光与二能级原子系统相互作用方程的解析解

王润文

(中国科学院上海光机所)

提要：研究光与二能级原子相互作用方程可获得电子在两能级间跃迁几率等重要知识。通常利用量子力学的时间微扰法可求得这类方程一次近似解的黄金定律。直接研究这类方程的解析方法仍有人不断在进行，然而至今尚未得到满意的形式而又简单的解，本文给出在不同条件下包括存在阻尼及强场作用的情况，跃迁几率的简明解析表示式，这对解析研究跃迁过程提供了更为方便的数学形式。

Analytic solution for the equation of interaction between light and atomic system of two energy levels

Wang Runwen

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

Abstract: Research of interaction between light and atomic system of two energy levels enables us to obtain some important knowledge, such as transition probability of the electron. Usually these equations can be solved using the method of perturbation approximation in quantum mechanics. Direct study on the analytic solution of these equations has been conducted by many reseachers, but so far no one has obtained a satisfactory and simple form of analytic solution. This paper presents some simple analytic equations of transition probability of the electron under several different conditions, including damping and strong field. It provides some convenient mathematical formulas for the study of electronic transition process.

一、引　言

光与物质的相互作用过程中，光场对介质中原子的电极化作用会使原子中的电子在不同能级之间跳跃，出现了光的吸收与发射的各种现象。爱因斯坦最早从直观的观点讨论了这个问题，提出了自发发射及感应发射系数。对于一个两能级系统，下态与上态波函数分别是 ψ_1 及 ψ_2，要描述的电子受光场作用引起在上下态间跃迁就必须用混合波函数 ψ，通常是用 ψ_1 与 ψ_2 的线性组合来表示，即：

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 \tag{1}$$

设 ψ_1、ψ_2 及 ψ 皆为归一化波函数，且 ψ_1 与

收稿日期：1981年7月31日。

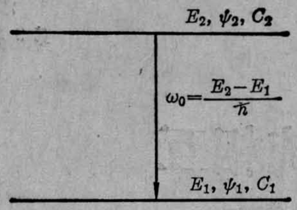

图 1

ψ_2 正交:

$$|C_1|^2+|C_2|^2\equiv 1 \tag{2}$$

当考察的是电子跃迁行为，ψ_1、ψ_2 及 ψ 以及系数 C_1 与 C_2 都必须是时间 t 的函数。它们都应满足时间上的 Schrödinger 方程:

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=E_1\psi_1,\ i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=E_2\psi_2 \\ i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=E\psi \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

因为 $C_1(t)$ 及 $C_2(t)$ 代表了电子在 t 时间占据 ψ_1 与 ψ_2 能级的几率振幅，因此若求得 $C_1(t)$ 及 $C_2(t)$ 的表示式，从(1)式就确定了系统的波函数 ψ，电子随时间而运动的情况就完全知道了。

通常，在正弦变化电场扰动情况下多数采用与时间有关的微扰理论，熟知的辐射黄金定律就是用这一方法求得的，此外对于不同性质的微扰场还有绝对微扰法及突变近似法等[1]。如果假定原子系统用量子力学来描写，而光场或电场是用经典电磁场来描述，则两能级系统受电场 $E_0\cos(kz-\omega t)$ 的作用下可导得如下方程组[2]:

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E_1/\hbar & \nu_{12}\cos\omega t\\ \nu_{12}^*\cos\omega t & E/\hbar\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{4}$$

$\nu_{12}=\frac{eE_0X_{12}}{\hbar}$，$X_{12}$ 为跃迁的偶极矩阵元。文献[2]应用了 Floquets 微分方程定理导得无穷阶行列式来讨论这一方程的解。此外也有人[3~5]讨论过此方程的解，似乎都不理想。今将(4)式作如下变量变换:

$$\begin{aligned} \bar C_1(t)=e^{-iE_1t/\hbar}C_1(t) \\ \bar C_2(t)=e^{-iE_2t/\hbar}C_2(t) \end{aligned} \tag{5}$$

将(5)代入(4)，并令 $\frac{E_2-E_1}{\hbar}=\omega_0$ 为两能级间跃迁频率，化简后把 $\bar C_1$ 与 $\bar C_2$ 仍写成 C_1 及 C_2 可得如下微分方程组:

$$\left.\begin{aligned} i\frac{\partial C_1}{\partial t}=\nu_{12}\cos\omega t\exp(-i\omega_0t)C_2 \\ i\frac{\partial C_2}{\partial t}=\nu_{12}^*\cos\omega t\exp(i\omega_0t)C_1 \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

