01	-.455426E-01	-.381016E-01
23.00	-.111388E+00	-.956281E-01	-.674191E-01	-.583801E-01	-.458461E-01	-.387511E-01
23.50	-.111387E+00	-.955996E-01	-.672736E-01	-.586816E-01	-.461336E-01	-.393626E-01
24.00	-.111388E+00	-.955738E-01	-.671218E-01	-.589378E-01	-.464048E-01	-.399388E-01
24.50	-.111389E+00	-.955519E-01	-.669669E-01	-.591529E-01	-.466609E-01	-.404789E-01
25.00	-.111391E+00	-.955321E-01	-.668131E-01	-.593291E-01	-.469031E-01	-.409851E-01
26.00	-.111397E+00	-.954997E-01	-.665207E-01	-.595717E-01	-.473447E-01	-.419007E-01
27.00	-.111403E+00	-.954746E-01	-.662646E-01	-.596856E-01	-.477346E-01	-.426986E-01
28.00	-.111410E+00	-.954571E-01	-.660531E-01	-.596901E-01	-.480751E-01	-.433861E-01
29.00	-.111417E+00	-.954435E-01	-.658865E-01	-.596095E-01	-.483695E-01	-.439755E-01
30.00	-.111425E+00	-.954330E-01	-.657610E-01	-.594670E-01	-.486220E-01	-.444750E-01
32.00	-.111439E+00	-.954209E-01	-.655999E-01	-.590739E-01	-.490149E-01	-.452349E-01
35.00	-.111457E+00	-.954140E-01	-.654870E-01	-.584260E-01	-.494010E-01	-.458710E-01
37.00	-.111468E+00	-.954137E-01	-.654507E-01	-.580397E-01	-.495787E-01	-.460277E-01
40.00	-.111481E+00	-.954160E-01	-.654190E-01	-.575650E-01	-.497970E-01	-.459980E-01
45.00	-.111498E+00	-.954160E-01	-.653920E-01	-.570230E-01	-.500910E-01	-.456870E-01
50.00	-.111510E+00	-.954160E-01	-.653748E-01	-.566868E-01	-.503108E-01	-.454308E-01
55.00	-.111519E+00	-.954160E-01	-.653637E-01	-.564707E-01	-.504667E-01	-.452867E-01
60.00	-.111526E+00	-.954160E-01	-.653547E-01	-.563267E-01	-.505777E-01	-.452057E-01
70.00	-.111534E+00	-.954160E-01	-.653424E-01	-.561585E-01	-.507155E-01	-.451244E-01
80.00	-.111540E+00	-.954160E-01	-.653361E-01	-.560721E-01	-.507911E-01	-.450891E-01
90.00	-.111543E+00	-.954160E-01	-.653309E-01	-.560240E-01	-.508350E-01	-.450739E-01
100.00	-.111546E+00	-.954160E-01	-.653280E-01	-.559951E-01	-.508621E-01	-.450670E-01

TAB. B.15: Orbitales II, ion NaRb⁺

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	-.972712E-01	-.256042E-01	0.154458E-01	0.537728E-01	0.722928E-01	0.867248E-01
5.20	-.100251E+00	-.281166E-01	0.924536E-02	0.484974E-01	0.677944E-01	0.810134E-01
5.40	-.102908E+00	-.305590E-01	0.330197E-02	0.434280E-01	0.634540E-01	0.754950E-01
5.60	-.105261E+00	-.329087E-01	-.237568E-02	0.385873E-01	0.592903E-01	0.701713E-01
5.80	-.107330E+00	-.351519E-01	-.778891E-02	0.339841E-01	0.553071E-01	0.650411E-01
6.00	-.109139E+00	-.372846E-01	-.129406E-01	0.296214E-01	0.515064E-01	0.600944E-01
6.20	-.110709E+00	-.393048E-01	-.178378E-01	0.254982E-01	0.478802E-01	0.553242E-01
6.40	-.112062E+00	-.412124E-01	-.224874E-01	0.216076E-01	0.444176E-01	0.507246E-01
6.60	-.113221E+00	-.430139E-01	-.268989E-01	0.179431E-01	0.411021E-01	0.462971E-01
6.80	-.114204E+00	-.447113E-01	-.310803E-01	0.144957E-01	0.379037E-01	0.420567E-01
7.00	-.115030E+00	-.463096E-01	-.350396E-01	0.112544E-01	0.347704E-01	0.380424E-01
7.20	-.115714E+00	-.478173E-01	-.387863E-01	0.821068E-02	0.316027E-01	0.343427E-01
7.40	-.116274E+00	-.492381E-01	-.423271E-01	0.535288E-02	0.282869E-01	0.310619E-01
7.60	-.116722E+00	-.505812E-01	-.456682E-01	0.267175E-02	0.248288E-01	0.281848E-01
7.80	-.117072E+00	-.518616E-01	-.488096E-01	0.156405E-03	0.213394E-01	0.255914E-01
8.00	-.117335E+00	-.531316E-01	-.517086E-01	-.220361E-02	0.179014E-01	0.231924E-01
8.20	-.117520E+00	-.549203E-01	-.538533E-01	-.441728E-02	0.145517E-01	0.209377E-01
8.40	-.117639E+00	-.574261E-01	-.550561E-01	-.649513E-02	0.113079E-01	0.188039E-01
8.60	-.117699E+00	-.598942E-01	-.560832E-01	-.844524E-02	0.817576E-02	0.167768E-01
8.80	-.117709E+00	-.622362E-01	-.570362E-01	-.102762E-01	0.515677E-02	0.148428E-01
9.00	-.117675E+00	-.644443E-01	-.579323E-01	-.119973E-01	0.225070E-02	0.129967E-01
9.20	-.117604E+00	-.665243E-01	-.587793E-01	-.136163E-01	-.545264E-03	0.112317E-01
9.40	-.117503E+00	-.684785E-01	-.595805E-01	-.151405E-01	-.323353E-02	0.954147E-02
9.60	-.117374E+00	-.703162E-01	-.603412E-01	-.165772E-01	-.581817E-02	0.792083E-02
9.80	-.117224E+00	-.720409E-01	-.610629E-01	-.179319E-01	-.830091E-02	0.636609E-02
10.00	-.117056E+00	-.736592E-01	-.617492E-01	-.192122E-01	-.106862E-01	0.487382E-02
10.20	-.116874E+00	-.751761E-01	-.624031E-01	-.204221E-01	-.129781E-01	0.343991E-02
10.40	-.116682E+00	-.765975E-01	-.630265E-01	-.215675E-01	-.151805E-01	0.206049E-02
10.60	-.116481E+00	-.779291E-01	-.636201E-01	-.226521E-01	-.172951E-01	0.732943E-03
10.80	-.116274E+00	-.791741E-01	-.641881E-01	-.236821E-01	-.193271E-01	-.545101E-03
11.00	-.116064E+00	-.803378E-01	-.647298E-01	-.246598E-01	-.212788E-01	-.177781E-02
11.20	-.115851E+00	-.814241E-01	-.652471E-01	-.255881E-01	-.231541E-01	-.296714E-02
11.40	-.115638E+00	-.824379E-01	-.657429E-01	-.264729E-01	-.249559E-01	-.411586E-02
11.60	-.115426E+00	-.833816E-01	-.662166E-01	-.273146E-01	-.266856E-01	-.522560E-02
11.80	-.115215E+00	-.842598E-01	-.666698E-01	-.283478E-01	-.281168E-01	-.629878E-02
12.00	-.115007E+00	-.850767E-01	-.671047E-01	-.299447E-01	-.288817E-01	-.733671E-02
12.20	-.114803E+00	-.858335E-01	-.675205E-01	-.314785E-01	-.296115E-01	-.834155E-02
12.40	-.114602E+00	-.865353E-01	-.679183E-01	-.329523E-01	-.303083E-01	-.931532E-02
12.60	-.114407E+00	-.871829E-01	-.682999E-01	-.343669E-01	-.309749E-01	-.102589E-01
12.80	-.114218E+00	-.877812E-01	-.686662E-01	-.357262E-01	-.316112E-01	-.111742E-01
13.00	-.114034E+00	-.883308E-01	-.690158E-01	-.370308E-01	-.322198E-01	-.120608E-01
13.50	-.113604E+00	-.895137E-01	-.698297E-01	-.400687E-01	-.336307E-01	-.141617E-01
14.00	-.113219E+00	-.904499E-01	-.705599E-01	-.428079E-01	-.348969E-01	-.161099E-01
14.50	-.112879E+00	-.911732E-01	-.712162E-01	-.452732E-01	-.360382E-01	-.179142E-01
15.00	-.112588E+00	-.917147E-01	-.718047E-01	-.474867E-01	-.370697E-01	-.195867E-01

15.50	-.112341E+00	-.921024E-01	-.723324E-01	-.494694E-01	-.380044E-01	-.211384E-01
16.00	-.112136E+00	-.923607E-01	-.728027E-01	-.512387E-01	-.388547E-01	-.225787E-01
16.50	-.111969E+00	-.925163E-01	-.732223E-01	-.528123E-01	-.396313E-01	-.239223E-01
17.00	-.111834E+00	-.925885E-01	-.735955E-01	-.542045E-01	-.403435E-01	-.251805E-01
17.50	-.111727E+00	-.925955E-01	-.739255E-01	-.554315E-01	-.409975E-01	-.263665E-01
18.50	-.111578E+00	-.924801E-01	-.744741E-01	-.574391E-01	-.421631E-01	-.285761E-01
19.00	-.111528E+00	-.923815E-01	-.746995E-01	-.582455E-01	-.426835E-01	-.296225E-01
19.50	-.111489E+00	-.922679E-01	-.748979E-01	-.589329E-01	-.431689E-01	-.306429E-01
20.00	-.111461E+00	-.921466E-01	-.750716E-01	-.595136E-01	-.436236E-01	-.316396E-01
20.50	-.111438E+00	-.920233E-01	-.752233E-01	-.599963E-01	-.440503E-01	-.326123E-01
21.00	-.111424E+00	-.919015E-01	-.753575E-01	-.603895E-01	-.444505E-01	-.335585E-01
21.50	-.111412E+00	-.917832E-01	-.754762E-01	-.607022E-01	-.448272E-01	-.344722E-01
22.00	-.111404E+00	-.916710E-01	-.755810E-01	-.609430E-01	-.451820E-01	-.353490E-01
22.50	-.111399E+00	-.915661E-01	-.756741E-01	-.611191E-01	-.455171E-01	-.361851E-01
23.00	-.111397E+00	-.914686E-01	-.757586E-01	-.612366E-01	-.458336E-01	-.369776E-01
23.50	-.111395E+00	-.913793E-01	-.758353E-01	-.613043E-01	-.461313E-01	-.377253E-01
24.00	-.111395E+00	-.912967E-01	-.759047E-01	-.613277E-01	-.464127E-01	-.384287E-01
24.50	-.111396E+00	-.912221E-01	-.759681E-01	-.613121E-01	-.466781E-01	-.390861E-01
25.00	-.111398E+00	-.911537E-01	-.760267E-01	-.612647E-01	-.469277E-01	-.396997E-01
26.00	-.111402E+00	-.910371E-01	-.761311E-01	-.610921E-01	-.473831E-01	-.408001E-01
27.00	-.111408E+00	-.909412E-01	-.762212E-01	-.608452E-01	-.477812E-01	-.417432E-01
28.00	-.111414E+00	-.908618E-01	-.762978E-01	-.605518E-01	-.481268E-01	-.425448E-01
29.00	-.111421E+00	-.907977E-01	-.763647E-01	-.602357E-01	-.484227E-01	-.432177E-01
30.00	-.111428E+00	-.907436E-01	-.764226E-01	-.599126E-01	-.486716E-01	-.437766E-01
32.00	-.111441E+00	-.906627E-01	-.765147E-01	-.592887E-01	-.490507E-01	-.445927E-01
35.00	-.111459E+00	-.905849E-01	-.766109E-01	-.584899E-01	-.494129E-01	-.452029E-01
37.00	-.111469E+00	-.905513E-01	-.766563E-01	-.580653E-01	-.495823E-01	-.495823E-01
40.00	-.111482E+00	-.905182E-01	-.767032E-01	-.575712E-01	-.497972E-01	-.497972E-01
45.00	-.111499E+00	-.904878E-01	-.767507E-01	-.570247E-01	-.500917E-01	-.446077E-01
50.00	-.111510E+00	-.904760E-01	-.767750E-01	-.566873E-01	-.503113E-01	-.441413E-01
55.00	-.111519E+00	-.904722E-01	-.767902E-01	-.564711E-01	-.504671E-01	-.438291E-01
60.00	-.111526E+00	-.904704E-01	-.767984E-03	-.563270E-01	-.505780E-01	-.436200E-01
70.00	-.111535E+00	-.904713E-01	-.768063E-03	-.561586E-01	-.507156E-01	-.433706E-01
80.00	-.111540E+00	-.904740E-01	-.768100E-01	-.560722E-01	-.507912E-01	-.432400E-01
90.00	-.111543E+00	-.904759E-01	-.768109E-01	-.560240E-01	-.508350E-01	-.431699E-01
100.00	-.111546E+00	-.904780E-01	-.768110E-01	-.559951E-01	-.508621E-01	-.431290E-01

TAB. B.16: Orbitales II, ion NaCs⁺

R(ua)	(1) ² Π	(2) ² Π	(3) ² Π	(4) ² Π	(5) ² Π	(6) ² Π
5.00	0.111425E-02	0.544122E-01	0.867762E-01	0.150854E+00	0.160039E+00	0.167570E+00
5.20	-.330518E-01	0.206432E-01	0.510032E-01	0.114456E+00	0.123910E+00	0.131040E+00
5.40	-.562177E-01	-.199772E-02	0.262903E-01	0.891053E-01	0.989293E-01	0.105563E+00
5.60	-.720513E-01	-.172803E-01	0.894469E-02	0.710957E-01	0.813747E-01	0.874277E-01
5.80	-.829772E-01	-.277002E-01	-.348017E-02	0.579838E-01	0.687788E-01	0.741608E-01
6.00	-.906001E-01	-.349041E-01	-.126031E-01	0.481509E-01	0.595049E-01	0.641009E-01
6.20	-.959839E-01	-.399799E-01	-.194959E-01	0.405331E-01	0.524631E-01	0.560891E-01
6.40	-.998401E-01	-.436441E-01	-.248711E-01	0.344209E-01	0.469009E-01	0.492549E-01
6.60	-.102640E+00	-.463684E-01	-.292034E-01	0.293446E-01	0.419876E-01	0.432026E-01
6.80	-.104701E+00	-.484660E-01	-.328080E-01	0.249860E-01	0.359380E-01	0.390120E-01
7.00	-.106237E+00	-.501425E-01	-.358975E-01	0.211165E-01	0.296015E-01	0.357345E-01
7.20	-.107392E+00	-.515317E-01	-.386147E-01	0.175373E-01	0.235783E-01	0.328703E-01
7.40	-.108265E+00	-.527242E-01	-.410572E-01	0.139688E-01	0.181748E-01	0.302918E-01
7.60	-.108924E+00	-.537775E-01	-.432915E-01	0.993448E-02	0.138325E-01	0.279255E-01
7.80	-.109417E+00	-.547333E-01	-.453663E-01	0.537472E-02	0.105657E-01	0.257237E-01
8.00	-.109778E+00	-.556151E-01	-.473131E-01	0.763902E-03	0.785890E-02	0.236519E-01
8.20	-.110034E+00	-.564409E-01	-.491579E-01	-.365986E-02	0.543914E-02	0.216871E-01
8.40	-.110201E+00	-.572226E-01	-.509176E-01	-.782865E-02	0.320635E-02	0.198124E-01
8.60	-.110295E+00	-.579687E-01	-.526077E-01	-.117297E-01	0.111934E-02	0.180153E-01
8.80	-.110327E+00	-.586845E-01	-.542375E-01	-.153645E-01	-.844473E-03	0.162845E-01
9.00	-.110307E+00	-.593738E-01	-.558138E-01	-.187408E-01	-.270085E-02	0.146142E-01
9.20	-.110242E+00	-.600413E-01	-.573433E-01	-.218713E-01	-.446029E-02	0.129987E-01
9.40	-.110139E+00	-.606924E-01	-.588254E-01	-.247684E-01	-.613041E-02	0.114356E-01
9.60	-.110002E+00	-.613432E-01	-.602482E-01	-.274462E-01	-.771915E-02	0.992385E-02
9.80	-.109837E+00	-.620950E-01	-.615130E-01	-.299190E-01	-.923297E-02	0.846203E-02
10.00	-.109647E+00	-.632399E-01	-.623299E-01	-.322019E-01	-.106759E-01	0.704809E-02
10.20	-.109435E+00	-.645447E-01	-.629327E-01	-.343077E-01	-.120537E-01	0.568328E-02
10.40	-.109204E+00	-.658448E-01	-.634848E-01	-.362528E-01	-.133708E-01	0.436415E-02
10.60	-.108956E+00	-.671175E-01	-.640085E-01	-.380485E-01	-.146305E-01	0.309046E-02
10.80	-.108694E+00	-.683558E-01	-.645108E-01	-.397088E-01	-.158368E-01	0.186018E-02
11.00	-.108419E+00	-.695575E-01	-.649925E-01	-.412455E-01	-.169925E-01	0.671464E-03
11.20	-.108132E+00	-.707194E-01	-.654564E-01	-.426694E-01	-.181014E-01	-.477352E-03
11.40	-.107836E+00	-.718418E-01	-.659008E-01	-.439908E-01	-.191658E-01	-.158879E-02
11.60	-.107531E+00	-.729232E-01	-.663292E-01	-.452202E-01	-.201882E-01	-.266422E-02
11.80	-.107220E+00	-.739629E-01	-.667399E-01	-.463649E-01	-.211719E-01	-.370489E-02
12.00	-.106902E+00	-.749599E-01	-.671339E-01	-.474329E-01	-.221179E-01	-.471390E-02
12.20	-.106578E+00	-.759163E-01	-.675123E-01	-.484303E-01	-.230293E-01	-.569126E-02
12.40	-.106252E+00	-.768308E-01	-.678758E-01	-.493648E-01	-.239068E-01	-.663885E-02
12.60	-.105921E+00	-.777035E-01	-.682245E-01	-.502405E-01	-.247535E-01	-.755845E-02
12.80	-.105589E+00	-.785368E-01	-.685588E-01	-.510628E-01	-.255718E-01	-.845075E-02
13.00	-.105254E+00	-.793314E-01	-.688804E-01	-.518374E-01	-.263614E-01	-.931635E-02
13.50	-.104418E+00	-.811504E-01	-.696264E-01	-.535824E-01	-.282244E-01	-.113754E-01
14.00	-.103592E+00	-.827489E-01	-.702999E-01	-.550979E-01	-.299439E-01	-.132919E-01
14.50	-.102785E+00	-.841449E-01	-.709079E-01	-.564219E-01	-.315399E-01	-.150799E-01
15.00	-.102007E+00	-.853598E-01	-.714578E-01	-.575858E-01	-.330268E-01	-.167478E-01

