

Classification
Physics Abstracts
 33.10

CONTRIBUTION A L'ÉTUDE DE LA FONCTION D'ONDE DE VIBRATION D'UNE MOLÉCULE DIATOMIQUE : EXPRESSIONS ANALYTIQUES DES FONCTIONS CANONIQUES (*)

H. KOBEISSI

Faculté des Sciences, Université Libanaise, Beyrouth, Liban

M. ADEL ALAMEDDINE

Faculté de Pédagogie, Université Libanaise, Beyrouth, Liban

(Reçu le 18 août 1977, accepté le 30 septembre 1977)

Résumé. — Le calcul des fonctions canoniques de vibration est considéré pour les potentiels électroniques usuels d'une molécule diatomique. Ces potentiels sont définis par un ensemble de points (points de retour ou non) et par des interpolations et extrapolations polynomiales. Des expressions analytiques exactes des fonctions canoniques sont trouvées pour un tel potentiel ainsi que pour un potentiel de Dunham. Ces expressions permettent de calculer les fonctions canoniques, et par la suite la fonction d'onde, pour chaque niveau de vibration et en tout point directement à partir des caractéristiques du potentiel donné et du niveau d'énergie. Le calcul ne nécessite guère le recours à un ordinateur. Des applications numériques sont présentées et discutées.

Abstract. — The derivation of the canonical functions of vibration is considered for a numerical potential of a diatomic molecule i.e. a potential given by the coordinates of its turning points and suitable polynomial interpolations and extrapolations. Exact analytical expressions of the canonical functions are found for a numerical potential as well for a Dunham potential. With these expressions, one can calculate the canonical functions, and furthermore the wave function, at any point and for any level directly from the coordinates of the turning points of the potential. The calculation can be made without the use of a computer. Some numerical applications are given and discussed.

1. **Introduction.** — Le potentiel électronique $U(r)$ d'une molécule diatomique est donné le plus souvent par les coordonnées de ses points de retour [1, 2] et par des interpolations (et extrapolations) convenables.

Nous appelons dans ce travail un tel potentiel *potentiel numérique* en nous limitant au cas où les interpolations et les extrapolations sont polynomiales. Nous cherchons alors à trouver les expressions analytiques des fonctions canoniques et par la suite, la fonction d'onde de vibration d'un tel potentiel.

Nous présentons dans la section 2 un rappel des résultats de travaux antérieurs, et dans les sections 3 et 4 les expressions analytiques des fonctions canoniques pour un potentiel de Dunham puis pour un potentiel numérique. Des applications numériques sont alors données dans la section 5. La section 6 est enfin réservée à la conclusion.

2. **Rappel.** — L'introduction de la notion des fonctions canoniques [3] permet de dissocier le problème du calcul de la fonction d'onde de vibration en deux problèmes.

En écrivant $\psi_v(x) = \psi_v(0) \alpha_v(x) + \psi'_v(0) \beta_v(x)$, on peut traiter d'une part le calcul des fonctions canoniques $\alpha_v(x)$ et $\beta_v(x)$ et traiter d'autre part le problème de détermination des *valeurs initiales* $\psi_v(0)$ et $\psi'_v(0)$. Nous savons déjà que le calcul des fonctions canoniques ne pose pas un problème de valeurs initiales [4] puisqu'on sait que :

$$\alpha_v(0) = 1, \quad \alpha'_v(0) = 0, \quad \beta_v(0) = 0, \quad \beta'_v(0) = 1.$$

Cette séparation du problème en deux n'est qu'artificielle, puisque la détermination des valeurs initiales de ψ_v est liée au calcul des fonctions canoniques par la relation :

$$\frac{\psi'_v(0)}{\psi_v(0)} = - \lim_{\substack{x \rightarrow a \\ x \rightarrow b}} \frac{\alpha_v(x)}{\beta_v(x)}$$

(*) Version révisée de manuscrits soumis en novembre 1975 dont la rédaction a été retardée par les événements survenus au Liban entre temps.

qui exprime les conditions aux limites imposées à la fonction d'onde [4]. A noter que $a = +\infty$ et $b = -r_e$ pour $x = r - r_e =$ distance internucléaire comptée à partir de l'équilibre.

Mais l'introduction de la notion des fonctions canoniques a permis de faire dégager certaines propriétés de ces fonctions qui ont permis de simplifier leur calcul et de simplifier par la suite celui de la fonction d'onde ψ_v .