方程(6)与 London R. 导得的一样[6]。London 用与量子力学相似的方法，令 $t=0$ 时原子下态有一电子，而上态出空，代入后很容易导得量子力学的微扰解:

$$C_2(t)=|\nu_{12}|^2\frac{\sin^2\left\{(\omega_0-\omega)\frac{t}{2}\right\}}{(\omega_0-\omega)^2} \tag{7}$$

London 又在 $\omega=0$ 情况研究了 (6) 式，显然这不是光场微扰的情况，意义不大。Solzman W. R. 曾经用数值计算讨论过这组方程[7]。下面我们在各种情况下求 (6) 式的解析表达式。

二、耦合方程的解析解

在耦合方程组(6)中若令

$$f_1(t)=\nu_{12}\cos\omega t\exp(-i\omega_0t)$$

及 $f_2(t)=\nu_{12}^*\cos\omega t\exp(i\omega_0t)$，于是可写成:

$$\left.\begin{aligned} f_1(t)C_2=i\frac{\partial C_1}{\partial t} \\ f_2(t)C_1=i\frac{\partial C_2}{\partial t} \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

将第一式对 t 偏微分，然后用第 2 式代入消去 C_2 便得如下表示式:

$$\frac{\partial^2C_1}{\partial t^2}-\frac{\partial\ln f_1}{\partial t}\cdot\frac{\partial C_1}{\partial t}+f_1f_2C_1=0 \tag{8}$$

显然:

$$\left.\begin{aligned} f_1f_2=|\nu_{12}|^2\cos^2\omega t \\ \frac{\partial\ln f_1}{\partial t}=-\omega\ \mathrm{tg}\ \omega t-i\omega_0 \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

故得 C_1 的微分方程式为:

$$\frac{\partial^2C_1}{\partial t^2}+(\omega\ \mathrm{tg}\ \omega t+i\omega_0)\frac{\partial C_1}{\partial t}+|\nu_{12}|^2\cos^2\omega tC_1=0 \tag{10}$$

同理在方程组(7)中消去 C_1 可得关于 C_2 的微分方程式:

$$\frac{\partial^2 C_2}{\partial t^2}+(\omega\operatorname{tg}\omega t-i\omega_0)\frac{\partial C_2}{\partial t}+|\nu_{12}|^2\cos^2\omega t\, C_2=0 \tag{11}$$

(10)与(11)都是线性微分方程式，由于存在正交关系(2)，因此解方程(11)或(10)中一个就可导出另一个解来。现在分两种情况来研究它们的解。

(I) 当考虑在外场刚加入瞬间，这时 $t\simeq 0$ 附近有 $|\omega\operatorname{tg}\omega t|\ll|i\omega_0|$，上面两微分方程可写成:

$$\frac{\partial^2 C_2}{\partial t^2}-i\omega_0\frac{\partial C_2}{\partial t}+|\nu_{12}|^2 C_2=0 \tag{12}$$

这就过渡到常微分方程了，很容易得到它的通解为:

$$C_2=Ae^{\frac{1}{2}i\omega_0 t}\cos\left[(4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2)^{\frac{1}{2}}\frac{t}{2}+\varphi\right] \tag{13}$$

式中 A 及 φ 为积分常数，由初始条件确定$\left(\text{初始条件为: } t=0,\ C_1(t)=1,\ C_2(t)=0 \text{ 及 } i\,\frac{\partial C_2}{\partial t}=\nu_{12}^*\right)$，于是积分常数是

$$\varphi=\frac{\pi}{2},\ A=\frac{-2i|\nu_{12}|}{(4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2)^{1/2}} \tag{14}$$

(13)式便是

$$C_2=\frac{-2i|\nu_{12}|}{(4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2)^{1/2}}e^{\frac{1}{2}i\omega_0 t}\times\sin\left[(4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2)^{1/2}\frac{t}{2}\right] \tag{15}$$

因此电子占据上下态的几率便是:

$$\left.\begin{aligned}|C_2|^2&=\frac{4|\nu_{12}|^2}{4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2}\times\sin^2\left[(4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2)^{1/2}\frac{t}{2}\right]\\|C_1|^2&=\frac{\omega_0^2}{4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2}+\frac{4|\nu_{12}|^2}{4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2}\times\cos^2\left[(4|\nu_{12}|^2+\omega_0^2)^{1/2}\frac{t}{2}\right]\end{aligned}\right\} \tag{16}$$