15.50	-.101265E+00	-.864102E-01	-.719552E-01	-.586122E-01	-.344162E-01	-.183062E-01
16.00	-.100566E+00	-.873159E-01	-.724059E-01	-.595209E-01	-.357189E-01	-.197659E-01
16.50	-.999133E-01	-.880913E-01	-.728153E-01	-.603263E-01	-.369423E-01	-.211333E-01
17.00	-.993105E-01	-.887505E-01	-.731865E-01	-.610405E-01	-.380915E-01	-.224195E-01
17.50	-.987595E-01	-.893075E-01	-.735235E-01	-.616735E-01	-.391715E-01	-.236335E-01
18.00	-.982605E-01	-.897715E-01	-.738295E-01	-.622335E-01	-.401845E-01	-.247825E-01
18.50	-.978135E-01	-.901535E-01	-.741075E-01	-.627285E-01	-.411325E-01	-.258735E-01
19.00	-.974190E-01	-.904620E-01	-.743580E-01	-.631630E-01	-.420170E-01	-.269130E-01
19.50	-.970740E-01	-.907050E-01	-.745840E-01	-.635440E-01	-.428400E-01	-.279020E-01
20.00	-.967767E-01	-.908897E-01	-.747887E-01	-.638757E-01	-.436017E-01	-.288447E-01
20.50	-.965248E-01	-.910258E-01	-.749718E-01	-.641618E-01	-.443018E-01	-.297408E-01
21.00	-.963138E-01	-.911178E-01	-.751368E-01	-.644078E-01	-.449438E-01	-.305918E-01
21.50	-.961404E-01	-.911744E-01	-.752844E-01	-.646174E-01	-.455284E-01	-.313994E-01
22.00	-.959983E-01	-.912023E-01	-.754163E-01	-.647943E-01	-.460553E-01	-.321663E-01
22.50	-.958839E-01	-.912079E-01	-.755349E-01	-.649409E-01	-.465289E-01	-.328929E-01
23.00	-.957920E-01	-.911960E-01	-.756420E-01	-.650630E-01	-.469500E-01	-.335830E-01
23.50	-.957193E-01	-.911723E-01	-.757373E-01	-.651613E-01	-.473213E-01	-.342363E-01
24.00	-.956616E-01	-.911406E-01	-.758236E-01	-.652416E-01	-.476456E-01	-.348566E-01
24.50	-.956149E-01	-.911029E-01	-.759019E-01	-.653049E-01	-.479249E-01	-.354459E-01
25.00	-.955776E-01	-.910636E-01	-.759716E-01	-.653546E-01	-.481626E-01	-.360046E-01
26.00	-.955244E-01	-.909844E-01	-.760944E-01	-.654214E-01	-.485244E-01	-.370374E-01
27.00	-.954891E-01	-.909091E-01	-.761961E-01	-.654581E-01	-.487531E-01	-.379681E-01
28.00	-.954657E-01	-.908417E-01	-.762817E-01	-.654757E-01	-.488727E-01	-.388057E-01
29.00	-.954496E-01	-.907846E-01	-.763536E-01	-.654806E-01	-.489016E-01	-.395576E-01
30.00	-.954388E-01	-.907348E-01	-.764148E-01	-.654798E-01	-.488588E-01	-.402298E-01
32.00	-.954247E-01	-.906587E-01	-.765117E-01	-.654687E-01	-.486157E-01	-.413607E-01
35.00	-.954177E-01	-.905837E-01	-.766107E-01	-.654457E-01	-.480127E-01	-.425977E-01
37.00	-.954177E-01	-.905515E-01	-.766565E-01	-.654325E-01	-.475415E-01	-.431725E-01
40.00	-.954177E-01	-.905188E-01	-.767038E-01	-.654148E-01	-.468398E-01	-.437408E-01
45.00	-.954177E-01	-.904908E-01	-.767518E-01	-.653928E-01	-.459278E-01	-.441138E-01
50.00	-.954177E-01	-.904780E-01	-.767770E-01	-.653928E-01	-.454710E-01	-.440320E-01
55.00	-.954177E-01	-.904735E-01	-.767915E-01	-.653928E-01	-.452915E-01	-.438105E-01
60.00	-.954177E-01	-.904713E-01	-.767993E-01	-.653928E-01	-.452063E-01	-.436173E-01
70.00	-.954177E-01	-.904718E-01	-.768068E-01	-.653928E-01	-.452063E-01	-.433708E-01
80.00	-.954177E-01	-.904743E-01	-.768103E-01	-.653928E-01	-.452063E-01	-.432403E-01
90.00	-.954177E-01	-.904761E-01	-.768111E-01	-.653928E-01	-.452063E-01	-.431701E-01
100.00	-.954177E-01	-.904781E-01	-.768111E-01	-.653928E-01	-.452063E-01	-.431291E-01

TAB. B.17: Orbitales II, ion RbCs⁺

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	0.151915E-01	0.746385E-01	0.915445E-01	0.120069E+00	0.122157E+00	0.130058E+00
5.20	0.967806E-02	0.672331E-01	0.849821E-01	0.112666E+00	0.114427E+00	0.123009E+00
5.40	0.467935E-02	0.603853E-01	0.789553E-01	0.105818E+00	0.107251E+00	0.116498E+00
5.60	0.136442E-03	0.540394E-01	0.734054E-01	0.994694E-01	0.100575E+00	0.110468E+00
5.80	-.400333E-02	0.481467E-01	0.682837E-01	0.935707E-01	0.943467E-01	0.104870E+00
6.00	-.778352E-02	0.426635E-01	0.635455E-01	0.880805E-01	0.885245E-01	0.996595E-01
6.20	-.112444E-01	0.375526E-01	0.591506E-01	0.829556E-01	0.830726E-01	0.947986E-01
6.40	-.144190E-01	0.327810E-01	0.550650E-01	0.779430E-01	0.781800E-01	0.902560E-01
6.60	-.173371E-01	0.283189E-01	0.512599E-01	0.731269E-01	0.737009E-01	0.860019E-01
6.80	-.200267E-01	0.241403E-01	0.477083E-01	0.685873E-01	0.695053E-01	0.820103E-01
7.00	-.225095E-01	0.202215E-01	0.443865E-01	0.643015E-01	0.655665E-01	0.782595E-01
7.20	-.248050E-01	0.165420E-01	0.412730E-01	0.602500E-01	0.618640E-01	0.747290E-01
7.40	-.269335E-01	0.130835E-01	0.383505E-01	0.564145E-01	0.583805E-01	0.714015E-01
7.60	-.289084E-01	0.982759E-02	0.356016E-01	0.527766E-01	0.550966E-01	0.682606E-01
7.80	-.307445E-01	0.676054E-02	0.330115E-01	0.493235E-01	0.519985E-01	0.652915E-01
8.00	-.324530E-01	0.386803E-02	0.305680E-01	0.460410E-01	0.490720E-01	0.624830E-01
8.20	-.340460E-01	0.113703E-02	0.282590E-01	0.429170E-01	0.463040E-01	0.598220E-01
8.40	-.355324E-01	-.144238E-02	0.260736E-01	0.399406E-01	0.436846E-01	0.572986E-01
8.60	-.369201E-01	-.388211E-02	0.240019E-01	0.371019E-01	0.412019E-01	0.549029E-01
8.80	-.382182E-01	-.619119E-02	0.220358E-01	0.343928E-01	0.388468E-01	0.526258E-01
9.00	-.394319E-01	-.837886E-02	0.201681E-01	0.318051E-01	0.366101E-01	0.504601E-01
9.20	-.405686E-01	-.104516E-01	0.183914E-01	0.293304E-01	0.344854E-01	0.483974E-01
9.40	-.416324E-01	-.124174E-01	0.166986E-01	0.269626E-01	0.324646E-01	0.464326E-01
9.60	-.426296E-01	-.142836E-01	0.150844E-01	0.246964E-01	0.305404E-01	0.445574E-01
9.80	-.435648E-01	-.160558E-01	0.135432E-01	0.225252E-01	0.287072E-01	0.427672E-01
10.00	-.444406E-01	-.177406E-01	0.120694E-01	0.204444E-01	0.269594E-01	0.410564E-01
10.20	-.452628E-01	-.193418E-01	0.106592E-01	0.184492E-01	0.252922E-01	0.394202E-01
10.40	-.460331E-01	-.208661E-01	0.930891E-02	0.165369E-01	0.236999E-01	0.378539E-01
10.60	-.467556E-01	-.223166E-01	0.801243E-02	0.147024E-01	0.221784E-01	0.363534E-01
10.80	-.474332E-01	-.236982E-01	0.676681E-02	0.129428E-01	0.207238E-01	0.349138E-01
11.00	-.480696E-01	-.250136E-01	0.556841E-02	0.112554E-01	0.193324E-01	0.335324E-01
11.20	-.486651E-01	-.262691E-01	0.441287E-02	0.963887E-02	0.179999E-01	0.322049E-01
11.40	-.492240E-01	-.274660E-01	0.329704E-02	0.809004E-02	0.167230E-01	0.309280E-01
11.60	-.497470E-01	-.286080E-01	0.221601E-02	0.660901E-02	0.155000E-01	0.296970E-01
11.80	-.502379E-01	-.296979E-01	0.116506E-02	0.519406E-02	0.143271E-01	0.285091E-01
12.00	-.506974E-01	-.307394E-01	0.140629E-03	0.384563E-02	0.132016E-01	0.273606E-01
12.20	-.511287E-01	-.317337E-01	-.862652E-03	0.256435E-02	0.121213E-01	0.262463E-01
12.40	-.515310E-01	-.326840E-01	-.185001E-02	0.135199E-02	0.110840E-01	0.251620E-01
12.60	-.519075E-01	-.335925E-01	-.282553E-02	0.208472E-03	0.100865E-01	0.241015E-01
12.80	-.522602E-01	-.344612E-01	-.379316E-02	-.867164E-03	0.912784E-02	0.230588E-01
13.00	-.525898E-01	-.352928E-01	-.475475E-02	-.187375E-02	0.820525E-02	0.220272E-01
13.50	-.533198E-01	-.372188E-01	-.713183E-02	-.411383E-02	0.604817E-02	0.194682E-01
14.00	-.539319E-01	-.389469E-01	-.943991E-02	-.602491E-02	0.408209E-02	0.169401E-01
14.50	-.544419E-01	-.405009E-01	-.116369E-01	-.768793E-02	0.228407E-02	0.145031E-01
15.00	-.548631E-01	-.419001E-01	-.136961E-01	-.916008E-02	0.634924E-03	0.121979E-01

15.50	-.552072E-01	-.431622E-01	-.156112E-01	-.104792E-01	-.885168E-03	0.100398E-01
16.00	-.554841E-01	-.443001E-01	-.173831E-01	-.116691E-01	-.229207E-02	0.803193E-02
16.50	-.557040E-01	-.453300E-01	-.190170E-01	-.127490E-01	-.359996E-02	0.617004E-02
17.00	-.558736E-01	-.462606E-01	-.205206E-01	-.137306E-01	-.482558E-02	0.445342E-02
17.50	-.559995E-01	-.471035E-01	-.219015E-01	-.146245E-01	-.598048E-02	0.287752E-02
18.00	-.560901E-01	-.478671E-01	-.231681E-01	-.154421E-01	-.707710E-02	0.144090E-02
18.50	-.561500E-01	-.485590E-01	-.243270E-01	-.161900E-01	-.812702E-02	0.140983E-03
19.00	-.561830E-01	-.491870E-01	-.253870E-01	-.168760E-01	-.913798E-02	-.102698E-02
19.50	-.561951E-01	-.497571E-01	-.263541E-01	-.175061E-01	-.101191E-01	-.206406E-02
20.00	-.561897E-01	-.502747E-01	-.272357E-01	-.180867E-01	-.110737E-01	-.297871E-02
20.50	-.561699E-01	-.507459E-01	-.280369E-01	-.186229E-01	-.120039E-01	-.377687E-02
21.00	-.561390E-01	-.511730E-01	-.287640E-01	-.191200E-01	-.129120E-01	-.446801E-02
21.50	-.561002E-01	-.515612E-01	-.294222E-01	-.195812E-01	-.137952E-01	-.506015E-02
22.00	-.560560E-01	-.519140E-01	-.300160E-01	-.200130E-01	-.146530E-01	-.556699E-02
22.50	-.560079E-01	-.522339E-01	-.305519E-01	-.204169E-01	-.154839E-01	-.599687E-02
23.00	-.559579E-01	-.525259E-01	-.310329E-01	-.207979E-01	-.162839E-01	-.636086E-02
23.50	-.559078E-01	-.527908E-01	-.314628E-01	-.211568E-01	-.170528E-01	-.666876E-02
24.00	-.558571E-01	-.530311E-01	-.318451E-01	-.214971E-01	-.177891E-01	-.692912E-02
24.50	-.558083E-01	-.532493E-01	-.321853E-01	-.218213E-01	-.184923E-01	-.715232E-02
25.00	-.557625E-01	-.534485E-01	-.324845E-01	-.221295E-01	-.191605E-01	-.734352E-02
26.00	-.556788E-01	-.537918E-01	-.329738E-01	-.227088E-01	-.203948E-01	-.765876E-02
27.00	-.556091E-01	-.540741E-01	-.333361E-01	-.232451E-01	-.214911E-01	-.791708E-02
28.00	-.555537E-01	-.543057E-01	-.335907E-01	-.237467E-01	-.224527E-01	-.814968E-02
29.00	-.555131E-01	-.544951E-01	-.337541E-01	-.242241E-01	-.232821E-01	-.837208E-02
30.00	-.554864E-01	-.546494E-01	-.338434E-01	-.246874E-01	-.239794E-01	-.859340E-02
32.00	-.554686E-01	-.548746E-01	-.338556E-01	-.255846E-01	-.250126E-01	-.903257E-02
35.00	-.555040E-01	-.550700E-01	-.336490E-01	-.266410E-01	-.260440E-01	-.961597E-02
37.00	-.555453E-01	-.551473E-01	-.334673E-01	-.270913E-01	-.265743E-01	-.990329E-02
40.00	-.556082E-01	-.552282E-01	-.332232E-01	-.274842E-01	-.272282E-01	-.101652E-01
45.00	-.556899E-01	-.553169E-01	-.329349E-01	-.280519E-01	-.277449E-01	-.102939E-01
50.00	-.557481E-01	-.553781E-01	-.327251E-01	-.286501E-01	-.278331E-01	-.102671E-01
55.00	-.557882E-01	-.554203E-01	-.325482E-01	-.290972E-01	-.278742E-01	-.102052E-01
60.00	-.558184E-01	-.554514E-01	-.323934E-01	-.294384E-01	-.276134E-01	-.101404E-01
70.00	-.558573E-01	-.554914E-01	-.321463E-01	-.299163E-01	-.279254E-01	-.100223E-01
80.00	-.558810E-01	-.555161E-01	-.319670E-01	-.302250E-01	-.279439E-01	-.992901E-02
90.00	-.558959E-01	-.555309E-01	-.318349E-01	-.304349E-01	-.279371E-01	-.985590E-02
100.00	-.559050E-01	-.555410E-01	-.317360E-01	-.305830E-01	-.279470E-01	-.979901E-02

TAB. B.18: Orbitales Δ , ion NaLi^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.105784E-01	0.565096E-01	0.799576E-01	0.107244E+00	0.118536E+00	0.122581E+00
5.20	-.139156E-01	0.502564E-01	0.740244E-01	0.100749E+00	0.111295E+00	0.116144E+00
5.40	-.170097E-01	0.444133E-01	0.685473E-01	0.947083E-01	0.104522E+00	0.110154E+00
5.60	-.198810E-01	0.389520E-01	0.634790E-01	0.890800E-01	0.981800E-01	0.104565E+00
5.80	-.225466E-01	0.338434E-01	0.587774E-01	0.838324E-01	0.922314E-01	0.993394E-01
6.00	-.250229E-01	0.290621E-01	0.544051E-01	0.789311E-01	0.866461E-01	0.944421E-01
6.20	-.273254E-01	0.245846E-01	0.503296E-01	0.743476E-01	0.813936E-01	0.898436E-01
6.40	-.294681E-01	0.203869E-01	0.465239E-01	0.700519E-01	0.764479E-01	0.855179E-01
6.60	-.314624E-01	0.164486E-01	0.429626E-01	0.660216E-01	0.717856E-01	0.814436E-01
6.80	-.333208E-01	0.127512E-01	0.396242E-01	0.622312E-01	0.673862E-01	0.775992E-01
7.00	-.350534E-01	0.927655E-02	0.364906E-01	0.586596E-01	0.632306E-01	0.739686E-01
7.20	-.366690E-01	0.600904E-02	0.335430E-01	0.552850E-01	0.593050E-01	0.705360E-01
7.40	-.381782E-01	0.293276E-02	0.307678E-01	0.520888E-01	0.555948E-01	0.672868E-01
7.60	-.395877E-01	0.342743E-04	0.281513E-01	0.490483E-01	0.520903E-01	0.642083E-01
7.80	-.409066E-01	-.269758E-02	0.256814E-01	0.461444E-01	0.487884E-01	0.612894E-01
8.00	-.421388E-01	-.527677E-02	0.233452E-01	0.433532E-01	0.456852E-01	0.585192E-01
8.20	-.432932E-01	-.771122E-02	0.211338E-01	0.406508E-01	0.427848E-01	0.558868E-01
8.40	-.443749E-01	-.100129E-01	0.190381E-01	0.380181E-01	0.400841E-01	0.533851E-01
8.60	-.453890E-01	-.121900E-01	0.170480E-01	0.354470E-01	0.375750E-01	0.510030E-01
8.80	-.463397E-01	-.142497E-01	0.151563E-01	0.329403E-01	0.352383E-01	0.487343E-01
9.00	-.472319E-01	-.161999E-01	0.133561E-01	0.305071E-01	0.330501E-01	0.465711E-01
9.20	-.480695E-01	-.180495E-01	0.116405E-01	0.281545E-01	0.309895E-01	0.445065E-01
9.40	-.488560E-01	-.198020E-01	0.100030E-01	0.258870E-01	0.290400E-01	0.425340E-01
9.60	-.495954E-01	-.214654E-01	0.843859E-02	0.237056E-01	0.271896E-01	0.406466E-01
9.80	-.502892E-01	-.230442E-01	0.694078E-02	0.216108E-01	0.254288E-01	0.388408E-01
10.00	-.509425E-01	-.245435E-01	0.550546E-02	0.196015E-01	0.237495E-01	0.371095E-01
10.20	-.515561E-01	-.259681E-01	0.412793E-02	0.176739E-01	0.221459E-01	0.354489E-01
10.40	-.521332E-01	-.273232E-01	0.280483E-02	0.158258E-01	0.206128E-01	0.338528E-01
10.60	-.526759E-01	-.286119E-01	0.153110E-02	0.140561E-01	0.191471E-01	0.323181E-01
10.80	-.531860E-01	-.298370E-01	0.302990E-03	0.123610E-01	0.177430E-01	0.308410E-01
11.00	-.536650E-01	-.310040E-01	-.882006E-03	0.107370E-01	0.163980E-01	0.294160E-01
11.20	-.541151E-01	-.321161E-01	-.202614E-02	0.918386E-02	0.151079E-01	0.280409E-01
11.40	-.545384E-01	-.331744E-01	-.313445E-02	0.769755E-02	0.138716E-01	0.267116E-01
11.60	-.549368E-01	-.341828E-01	-.420776E-02	0.627724E-02	0.126862E-01	0.254242E-01
11.80	-.553097E-01	-.351447E-01	-.524872E-02	0.491828E-02	0.115473E-01	0.241763E-01
12.00	-.556598E-01	-.360608E-01	-.625981E-02	0.362119E-02	0.104552E-01	0.229662E-01
12.20	-.559893E-01	-.369353E-01	-.724333E-02	0.238167E-02	0.940667E-02	0.217887E-01
12.40	-.562975E-01	-.377695E-01	-.820047E-02	0.119853E-02	0.839953E-02	0.206435E-01
12.60	-.565862E-01	-.385652E-01	-.913225E-02	0.697540E-04	0.743275E-02	0.195268E-01
12.80	-.568576E-01	-.393246E-01	-.100416E-01	-.100658E-02	0.650342E-02	0.184374E-01
13.00	-.571113E-01	-.400503E-01	-.109273E-01	-.203327E-02	0.561073E-02	0.173737E-01
13.50	-.576776E-01	-.417226E-01	-.130496E-01	-.439561E-02	0.352939E-02	0.148144E-01
14.00	-.581548E-01	-.432138E-01	-.150458E-01	-.649077E-02	0.164323E-02	0.123862E-01
14.50	-.585563E-01	-.445453E-01	-.169203E-01	-.835334E-02	-.653436E-04	0.100767E-01
15.00	-.588932E-01	-.457332E-01	-.186782E-01	-.100122E-01	-.161521E-02	0.788079E-02

15.50	-.591720E-01	-.467930E-01	-.203180E-01	-.114950E-01	-.302200E-02	0.579600E-02
16.00	-.594034E-01	-.477404E-01	-.218444E-01	-.128244E-01	-.429838E-02	0.381962E-02
16.50	-.595934E-01	-.485854E-01	-.232584E-01	-.140214E-01	-.545941E-02	0.194959E-02
17.00	-.597497E-01	-.493397E-01	-.245637E-01	-.151037E-01	-.651672E-02	0.185279E-03
17.50	-.598768E-01	-.500118E-01	-.257658E-01	-.160848E-01	-.748375E-02	-.147275E-02
18.00	-.599799E-01	-.506099E-01	-.268679E-01	-.169779E-01	-.837389E-02	-.302489E-02
18.50	-.600636E-01	-.511416E-01	-.278766E-01	-.177946E-01	-.920065E-02	-.446865E-02
19.00	-.601327E-01	-.516127E-01	-.287967E-01	-.185427E-01	-.998172E-02	-.579572E-02
19.50	-.601891E-01	-.520301E-01	-.296331E-01	-.192301E-01	-.107391E-01	-.699815E-02
20.00	-.602373E-01	-.523993E-01	-.303923E-01	-.198653E-01	-.114943E-01	-.806135E-02
21.00	-.603152E-01	-.530112E-01	-.316992E-01	-.210002E-01	-.130712E-01	-.974222E-02
21.50	-.603494E-01	-.532634E-01	-.322574E-01	-.215104E-01	-.138984E-01	-.103734E-01
22.00	-.603803E-01	-.534843E-01	-.327573E-01	-.219873E-01	-.147363E-01	-.108923E-01
22.50	-.604114E-01	-.536774E-01	-.332054E-01	-.224364E-01	-.155664E-01	-.113254E-01
23.00	-.604417E-01	-.538457E-01	-.336037E-01	-.228587E-01	-.163767E-01	-.116947E-01
23.50	-.604709E-01	-.539939E-01	-.339579E-01	-.232569E-01	-.171579E-01	-.120169E-01
24.00	-.605007E-01	-.541237E-01	-.342707E-01	-.236347E-01	-.179047E-01	-.123047E-01
24.50	-.605304E-01	-.542364E-01	-.345454E-01	-.239924E-01	-.186144E-01	-.125674E-01
25.00	-.605601E-01	-.543361E-01	-.347851E-01	-.243321E-01	-.192851E-01	-.128131E-01
26.00	-.606175E-01	-.544995E-01	-.351725E-01	-.249605E-01	-.205125E-01	-.132685E-01
27.00	-.606742E-01	-.546272E-01	-.354512E-01	-.255262E-01	-.215912E-01	-.137002E-01
28.00	-.607282E-01	-.547292E-01	-.356422E-01	-.260332E-01	-.225342E-01	-.141202E-01
29.00	-.607792E-01	-.548112E-01	-.357592E-01	-.264832E-01	-.233542E-01	-.145322E-01
30.00	-.608261E-01	-.548791E-01	-.358181E-01	-.268781E-01	-.240671E-01	-.149371E-01
32.00	-.609086E-01	-.549856E-01	-.358136E-01	-.275106E-01	-.252216E-01	-.157126E-01
35.00	-.610074E-01	-.551004E-01	-.356534E-01	-.281324E-01	-.264374E-01	-.167604E-01
37.00	-.610595E-01	-.551595E-01	-.355225E-01	-.284115E-01	-.269835E-01	-.173655E-01
40.00	-.611210E-01	-.552311E-01	-.353491E-01	-.287761E-01	-.274821E-01	-.181341E-01
45.00	-.611935E-01	-.553185E-01	-.351385E-01	-.293695E-01	-.277745E-01	-.190995E-01
50.00	-.612425E-01	-.553784E-01	-.349874E-01	-.298464E-01	-.278484E-01	-.197724E-01
55.00	-.612765E-01	-.554205E-01	-.348745E-01	-.301875E-01	-.278795E-01	-.202475E-01
60.00	-.613005E-01	-.554515E-01	-.347906E-01	-.304296E-01	-.279005E-01	-.205905E-01
70.00	-.613325E-01	-.554914E-01	-.346855E-01	-.307295E-01	-.279254E-01	-.205905E-01
80.00	-.613511E-01	-.555161E-01	-.346311E-01	-.308901E-01	-.279371E-01	-.205905E-01
90.00	-.613620E-01	-.555309E-01	-.346050E-01	-.309820E-01	-.279439E-01	-.205905E-01
100.00	-.613700E-01	-.555410E-01	-.345910E-01	-.310360E-01	-.279470E-01	-.205905E-01

TAB. B.19: Orbitales Δ , ion LiK^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.218512E-01	0.535168E-01	0.764558E-01	0.106265E+00	0.119584E+00	0.141193E+00
5.20	-.245909E-01	0.474191E-01	0.709821E-01	0.100090E+00	0.113549E+00	0.135663E+00
5.40	-.271391E-01	0.416929E-01	0.658829E-01	0.942979E-01	0.107881E+00	0.130496E+00
5.60	-.295070E-01	0.363220E-01	0.611290E-01	0.888660E-01	0.102550E+00	0.125643E+00
5.80	-.317063E-01	0.312847E-01	0.566917E-01	0.837717E-01	0.975317E-01	0.121048E+00
6.00	-.337491E-01	0.265629E-01	0.525439E-01	0.789919E-01	0.927989E-01	0.116653E+00
6.20	-.356484E-01	0.221356E-01	0.486616E-01	0.745046E-01	0.883276E-01	0.112409E+00
6.40	-.374159E-01	0.179841E-01	0.450201E-01	0.702881E-01	0.840981E-01	0.108289E+00
6.60	-.390603E-01	0.140877E-01	0.416007E-01	0.663207E-01	0.800897E-01	0.104302E+00
6.80	-.405928E-01	0.104302E-01	0.383842E-01	0.625822E-01	0.762842E-01	0.100474E+00
7.00	-.420227E-01	0.699530E-02	0.353543E-01	0.590553E-01	0.726673E-01	0.968363E-01
7.20	-.433559E-01	0.376606E-02	0.324941E-01	0.557211E-01	0.692231E-01	0.934111E-01
7.40	-.446013E-01	0.728696E-03	0.297917E-01	0.525657E-01	0.659417E-01	0.902097E-01
7.60	-.457645E-01	-.213052E-02	0.272345E-01	0.495735E-01	0.628105E-01	0.872345E-01
7.80	-.468523E-01	-.482430E-02	0.248117E-01	0.467297E-01	0.598207E-01	0.844807E-01
8.00	-.478694E-01	-.736442E-02	0.225126E-01	0.440246E-01	0.569656E-01	0.819416E-01
8.20	-.488218E-01	-.975983E-02	0.203282E-01	0.414462E-01	0.542362E-01	0.796052E-01
8.40	-.497137E-01	-.120227E-01	0.182513E-01	0.389833E-01	0.516273E-01	0.774593E-01
8.60	-.505484E-01	-.141604E-01	0.162726E-01	0.366286E-01	0.491316E-01	0.754906E-01
8.80	-.513316E-01	-.161816E-01	0.143874E-01	0.343734E-01	0.467454E-01	0.736864E-01
9.00	-.520647E-01	-.180947E-01	0.125893E-01	0.322103E-01	0.444633E-01	0.720323E-01
9.20	-.527522E-01	-.199062E-01	0.108708E-01	0.301348E-01	0.422798E-01	0.705148E-01
9.40	-.533972E-01	-.216222E-01	0.922780E-02	0.281398E-01	0.401908E-01	0.691218E-01
9.60	-.540024E-01	-.232494E-01	0.765564E-02	0.262206E-01	0.381926E-01	0.678396E-01
9.80	-.545699E-01	-.247929E-01	0.615006E-02	0.243741E-01	0.362801E-01	0.666581E-01
10.00	-.551028E-01	-.262588E-01	0.470621E-02	0.225952E-01	0.344492E-01	0.655652E-01
10.20	-.556034E-01	-.276504E-01	0.332157E-02	0.208816E-01	0.326966E-01	0.645516E-01
10.40	-.560730E-01	-.289720E-01	0.199097E-02	0.192290E-01	0.310180E-01	0.636090E-01
10.60	-.565145E-01	-.302295E-01	0.712506E-03	0.176365E-01	0.294095E-01	0.627265E-01
10.80	-.569295E-01	-.314255E-01	-.517453E-03	0.161005E-01	0.278675E-01	0.619005E-01
11.00	-.573193E-01	-.325623E-01	-.170228E-02	0.146187E-01	0.263897E-01	0.611217E-01
11.20	-.576851E-01	-.336451E-01	-.284314E-02	0.131899E-01	0.249719E-01	0.603869E-01
11.40	-.580300E-01	-.346760E-01	-.394296E-02	0.118120E-01	0.236120E-01	0.596910E-01
11.60	-.583535E-01	-.356575E-01	-.500350E-02	0.104835E-01	0.223055E-01	0.590305E-01
11.80	-.586583E-01	-.365933E-01	-.602833E-02	0.920167E-02	0.210517E-01	0.584027E-01
12.00	-.589449E-01	-.374839E-01	-.701786E-02	0.796514E-02	0.198461E-01	0.578041E-01
12.20	-.592144E-01	-.383334E-01	-.797437E-02	0.677363E-02	0.186866E-01	0.572346E-01
12.40	-.594669E-01	-.391439E-01	-.889895E-02	0.562405E-02	0.175721E-01	0.566911E-01
12.60	-.597056E-01	-.399156E-01	-.979361E-02	0.451639E-02	0.164994E-01	0.561724E-01
12.80	-.599302E-01	-.406512E-01	-.106592E-01	0.344778E-02	0.154668E-01	0.556788E-01
13.00	-.601415E-01	-.413535E-01	-.114975E-01	0.241847E-02	0.144715E-01	0.552075E-01
13.50	-.606183E-01	-.429693E-01	-.134793E-01	0.369744E-05	0.121397E-01	0.541257E-01
14.00	-.610275E-01	-.444035E-01	-.153105E-01	-.219951E-02	0.100095E-01	0.531685E-01
14.50	-.613814E-01	-.456774E-01	-.170034E-01	-.420843E-02	0.805757E-02	0.523246E-01
15.00	-.616887E-01	-.468067E-01	-.185687E-01	-.604371E-02	0.626729E-02	0.515793E-01

15.50	-.619538E-01	-.478078E-01	-.200138E-01	-.772076E-02	0.462224E-02	0.509212E-01
16.00	-.621861E-01	-.486931E-01	-.213471E-01	-.925511E-02	0.310789E-02	0.503379E-01
16.50	-.623897E-01	-.494747E-01	-.225727E-01	-.106627E-01	0.171231E-02	0.498203E-01
17.00	-.625700E-01	-.501640E-01	-.236990E-01	-.119560E-01	0.426956E-03	0.493590E-01
17.50	-.627305E-01	-.507695E-01	-.247295E-01	-.131465E-01	-.758518E-03	0.489465E-01
18.00	-.628754E-01	-.513014E-01	-.256714E-01	-.142454E-01	-.185145E-02	0.485756E-01
18.50	-.630063E-01	-.517663E-01	-.265283E-01	-.152613E-01	-.285928E-02	0.482427E-01
19.00	-.631267E-01	-.521727E-01	-.273057E-01	-.162037E-01	-.378867E-02	0.479423E-01
19.50	-.632386E-01	-.525266E-01	-.280086E-01	-.170796E-01	-.464362E-02	0.476704E-01
20.00	-.633425E-01	-.528345E-01	-.286435E-01	-.178945E-01	-.543052E-02	0.474245E-01
20.50	-.634403E-01	-.531023E-01	-.292153E-01	-.186553E-01	-.615425E-02	0.472007E-01
21.00	-.635322E-01	-.533342E-01	-.297282E-01	-.193662E-01	-.681924E-02	0.469968E-01
21.50	-.636205E-01	-.535365E-01	-.301875E-01	-.200305E-01	-.743047E-02	0.468115E-01
22.00	-.637036E-01	-.537116E-01	-.305976E-01	-.206526E-01	-.799161E-02	0.466424E-01
22.50	-.637830E-01	-.538640E-01	-.309650E-01	-.212360E-01	-.850798E-02	0.464870E-01
23.00	-.638586E-01	-.539976E-01	-.312926E-01	-.217806E-01	-.898261E-02	0.463444E-01
23.50	-.639303E-01	-.541143E-01	-.315843E-01	-.222913E-01	-.941929E-02	0.462137E-01
24.00	-.639986E-01	-.542166E-01	-.318456E-01	-.227686E-01	-.982256E-02	0.460934E-01
24.50	-.640638E-01	-.543068E-01	-.320788E-01	-.232148E-01	-.101958E-01	0.459822E-01
25.00	-.641261E-01	-.543871E-01	-.322881E-01	-.236301E-01	-.105421E-01	0.458799E-01
26.00	-.642408E-01	-.545218E-01	-.326478E-01	-.243758E-01	-.111668E-01	0.456992E-01
27.00	-.643428E-01	-.546318E-01	-.329458E-01	-.250138E-01	-.117158E-01	0.455452E-01
28.00	-.644344E-01	-.547224E-01	-.331984E-01	-.255534E-01	-.122064E-01	0.454156E-01
29.00	-.645159E-01	-.547989E-01	-.334189E-01	-.260039E-01	-.126509E-01	0.453051E-01
30.00	-.645895E-01	-.548655E-01	-.336155E-01	-.263745E-01	-.130565E-01	0.452115E-01
32.00	-.647115E-01	-.549725E-01	-.339645E-01	-.269135E-01	-.137705E-01	0.450655E-01
35.00	-.648497E-01	-.550937E-01	-.344077E-01	-.273657E-01	-.146277E-01	0.449183E-01
37.00	-.649268E-01	-.551555E-01	-.346595E-01	-.275245E-01	-.150705E-01	0.448515E-01
40.00	-.650018E-01	-.552298E-01	-.349748E-01	-.276598E-01	-.155738E-01	0.447792E-01
45.00	-.650949E-01	-.553179E-01	-.353629E-01	-.277739E-01	-.161129E-01	0.447021E-01
50.00	-.651547E-01	-.553778E-01	-.356238E-01	-.278368E-01	-.164398E-01	0.446542E-01
55.00	-.651956E-01	-.554207E-01	-.358026E-01	-.278747E-01	-.166566E-01	0.446223E-01
60.00	-.652236E-01	-.554517E-01	-.359296E-01	-.278987E-01	-.168076E-01	0.446003E-01
70.00	-.652584E-01	-.554915E-01	-.360884E-01	-.279255E-01	-.169954E-01	0.445725E-01
80.00	-.652781E-01	-.555161E-01	-.360884E-01	-.279371E-01	-.171021E-01	0.445569E-01
90.00	-.652909E-01	-.555310E-01	-.362339E-01	-.279440E-01	-.171669E-01	0.445480E-01
100.00	-.653280E-01	-.555410E-01	-.362690E-01	-.279470E-01	-.172090E-01	0.445420E-01

TAB. B.20: Orbitales Δ , ion LiRb^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.452223E-01	0.473327E-01	0.699457E-01	0.102588E+00	0.115805E+00	0.137190E+00
5.20	-.471870E-01	0.415670E-01	0.650910E-01	0.968810E-01	0.110477E+00	0.132251E+00
5.40	-.490489E-01	0.360931E-01	0.604821E-01	0.914611E-01	0.105368E+00	0.127493E+00
5.60	-.507991E-01	0.309149E-01	0.561199E-01	0.863299E-01	0.100482E+00	0.122876E+00
5.80	-.524340E-01	0.260300E-01	0.519970E-01	0.814830E-01	0.958140E-01	0.118357E+00
6.00	-.539558E-01	0.214302E-01	0.481032E-01	0.769102E-01	0.913592E-01	0.113910E+00
6.20	-.553677E-01	0.171053E-01	0.444273E-01	0.725993E-01	0.871093E-01	0.109544E+00
6.40	-.566770E-01	0.130430E-01	0.409560E-01	0.685370E-01	0.830530E-01	0.105298E+00
6.60	-.578881E-01	0.922785E-02	0.376769E-01	0.647069E-01	0.791809E-01	0.101217E+00
6.80	-.590085E-01	0.564654E-02	0.345765E-01	0.610935E-01	0.754835E-01	0.973415E-01
7.00	-.600454E-01	0.228464E-02	0.316426E-01	0.576836E-01	0.719496E-01	0.936956E-01
7.20	-.610059E-01	-.870911E-03	0.288631E-01	0.544591E-01	0.685701E-01	0.902911E-01
7.40	-.618947E-01	-.383574E-02	0.262273E-01	0.514083E-01	0.653373E-01	0.871303E-01
7.60	-.627189E-01	-.661995E-02	0.237251E-01	0.485161E-01	0.622431E-01	0.842111E-01
7.80	-.634841E-01	-.923710E-02	0.213449E-01	0.457699E-01	0.592789E-01	0.815239E-01
8.00	-.641952E-01	-.116992E-01	0.190798E-01	0.431578E-01	0.564408E-01	0.790598E-01
8.20	-.648566E-01	-.140156E-01	0.169214E-01	0.406684E-01	0.537224E-01	0.768054E-01
8.40	-.654733E-01	-.161963E-01	0.148627E-01	0.382917E-01	0.511167E-01	0.747477E-01
8.60	-.660477E-01	-.182517E-01	0.128953E-01	0.360193E-01	0.486213E-01	0.728713E-01
8.80	-.665845E-01	-.201895E-01	0.110145E-01	0.338425E-01	0.462295E-01	0.711635E-01
9.00	-.670872E-01	-.220172E-01	0.921382E-02	0.317548E-01	0.439378E-01	0.696108E-01
9.20	-.675568E-01	-.237438E-01	0.748825E-02	0.297492E-01	0.417412E-01	0.681972E-01
9.40	-.679968E-01	-.253738E-01	0.583425E-02	0.278212E-01	0.396362E-01	0.669102E-01
9.60	-.684104E-01	-.269154E-01	0.424663E-02	0.259646E-01	0.376186E-01	0.657366E-01
9.80	-.687984E-01	-.283734E-01	0.272157E-02	0.241766E-01	0.356846E-01	0.646646E-01
10.00	-.691634E-01	-.297534E-01	0.125557E-02	0.224526E-01	0.338296E-01	0.636816E-01
10.20	-.695066E-01	-.310606E-01	-.153589E-03	0.207894E-01	0.320504E-01	0.627784E-01
10.40	-.698288E-01	-.322978E-01	-.151082E-02	0.191852E-01	0.303432E-01	0.619452E-01
10.60	-.701338E-01	-.334708E-01	-.281779E-02	0.176362E-01	0.287052E-01	0.611722E-01
10.80	-.704209E-01	-.345829E-01	-.407791E-02	0.161401E-01	0.271321E-01	0.604521E-01
11.00	-.706914E-01	-.356384E-01	-.529140E-02	0.146966E-01	0.256206E-01	0.597776E-01
11.20	-.709473E-01	-.366383E-01	-.646225E-02	0.133017E-01	0.241677E-01	0.591427E-01
11.40	-.711893E-01	-.375883E-01	-.759226E-02	0.119537E-01	0.227717E-01	0.585427E-01
11.60	-.714171E-01	-.384891E-01	-.868308E-02	0.106519E-01	0.214289E-01	0.579739E-01
11.80	-.716331E-01	-.393451E-01	-.973615E-02	0.939485E-02	0.201369E-01	0.574329E-01
12.00	-.718378E-01	-.401578E-01	-.107528E-01	0.818020E-02	0.188922E-01	0.569152E-01
12.20	-.720312E-01	-.409282E-01	-.117352E-01	0.700679E-02	0.176938E-01	0.564208E-01
12.40	-.722154E-01	-.416614E-01	-.126844E-01	0.587358E-02	0.165386E-01	0.559476E-01
12.60	-.723894E-01	-.423564E-01	-.136024E-01	0.477764E-02	0.154256E-01	0.554936E-01
12.80	-.725538E-01	-.430168E-01	-.144888E-01	0.371917E-02	0.143512E-01	0.550582E-01
13.00	-.727105E-01	-.436435E-01	-.153455E-01	0.269646E-02	0.133155E-01	0.546415E-01
13.50	-.730679E-01	-.450769E-01	-.173649E-01	0.287132E-03	0.108791E-01	0.536741E-01
14.00	-.733841E-01	-.463341E-01	-.192191E-01	-.192507E-02	0.864393E-02	0.528079E-01
14.50	-.736630E-01	-.474360E-01	-.209210E-01	-.395996E-02	0.658904E-02	0.520330E-01
15.00	-.739108E-01	-.484018E-01	-.224818E-01	-.583279E-02	0.469721E-02	0.513432E-01