图2是(16)式的曲线，(a)图是 $|\nu_{12}|/\omega_0=1$ 的情况，(b)图是 $|\nu_{12}|/\omega_0=0.3$ 的情况，图中我们只描绘曲线的 $\omega_0 t=1$ 的以下部分。由图可见当外场较强的情况下，由于曲线斜率较徒，因此跃迁得也更快。满足(16)式的条件是 $\omega t\ll\frac{\omega_0}{\omega}$，如果是共振激励，则此条件便是 $\omega t\ll 1$。正如引言所述，London 也曾导得(16)式[6]，但是他是在假定 $\omega=0$ 的情况下获得的，这只表明静电场的作用，并不表明属于光场与原子相互作用的情况。

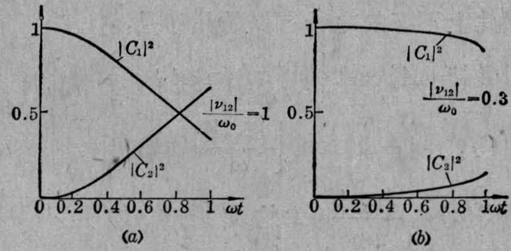

图 2

(II) 在时间 t 较大的情况下，当

$$|\omega\operatorname{tg}\omega t|\gg|i\omega_0|,$$

这相当于 ωt 接近 $\frac{\pi}{2}$、$\frac{3\pi}{2}\cdots$附近，于是(10)与(11)式中 $i\omega_0$ 因子可略去，便得:

$$\frac{\partial^2 C_2}{\partial t^2}+\omega\operatorname{tg}\omega t\frac{\partial C_2}{\partial t}+|\nu_{12}|^2\cos^2\omega t\, C_2=0 \tag{17}$$

令 $\omega t=T$，上式经变量变换后便成为:

$$\frac{\partial^2 C_2}{\partial T^2}+\operatorname{tg}T\frac{\partial C_2}{\partial T}+\frac{|\nu_{12}|^2}{\omega^2}\cos^2 T\, C_2=0 \tag{18}$$

作如下变量变换:

$$v(u)=C_2(T),\ u=\sin T \tag{19}$$

代入(18)便得:

$$v''+\frac{|\nu_{12}|^2}{\omega^2}v=0 \tag{20}$$

所以

$$v=A_1\cos\left(\frac{|\nu_{12}|}{\omega}u+\varphi_1\right) \tag{21}$$

故最后得(18)式的通解为:

$$C_2=A_1\cos\left\{\frac{|\nu_{12}|}{\omega}\sin\omega t+\varphi_1\right\} \quad (22)$$

式中 A_1 及 φ_1 为积分常数。由初值确定(若 $t=t_0$ 时 $|C_2|^2=|C_2|_0^2$, $\left.\frac{dC_2}{dt}\right|_0=C'_{20}$), 则 A_1 及 φ_1 便可解得:

$$\left.\begin{aligned}\varphi_1=&-\operatorname{arc\,tg}\left(\frac{C'_{20}}{|C_2|_0\cos\omega t_0}\right)\\&-\frac{|\nu_{12}|}{\omega}\sin\omega_0 t\\A_1=&|C_2|_0\Big/\cos\left\{\frac{|\nu_{12}|}{\omega}\sin\omega t_0+\varphi_1\right\}\end{aligned}\right\} \quad (23)$$

因此上下态的电子占据的几率是:

$$\left.\begin{aligned}|C_2|^2&=A_1^2\cos^2\left\{\frac{|\nu_{12}|}{\omega}\sin\omega t+\varphi_1\right\}\\|C_1|^2&=1-A_1^2\cos^2\left\{\frac{|\nu_{12}|}{\omega}\sin\omega t+\varphi_1\right\}\end{aligned}\right\} \quad (24)$$

图 3(*a*)是 $\frac{|\nu_{12}|}{\omega_0}=1$ 的曲线, (*b*) 是 $\frac{|\nu_{12}|}{\omega_0}=0.3$ 情况下的曲线。可见弱耦合情况下粒子分布变化也较平缓。