15.50	-.741327E-01	-.492447E-01	-.239087E-01	-.755870E-02	0.295230E-02	0.507273E-01
16.00	-.743310E-01	-.499810E-01	-.252130E-01	-.915097E-02	0.134103E-02	0.501790E-01
16.50	-.745104E-01	-.506214E-01	-.264014E-01	-.106234E-01	-.148357E-03	0.496876E-01
17.00	-.746712E-01	-.511782E-01	-.274812E-01	-.119852E-01	-.152624E-02	0.492478E-01
17.50	-.748179E-01	-.516619E-01	-.284609E-01	-.132469E-01	-.280086E-02	0.488531E-01
18.00	-.749504E-01	-.520794E-01	-.293454E-01	-.144184E-01	-.398045E-02	0.484986E-01
18.50	-.750724E-01	-.524414E-01	-.301424E-01	-.155054E-01	-.507137E-02	0.481796E-01
19.00	-.751842E-01	-.527542E-01	-.308592E-01	-.165162E-01	-.608222E-02	0.478918E-01
19.50	-.752869E-01	-.530239E-01	-.315009E-01	-.174569E-01	-.701794E-02	0.476311E-01
20.00	-.753809E-01	-.532569E-01	-.320739E-01	-.183319E-01	-.788389E-02	0.473951E-01
20.50	-.754679E-01	-.534589E-01	-.325849E-01	-.191459E-01	-.868489E-02	0.471811E-01
21.00	-.755493E-01	-.536333E-01	-.330393E-01	-.199033E-01	-.942634E-02	0.469867E-01
21.50	-.756242E-01	-.537862E-01	-.334442E-01	-.206072E-01	-.101132E-01	0.468088E-01
22.00	-.756932E-01	-.539182E-01	-.338032E-01	-.212612E-01	-.107492E-01	0.466458E-01
22.50	-.757574E-01	-.540354E-01	-.341214E-01	-.218674E-01	-.113384E-01	0.464956E-01
23.00	-.758181E-01	-.541371E-01	-.344061E-01	-.224291E-01	-.118861E-01	0.463579E-01
23.50	-.758739E-01	-.542289E-01	-.346589E-01	-.229479E-01	-.123939E-01	0.462311E-01
24.00	-.759254E-01	-.543094E-01	-.348864E-01	-.234264E-01	-.128674E-01	0.461126E-01
24.50	-.759739E-01	-.543819E-01	-.350909E-01	-.238669E-01	-.133089E-01	0.460041E-01
25.00	-.760196E-01	-.544476E-01	-.352766E-01	-.242716E-01	-.137216E-01	0.459024E-01
26.00	-.761012E-01	-.545612E-01	-.356022E-01	-.249792E-01	-.144722E-01	0.457218E-01
27.00	-.761724E-01	-.546574E-01	-.358814E-01	-.255644E-01	-.151394E-01	0.455666E-01
28.00	-.762352E-01	-.547392E-01	-.361282E-01	-.260432E-01	-.157392E-01	0.454348E-01
29.00	-.762901E-01	-.548101E-01	-.363511E-01	-.264291E-01	-.162841E-01	0.453219E-01
30.00	-.763381E-01	-.548731E-01	-.365551E-01	-.267361E-01	-.167821E-01	0.452259E-01
32.00	-.764183E-01	-.549773E-01	-.369183E-01	-.271653E-01	-.176613E-01	0.450747E-01
35.00	-.765087E-01	-.550957E-01	-.373697E-01	-.275017E-01	-.187297E-01	0.449233E-01
37.00	-.765531E-01	-.551571E-01	-.376161E-01	-.276131E-01	-.192921E-01	0.448539E-01
40.00	-.766060E-01	-.552310E-01	-.379150E-01	-.277040E-01	-.199460E-01	0.447800E-01
45.00	-.766657E-01	-.553186E-01	-.382716E-01	-.277856E-01	-.206586E-01	0.447014E-01
50.00	-.767043E-01	-.553782E-01	-.385112E-01	-.278392E-01	-.210892E-01	0.446538E-01
55.00	-.767301E-01	-.554210E-01	-.382941E-01	-.278760E-01	-.213710E-01	0.446220E-01
60.00	-.767490E-01	-.554519E-01	-.385350E-01	-.278989E-01	-.215660E-01	0.446001E-01
70.00	-.767717E-01	-.554916E-01	-.388277E-01	-.279256E-01	-.218107E-01	0.445724E-01
80.00	-.767842E-01	-.555162E-01	-.389812E-01	-.279372E-01	-.219492E-01	0.445568E-01
90.00	-.767921E-01	-.555310E-01	-.390661E-01	-.279440E-01	-.220331E-01	0.445480E-01
100.00	-.767970E-01	-.555411E-01	-.391070E-01	-.279471E-01	-.220870E-01	0.445419E-01

TAB. B.21: Orbitales Δ , ion LiCs^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.122173E-01	0.544627E-01	0.779937E-01	0.104721E+00	0.115184E+00	0.120878E+00
5.20	-.153832E-01	0.483048E-01	0.722488E-01	0.982358E-01	0.108271E+00	0.114552E+00
5.40	-.183352E-01	0.425368E-01	0.669328E-01	0.921738E-01	0.101775E+00	0.108647E+00
5.60	-.210894E-01	0.371346E-01	0.620036E-01	0.865026E-01	0.956666E-01	0.103127E+00
5.80	-.236579E-01	0.320751E-01	0.574231E-01	0.811941E-01	0.899181E-01	0.979601E-01
6.00	-.260573E-01	0.273347E-01	0.531567E-01	0.762187E-01	0.845017E-01	0.931137E-01
6.40	-.303943E-01	0.187237E-01	0.454487E-01	0.671657E-01	0.745727E-01	0.842757E-01
6.60	-.323553E-01	0.148117E-01	0.419547E-01	0.630417E-01	0.700167E-01	0.802357E-01
6.80	-.341913E-01	0.111387E-01	0.386727E-01	0.591567E-01	0.657057E-01	0.764217E-01
7.00	-.359114E-01	0.768659E-02	0.355846E-01	0.554906E-01	0.616236E-01	0.728156E-01
7.20	-.375224E-01	0.443961E-02	0.326726E-01	0.520276E-01	0.577556E-01	0.693996E-01
7.40	-.390325E-01	0.138454E-02	0.299225E-01	0.487495E-01	0.540875E-01	0.661615E-01
7.60	-.404485E-01	-.149351E-02	0.273235E-01	0.456415E-01	0.506075E-01	0.630875E-01
7.80	-.417752E-01	-.420725E-02	0.248638E-01	0.426898E-01	0.473048E-01	0.601658E-01
8.00	-.430193E-01	-.676629E-02	0.225327E-01	0.398797E-01	0.441697E-01	0.573867E-01
8.20	-.441852E-01	-.918125E-02	0.203208E-01	0.371998E-01	0.411958E-01	0.547398E-01
8.40	-.452779E-01	-.114639E-01	0.182201E-01	0.346361E-01	0.383741E-01	0.522161E-01
8.60	-.463030E-01	-.136210E-01	0.162240E-01	0.321790E-01	0.357010E-01	0.498090E-01
8.80	-.472630E-01	-.156620E-01	0.143240E-01	0.298180E-01	0.331700E-01	0.475110E-01
9.00	-.481622E-01	-.175932E-01	0.125158E-01	0.275438E-01	0.307768E-01	0.453138E-01
9.20	-.490047E-01	-.194227E-01	0.107903E-01	0.253473E-01	0.285143E-01	0.432133E-01
9.40	-.497937E-01	-.211567E-01	0.914531E-02	0.232263E-01	0.263773E-01	0.412023E-01
9.60	-.505332E-01	-.228012E-01	0.757279E-02	0.211738E-01	0.243588E-01	0.392758E-01
9.80	-.512246E-01	-.243616E-01	0.606836E-02	0.191904E-01	0.224494E-01	0.374284E-01
10.00	-.518730E-01	-.258430E-01	0.462898E-02	0.172740E-01	0.206420E-01	0.356570E-01
10.20	-.524790E-01	-.272500E-01	0.324900E-02	0.154240E-01	0.189290E-01	0.339550E-01
10.40	-.530459E-01	-.285869E-01	0.192309E-02	0.136411E-01	0.173011E-01	0.323211E-01
10.60	-.535768E-01	-.298578E-01	0.649249E-03	0.119252E-01	0.157532E-01	0.307482E-01
10.80	-.540732E-01	-.310662E-01	-.576250E-03	0.102758E-01	0.142788E-01	0.292348E-01
11.00	-.545379E-01	-.322169E-01	-.175887E-02	0.869113E-02	0.128711E-01	0.277781E-01
11.20	-.549718E-01	-.333108E-01	-.289985E-02	0.717215E-02	0.115272E-01	0.263722E-01
11.40	-.553772E-01	-.343532E-01	-.400419E-02	0.571681E-02	0.102408E-01	0.250168E-01
11.60	-.557557E-01	-.353467E-01	-.507371E-02	0.432429E-02	0.901029E-02	0.237073E-01
11.80	-.561100E-01	-.362920E-01	-.611103E-02	0.299397E-02	0.783097E-02	0.224420E-01
12.00	-.564396E-01	-.371936E-01	-.711862E-02	0.172338E-02	0.669938E-02	0.212174E-01
12.20	-.567478E-01	-.380538E-01	-.809977E-02	0.512230E-03	0.561423E-02	0.200322E-01
12.40	-.570356E-01	-.388726E-01	-.905564E-02	-.640641E-03	0.457136E-02	0.188844E-01
12.60	-.573033E-01	-.396553E-01	-.998726E-02	-.173926E-02	0.356874E-02	0.177697E-01
12.80	-.575525E-01	-.404005E-01	-.108965E-01	-.278252E-02	0.260448E-02	0.166875E-01
13.00	-.577842E-01	-.411122E-01	-.117852E-01	-.377522E-02	0.167778E-02	0.156368E-01
13.50	-.582944E-01	-.427524E-01	-.139174E-01	-.604242E-02	-.493418E-03	0.131286E-01
14.00	-.587178E-01	-.442128E-01	-.159278E-01	-.803380E-02	-.247480E-02	0.107722E-01
14.50	-.590659E-01	-.455139E-01	-.178179E-01	-.978489E-02	-.428589E-02	0.854011E-02
15.00	-.593505E-01	-.466735E-01	-.195865E-01	-.113305E-01	-.594853E-02	0.640847E-02
15.50	-.595793E-01	-.477063E-01	-.212313E-01	-.127003E-01	-.747527E-02	0.435973E-02

16.00	-.597628E-01	-.486248E-01	-.227528E-01	-.139188E-01	-.888277E-02	0.238223E-02
16.50	-.599070E-01	-.494430E-01	-.241540E-01	-.150070E-01	-.101820E-01	0.476957E-03
17.00	-.600197E-01	-.501687E-01	-.254387E-01	-.159837E-01	-.113827E-01	-.135471E-02
17.50	-.601062E-01	-.508132E-01	-.266122E-01	-.168622E-01	-.124942E-01	-.310418E-02
18.00	-.601728E-01	-.513828E-01	-.276798E-01	-.176558E-01	-.135248E-01	-.477085E-02
18.50	-.602232E-01	-.518852E-01	-.286492E-01	-.183752E-01	-.144802E-01	-.635219E-02
19.00	-.602609E-01	-.523279E-01	-.295279E-01	-.190299E-01	-.153679E-01	-.784790E-02
19.50	-.602910E-01	-.527160E-01	-.303220E-01	-.196290E-01	-.161910E-01	-.926200E-02
20.00	-.603159E-01	-.530559E-01	-.310389E-01	-.201819E-01	-.169539E-01	-.105939E-01
20.50	-.603386E-01	-.533526E-01	-.316866E-01	-.206966E-01	-.176616E-01	-.118486E-01
21.00	-.603593E-01	-.536113E-01	-.322723E-01	-.211813E-01	-.183173E-01	-.130283E-01
21.50	-.603803E-01	-.538363E-01	-.328003E-01	-.216423E-01	-.189233E-01	-.141353E-01
22.00	-.604021E-01	-.540311E-01	-.332781E-01	-.220871E-01	-.194831E-01	-.151711E-01
22.50	-.604250E-01	-.542010E-01	-.337100E-01	-.225200E-01	-.200000E-01	-.161400E-01
23.00	-.604501E-01	-.543481E-01	-.341011E-01	-.229451E-01	-.204781E-01	-.170441E-01
23.50	-.604763E-01	-.544763E-01	-.344553E-01	-.233663E-01	-.209203E-01	-.178853E-01
24.00	-.605029E-01	-.545879E-01	-.347749E-01	-.237839E-01	-.213309E-01	-.186649E-01
24.50	-.605315E-01	-.546865E-01	-.350645E-01	-.241985E-01	-.217145E-01	-.193875E-01
25.00	-.605601E-01	-.547721E-01	-.353261E-01	-.246101E-01	-.220751E-01	-.200531E-01
26.00	-.606184E-01	-.549154E-01	-.357724E-01	-.254214E-01	-.227434E-01	-.212264E-01
27.00	-.606750E-01	-.550300E-01	-.361260E-01	-.262080E-01	-.233620E-01	-.222030E-01
28.00	-.607299E-01	-.551219E-01	-.363989E-01	-.269599E-01	-.239509E-01	-.230039E-01
29.00	-.607807E-01	-.551977E-01	-.365987E-01	-.276697E-01	-.245167E-01	-.236577E-01
30.00	-.608276E-01	-.552626E-01	-.367326E-01	-.283296E-01	-.250546E-01	-.241986E-01
32.00	-.609110E-01	-.553660E-01	-.368330E-01	-.294880E-01	-.260130E-01	-.250640E-01
35.00	-.610087E-01	-.554797E-01	-.366667E-01	-.308307E-01	-.271527E-01	-.260507E-01
37.00	-.610597E-01	-.555377E-01	-.364247E-01	-.314867E-01	-.277507E-01	-.265777E-01
40.00	-.611213E-01	-.556072E-01	-.359902E-01	-.321672E-01	-.284622E-01	-.272292E-01
45.00	-.611936E-01	-.556906E-01	-.353716E-01	-.326696E-01	-.292916E-01	-.280526E-01
50.00	-.612426E-01	-.557485E-01	-.350405E-01	-.326895E-01	-.298275E-01	-.286505E-01
55.00	-.612766E-01	-.557885E-01	-.348835E-01	-.325495E-01	-.301835E-01	-.290975E-01
60.00	-.613006E-01	-.558186E-01	-.347916E-01	-.323966E-01	-.304296E-01	-.294386E-01
70.00	-.613325E-01	-.558574E-01	-.346855E-01	-.321474E-01	-.304296E-01	-.299164E-01
80.00	-.613511E-01	-.558811E-01	-.346311E-01	-.319671E-01	-.304296E-01	-.302251E-01
90.00	-.613620E-01	-.558959E-01	-.346050E-01	-.318349E-01	-.304296E-01	-.304349E-01
100.00	-.613700E-01	-.559050E-01	-.345910E-01	-.317360E-01	-.304296E-01	-.305830E-01

TAB. B.22: Orbitales Δ , ion NaK^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.235049E-01	0.507621E-01	0.740871E-01	0.102616E+00	0.114343E+00	0.118084E+00
5.20	-.260385E-01	0.447395E-01	0.688195E-01	0.964215E-01	0.107884E+00	0.112083E+00
5.40	-.284195E-01	0.390665E-01	0.638845E-01	0.905765E-01	0.101725E+00	0.106469E+00
5.60	-.306524E-01	0.337306E-01	0.592596E-01	0.850696E-01	0.958736E-01	0.101204E+00
5.80	-.327430E-01	0.287180E-01	0.549250E-01	0.798840E-01	0.903270E-01	0.962530E-01
6.00	-.346998E-01	0.240142E-01	0.508582E-01	0.750012E-01	0.850742E-01	0.915922E-01
6.20	-.365308E-01	0.195992E-01	0.470382E-01	0.704022E-01	0.801022E-01	0.871942E-01
6.40	-.382469E-01	0.154561E-01	0.434451E-01	0.660701E-01	0.753951E-01	0.830401E-01
6.60	-.398547E-01	0.115673E-01	0.400613E-01	0.619863E-01	0.709383E-01	0.791113E-01
6.80	-.413629E-01	0.791713E-02	0.368701E-01	0.581341E-01	0.667161E-01	0.753901E-01
7.00	-.427782E-01	0.448784E-02	0.338568E-01	0.544968E-01	0.627138E-01	0.718618E-01
7.20	-.441065E-01	0.126648E-02	0.310075E-01	0.510585E-01	0.589175E-01	0.685135E-01
7.40	-.453539E-01	-.176292E-02	0.283091E-01	0.478071E-01	0.553161E-01	0.653321E-01
7.60	-.465264E-01	-.461342E-02	0.257526E-01	0.447286E-01	0.518956E-01	0.623076E-01
7.80	-.476272E-01	-.729619E-02	0.233268E-01	0.418098E-01	0.486468E-01	0.594278E-01
8.00	-.486616E-01	-.982359E-02	0.210224E-01	0.390414E-01	0.455584E-01	0.566854E-01
8.20	-.496332E-01	-.122062E-01	0.188308E-01	0.364118E-01	0.426218E-01	0.540708E-01
8.40	-.505448E-01	-.144528E-01	0.167462E-01	0.339112E-01	0.398282E-01	0.515762E-01
8.60	-.514007E-01	-.165727E-01	0.147603E-01	0.315303E-01	0.371703E-01	0.491933E-01
8.80	-.522024E-01	-.185754E-01	0.128656E-01	0.292626E-01	0.346406E-01	0.469176E-01
9.00	-.529548E-01	-.204678E-01	0.110592E-01	0.271002E-01	0.322322E-01	0.447402E-01
9.20	-.536586E-01	-.222566E-01	0.933344E-02	0.250354E-01	0.299384E-01	0.426574E-01
9.40	-.543186E-01	-.239486E-01	0.768344E-02	0.230624E-01	0.277544E-01	0.406624E-01
9.60	-.549354E-01	-.255514E-01	0.610461E-02	0.211766E-01	0.256746E-01	0.387506E-01
9.80	-.555112E-01	-.270682E-01	0.459379E-02	0.193718E-01	0.236918E-01	0.369178E-01
10.00	-.560498E-01	-.285058E-01	0.314520E-02	0.176432E-01	0.218032E-01	0.351602E-01
10.20	-.565516E-01	-.298686E-01	0.175639E-02	0.159874E-01	0.200034E-01	0.334714E-01
10.40	-.570208E-01	-.311608E-01	0.422233E-03	0.144002E-01	0.182862E-01	0.318502E-01
10.60	-.574571E-01	-.323871E-01	-.858131E-03	0.128789E-01	0.166499E-01	0.302909E-01
10.80	-.578633E-01	-.335503E-01	-.209029E-02	0.114207E-01	0.150877E-01	0.287917E-01
11.00	-.582416E-01	-.346556E-01	-.327558E-02	0.100224E-01	0.135964E-01	0.273494E-01
11.20	-.585931E-01	-.357041E-01	-.441713E-02	0.868287E-02	0.121729E-01	0.259609E-01
11.40	-.589199E-01	-.367009E-01	-.551785E-02	0.739815E-02	0.108111E-01	0.246231E-01
11.60	-.592225E-01	-.376485E-01	-.657949E-02	0.616651E-02	0.950951E-02	0.233335E-01
11.80	-.595046E-01	-.385486E-01	-.760358E-02	0.498742E-02	0.826242E-02	0.220904E-01
12.00	-.597655E-01	-.394045E-01	-.859352E-02	0.385848E-02	0.706948E-02	0.208915E-01
12.20	-.600076E-01	-.402176E-01	-.954957E-02	0.277643E-02	0.592443E-02	0.197344E-01
12.40	-.602318E-01	-.409918E-01	-.104738E-01	0.174118E-02	0.482718E-02	0.186172E-01
12.60	-.604403E-01	-.417273E-01	-.113683E-01	0.750746E-03	0.377275E-02	0.175377E-01
12.80	-.606327E-01	-.424267E-01	-.122337E-01	-.196733E-03	0.275927E-02	0.164963E-01
13.00	-.608110E-01	-.430920E-01	-.130720E-01	-.110401E-02	0.178499E-02	0.154890E-01
13.50	-.612025E-01	-.446165E-01	-.150515E-01	-.320452E-02	-.493524E-03	0.131145E-01
14.00	-.615279E-01	-.459599E-01	-.168799E-01	-.508587E-02	-.257287E-02	0.109311E-01
14.50	-.617993E-01	-.471433E-01	-.185683E-01	-.677625E-02	-.447725E-02	0.891975E-02
15.00	-.620272E-01	-.481842E-01	-.201252E-01	-.829824E-02	-.622724E-02	0.706776E-02

15.50	-.622232E-01	-.490982E-01	-.215612E-01	-.967721E-02	-.783921E-02	0.536079E-02
16.00	-.623936E-01	-.498986E-01	-.228836E-01	-.109326E-01	-.932465E-02	0.378935E-02
16.50	-.625445E-01	-.505985E-01	-.240985E-01	-.120875E-01	-.106915E-01	0.234255E-02
17.00	-.626811E-01	-.512091E-01	-.252141E-01	-.131631E-01	-.119441E-01	0.101186E-02
17.50	-.628070E-01	-.517410E-01	-.262360E-01	-.141830E-01	-.130800E-01	-.210039E-03
18.00	-.629255E-01	-.522025E-01	-.271725E-01	-.151685E-01	-.140975E-01	-.133348E-02
18.50	-.630379E-01	-.526019E-01	-.280269E-01	-.161319E-01	-.150009E-01	-.236287E-02
19.00	-.631449E-01	-.529479E-01	-.288079E-01	-.170709E-01	-.158039E-01	-.330689E-02
19.50	-.632485E-01	-.532475E-01	-.295195E-01	-.179815E-01	-.165255E-01	-.417052E-02
20.00	-.633481E-01	-.535071E-01	-.301671E-01	-.188571E-01	-.171801E-01	-.496214E-02
20.50	-.634446E-01	-.537306E-01	-.307556E-01	-.196946E-01	-.177806E-01	-.568562E-02
21.00	-.635364E-01	-.539254E-01	-.312904E-01	-.204934E-01	-.183364E-01	-.634938E-02
21.50	-.636254E-01	-.540944E-01	-.317754E-01	-.212534E-01	-.188514E-01	-.695642E-02
22.00	-.637104E-01	-.542414E-01	-.322154E-01	-.219774E-01	-.193334E-01	-.751439E-02
22.50	-.637916E-01	-.543706E-01	-.326116E-01	-.226646E-01	-.197856E-01	-.802760E-02
23.00	-.638691E-01	-.544831E-01	-.329701E-01	-.233171E-01	-.202111E-01	-.850209E-02
23.50	-.639426E-01	-.545826E-01	-.332926E-01	-.239366E-01	-.206116E-01	-.894065E-02
24.00	-.640128E-01	-.546718E-01	-.335828E-01	-.245248E-01	-.209908E-01	-.934781E-02
24.50	-.640789E-01	-.547499E-01	-.338429E-01	-.250819E-01	-.213509E-01	-.972892E-02
25.00	-.641411E-01	-.548211E-01	-.340741E-01	-.256111E-01	-.216921E-01	-.100851E-01
26.00	-.642547E-01	-.549427E-01	-.344627E-01	-.265877E-01	-.223257E-01	-.107397E-01
27.00	-.643566E-01	-.550426E-01	-.347636E-01	-.274626E-01	-.229006E-01	-.113306E-01
28.00	-.644461E-01	-.551271E-01	-.349911E-01	-.282471E-01	-.234251E-01	-.118701E-01
29.00	-.645265E-01	-.551985E-01	-.351555E-01	-.289465E-01	-.239045E-01	-.123695E-01
30.00	-.645970E-01	-.552610E-01	-.352680E-01	-.295700E-01	-.243440E-01	-.128310E-01
32.00	-.647159E-01	-.553629E-01	-.353749E-01	-.306129E-01	-.251169E-01	-.136539E-01
35.00	-.648520E-01	-.554780E-01	-.353610E-01	-.317380E-01	-.260640E-01	-.146370E-01
37.00	-.649217E-01	-.555377E-01	-.353167E-01	-.322387E-01	-.265827E-01	-.151287E-01
40.00	-.650020E-01	-.556080E-01	-.352920E-01	-.326770E-01	-.272310E-01	-.156540E-01
45.00	-.650950E-01	-.556910E-01	-.354280E-01	-.328350E-01	-.280530E-01	-.161610E-01
50.00	-.651549E-01	-.557488E-01	-.356348E-01	-.327128E-01	-.286508E-01	-.164548E-01
55.00	-.651958E-01	-.557887E-01	-.358047E-01	-.325467E-01	-.290977E-01	-.166597E-01
60.00	-.652238E-01	-.558187E-01	-.359297E-01	-.323937E-01	-.294387E-01	-.166597E-01
70.00	-.652585E-01	-.558575E-01	-.360885E-01	-.321465E-01	-.299165E-01	-.166597E-01
80.00	-.652782E-01	-.558811E-01	-.361792E-01	-.319671E-01	-.302251E-01	-.166597E-01
90.00	-.652910E-01	-.558960E-01	-.362340E-01	-.318350E-01	-.304350E-01	-.166597E-01
100.00	-.652980E-01	-.559051E-01	-.362690E-01	-.317361E-01	-.305831E-01	-.166597E-01

TAB. B.23: Orbitales Δ , ion NaRb^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.468062E-01	0.439518E-01	0.675808E-01	0.979938E-01	0.110947E+00	0.112334E+00
5.20	-.485356E-01	0.383204E-01	0.629844E-01	0.923744E-01	0.105203E+00	0.106838E+00
5.40	-.502100E-01	0.329440E-01	0.585780E-01	0.869860E-01	0.994400E-01	0.101821E+00
5.60	-.518097E-01	0.278363E-01	0.543713E-01	0.818433E-01	0.938633E-01	0.970963E-01
5.80	-.533229E-01	0.230031E-01	0.503701E-01	0.769501E-01	0.885311E-01	0.926071E-01
6.00	-.547466E-01	0.184404E-01	0.465694E-01	0.723054E-01	0.834554E-01	0.883354E-01
6.20	-.560798E-01	0.141422E-01	0.429642E-01	0.679022E-01	0.786312E-01	0.842692E-01
6.40	-.573244E-01	0.100966E-01	0.395456E-01	0.637296E-01	0.740506E-01	0.803976E-01
6.60	-.584849E-01	0.629315E-02	0.363031E-01	0.597791E-01	0.697031E-01	0.767111E-01
6.80	-.595653E-01	0.271866E-02	0.332287E-01	0.560377E-01	0.655757E-01	0.731977E-01
7.00	-.605726E-01	-.638588E-03	0.303094E-01	0.524954E-01	0.616584E-01	0.698494E-01
7.20	-.615093E-01	-.379332E-02	0.275377E-01	0.491387E-01	0.579387E-01	0.666567E-01
7.40	-.623831E-01	-.675712E-02	0.249029E-01	0.459569E-01	0.544059E-01	0.636089E-01
7.60	-.631972E-01	-.954225E-02	0.223978E-01	0.429398E-01	0.510478E-01	0.606998E-01
7.80	-.639566E-01	-.121596E-01	0.200114E-01	0.400764E-01	0.478554E-01	0.579204E-01
8.00	-.646646E-01	-.146206E-01	0.177384E-01	0.373574E-01	0.448194E-01	0.552624E-01
8.20	-.653263E-01	-.169353E-01	0.155697E-01	0.347737E-01	0.419317E-01	0.527207E-01
8.40	-.659441E-01	-.191131E-01	0.135009E-01	0.323169E-01	0.391829E-01	0.502869E-01
8.60	-.665212E-01	-.211632E-01	0.115238E-01	0.299788E-01	0.365658E-01	0.479568E-01
8.80	-.670612E-01	-.230932E-01	0.963277E-02	0.277528E-01	0.340728E-01	0.457238E-01
9.00	-.675663E-01	-.249113E-01	0.782470E-02	0.256327E-01	0.316977E-01	0.435817E-01
9.20	-.680383E-01	-.266243E-01	0.609174E-02	0.236107E-01	0.294337E-01	0.415267E-01
9.40	-.684805E-01	-.282395E-01	0.443147E-02	0.216825E-01	0.272755E-01	0.395545E-01
9.60	-.688942E-01	-.297622E-01	0.283883E-02	0.198428E-01	0.252168E-01	0.376598E-01
9.80	-.692809E-01	-.311989E-01	0.131009E-02	0.180871E-01	0.232531E-01	0.358391E-01
10.00	-.696422E-01	-.325542E-01	-.159176E-03	0.164098E-01	0.213788E-01	0.340888E-01
10.20	-.699811E-01	-.338331E-01	-.157009E-02	0.148079E-01	0.195889E-01	0.324049E-01
10.40	-.702975E-01	-.350395E-01	-.292851E-02	0.132785E-01	0.178795E-01	0.307845E-01
10.60	-.705941E-01	-.361791E-01	-.423506E-02	0.118159E-01	0.162459E-01	0.292249E-01
10.80	-.708721E-01	-.372551E-01	-.549410E-02	0.104189E-01	0.146839E-01	0.277219E-01
11.00	-.711318E-01	-.382708E-01	-.670681E-02	0.908419E-02	0.131892E-01	0.262742E-01
11.20	-.713751E-01	-.392301E-01	-.787514E-02	0.780786E-02	0.117589E-01	0.248779E-01
11.40	-.716029E-01	-.401359E-01	-.900286E-02	0.658814E-02	0.103881E-01	0.235321E-01
11.60	-.718166E-01	-.409906E-01	-.100906E-01	0.542240E-02	0.907440E-02	0.222334E-01
11.80	-.720168E-01	-.417978E-01	-.111398E-01	0.430822E-02	0.781422E-02	0.209802E-01
12.00	-.722047E-01	-.425607E-01	-.121527E-01	0.324329E-02	0.660429E-02	0.197703E-01
12.20	-.723805E-01	-.432805E-01	-.131315E-01	0.222545E-02	0.544245E-02	0.186025E-01
12.40	-.725463E-01	-.439603E-01	-.140753E-01	0.125268E-02	0.432468E-02	0.174737E-01
12.60	-.727019E-01	-.446019E-01	-.149879E-01	0.322066E-03	0.325007E-02	0.163841E-01
12.80	-.728492E-01	-.452072E-01	-.158692E-01	-.568194E-03	0.221581E-02	0.153308E-01
13.00	-.729878E-01	-.457778E-01	-.167198E-01	-.141980E-02	0.121820E-02	0.143122E-01
13.50	-.733007E-01	-.470687E-01	-.187217E-01	-.339171E-02	-.112271E-02	0.119133E-01
14.00	-.735739E-01	-.481829E-01	-.205569E-01	-.516193E-02	-.326993E-02	0.970607E-02
14.50	-.738142E-01	-.491432E-01	-.222352E-01	-.675618E-02	-.524818E-02	0.767382E-02
15.00	-.740287E-01	-.499697E-01	-.237707E-01	-.819665E-02	-.707665E-02	0.580235E-02

15.50	-.742214E-01	-.506794E-01	-.251724E-01	-.950742E-02	-.877142E-02	0.407558E-02
16.00	-.743957E-01	-.512897E-01	-.264487E-01	-.107167E-01	-.103327E-01	0.248327E-02
16.50	-.745553E-01	-.518133E-01	-.276113E-01	-.119473E-01	-.116673E-01	0.101270E-02
17.00	-.747025E-01	-.522625E-01	-.286665E-01	-.132865E-01	-.127095E-01	-.345487E-03
17.50	-.748375E-01	-.526475E-01	-.296225E-01	-.145805E-01	-.136305E-01	-.160151E-02
100.00	-.120441E+00	-.984561E-01	-.759671E-01	-.612831E-01	-.599521E-01	-.482431E-01
18.50	-.750791E-01	-.532611E-01	-.312711E-01	-.169601E-01	-.152501E-01	-.384206E-02
19.00	-.751875E-01	-.535055E-01	-.319755E-01	-.180495E-01	-.159695E-01	-.484153E-02
19.50	-.752879E-01	-.537169E-01	-.326099E-01	-.190779E-01	-.166359E-01	-.576991E-02
20.00	-.753816E-01	-.538996E-01	-.331796E-01	-.200486E-01	-.172576E-01	-.663256E-02
20.50	-.754693E-01	-.540583E-01	-.336903E-01	-.209653E-01	-.178363E-01	-.743631E-02
21.00	-.755505E-01	-.541975E-01	-.341475E-01	-.218295E-01	-.183775E-01	-.818453E-02
21.50	-.756252E-01	-.543192E-01	-.345552E-01	-.226452E-01	-.188852E-01	-.888421E-02
22.00	-.756960E-01	-.544270E-01	-.349190E-01	-.234140E-01	-.193620E-01	-.953796E-02
22.50	-.757611E-01	-.545231E-01	-.352421E-01	-.241391E-01	-.198111E-01	-.101501E-01
23.00	-.758216E-01	-.546086E-01	-.355296E-01	-.248226E-01	-.202336E-01	-.107246E-01
23.50	-.758773E-01	-.546863E-01	-.357843E-01	-.254653E-01	-.206333E-01	-.112653E-01
24.00	-.759297E-01	-.547557E-01	-.360097E-01	-.260697E-01	-.210117E-01	-.117737E-01
24.50	-.759791E-01	-.548191E-01	-.362091E-01	-.266391E-01	-.213701E-01	-.122531E-01
25.00	-.760237E-01	-.548777E-01	-.363847E-01	-.271727E-01	-.217097E-01	-.127067E-01
26.00	-.761051E-01	-.549801E-01	-.366741E-01	-.281421E-01	-.223411E-01	-.135441E-01
27.00	-.761762E-01	-.550672E-01	-.368982E-01	-.289912E-01	-.229152E-01	-.143002E-01
28.00	-.762388E-01	-.551438E-01	-.370708E-01	-.297308E-01	-.234368E-01	-.149878E-01
29.00	-.762927E-01	-.552107E-01	-.372047E-01	-.303697E-01	-.239147E-01	-.156177E-01
30.00	-.763406E-01	-.552686E-01	-.373106E-01	-.309156E-01	-.243516E-01	-.161946E-01
32.00	-.764197E-01	-.553677E-01	-.374707E-01	-.317657E-01	-.251217E-01	-.172147E-01
35.00	-.765089E-01	-.554799E-01	-.376639E-01	-.325389E-01	-.260669E-01	-.184459E-01
37.00	-.555393E-01	-.377923E-01	-.328033E-01	-.265843E-01	-.190903E-01	-.948328E-02
40.00	-.556092E-01	-.379892E-01	-.329582E-01	-.272322E-01	-.198322E-01	-.982815E-02
45.00	-.556917E-01	-.382877E-01	-.328977E-01	-.280537E-01	-.206237E-01	-.101337E-01
50.00	-.557493E-01	-.385143E-01	-.327243E-01	-.286513E-01	-.210813E-01	-.102173E-01
55.00	-.557891E-01	-.386761E-01	-.325491E-01	-.290981E-01	-.213691E-01	-.101941E-01
60.00	-.558190E-01	-.387920E-01	-.323940E-01	-.294390E-01	-.215660E-01	-.101380E-01
70.00	-.558576E-01	-.321466E-01	-.299166E-01	-.100226E-01	-.861062E-02	0.903724E-01
80.00	-.558812E-01	-.319672E-01	-.302252E-01	-.992920E-02	-.882720E-02	0.903498E-01
90.00	-.558960E-01	-.318350E-01	-.304350E-01	-.985601E-02	-.897301E-02	0.903360E-01
100.00	-.559051E-01	-.317361E-01	-.305831E-01	-.979908E-02	-.907508E-02	0.903269E-01

TAB. B.24: Orbitales Δ , ion NaCs⁺

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.211200E-01	0.466190E-01	0.767950E-01	0.106683E+00	0.122810E+00	0.130372E+00
5.20	-.281906E-01	0.351054E-01	0.666294E-01	0.951234E-01	0.111417E+00	0.118359E+00
5.40	-.331886E-01	0.261094E-01	0.587844E-01	0.859954E-01	0.102308E+00	0.108855E+00
5.60	-.368283E-01	0.188597E-01	0.525117E-01	0.785467E-01	0.947367E-01	0.101109E+00
5.80	-.395760E-01	0.128450E-01	0.473210E-01	0.722790E-01	0.882180E-01	0.946120E-01
6.00	-.417348E-01	0.772022E-02	0.428862E-01	0.668602E-01	0.824462E-01	0.890182E-01
6.20	-.434992E-01	0.325476E-02	0.389938E-01	0.620698E-01	0.772238E-01	0.840858E-01
6.40	-.449950E-01	-.708024E-03	0.355000E-01	0.577560E-01	0.724220E-01	0.796500E-01
6.60	-.463050E-01	-.427603E-02	0.323100E-01	0.538180E-01	0.679590E-01	0.755970E-01
6.80	-.474814E-01	-.752736E-02	0.293586E-01	0.501846E-01	0.637766E-01	0.718476E-01
7.00	-.485558E-01	-.105138E-01	0.266012E-01	0.468032E-01	0.598352E-01	0.683462E-01
7.20	-.495507E-01	-.132767E-01	0.240093E-01	0.436403E-01	0.561053E-01	0.650543E-01
7.40	-.504801E-01	-.158441E-01	0.215599E-01	0.406669E-01	0.525679E-01	0.619449E-01
7.60	-.513514E-01	-.182394E-01	0.192366E-01	0.378626E-01	0.492046E-01	0.589956E-01
7.80	-.521725E-01	-.204815E-01	0.170285E-01	0.352105E-01	0.460015E-01	0.561935E-01
8.00	-.529464E-01	-.225844E-01	0.149256E-01	0.326976E-01	0.429496E-01	0.535226E-01
8.20	-.536762E-01	-.245612E-01	0.129188E-01	0.303128E-01	0.400398E-01	0.509758E-01
8.40	-.543644E-01	-.264204E-01	0.110036E-01	0.280466E-01	0.372616E-01	0.485426E-01
8.60	-.550122E-01	-.281732E-01	0.917280E-02	0.258908E-01	0.346108E-01	0.462158E-01
8.80	-.556212E-01	-.298262E-01	0.742284E-02	0.238378E-01	0.320788E-01	0.439898E-01
9.00	-.561940E-01	-.313880E-01	0.574698E-02	0.218810E-01	0.296620E-01	0.418580E-01
9.20	-.567319E-01	-.328629E-01	0.414108E-02	0.200131E-01	0.273531E-01	0.398151E-01
9.40	-.572355E-01	-.342585E-01	0.260250E-02	0.182315E-01	0.251475E-01	0.378555E-01
9.60	-.577080E-01	-.355790E-01	0.112700E-02	0.165280E-01	0.230410E-01	0.359750E-01
9.80	-.581492E-01	-.368292E-01	-.290231E-03	0.149008E-01	0.210298E-01	0.341698E-01
10.00	-.585607E-01	-.380147E-01	-.165069E-02	0.133433E-01	0.191093E-01	0.324363E-01
10.20	-.589455E-01	-.391375E-01	-.295955E-02	0.118535E-01	0.172745E-01	0.307695E-01
10.40	-.593037E-01	-.402037E-01	-.421771E-02	0.104263E-01	0.155243E-01	0.291663E-01
10.60	-.596368E-01	-.412148E-01	-.542979E-02	0.905821E-02	0.138532E-01	0.276242E-01
10.80	-.599462E-01	-.421752E-01	-.659621E-02	0.774779E-02	0.122578E-01	0.261388E-01
11.00	-.602341E-01	-.430871E-01	-.772113E-02	0.648987E-02	0.107359E-01	0.247089E-01
11.20	-.605005E-01	-.439545E-01	-.880653E-02	0.528347E-02	0.928447E-02	0.233305E-01
11.40	-.607462E-01	-.447782E-01	-.985320E-02	0.412480E-02	0.789980E-02	0.220018E-01
11.60	-.609747E-01	-.455617E-01	-.108647E-01	0.301125E-02	0.657825E-02	0.207203E-01
11.80	-.611856E-01	-.463066E-01	-.118406E-01	0.194137E-02	0.531937E-02	0.194834E-01
12.00	-.613792E-01	-.470162E-01	-.127842E-01	0.912843E-03	0.411784E-02	0.182898E-01
12.20	-.615585E-01	-.476915E-01	-.136965E-01	-.764857E-04	0.297251E-02	0.171365E-01
12.40	-.617227E-01	-.483347E-01	-.145777E-01	-.102966E-02	0.187934E-02	0.160223E-01
12.60	-.618736E-01	-.489466E-01	-.154306E-01	-.194658E-02	0.838416E-03	0.149464E-01
12.80	-.620121E-01	-.495301E-01	-.162551E-01	-.283108E-02	-.156076E-03	0.139059E-01
13.00	-.621388E-01	-.500858E-01	-.170528E-01	-.368284E-02	-.110384E-02	0.129002E-01
13.50	-.624103E-01	-.513633E-01	-.189333E-01	-.568334E-02	-.328734E-02	0.105267E-01
14.00	-.626248E-01	-.524968E-01	-.206608E-01	-.751579E-02	-.523379E-02	0.834221E-02
14.50	-.627939E-01	-.535019E-01	-.222479E-01	-.919994E-02	-.697194E-02	0.632906E-02
15.00	-.629271E-01	-.543951E-01	-.237011E-01	-.107531E-01	-.853005E-02	0.447395E-02