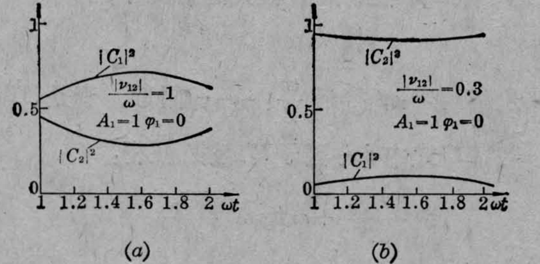

图 3

三、有阻尼情况下耦合方程的解析解

上节我们讨论的两能级系统只有受激吸收与受激辐射两种情况, 并没有考虑上能级原子的自发辐射, 如果考虑这情况可引入阻尼系数 γ 来表示, 而有阻尼情况下的耦合方程为:

$$\left.\begin{aligned}&\nu_{12}\cos\omega t\exp(-i\omega_0 t)C_2=i\dot{C}_1\\&\nu_{12}^*\cos\omega t\exp(i\omega_0 t)C_1-i\gamma C_2=i\dot{C}_2\end{aligned}\right\} \quad (25)$$

消去 C_1 或 C_2 可得如下微分方程:

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial^2 C_1}{\partial t^2}+(\omega\operatorname{tg}\omega t+\gamma+i\omega_0)\frac{\partial C_1}{\partial t}\\&\quad+|\nu_{12}|^2\cos^2\omega t\,C_1=0\\&\frac{\partial^2 C_2}{\partial t^2}+(\omega\operatorname{tg}\omega t+\gamma-i\omega_0)\frac{\partial C_2}{\partial t}\\&\quad+(|\nu_{12}|^2\cos^2\omega t+\gamma(\omega\operatorname{tg}\omega t\\&\quad-i\omega_0))C_2=0\end{aligned}\right\} \quad (26)$$

可以看出当 $\gamma\to 0$, (26) 便自动变成 (10) 及 (11)式, 过渡为无阻尼的情况, 类似于对耦合方程的解析解, 我们分别不同情况研究(26)式的解。

(I) 在外场刚加入瞬间 $t\sim 0$, 关于 C_2 的微分方程可写成:

$$\frac{\partial^2 C_2}{\partial t^2}+(\gamma-i\omega_0)\frac{\partial C_2}{\partial t}+(|\gamma_{12}|^2-i\gamma\omega_0)C_2=0 \quad (27)$$

其通解为:

$$C_2=Ae^{-\frac{1}{2}\gamma t}e^{\frac{i}{2}\omega_0 t}\sin\left\{(4|\nu_{12}|^2-(\gamma+i\omega_0)^2)^{1/2}\frac{t}{2}+\varphi\right\} \quad (28)$$

若 $t=0$, $C_1(0)=1$, $C_2(0)=0$, $i\dot{C}_2=\nu_{12}^*$, 则可确定 A、φ 为:

$$\varphi=0,\ A=\frac{-i2\nu_{12}^*}{(4|\nu_{12}|^2-(\gamma+i\omega_0)^2)^{1/2}} \quad (29)$$

将(29)代入(28)式便得:

$$C_2=\frac{-i2\nu_{12}^*}{(4|\nu_{12}|^2-(\gamma+i\omega_0)^2)^{1/2}}\times e^{-\frac{1}{2}\gamma t}e^{\frac{i}{2}\omega_0 t}\sin\left\{(4|\nu_{12}|^2-(\gamma+i\omega_0)^2)^{1/2}\frac{t}{2}\right\} \quad (30)$$

应用(2)式可得粒子分布的几率为:

$$|C_2|^2=C_2C_2^*=\frac{2|\nu_{12}|^2}{4|\nu_{12}|^2-(\gamma^2-\omega_0^2)}\times e^{-\gamma t}\{\operatorname{ch}bt-\cos at\} \quad (31)$$

$$|C_1|^2=1-|C_2|^2=1-\frac{2|\nu_{12}|^2}{4|\nu_{12}|^2-(\gamma^2-\omega_0^2)}\times e^{-\gamma t}\{\operatorname{ch}bt-\cos at\} \quad (32)$$

其中

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}[4|\nu_{12}|^2-(\gamma^2-\omega_0^2)$$
$$+\sqrt{(4|\nu_{12}|^2-(\gamma^2-\omega_0^2))^2+16\gamma^2\omega_0^2}]^{1/2}\tag{33}$$

$$b=\frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{(4|\nu_{12}|^2-(\gamma^2-\omega_0^2))^2+16\gamma^2\omega_0^2}$$
$$-(4|\nu_{12}|^2-(\gamma^2-\omega_0^2)]^{1/2}\tag{34}$$