15.50	-.630322E-01	-.551872E-01	-.250302E-01	-.121882E-01	-.993024E-02	0.276476E-02
16.00	-.631158E-01	-.558898E-01	-.262448E-01	-.135198E-01	-.111958E-01	0.119122E-02
16.50	-.631844E-01	-.565114E-01	-.273494E-01	-.147594E-01	-.123424E-01	-.256416E-03
17.00	-.632425E-01	-.570615E-01	-.283545E-01	-.159155E-01	-.133875E-01	-.158654E-02
17.50	-.632944E-01	-.575454E-01	-.292674E-01	-.169964E-01	-.143424E-01	-.280637E-02
18.00	-.633432E-01	-.579712E-01	-.300942E-01	-.180102E-01	-.152202E-01	-.392616E-02
18.50	-.633923E-01	-.583443E-01	-.308413E-01	-.189643E-01	-.160303E-01	-.495027E-02
19.00	-.634423E-01	-.586693E-01	-.315173E-01	-.198623E-01	-.167793E-01	-.588729E-02
19.50	-.634952E-01	-.589532E-01	-.321272E-01	-.207102E-01	-.174762E-01	-.674416E-02
20.00	-.635503E-01	-.591993E-01	-.326763E-01	-.215113E-01	-.181253E-01	-.752725E-02
20.50	-.636094E-01	-.594124E-01	-.331704E-01	-.222694E-01	-.187334E-01	-.824339E-02
21.00	-.636700E-01	-.595970E-01	-.336150E-01	-.229880E-01	-.193030E-01	-.889895E-02
21.50	-.637319E-01	-.597569E-01	-.340129E-01	-.236689E-01	-.198399E-01	-.949994E-02
22.00	-.637960E-01	-.598950E-01	-.343700E-01	-.243160E-01	-.203460E-01	-.100530E-01
22.50	-.638593E-01	-.600153E-01	-.346883E-01	-.249293E-01	-.208233E-01	-.105623E-01
23.00	-.639231E-01	-.601201E-01	-.349731E-01	-.255111E-01	-.212761E-01	-.110331E-01
23.50	-.639860E-01	-.602120E-01	-.352250E-01	-.260640E-01	-.217050E-01	-.114720E-01
24.00	-.640465E-01	-.602925E-01	-.354485E-01	-.265895E-01	-.221115E-01	-.118805E-01
24.50	-.641051E-01	-.603641E-01	-.356441E-01	-.270871E-01	-.224981E-01	-.122651E-01
25.00	-.641629E-01	-.604279E-01	-.358169E-01	-.275599E-01	-.228659E-01	-.126269E-01
26.00	-.642696E-01	-.605366E-01	-.360946E-01	-.284346E-01	-.235486E-01	-.132946E-01
27.00	-.643658E-01	-.606258E-01	-.362958E-01	-.292208E-01	-.241678E-01	-.139018E-01
28.00	-.644527E-01	-.606997E-01	-.364327E-01	-.299267E-01	-.247307E-01	-.144597E-01
29.00	-.645306E-01	-.607636E-01	-.365156E-01	-.305606E-01	-.252416E-01	-.149766E-01
30.00	-.646007E-01	-.608187E-01	-.365527E-01	-.311287E-01	-.257067E-01	-.154547E-01
32.00	-.647190E-01	-.609090E-01	-.365250E-01	-.320940E-01	-.265160E-01	-.163080E-01
35.00	-.648535E-01	-.610095E-01	-.363265E-01	-.331885E-01	-.274815E-01	-.173465E-01
37.00	-.649229E-01	-.610619E-01	-.361499E-01	-.337329E-01	-.279939E-01	-.178959E-01
40.00	-.650029E-01	-.358889E-01	-.343349E-01	-.286109E-01	-.185469E-01	-.148159E-01
45.00	-.650956E-01	-.356136E-01	-.348816E-01	-.293486E-01	-.193196E-01	-.157546E-01
50.00	-.651552E-01	-.356572E-01	-.349582E-01	-.298442E-01	-.198672E-01	-.163002E-01
55.00	-.651960E-01	-.358070E-01	-.348730E-01	-.301880E-01	-.202820E-01	-.166110E-01
60.00	-.652239E-01	-.359299E-01	-.347909E-01	-.304299E-01	-.206009E-01	-.167949E-01
70.00	-.652586E-01	-.360886E-01			-.210366E-01	-.169956E-01
80.00	-.652782E-01	-.361792E-01			-.212982E-01	-.171022E-01
90.00	-.652910E-01	-.362340E-01				-.171670E-01
100.00	-.652981E-01	-.362691E-01				-.172091E-01

TAB. B.25: Orbitales Δ , ion KRb^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	-.229722E-01	0.551808E-01	0.891508E-01	0.119885E+00	0.137176E+00	0.141371E+00
5.20	-.388953E-01	0.345917E-01	0.699687E-01	0.993967E-01	0.116973E+00	0.120404E+00
5.40	-.482027E-01	0.210603E-01	0.576273E-01	0.858443E-01	0.103485E+00	0.106529E+00
5.60	-.537436E-01	0.116854E-01	0.492484E-01	0.763444E-01	0.938074E-01	0.968974E-01
5.80	-.571419E-01	0.479505E-02	0.431861E-01	0.692451E-01	0.863331E-01	0.898121E-01
6.00	-.593257E-01	-.575705E-03	0.384933E-01	0.635963E-01	0.801903E-01	0.842523E-01
6.20	-.608186E-01	-.498663E-02	0.346284E-01	0.588524E-01	0.748904E-01	0.796154E-01
6.40	-.619176E-01	-.876459E-02	0.312824E-01	0.546964E-01	0.701524E-01	0.755594E-01
6.60	-.627911E-01	-.121021E-01	0.282739E-01	0.509449E-01	0.658099E-01	0.718879E-01
6.80	-.635298E-01	-.151158E-01	0.255022E-01	0.474912E-01	0.617652E-01	0.684872E-01
7.00	-.641875E-01	-.178745E-01	0.229065E-01	0.442705E-01	0.579605E-01	0.652915E-01
7.20	-.647908E-01	-.204248E-01	0.204512E-01	0.412422E-01	0.543572E-01	0.622622E-01
7.40	-.653566E-01	-.227956E-01	0.181134E-01	0.383804E-01	0.509334E-01	0.593764E-01
7.60	-.658906E-01	-.250096E-01	0.158814E-01	0.356674E-01	0.476724E-01	0.566174E-01
7.80	-.663982E-01	-.270822E-01	0.137448E-01	0.330908E-01	0.445638E-01	0.539748E-01
8.00	-.668810E-01	-.290250E-01	0.116970E-01	0.306400E-01	0.415980E-01	0.514400E-01
8.20	-.673410E-01	-.308490E-01	0.973302E-02	0.283070E-01	0.387660E-01	0.490090E-01
8.40	-.677782E-01	-.325622E-01	0.784780E-02	0.260838E-01	0.360628E-01	0.466748E-01
8.60	-.681930E-01	-.341730E-01	0.603702E-02	0.239660E-01	0.334820E-01	0.444320E-01
8.80	-.685871E-01	-.356891E-01	0.429786E-02	0.219449E-01	0.310179E-01	0.422789E-01
9.00	-.689601E-01	-.371151E-01	0.262689E-02	0.200179E-01	0.286649E-01	0.402089E-01
9.20	-.693140E-01	-.384580E-01	0.102002E-02	0.181770E-01	0.264190E-01	0.382180E-01
9.40	-.696475E-01	-.397225E-01	-.525537E-03	0.164195E-01	0.242755E-01	0.363045E-01
9.60	-.699623E-01	-.409143E-01	-.201229E-02	0.147407E-01	0.222287E-01	0.344637E-01
9.80	-.702595E-01	-.420375E-01	-.344348E-02	0.131345E-01	0.202765E-01	0.326915E-01
10.00	-.705401E-01	-.430951E-01	-.482211E-02	0.115989E-01	0.184129E-01	0.309859E-01
10.20	-.708039E-01	-.440939E-01	-.614895E-02	0.101301E-01	0.166351E-01	0.293431E-01
10.40	-.710525E-01	-.450345E-01	-.742854E-02	0.872346E-02	0.149395E-01	0.277605E-01
10.60	-.712872E-01	-.459222E-01	-.866124E-02	0.737576E-02	0.133218E-01	0.262358E-01
10.80	-.715072E-01	-.467602E-01	-.985019E-02	0.608481E-02	0.117788E-01	0.247648E-01
11.00	-.717153E-01	-.475493E-01	-.109963E-01	0.484566E-02	0.103067E-01	0.233467E-01
11.20	-.719115E-01	-.482955E-01	-.121015E-01	0.365752E-02	0.890252E-02	0.219775E-01
11.40	-.720952E-01	-.489982E-01	-.131682E-01	0.251776E-02	0.756376E-02	0.206568E-01
11.60	-.722691E-01	-.496621E-01	-.141971E-01	0.142191E-02	0.628691E-02	0.193819E-01
11.80	-.724334E-01	-.502884E-01	-.151904E-01	0.368640E-03	0.506964E-02	0.181506E-01
12.00	-.725882E-01	-.508792E-01	-.161482E-01	-.643239E-03	0.390676E-02	0.169608E-01
12.20	-.727338E-01	-.514378E-01	-.170718E-01	-.161780E-02	0.279820E-02	0.158122E-01
12.40	-.728720E-01	-.519640E-01	-.179640E-01	-.255599E-02	0.174101E-02	0.147010E-01
12.60	-.730027E-01	-.524597E-01	-.188237E-01	-.345966E-02	0.730342E-03	0.136273E-01
12.80	-.731255E-01	-.529285E-01	-.196525E-01	-.433153E-02	-.233534E-03	0.125895E-01
13.00	-.732423E-01	-.533703E-01	-.204513E-01	-.517126E-02	-.115426E-02	0.115847E-01
13.50	-.735094E-01	-.543674E-01	-.223254E-01	-.714942E-02	-.328142E-02	0.921758E-02
14.00	-.737462E-01	-.552272E-01	-.240302E-01	-.896618E-02	-.518518E-02	0.703982E-02
14.50	-.739568E-01	-.559688E-01	-.255788E-01	-.106438E-01	-.689276E-02	0.503524E-02
15.00	-.741460E-01	-.566070E-01	-.269820E-01	-.121970E-01	-.843301E-02	0.319199E-02

15.50	-.743187E-01	-.571547E-01	-.282507E-01	-.136417E-01	-.982471E-02	0.149629E-02
16.00	-.744769E-01	-.576259E-01	-.293949E-01	-.149899E-01	-.110899E-01	-.609122E-04
16.50	-.746221E-01	-.580311E-01	-.304241E-01	-.162511E-01	-.122441E-01	-.149113E-02
17.00	-.747576E-01	-.583786E-01	-.313486E-01	-.174356E-01	-.133016E-01	-.280261E-02
17.50	-.748835E-01	-.586775E-01	-.321765E-01	-.185505E-01	-.142725E-01	-.400646E-02
18.00	-.750008E-01	-.589348E-01	-.329168E-01	-.196018E-01	-.151688E-01	-.510979E-02
18.50	-.751109E-01	-.591579E-01	-.335769E-01	-.205949E-01	-.159979E-01	-.612189E-02
19.00	-.752143E-01	-.593503E-01	-.341643E-01	-.215333E-01	-.167663E-01	-.705129E-02
19.50	-.753109E-01	-.595169E-01	-.346859E-01	-.224229E-01	-.174819E-01	-.790488E-02
20.00	-.754009E-01	-.596629E-01	-.351479E-01	-.232649E-01	-.181489E-01	-.868895E-02
20.50	-.754853E-01	-.597913E-01	-.355563E-01	-.240633E-01	-.187733E-01	-.941331E-02
21.00	-.755643E-01	-.599053E-01	-.359163E-01	-.248193E-01	-.193573E-01	-.100813E-01
21.50	-.756379E-01	-.600049E-01	-.362329E-01	-.255359E-01	-.199049E-01	-.107009E-01
22.00	-.757067E-01	-.600947E-01	-.365097E-01	-.262137E-01	-.204207E-01	-.112767E-01
22.50	-.757710E-01	-.601750E-01	-.367510E-01	-.268550E-01	-.209060E-01	-.118130E-01
23.00	-.758297E-01	-.602477E-01	-.369617E-01	-.274617E-01	-.213637E-01	-.123157E-01
23.50	-.758857E-01	-.603137E-01	-.371427E-01	-.280347E-01	-.217967E-01	-.127887E-01
24.00	-.759375E-01	-.603745E-01	-.372995E-01	-.285755E-01	-.222055E-01	-.132335E-01
24.50	-.759854E-01	-.604294E-01	-.374324E-01	-.290854E-01	-.225934E-01	-.136554E-01
25.00	-.760305E-01	-.604795E-01	-.375455E-01	-.295665E-01	-.229605E-01	-.140555E-01
26.00	-.761111E-01	-.605691E-01	-.377171E-01	-.304461E-01	-.236411E-01	-.148001E-01
27.00	-.761804E-01	-.606464E-01	-.378314E-01	-.312224E-01	-.242544E-01	-.154794E-01
28.00	-.762425E-01	-.607145E-01	-.379005E-01	-.319055E-01	-.248115E-01	-.161045E-01
29.00	-.762958E-01	-.607728E-01	-.379368E-01	-.325028E-01	-.253158E-01	-.166798E-01
30.00	-.763434E-01	-.608254E-01	-.379474E-01	-.330234E-01	-.257744E-01	-.172094E-01
32.00	-.764218E-01	-.609128E-01	-.379318E-01	-.338538E-01	-.265708E-01	-.181458E-01
35.00	-.765104E-01		-.379054E-01	-.346544E-01	-.275204E-01	-.192634E-01
37.00	-.765555E-01		-.379305E-01	-.349455E-01	-.280245E-01	-.198355E-01
40.00	-.766070E-01		-.380410E-01	-.351290E-01	-.286310E-01	-.204710E-01
45.00	-.766663E-01		-.382963E-01	-.351063E-01	-.293563E-01	-.210893E-01
50.00	-.767046E-01		-.385156E-01	-.349856E-01	-.298476E-01	-.213806E-01
55.00	-.767303E-01		-.386763E-01	-.348753E-01	-.301893E-01	-.215313E-01
60.00	-.767491E-01		-.387921E-01	-.347911E-01	-.304311E-01	-.216371E-01
70.00	-.767717E-01		-.389387E-01			-.218187E-01
80.00	-.767843E-01		-.390223E-01			-.219493E-01
90.00	-.767920E-01		-.390740E-01			-.220330E-01
100.00	-.767971E-01		-.391071E-01			-.220871E-01

TAB. B.26: Orbitales Δ , ion KCs^+

R(ua)	(1) ² Δ	(2) ² Δ	(3) ² Δ	(4) ² Δ	(5) ² Δ	(6) ² Δ
5.00	0.283402E-01	0.106413E+00	0.144251E+00	0.175615E+00	0.193226E+00	0.213903E+00
5.20	-.358478E-02	0.691582E-01	0.108755E+00	0.138729E+00	0.157044E+00	0.176842E+00
5.40	-.246977E-01	0.432243E-01	0.843043E-01	0.112994E+00	0.131925E+00	0.150886E+00
5.60	-.386883E-01	0.248667E-01	0.671867E-01	0.946887E-01	0.114157E+00	0.132328E+00
5.80	-.479892E-01	0.116008E-01	0.549478E-01	0.813508E-01	0.101281E+00	0.118712E+00
6.00	-.542051E-01	0.177891E-02	0.459659E-01	0.713509E-01	0.916759E-01	0.108418E+00
6.20	-.583919E-01	-.569595E-02	0.391661E-01	0.636111E-01	0.842661E-01	0.100372E+00
6.40	-.612451E-01	-.115531E-01	0.338409E-01	0.574159E-01	0.783429E-01	0.938619E-01
6.60	-.632234E-01	-.162794E-01	0.295196E-01	0.522916E-01	0.734366E-01	0.884176E-01
6.80	-.646260E-01	-.202010E-01	0.258910E-01	0.479220E-01	0.692360E-01	0.837240E-01
7.00	-.656495E-01	-.235385E-01	0.227495E-01	0.440975E-01	0.655345E-01	0.795745E-01
7.20	-.664227E-01	-.264417E-01	0.199573E-01	0.406753E-01	0.621963E-01	0.758273E-01
7.40	-.670302E-01	-.290112E-01	0.174238E-01	0.375608E-01	0.591298E-01	0.723878E-01
7.60	-.675275E-01	-.313185E-01	0.150875E-01	0.346885E-01	0.562735E-01	0.691935E-01
7.80	-.679483E-01	-.334143E-01	0.129067E-01	0.320137E-01	0.535877E-01	0.661977E-01
8.00	-.683171E-01	-.353331E-01	0.108539E-01	0.295039E-01	0.510429E-01	0.633719E-01
8.20	-.686479E-01	-.371009E-01	0.890914E-02	0.271361E-01	0.486201E-01	0.606921E-01
8.40	-.689516E-01	-.387376E-01	0.705935E-02	0.248954E-01	0.463064E-01	0.581414E-01
8.60	-.692327E-01	-.402587E-01	0.529334E-02	0.227673E-01	0.440913E-01	0.557083E-01
8.80	-.694965E-01	-.416765E-01	0.360553E-02	0.207425E-01	0.419655E-01	0.533835E-01
9.00	-.697458E-01	-.429988E-01	0.198915E-02	0.188122E-01	0.399252E-01	0.511582E-01
9.20	-.699813E-01	-.442353E-01	0.438711E-03	0.169697E-01	0.379637E-01	0.490247E-01
9.40	-.702054E-01	-.453924E-01	-.104741E-02	0.152106E-01	0.360776E-01	0.469786E-01
9.60	-.704192E-01	-.464772E-01	-.247415E-02	0.135278E-01	0.342628E-01	0.450148E-01
9.80	-.706230E-01	-.474930E-01	-.384397E-02	0.119180E-01	0.325160E-01	0.431290E-01
10.00	-.708169E-01	-.484459E-01	-.515891E-02	0.103761E-01	0.308351E-01	0.413151E-01
10.20	-.710017E-01	-.493397E-01	-.642272E-02	0.889928E-02	0.292163E-01	0.395723E-01
10.40	-.711798E-01	-.501788E-01	-.763685E-02	0.748415E-02	0.276562E-01	0.378942E-01
10.60	-.713495E-01	-.509665E-01	-.880354E-02	0.612646E-02	0.261535E-01	0.362795E-01
10.80	-.715128E-01	-.517058E-01	-.992482E-02	0.482318E-02	0.247052E-01	0.347232E-01
11.00	-.716695E-01	-.524005E-01	-.110015E-01	0.357246E-02	0.233085E-01	0.332245E-01
11.20	-.718204E-01	-.530524E-01	-.120374E-01	0.237165E-02	0.219626E-01	0.317796E-01
11.40	-.719648E-01	-.536658E-01	-.130338E-01	0.121721E-02	0.206642E-01	0.303862E-01
11.60	-.721052E-01	-.542422E-01	-.139902E-01	0.106778E-03	0.194128E-01	0.290418E-01
11.80	-.722399E-01	-.547839E-01	-.149109E-01	-.960889E-03	0.182041E-01	0.277441E-01
12.00	-.723709E-01	-.552929E-01	-.157959E-01	-.198890E-02	0.170381E-01	0.264911E-01
12.20	-.724973E-01	-.557713E-01	-.166463E-01	-.297826E-02	0.159127E-01	0.252807E-01
12.40	-.726198E-01	-.562218E-01	-.174648E-01	-.393085E-02	0.148272E-01	0.241102E-01
12.60	-.727395E-01	-.566455E-01	-.182515E-01	-.484945E-02	0.137775E-01	0.229795E-01
12.80	-.728548E-01	-.570448E-01	-.190078E-01	-.573475E-02	0.127652E-01	0.218862E-01
13.00	-.729664E-01	-.574194E-01	-.197344E-01	-.658835E-02	0.117866E-01	0.208276E-01
13.50	-.732334E-01	-.582654E-01	-.214314E-01	-.859536E-02	0.948364E-02	0.183286E-01
14.00	-.734809E-01	-.589949E-01	-.229669E-01	-.104359E-01	0.737006E-02	0.160221E-01
14.50	-.737129E-01	-.596269E-01	-.243559E-01	-.121279E-01	0.542808E-02	0.138871E-01
15.00	-.739278E-01	-.601738E-01	-.256118E-01	-.136868E-01	0.364418E-02	0.119102E-01

15.50	-.741282E-01	-.606512E-01	-.267442E-01	-.151282E-01	0.200280E-02	0.100748E-01
16.00	-.743129E-01	-.610679E-01	-.277659E-01	-.164619E-01	0.492107E-03	0.836911E-02
16.50	-.744853E-01	-.614333E-01	-.286853E-01	-.176993E-01	-.898291E-03	0.678171E-02
17.00	-.746435E-01	-.617545E-01	-.295115E-01	-.188505E-01	-.217950E-02	0.530350E-02
17.50	-.747905E-01	-.620395E-01	-.302535E-01	-.199225E-01	-.336254E-02	0.392446E-02
18.00	-.749265E-01	-.622925E-01	-.309205E-01	-.209225E-01	-.445345E-02	0.263755E-02
18.50	-.750515E-01	-.625185E-01	-.315195E-01	-.218565E-01	-.546346E-02	0.143654E-02
19.00	-.751670E-01	-.627210E-01	-.320570E-01	-.227300E-01	-.639804E-02	0.314961E-03
19.50	-.752730E-01	-.629030E-01	-.325400E-01	-.235480E-01	-.726503E-02	-.734033E-03
20.00	-.753717E-01	-.630677E-01	-.329737E-01	-.243147E-01	-.807171E-02	-.171371E-02
20.50	-.754618E-01	-.632168E-01	-.333648E-01	-.250328E-01	-.882185E-02	-.262885E-02
21.00	-.755458E-01	-.633528E-01	-.337178E-01	-.257078E-01	-.952276E-02	-.348476E-02
21.50	-.756234E-01	-.634774E-01	-.340374E-01	-.263404E-01	-.101784E-01	-.428440E-02
22.00	-.756953E-01	-.635903E-01	-.343263E-01	-.269343E-01	-.107933E-01	-.503134E-02
22.50	-.757609E-01	-.636949E-01	-.345889E-01	-.274919E-01	-.113719E-01	-.572986E-02
23.00	-.758230E-01	-.637910E-01	-.348280E-01	-.280150E-01	-.119170E-01	-.638195E-02
23.50	-.758793E-01	-.638803E-01	-.350463E-01	-.285063E-01	-.124303E-01	-.699235E-02
24.00	-.759326E-01	-.639616E-01	-.352466E-01	-.289676E-01	-.129176E-01	-.756158E-02
24.50	-.759809E-01	-.640379E-01	-.354309E-01	-.294009E-01	-.133779E-01	-.809495E-02
25.00	-.760266E-01	-.641086E-01	-.356016E-01	-.298066E-01	-.138146E-01	-.859260E-02
26.00	-.761084E-01	-.642344E-01	-.359044E-01	-.305444E-01	-.146234E-01	-.949544E-02
27.00	-.761801E-01	-.643441E-01	-.361661E-01	-.311921E-01	-.153541E-01	-.102871E-01
28.00	-.762417E-01	-.644397E-01	-.363957E-01	-.317597E-01	-.160137E-01	-.109827E-01
29.00	-.762956E-01	-.645226E-01	-.365986E-01	-.322566E-01	-.166096E-01	-.115976E-01
30.00	-.763438E-01	-.645958E-01	-.367798E-01	-.326918E-01	-.171458E-01	-.121428E-01
32.00	-.764227E-01	-.647187E-01	-.370917E-01	-.334027E-01	-.180587E-01	-.130617E-01
35.00	-.765117E-01	-.648557E-01	-.374707E-01	-.341647E-01	-.190847E-01	-.141167E-01
37.00	-.765555E-01	-.648557E-01	-.376805E-01	-.345275E-01	-.195865E-01	-.146615E-01
40.00	-.766078E-01	-.648557E-01	-.379448E-01	-.349268E-01	-.201398E-01	-.152988E-01
45.00	-.766668E-01	-.648557E-01	-.382798E-01	-.353558E-01	-.207318E-01	-.160028E-01
50.00	-.767050E-01	-.648557E-01	-.385130E-01	-.356240E-01	-.211100E-01	-.164080E-01
55.00	-.767305E-01	-.648557E-01	-.386755E-01	-.358035E-01	-.213755E-01	-.166495E-01
60.00	-.767493E-01	-.648557E-01	-.387923E-01	-.359293E-01	-.215673E-01	-.168063E-01
70.00	-.767718E-01	-.648557E-01	-.389388E-01	-.359293E-01	-.218108E-01	-.169958E-01
80.00	-.767843E-01	-.648557E-01	-.390223E-01	-.359293E-01	-.219493E-01	-.169958E-01
90.00	-.767921E-01	-.648557E-01	-.390741E-01	-.359293E-01	-.220331E-01	-.169958E-01
100.00	-.767971E-01	-.648557E-01	-.391071E-01	-.359293E-01	-.220871E-01	-.169958E-01

TAB. B.27: Orbitales Δ , ion RbCs^+

Bibliographie

- [1] H. WANG and W. STWALLEY, *J. Chem. Phys.* **108**, 5767 (1998).
- [2] S. AZIZI, M. AYMAR, and O. DULIEU, *Eur. Phys. J. D.* **31**, 195 (2004).
- [3] J. ESCHNER, G. MORIGI, F. SCHMIDT-KALER, and R. BLAT, *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 1003 (2003).
- [4] C. E. WIEMAN, D. E. PRITCHARD, and D. J. WINELAND, *Rev. Mod. Phys.* **71**, s253 (1999).
- [5] W. KETTERLE, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1131 (2002).
- [6] C. A. REGAL, C. TICKNOR, J. L. BOHN, and D. S. JIN, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 053201 (2003).
- [7] S. BOSE, *Z. Phys.* **26**, 178 (1924).
- [8] A. EINSTEIN, *Zweite Abhandlung*, 3 (1925).
- [9] S. INTERNET OFFICIEL DE LA FONDATION NOBEL, *www.nobel.se*.
- [10] N. DJEU and W. T. WHITNEY, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 238 (1981).
- [11] J. T. BAHNS, W. C. STWALLEY, and P. L. GOULD, *J. Chem. Phys.* **104**, 9689 (1996).
- [12] P. VAN DER STRAATEN and H. METCALF, *The Quest for BEC. Interactions in Ultracold Gases. From Atoms to Molecules. M. Weidemüller and C. Zimmermann*.
- [13] M. DI ROSA, *ITAMP-CUA Workshop on Ultracold Polar Molecules Cambridge* (2004).
- [14] A. FIORETTI, D. COMPARAT, A. CRUBELLIER, O. DULIEU, F. MASNOU-SEEUWS, and P. PILLET, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4402 (1998).
- [15] H. R. THORSHEIM, J. WEINER, and P. S. JULIENNE, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2420 (1987).
- [16] J. WEINER, V. S. BAGNATO, S. ZILIO, and P. S. JULIENNE, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1 (1999).
- [17] F. MASNOU-SEEUWS and P. PILLET, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 53 (2001).
- [18] J. T. BAHNS, W. C. STWALLEY, and P. L. GOULD, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **42**, 171 (2000).
- [19] W. C. STWALLEY and H. WANG, *J. Mol. Spectrosc.* **195**, 194 (1999).

- [20] T. TAKEKOSHI, B. M. PATTERSON, and R. J. KNIZE, *Phys. Rev. A* **59**, R5 (1998).
- [21] A. N. NIKOLOV, J. R. ENSCHER, E. E. EYLER, X. T. WANG, J. LI, H. WANG, W. C. STWALLEY, and P. L. GOULD, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 703 (1999).
- [22] A. N. NIKOLOV, J. R. ENSCHER, E. E. EYLER, H. WANG, W. C. STWALLEY, and P. L. GOULD, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 246 (2000).
- [23] C. GABBANINI, A. FIORETTI, A. LUCCHESINI, S. GOZZINI, and M. MAZZONI, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2814 (2000).
- [24] C. M. DION, C. DRAG, O. DULIEU, B. LABURTHE-TOLRA, F. MASNOU-SEEUWS, and P. PILLET, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2253 (2001).
- [25] F. FATEMI, K. JONES, P. LETT, and E. TIESINGA, *Phys. Rev. A* **66**, 053401 (2002).
- [26] D. WANG, J. QI, M. F. STONE, O. NIKOLAYEVA, H. WANG, B. HATTAWAY, S. D. GENSEMER, P. L. GOULD, E. E. EYLER, and W. C. STWALLEY, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 243005 (2004).
- [27] M. W. MANCINI, G. TELLES, A. R. L. CAIRES, V. S. BAGNATO, and L. G. MARCASSA, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 133203 (2004).
- [28] A. J. KERMAN, J. M. SAGE, S. SAINIS, T. BERGEMAN, and D. DEMILLE, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 033004 (2004).
- [29] C. HAIMBERGER, J. KLEINERT, M. BHATTACHARYA, and N. P. BIGELOW, *Phys. Rev. A* **70**, 21402 (2004).
- [30] W. C. STWALLEY, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1628 (1976).
- [31] E. TIESINGA, A. J. MOERDIJK, B. J. VERHAAR, and H. T. C. STOOF, *Phys. Rev. A* **46**, R1167 (1992).
- [32] E. TIESINGA, B. J. VERHAAR, and H. T. C. STOOF, *Phys. Rev. A* **47**, 4114 (1993).
- [33] S. INOUE, M. ADREWS, J. STENGER, H.-J. MIESNER, D. STAMPER-KURN, and W. KETTERLE, *Nature* **392(0)**, 151 (1998).
- [34] P. COURTEILLE, R. S. FREELAND, D. J. HEINZEN, A. VAN ABEELLEN, and B. J. VERHAAR, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 69 (1998).
- [35] J. L. ROBERTS, N. R. CLAUSSEN, J. P. BURKE JR, C. H. GREENE, E. A. CORNELL, and C. E. WIEMAN, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5109 (1998).
- [36] C. CHIN, V. VULETIC, A. J. KERMAN, and S. CHU, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2717 (2000).
- [37] A. MARTE, T. VOLZ, J. SCHUSTER, S. DÜRR, G. REMPE, E. G. M. VAN KEMPEN, and B. J. VERHAAR, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 283202 (2002).
- [38] E. A. DONLEY, N. R. CLAUSSEN, S. T. THOMPSON, and C. E. WIEMAN, *Nature* **417**, 529 (2002).

- [39] P. S. JULIENNE, E. TIE, SINGA, and T. KOEHLER, *J. Mod. Opt.* **51**, 1787 (2004).
- [40] D. S. PETROV, *Phys. Rev. A* **67**, 010703(R) (2003).
- [41] D. S. PETROV, C. SALOMON, and G. V. SHLYAPNIKOV, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 090404 (2004).
- [42] D. S. PETROV, C. SALOMON, and G. V. SHLYAPNIKOV, *Phys. Rev. A* **in press** (2004).
- [43] M. W. ZWIERLEIN, J. R. ABO-SHAEER, A. SCHIROTZEK, C. H. SCHUNCK, and W. KETTERLE, *Nature* **435**, 03858 (2005).
- [44] H. L. BETHLEM, G. BERDEN, and G. MEIJER, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1558 (1999).
- [45] H. L. BETHLEM, G. BERDEN, A. J. A. VAN ROIJ, F. M. H. CROMPVOETS, and G. MEIJER, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5744 (2000).
- [46] H. L. BETHLEM, G. BERDEN, F. M. H. CROMPVOETS, R. T. JONGMA, A. J. A. VAN ROIJ, and G. MEIJER, *Nature* **406**, 491 (2000).
- [47] J. R. BOCHINSKI, E. R. HUDSON, H. J. LEWANDOWSKI, and J. YE, *Phys. Rev. A* (submitted).
- [48] E. A. HINDS, *Phys. Scripta* **T70**, 34 (1997).
- [49] M. R. TARBUTT, H. L. BETHLEM, J. J. HUDSON, V. L. RYABOV, V. A. RYZHOV, B. E. SAUER, G. MEIJER, and E. A. HINDS, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 173002 (2004).
- [50] H. GOULD, *Department of Energy, Basic Energy Science Contractor's Meeting* (2003).
- [51] J. D. WEINSTEIN, R. DECARVALHO, T. GUILLET, B. FRIEDRICH, and J. M. DOYLE, *Nature* **395**, 148 (1998).
- [52] R. DECARVALHO, N. BRAHMS, B. NEWMAN, C. JOHNSON, L. WILLMAN, J. M. DOYLE, T. J. GREYTAK, and D. KLEPPNER, *in Hydrogen Atom III, The international conference on Precision Physics of Simple Atomic Systems*, edited by C. L. Cesar, S. G. Karshenboim, V. A. Shelyuto (2004).
- [53] A. PETERS, *A cryogenic magnetic trap for ultracold atoms and molecules, in Quantum Gases International Workshop*, 19 (2003).
- [54] C. L. CESAR, D. M. SILVEIRA, M. G. VELOSO, F. ZAPPA, and C. C. RODIGHIERI, *in Hydrogen Atom III, The international conference on Precision Physics of Simple Atomic Systems. edited by C. L. Cesar, S. G. Karshenboim, V. A. Shelyuto* (2004).
- [55] J. M. DOYLE and B. FRIEDRICH, *Nature* **401**, 749 (1998).
- [56] S. A. RANGWALA, T. JUNGLIN, T. RIEGER, P. W. H. PINKSE, and G. REMPE, *Phys. Rev. A* **67**, 04306 (2003).
- [57] E. NIKITIN, E. DASHEVSKAYA, J. ALNIS, M. AUZINSH, E. R. I. ABRAHAM, B. R. FURNEAUX, M. KEIL, C. MCRAVEN, N. SHAFER-RAY, and R. WASKOWSKY, *Phys. Rev. A* **68**, 023403 (2003).

- [58] P. F. BARKER, A. I. BISHOP, R. FULTON, and M. N. SHNEIDER, *in ACS 2004 National Meeting Technical Program* (2004).
- [59] M. GUPTA and D. HERSCHBACH, *J. Phys. Chem. A* **103**, 10670 (1999).
- [60] M. S. ELIOFF, J. J. VALENTINI, and D. W. CHANDLER, *Science* **302**, 1940 (2003).
- [61] S. Y. T. VAN DE MEERAKKER, P. H. M. SMEETS, N. VANHAECKE, R. T. JONGMA, and G. MEIJER, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 023004 (2005).
- [62] D. DEMILLE, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067901 (2002).
- [63] D. DEMILLE, *Page web personnelle* <http://pantheon.yale.edu/dpd5/demillehome.htm>.
- [64] J. VALA, Z. AMITAY, B. ZHANG, S. R. LEONE, and R. KOSLOF, *Phys. Rev. A* **66**, 062316 (2002).
- [65] Z. AMITAY, R. KOSLOFF, and S. R. LEONE, *Chem. Phys. Lett.* **359**, 8 (2002).
- [66] J. J. HUDSON, B. E. SAUER, M. R. TARBUTT, and E. A. HINDS, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 023003 (2002).
- [67] M. ELBS, O. KECK, H. KNÖCKEL, and E. TIEMANN, *Z. Phys. D* **42**, 49 (1997).
- [68] E. R. I. ABRAHAM, W. I. MCALEXANDER, C. A. SACKETT, and R. G. HULET, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1315 (1995).
- [69] P. D. LETT, K. HELMERSON, W. D. PHILIPS, L. P. RATLIFF, S. L. ROLSTON, and M. E. WAGSHUL, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2200 (1993).
- [70] H. WANG, P. L. GOULD, and W. STWALLEY, *Phys. Rev. A* **53**, R1216 (1996).
- [71] J. D. MILLER, R. A. CLINE, and D. J. HEIZEN, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2204 (1993).
- [72] U. SCHÖLDER, C. SILBER, and T. D. C. ZIMMERMAN, *Phys. Rev. A* **66**, 61403 (2002).
- [73] A. J. KERMAN, J. M. SAGE, S. SAINIS, T. BERGEMAN, and D. DEMILLE, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 153001 (2004).
- [74] G. R. WOESTENEK, J. W. THOMSEN, P. VAN DERSTRATEN, and A. NIEHAUS, *Cold Atomic collisions : Formation of cold molecules Les Houches, France* (1999).
- [75] G. ZINNER, T. BINNEWIES, F. RIEHLE, and E. TIEMANN, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2292 (2000).
- [76] S. B. NAGEL, P. G. MICKELSON, A. D. SAENZ, Y. N. MARTINEZ, Y. C. CHEN, T. C. KILLIAN, P. PELLEGRINI, and R. CÔTÉ, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 083004 (2005).
- [77] Y. TAKASU, K. KOMORI, K. HONDA, M. KUMAKURA, T. YABUZAKI, and Y. TAKAHASHI, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 123202 (2004).
- [78] W. C. STWALLEY, Y.-H. WANG, and G. PICHLER, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1164 (1978).

- [79] N. HERSCHBACH, P. J. J. TOL, W. WASSEN, W. HOGERVORST, G. R. WOESTENEK, J. W. THOMSEN, P. VAN DER STRATEN, and A. NIEHAUS, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1874 (2000).
- [80] E. R. I. ABRAHAM, N. W. M. RITCHIE, W. I. MCALEXANDER, and R. G. HULET, *J. Chem. Phys.* **103**, 7773 (1995).
- [81] W. I. MCALEXANDER, E. R. I. ABRAHAM, N. W. M. RITCHIE, C. J. WILLIAMS, H. T. C. STOOFF, and R. G. HULET, *Phys. Rev. A* **51**, R871 (1995).
- [82] V. BAGNATO, L. MARCASSA, C. TSAO, Y. WANG, and J. WEINER, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3225 (1993).
- [83] H. WANG, J. LI, X. WANG, C. WILLIAMS, P. L. GOULD, and W. STWALLEY, *Phys. Rev. A* **55**, R1569 (1997).
- [84] J. R. GARDNER, R. A. CLINE, J. D. MILLER, D. J. HEINZEN, H. M. J. M. BOESTEN, and B. J. VERHAAR, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3764 (1995).
- [85] C. AMIOT, O. DULIEU, R. F. GUTTERRES, and F. MASNOU-SEEUWS, *Phys. Rev. A* **66**, 052506 (2002).
- [86] E. TIESINGA, C. J. WILLIAMS, P. S. JULIENNE, K. M. JONES, P. D. LETT, and W. D. PHILLIPS, *Phys. Rev. A* **58**, 498 (1998).
- [87] B. T'JAMPENS, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (2002).
- [88] C. P. KOCH, J. P. PALAO, R. KOSLOFF, and F. MASNOU-SEEUWS, *Phys. Rev. A* **70**, 013402 (2004).
- [89] C. CHIN, T. KRAEMER, M. MARK, J. HERBIG, P. WALDBURGER, H. C. NÄGERL, and R. GRIMM, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 123201 (2005).
- [90] J. VALA, O. DULIEU, F. MASNOU-SEEUWS, and R. KOSLOFF, *Phys. Rev. A* **63**, 013412 (2001).
- [91] M. VATASESCU, O. DULIEU, R. KOSLOFF, and F. MASNOU-SEEUWS, *Phys. Rev. A* **63**, 033407 (2001).
- [92] F. H. MIES, E. TIESINGA, and P. S. JULIENNE, *Phys. Rev. A* **61**, 022721 (2000).
- [93] S. MAGNIER, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (1993).
- [94] M. AYMAR, S. AZIZI, and O. DULIEU, *J. Phys. B* **36**, 4799 (2003).
- [95] V. KOKOULINE, O. DULIEU, R. KOSLOFF, and F. MASNOU-SEEUWS, *J. Chem. Phys.* **110**, 9865 (1999).
- [96] V. KOKOULINE, O. DULIEU, R. KOSLOFF, and F. MASNOU-SEEUWS, *Phys. Rev. A* **62**, 032716 (2000).
- [97] K. WILLNER, O. DULIEU, and F. MASNOU-SEEUWS, *J. Chem. Phys.* **120**, 548 (2004).

- [98] V. KOKOULINE, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (1999).
- [99] K. WILLNER, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (2005).
- [100] C. DRAG, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (2000).
- [101] B. HURON, P. RANCUREL, and J. P. MALRIEU, *J. Chem. Phys.* **58**, 5745 (1973).
- [102] S. ROUSSEAU, A. ALLOUCHE, M. AUBERT-FRÉCON, S. MAGNIER, P. KOWALCZYK, and W. JASTRZEBSKI, *Chem. Phys.* **247**, 193 (1999).
- [103] S. ROUSSEAU, A. ALLOUCHE, and M. AUBERT-FRÉCON, *J. Mol. Spectr.* **203**, 235 (2000).
- [104] M. KOREK, A. ALLOUCHE, K. FAKHREDDINE, and A. CHAALAN, *Can. J. Phys.* **78**, 977 (2000).
- [105] A. ALLOUCHE, M. KOREK, K. FAKHERDDINE, A. CHAALAN, M. DAGHER, F. TAHER, and M. AUBERT-FRÉCON, *J. Phys. B* **33**, 2307 (2000).
- [106] A. HENRIET, *Thèse de 3^{me} cycle* (1983).
- [107] A. HENRIET, *J. Phys. B* **18**, 3085 (1985).
- [108] M. FOUCRAULT, P. MILLIE, and J. DAUDEY, *J. Chem. Phys.* **96**, 1257 (1992).
- [109] W. J. STEVENS, M. HESSEL, P. J. BERTONCINI, and A. C. WAHL, *J. Chem. Phys.* **66**, 1477 (1977).
- [110] D. D. KONOWALOW, M. E. ROSENKANTZ, and M. OLSON, *J. Chem. Phys.* **72**, 2612 (1980).
- [111] G. H. JEUNG, J. P. MALRIEU, and J. P. DAUDEY, *J. Chem. Phys.* **77**, 3371 (1982).
- [112] W. MÜLLER and W. MEYER, *J. Chem. Phys.* **80**, 3311 (1984).
- [113] P. VALIRON, R. GAYET, R. MCCARROLL, F. MASNOU-SEEUWS, and M. PHILIPPE, *J. Phys. B* **12**, 53 (1979).
- [114] A. V. NEMUKHIN and N. F. STEPANOV, *Chem. Phys. Lett.* **60**, 421 (1979).
- [115] S. H. PATIL and K. T. TANG, *J. Phys. Chem.* **113**, 676 (2000).
- [116] S. MAGNIER and M. AUBERT-FRÉCON, *J. Phys. Chem. A* **105**, 165 (2001).
- [117] S. MAGNIER and M. AUBERT-FRÉCON, *J. of Quant. Spectr. Rad. Trans.* **78**, 217 (2003).
- [118] M. KLAPISCH, *Thèse de doctorat ès-Sciences Université de Paris-Sud* (1969).
- [119] C. BOTTCHEr and A. DALGARNO, *Proc. R. Soc. London ser. A* **340**, 187 (1974).
- [120] P. DURAND and J. BARTHELAT, *Theor. Chim. Acta* **38**, 283 (1975).