(II) 若阻尼很小 $\gamma\ll\frac{1}{\omega}$, 并且时间 t 满足关系 $|\omega\,\mathrm{tg}\,\omega t|\gg|\gamma-i\omega_0|$, 则方程 (27) 自然变成方程(17), 于是(22)式的解仍可应用于现在的情况。

四、强场作用情况

在无阻尼下 $\gamma=0$, 并设 $t<\frac{1}{\omega}$, 则 $\mathrm{tg}\,\omega t\simeq\omega t$, $\cos\omega t\simeq1$, 方程(11)可写成:

$$\frac{\partial^2C_2}{\partial t^2}+\omega^2\left(t-i\frac{\omega_0}{\omega^2}\right)\frac{\partial C_2}{\partial t}+|\nu_{12}|^2C_2=0\tag{35}$$

作变量变换, 令 $\omega\left(t-i\frac{\omega_0}{\omega}\right)=T$, 则得:

$$\omega^2\frac{\partial^2C_2}{\partial T^2}+\omega^2T\frac{\partial C_2}{\partial T}+|\nu_{12}|^2C_2=0\tag{36}$$

再作变量变换 $C_2=ue^{-\frac{1}{4}T^2}$, 则(36)式的一次导函数被消去, 微分方程变成:

$$u''+\left(\frac{|\nu_{12}|^2}{\omega^2}-\frac{1}{2}-\frac{1}{4}T^2\right)u=0\tag{37}$$

记

$$4u''=(T^2+a)u\tag{38}$$

其中

$$a=2-\frac{4|\nu_{12}|^2}{\omega^2}=-2(2n+1)\tag{39}$$

$n=$ 自然数,

(39)式第 2 个等号是命定的, 这样指定后积分便可进行, 同时也不失普遍性, 因为 n 的大小直接与 $|\nu_{12}|^2$ 大小成比例。于是(40)式便过渡到韦伯方程[8], 其通解为:

$$u=2^{-\frac{1}{2}n}e^{-\frac{1}{4}T^2}H_n\left(\frac{T}{\sqrt{2}}\right)\tag{40}$$

最后得

$$C_2=2^{-\frac{1}{2}n}e^{-\frac{1}{2}\omega^2\left(t-i\frac{\omega_0}{\omega^2}\right)^2}$$
$$\times H_n\left(\frac{\omega\left(t-i\frac{\omega_0}{\omega^2}\right)}{\sqrt{2}}\right)\tag{41}$$

故得几率函数是:

$$|C_2|^2=C_2C_2^*=2^{-n}e^{-\omega^2\left(t^2-\frac{\omega_0^2}{\omega^4}\right)}|H_n|^2\tag{42}$$

式中 H_n 为 n 阶厄米特多项式, 其性质是熟知的[1]。当 n 愈大, 亦即 $|\nu_{12}|^2$ 愈大, 换言之在甚大的强场作用下, 几率函数由更高阶厄米多项式描述, 其随时间的跃迁跳变更为激烈。

五、共振激励条件下

这时 $\omega\simeq\omega_0$, 方程 (11) 可以写成如下形式:

$$\frac{\partial^2C_2}{\partial t^2}+\omega_0(\mathrm{tg}\,\omega_0t-i)\frac{\partial C_2}{\partial t}$$
$$+|\nu_{12}|^2\cos^2\omega_0t\,C_2=0\tag{43}$$

并且

$$\left.\begin{aligned}&(\mathrm{tg}\,\omega_0t-i)=\sec\omega_0t\,e^{i\varphi}\\&\varphi=\mathrm{arc\,tg}\frac{-1}{\omega_0t}\end{aligned}\right\}\tag{44}$$

考虑光场加上瞬间, $t\sim0$, $\varphi=-\frac{\pi}{2}$, 所以 $e^{i\varphi}=-i$, (43)式变成:

$$\frac{\partial^2C_2}{\partial t^2}-i\omega_0\sec\omega_0t\frac{\partial C_2}{\partial t}$$
$$+|\nu_{12}|^2\cos^2\omega_0t\,C_2=0\tag{45}$$

作 $t=iT$ 的变量变换, (45)便是

$$\frac{\partial^2C_2}{\partial T^2}+\omega_0\,\mathrm{sech}\,\omega_0T\frac{\partial C_2}{\partial T}$$
$$-|\nu_{12}|^2\mathrm{ch}^2\omega_0T\,C_2=0\tag{46}$$