- [121] D. R. HARTREE, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **24**, 89 (1928).
- [122] V. FOCK, *Zeitz. Physik* **61**, 126 (1930).
- [123] R. POTEAU and F. SPIEGELMANN, *J. Mol. Spectr.* **171**, 299 (1995).
- [124] W. MÜLLER, J. FLESCHE, and W. MEYER, *J. Chem. Phys.* **80**, 3297 (1984).
- [125] G. JEUNG, *J. Mol. Spectr.* **182**, 113 (1997).
- [126] F. SPIEGELMANN, D. PAVOLINI, and J. DAUDEY, *J. Phys. B* **22**, 2465 (1989).
- [127] D. PAVOLINI, T. GUSTAVSSON, F. SPIEGELMANN, and J. DAUDEY, *J. Phys. B* **22**, 1721 (1989).
- [128] S. MAGNIER, P. MILLIÉ, O. DULIEU, and F. MASNOU-SEEUWS, *J. Chem. Phys.* **98**, 7113 (1993).
- [129] S. MAGNIER and P. MILLIÉ, *Phys. Rev. A* **54**, 204 (1996).
- [130] M. DUPUIS, *Program 338, Quantum Chemistry Program Exchange, Chemistry Department, Indiana University, Bloomington, Indiana*.
- [131] C. E. MOORE, *Washington, DC : US government Printing Office vol.3*, NBS Circular no 467 (1958).
- [132] C. E. MOORE, *Washington, DC : US government Printing Office vol.1*, NBS Circular no 467 (1949).
- [133] J. WILSON and R. CURTIS, *J. Chem. Phys.* **74**, 187 (1970).
- [134] S. ROUSSEAU, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université Claude Bernard, LyonI* (1999).
- [135] I. SCHMIDT-MINK, W. MÜLLER, and M. MEYER, *Chem. phys.* **92**, 263 (1985).
- [136] G. H. JEUNG, *Phys. Rev. A* **35**, 26 (1987).
- [137] J. LOMBARDI, *Phys. Rev. A* **32**, 2569 (1985).
- [138] G. JEUNG and A. ROSS, *J. Phys. Rev. B* **21**, 1473 (1988).
- [139] A. ROSS, B. BUSSERY, G. JEUNG, M. BACCHUS-MONTABONEL, and M. AUBERT-FRÉCON, *J. Chimie Physique* **84**, 754 (1987).
- [140] H. COKER, *J. Chem. Phys.* **80**, 2078 (1976).
- [141] M. KOREK and A. R. ALLOUCHE, *J. Phys. B* **34**, 3689 (2001).
- [142] L. BELLOMONTE, P. CAVALIERE, and G. FERRANTE, *J. Chem. Phys.* **61**, 3225 (1974).
- [143] A. VALANCE, *J. Chem. Phys.* **69**, 355 (1978).
- [144] L. VON SZENTPÁLY, P. FUENTEALBA, H. PREUSS, and H. STOLL, *Chem. Phys. Lett.* **93**, 555 (1982).
- [145] A. R. ALLOUCHE, <http://lasim.univ-lyon1.fr/allouche/pec.html>.
- [146] A. HENRIET and F. MASNOU-SEEUWS, *Chem. Phys. Lett.* **101**, 535 (1983).
- [147] S. MAGNIER, S. ROUSSEAU, A. R. ALLOUCHE, G. HADINGER, and M. AUBERT-FRÉCON, *Chem. Phys.* **246**, 57 (1999).

- [148] J. M. HUTSON, *J. Phys. B* **14**, 851 (1991).
- [149] R. A. BERNHEIM, L. P. GOLD, and T. TIPTON, *Chem. Phys. Lett.* **92**, 13 (1982).
- [150] M. W. MCGEOCH and R. E. SCHLIER, *Chem. Phys. Lett.* **99**, 347 (1983).
- [151] B. P. MATHEW, E. W. ROTHE, G. P. RECK, and J. A. LIGHTMAN, *Chem. Phys. Lett.* **56**, 336 (1978).
- [152] D. D. KONOWALOW and E. ROSENKRANTZ, *Chem. Phys. Lett.* **61**, 489 (1979).
- [153] P. FUENTEALBA, H. PREUSS, H. STOLL, and VON SZENTPÀLY, *Chem. Phys. Lett.* **89**, 418 (1982).
- [154] C. BORDAS, J. LABASTIE, J. CHEVALEYRE, and M. BROYER, *Chem. Phys.* **129**, 21 (1989).
- [155] S. MARTIN, J. CHEVALEYRE, S. VALIGNAT, J. P. PERROT, M. BROYER, B. CABAUD, and A. HOAREAU, *Chem. Phys. Lett.* **87**, 235 (1982).
- [156] N. W. CARLSON, A. J. TAYLOR, and A. L. SCHAWLOW, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 18 (1980).
- [157] S. LEUTWYLER, T. HEINIS, M. JUNGEN, H.-P. HÄRRI, and E. SCHUMACHER, *J. Chem. Phys.* **76**, 4290 (1982).
- [158] A. BÄHRING, I. V. HERTEL, E. MEYER, W. MAYER, N. SPIES, and H. SCHMIDT, *J. Phys. B* **17**, 2859 (1984).
- [159] M. L. ALMAZOR, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (1998).
- [160] S. LEUTWYLER, A. HERRMANN, L. WÖSTE, and E. SCHUMACHER, *Chem. Phys.* **48**, 253 (1980).
- [161] M. BROYER, J. CHEVALEYRE, G. DELACRETAZ, S. MARTIN, and L. WÖSTE, *Chem. Phys. Lett.* **99**, 206 (1983).
- [162] W. C. STWALLEY and H. WANG, *J. Mol. Spectr.* **195**, 194 (1999).
- [163] E. ILYABAEV and U. KALDOR, *J. Chem. Phys.* **98**, 7126 (1993).
- [164] A. JRAIJ, A. R. ALLOUCHE, M. KOREK, and M. AUBERT-FRÉCON, *Chem. Phys.* **290**, 129 (2003).
- [165] C. L. BECKEL and R. ENGELKE, *J. Mol. Spectrosc.* **42**, 578 (1972).
- [166] H. SILBERBACH, P. SCHWERDTFEGER, H. STOLL, and H. PREUSS, *J. Phys. B* **19**, 501 (1986).
- [167] A. JRAIJ, A. R. ALLOUCHE, M. KOREK, and M. AUBERT-FRÉCON, *Chem. Phys.* **310**, 145 (2005).
- [168] G. V. MARR and S. R. WHERETT, *J. Phys. B* **5**, 1735 (1972).
- [169] K. P. HUBER and G. HERZBERG, *Van Nostrand Reinhold New York* (1979).
- [170] I. MOULLET, W. ANDREONI, and P. GIANNOZZI, *J. Chem. Phys.* **90**, 7306 (1986).

- [171] A. L. OLDENBURG, P. C. JOHN, and J. G. EDEN, *J. Phys. Chem.* **113**, 11009 (2000).
- [172] P. J. BERTONCINI, G. DAS, and A. C. WAHL, *J. Chem. Phys.* **52**, 5112 (1972).
- [173] S. LEUTWYLER, M. HOFMANN, H. P. HÄRRI, and E. SCHUMACHER, *Chem. Phys. Lett.* **77**, 257 (1981).
- [174] M. KOREK, A. R. ALLOUCHE, and N. ABDUL AL, *Can. J. Phys.* **80**, 1025 (2002).
- [175] M. KOREK, G. YOUNES, and A. R. ALLOUCHE, *Int. J. Quant. Chem.* **92**, 376 (2003).
- [176] C. M. DION, O. DULIEU, D. COMPARAT, N. DE SOUZA MELO, W. END VAN-HAECKE, P. PILLET, R. BEUC, S. MILOSEVIC, and G. PICHLER, *Eur. Phys. J. D* **18**, 365 (2002).
- [177] M. AYMAR and O. DULIEU, *J. Chem. Phys.* **122**, 1 (2005).
- [178] COHEN-TANNOUJDI, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 707 (1998).
- [179] S. CHU, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 685 (1998).
- [180] W. D. PHILLIPS, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 721 (1998).
- [181] B. NATIONAL DE MÉTROLOGIE SYSTES DE RÉFÉRENCE TEMPS ESPACE.
- [182] *Appli. Phys.* **B54**, 321 (1992).
- [183] M. ANDERSON, J. ENSHER, M. MATTHEWS, C. , and E. CORNELL, *Science* **269**, 198 (1995).
- [184] C. C. BRADLEY, C. A. SACKETT, J. J. TOLETT, and R. G. HULET, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995).
- [185] K. B. DAVIS, M. O. MEWES, M. R. ANDREWS, N. J. VAN DRUTEN, D. S. DURFEE, D. M. KURN, and W. KETTERLE, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [186] O. HOUDE, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (2002).
- [187] M. O. MEWES, M. R. ANDREWS, D. M. KURN, D. S. DURFEE, C. G. TOWNSEND, and W. KETTERLE, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 582 (1997).
- [188] I. RUSSIER, M. AUBERT-FRÉCON, A. J. ROSS, F. MARTIN, A. YIANNOPOULOU, and P. CROZET, *J. Chem. Phys.* **109**, 2717 (1998).
- [189] E. I. DASHEVSKAYA, A. I. VOROVIN, and E. E. NIKITIN, *Can. J. Phys.* **47**, 1237 (1969).
- [190] M. MOVRE and G. PICHLER, *J. Phys. B* **10**, 2631 (1977).
- [191] P. A. RUPRECHT, M. J. HOLLAND, K. BURNETT, and M. EDWARDS, *Phys. Rev. A* **51**, 4704 (1995).
- [192] T. P. DINNEEN, K. VOGEL, E. ARIMONDO, J. L. HALL, and A. GALLAGHER, *Phys. Rev. A* **59**, 1216 (1999).

- [193] D. WANG, J. QI, M. F. STONE, O. NIKOLAYEVA, S. D. HATTAWAY, B. ANDGENSEMER, H. WANG, W. T. ZEMKE, P. L. GOULD, E. E. EYLER, and W. C. STWALLEY, *Eur. Phys. J. D* **31**, 165 (2004).
- [194] T. BERGEMAN, A. J. KERMAN, J. SAGE, S. SAINIS, and D. DEMILLE, *Eur. Phys. J. D* **31**, 179 (2004).
- [195] R. J. LEROY and R. B. BERNSTEIN, *J. Chem. Phys.* **52**, 3869 (1970).
- [196] A. MESSIAH, *Dunod*, Paris (1964).
- [197] L. LANDAU and E. LIFCHITZ, *MIR*, 70 (1988).
- [198] N. VANHAECKE, *Thèse de Doctorat en Sciences de l' Université de Paris Sud* (2003).
- [199] D. LEONHARDT and J. WEINER, *Phys. Rev. A* **53**, 2904 (1996).
- [200] L. P. RATCLIFF, M. E. WAGSHUL, P. D. LETT, S. L. ROLSTON, and W. D. PHILLIPS, *J. Chem. Phys.* **101**, 2638 (1994).
- [201] P. A. MOLENAAR and P. VAN DER STRATEN, *V* **77**, 1460 (1996).
- [202] H. WANG, P. L. GOULD, and W. C. STWALLEY, *A. Phys. D* **36**, 317 (1996).
- [203] D. LEONHARDT and J. WEINER, *Phys. Rev. A* **52**, R4332 (1995).
- [204] A. P. MOSK, M. W. REYNOLDS, T. W. HIJMANS, and J. T. M. WALRAVEN, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 307 (1999).
- [205] H. WANG, P. L. GOULD, and W. STWALLEY, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 476 (1998).
- [206] W. WANG, H. WANG, P. L. GOULD, and W. C. STWALLEY, *Phys. Rev. A* **57**, 4600 (1998).
- [207] U. SCHÖLDER, C. SILBER, and T. D. C. ZIMMERMAN, *Appl. Phys. B* **73**, 801 (2001).
- [208] J. P. SHAFFER, W. CHALUPCZAK, and N. P. BIGELOW, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1124 (1999).
- [209] J. LÉONARD, A. P. MOSK, M. WALHOUT, P. VAN DER STRATEN, M. LEDUC, and C. COHEN-TANNOUDJI, *Phys. Rev. A* **69**, 32702 (2004).
- [210] A. GALLAGHER and D. E. PRITCHARD, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 957 (1989).
- [211] M. VATASESCU, O. DULIEU, C. AMIOT, D. COMPARAT, C. DRAG, V. KOKOULINE, F. MASNOU-SEEUWS, and P. PILLET, *Phys. Rev. A* **61**, 044701 (2000).
- [212] T. TATEKOSHI, B. M. PATTERSON, and R. J. KNIZE, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5105 (1998).
- [213] R. WYNAR, R. S. FREELAND, D. J. HAN, C. RYU, and D. J. HEINZEN, *Science* **287**, 1016 (2000).
- [214] J. P. SCHAFFER, W. CHALUPCZAK, and N. P. BIGELOW, *Phys. Rev. A* **60**, R3365 (1999).
- [215] J. SAGE, S. SAINIS, T. BERGEMAN, and D. DEMILLE, *arXiv :physics/0501008 v1* (2004).

- [216] S. KOTOCHIGOVA, E. TIESINGA, and P. S. JULIENNE, *Eur. Phys. J. D* **31**, 189 (2004).
- [217] A. J. MOERDIJK, B. J. VERHAAR, and A. AXELSSON, *Phys. Rev. A* **51**, 4852 (1995).
- [218] F. A. VAN ABEELLEN, D. J. HEINZEN, and B. J. VERHAAR, *Phys. Rev. A* **57**, R4102 (1998).
- [219] P. J. LEO, C. J. WILLIAMS, and P. S. JULIENNE, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2721 (2000).
- [220] S. JOCHIM, M. BARTENSTEIN, G. HENDL, J. H. DENSCHLAG, R. GRIMM, A. MOSK, and M. WEIDEMULLER, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 273202 (2002).
- [221] J. HERBIG, T. KRAEMER, M. MARK, T. WEBER, C. CHIN, H. C. NÄGERL, and R. GRIMM, *Scienceexpress* (2003).
- [222] C. A. STAN, M. W. ZWIERLEIN, C. H. SCHUNCK, S. M. F. RANPACH, and W. KETTERLE, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 143001 (2004).
- [223] S. INOUE, J. GOLDWIN, M. L. OLSEN, C. TICKNOR, J. L. BOHN, and D. S. JIN, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 183201 (2004).
- [224] R. NAPOLITANO, J. WEINER, C. J. WILLIAMS, and P. S. JULIENNE, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1352 (1994).
- [225] P. PILLET, A. CRUBELLIER, A. BLETON, O. DULIEU, P. NOSBAUM, I. MOURACHKO, and F. MASNOU-SEEUWS, *J. Phys. B* **30**, 2801 (1997).
- [226] R. CÔTÉ and A. DALGARNO, *Phys. Rev. A* **58**, 498 (1998).
- [227] M. MACKIE and J. JAVANAINEN, *Phys. Rev. A* **60**, 3174 (1999).
- [228] M. MACKHOLM, A. GIUSTI-SUZOR, and F. H. MIES, *Phys. Rev. A* **50**, 5025 (1994).
- [229] A. VARDI, D. ABRASHKEVICH, E. FRISHMAN, and M. SHAPIRO, *J. Chem. Phys.* **107**, 6166 (1997).
- [230] H. M. J. M. BOESTEN, C. C. TSAI, D. J. HEINZEN, A. J. MOONEN, and B. J. VERHAAR, *J. Phys. B* **32**, 287 (1999).
- [231] P. S. JULIENNE, *J. Res. Natl. Ins. Stand. Technol.* **101**, 487 (1996).
- [232] H. WANG, P. L. GOULD, and W. STWALLEY, *J. Chem. Phys.* **106**, 7899 (1997).
- [233] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING, and B. P. FLANERY, *Numerical Recipes Cambridge University Press* (1992).
- [234] G. BALINT-KURTI and A. VIBOK, *In C. Cerjan, editor, Kluwer Academic*, 412 (1993).
- [235] J. C. MARSTON and G. G. BALINT-KURTI, *J. Chem. Phys.* **91**, 3571 (1989).
- [236] R. KOSLOFF and H. TAL-EZER, *Chem. Phys. Lett.* **127**, 223 (1986).
- [237] R. KOSLOFF, *J. Phys. Chem.* **92**, 2087 (1988).

- [238] J. C. LIGHT, I. P. HAMILTON, and J. V. LILL, *J. Chem. Phys.* **82**, 1400 (1985).
- [239] M. MONNERVILLE, *Thèse de Doctorat en Sciences de l'Université de Bordeaux I* (1991).
- [240] M. MONNERVILLE and J. M. ROBBE, *J. Chem. Phys.* **101**, 7580 (1994).
- [241] O. DULIEU and P. S. JULIENNE, *J. Chem. Phys.* **103**, 60 (1995).
- [242] R. KOSLOFF, In C. Cerjan, editor, *Kluwer Academic Numerical grid methods and their applications to Schrödinger's equation*, 175 (1993).
- [243] R. MEYER, *J. Chem. Phys.* **52**, 2053 (1970).
- [244] C. BOISSEAU, E. AUDOUARD, and J. VIGUÉ, *Europhys. Lett.* **41**, 349 (1998).
- [245] E. FATTAL, R. BAER, and R. KOSLOFF, *Phys. Rev. E* **53**, 1217 (1996).
- [246] R. KOSLOFF, *Quantum Molecular Dynamics on Grids.*, R. E. Wyatt and J. Z. Zhang, editor, *Dynamics of Molecules and Chemical Reactions* Marcel Dekker, 185 (1996).
- [247] M. KOREK, A. R. ALLOUCHE, M. KOBEISSI, A. CHAALAN, M. DAGHER, K. FAKHERDDIN, and M. AUBERT-FRÉCON, *Chem. Phys.* **256**, 1 (2000).
- [248] C. COHEN-TANNOUJDI, B. DIU, and F. LALOÉ, *Herman Paris* (1996).
- [249] S. G. PORSEV and A. DEREVIANKO, *J. Chem. Phys.* **119**, 844 (2003).
- [250] A. DEREVIANKO, J. F. BABB, and A. DALGARNO, *Phys. Rev. A* **63**, 052704 (2001).
- [251] M. MARINESCU and H. R. SADEGHPOUR, *Phys. Rev. A* **59**, 390 (1999).
- [252] C. AMIOT, O. DULIEU, and J. VERGÈS, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2316 (1999).
- [253] H. LEFEBVRE-BRION and R. W. FIELD, *Perturbations in the spectra of Diatomic Molecules*, Academic Press London (1986).
- [254] R. F. GUTTERRES, C. AMIOT, A. FIORETTI, C. GABBANINI, M. MAZZONI, and O. DULIEU, *Phys. Rev. A* **66**, 024502 (2002).
- [255] N. SPIES, *Universität Kaiserslautern PhD thesis* (1989).
- [256] C. DRAG, B. L. TOLRA, O. DULIEU, D. COMPARAT, M. VATASESCU, S. BOUSSE, S. GUIBAL, A. CRUBELLIER, and P. PILLET, *IEEE J. Quant. Electron.* **36**, 1378 (2000).
- [257] B. BUSSERY, Y. ACHKAR, and M. AUBERT-FRÉCON, *Chem. Phys.* **116**, 319 (1987).
- [258] W. WEICKENMEIER, U. DIEMER, W. DEMTRÖDER, and M. BROYER, *Chem. Phys. Lett.* **124**, 470 (1986).
- [259] O. ALLARD, S. FALKE, A. PASHOV, O. DULIEU, H. KNÖCKEL, and E. TIEMANN, *Eur. Phys. J. D* (submitted).