再作如下变量变换:

$$C_2=v(T)\exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^T\omega_0\,\mathrm{sech}\,\omega_0T\,dT\right\}\tag{47}$$

(46)方程的一次导数即消去得:

$$\frac{d^2v}{dT^2}+J(T)v=0 \tag{48}$$

其中:

$$J(T)=-\omega_0^2\left[k\operatorname{ch}^2\omega_0 T+\frac{1}{2}\operatorname{sech}\omega_0 T\tanh\omega_0 T+\frac{1}{4}\operatorname{sech}^2\omega_0 T\right] \tag{49}$$

(49)式中曾令 $|\nu_{12}|^2=k\omega_0^2$, 在 $k=1$ 情况下可作图得 $J(T)$ 的有限极值为 $-1.18\omega_0^2$ (当 $\omega_0 T=-0.25$), 而 $0\leqslant\omega_0 T\leqslant 0.5$ 范围内通过计算可知满足 $\frac{1}{2}\left|\frac{J'}{\sqrt{J}}\right|\ll|J|$, 这表明此区间之解可以用 WKB 法求得[9], 其形式是:

$$v(T)=\frac{a}{\sqrt[4]{J(T)}}\exp\left\{+i\int_{T_0}^{T}\sqrt{J}\,dT\right\}+\frac{b}{\sqrt[4]{J(T)}}\exp\left\{-i\int_{T_0}^{T}\sqrt{J}\,dT\right\} \tag{50}$$

式中 a、b 为积分常数, 可由原子系统的初始状况决定。(47)及(50)便是共振情况下耦合方程之近似解析解。

参 考 文 献

[1] Schiff L. I.; Quantum Mechanics, 3rd edition, 1968, p279-293.

[2] Shirley J. H.; *Phys. Rev.*, 1965, **138**, B979.

[3] J. V. Moloney *et al.*; *Phys. Lett.*, 1974, **49**, 207.

[4] Muriel A. M.; *Phys Lett.*, **40A**, 1972, 261.

[5] Gupta, N. D. Sen; *Phys. Lett.*, **42A**, 1972, 33.

[6] London R.; The Quantum Theory of Light, 1978, p44, New York.

[7] Salzman W. R.; *Phys. Rev. Lett.*, 1971, **26**, 220.

[8] E. 卡姆克;《常微分方程手册》, 科学出版社, 1977, p489.

[9] L. M. Jones; An Introduction to Mathematical Method of Physics, Cummings Publishing Company, 1979, p257.

(上接第 203 页)

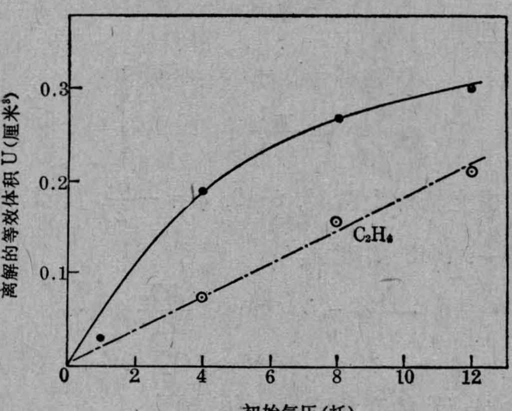

图 7 乙醇离解等效体积与初始气压的关系
虚线表示生成物 C_2H_4 浓度随气压的变化

而增大。

作者感谢张志三先生、徐积仁、唐福海同志, 以及分子光谱组的支持。

参 考 文 献

[1] R. H. Pierson, A. N. Fletcher; *Anal. Chem.*, 1956, **28**, 1218.

[2] J. D. Campbell *et al.*; *Appl. Phys. Lett.*, 1978, **32**, 413.

[3] W. C. Danen; *J. Amer. Chem. Soc.*, 1979, **101**, 1187.

[4] 朱沛然等;《激光》, 1981, **8**, No. 10, 20.

[5] W. Fuss, T. P. Cotter; *Appl. Phys.*, 1977, **12**, 265.

[6] A. И. 杜德罗夫斯基;《光学仪器理论》, 第一卷, 科学出版社, 1975.

[7] G. Herzberg; "Molecular spectra and molecular structure, II", N. Y. (1947).

[8] P. A. Schulz *et al.*; *J. Chem. Phys.*, 1980, **72**, 4985.