Nous avons, en effet, montré [4] que les fonctions canoniques $\alpha_v(x)$ et $\beta_v(x)$ sont données par les expressions suivantes :

$$\alpha(x) = 1 + \int_0^x R(x, t) dt$$

$$\beta(x) = x + \int_0^x tR(x, t) dt$$

où

$$R(x, t) = \sum_{i=0}^{\infty} K_i(x, t)$$

$$K_i(x, t) = \int_t^x K(x, z) K_{i-1}(z, t) dz \quad (i > 0)$$

$$K_0(x, t) = K(x, t) = (x - t) f_v(t)$$

$$f_v(x) = \frac{2\mu}{\hbar^2} [U(x) - E_v]$$

μ et \hbar ayant les significations habituelles, E_v étant l'énergie du niveau v ($x = r - r_e$, distance internucléaire comptée à partir de l'équilibre).

Dans un autre travail [5], nous avons montré que l'étude des fonctions canoniques est considérablement simplifiée en définissant les *harmoniques* de chacune de ces fonctions. Les fonctions canoniques $\alpha(x)$ et $\beta(x)$ peuvent alors être mises sous la forme :

$$\alpha_v(x) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i(x)$$

$$\beta_v(x) = \sum_{i=0}^{\infty} B_i(x)$$

avec

$$A_i(x) = \int_0^x (x - t) f(t) A_{i-1}(t) dt \quad \text{et} \quad A_0(x) = 1$$

$$B_i(x) = \int_0^x (x - t) f(t) B_{i-1}(t) dt \quad \text{et} \quad B_0(x) = x$$

$f_v(x)$ étant le facteur d'énergie du niveau v défini par

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2} [E_v - U(x)].$$

Nous avons montré aussi que la série des *harmoniques* est absolument convergente et qu'il suffit, en fait, de prendre quelques *harmoniques* pour calculer, avec une bonne précision, les fonctions canoniques en un point.

3. Expressions analytiques des fonctions canoniques de Dunham. — Pour un état électronique donné d'une molécule diatomique, le potentiel de Dunham [6] peut s'écrire sous la forme :

$$U(x) = \sum_{j=2}^m \gamma_j x^j$$

où $x = r - r_e$, les γ_j sont des constantes caractéristiques de l'état considéré et m est un entier qui dépend du nombre des niveaux de vibration obtenus expérimentalement.

Dans ce cas, l'équation radiale de Schrödinger s'écrit :

$$\psi''(x) - f(x) \psi(x) = 0$$

et le facteur d'énergie $f(x)$ se met sous la forme :

$$f(x) = \sum_{j=0}^m a_j^0 x^j$$

où

$$a_0^0 = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E_v, \quad a_1^0 = 0$$

et pour $j > 1$,

$$a_j^0 = \frac{2\mu}{\hbar^2} \gamma_j.$$

Remarquons qu'en supposant $x = \frac{r - r_e}{r_e}$, la méthode reste la même et le seul changement à introduire est dans les coefficients a_j^0 qui seront alors :

$$a_0^0 = -\frac{2\mu r_e^2}{\hbar^2} E_v, \quad a_1^0 = 0$$

et pour $j > 1$,

$$a_j^0 = \frac{2\mu r_e^2}{\hbar^2} \gamma_j.$$

En remplaçant $f(x)$ par son expression dans les *harmoniques* de $\alpha(x)$ et $\beta(x)$, nous pouvons intégrer ces derniers. Ce qui nous permet de trouver analytiquement les expressions des fonctions canoniques.

3.1 EXPRESSION DE $\alpha(x)$. — Considérons les différents termes de

$$\alpha(x) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i(x)$$

avec

$$A_0(x) = 1 \quad \text{et} \quad A_i(x) = \int_0^x (x - t) f(t) A_{i-1}(t) dt.$$

Une étude des $A_i(x)$ montre que chaque *harmonique* est un polynôme en x . En faisant la somme de

tous les $A_i(x)$ et en réarrangeant les termes, nous trouvons :

$$\alpha(x) = 1 + \sum_{i=2}^{\infty} c_i \frac{x^i}{i(i-1)}$$

avec

$$c_i = \sum_{i=1}^{|l/2|} a_{i-2i}^{i-1}$$

et

$$a_k^i = \sum_{j=0}^k \frac{a_j^0 a_{k-j}^{i-1}}{(k-j+2i-1)(k-j+2i)}$$

$|l/2|$ étant la partie entière de $l/2$.

3.2 EXPRESSION DE $\beta(x)$. — Une étude des $B_i(x)$ analogue à celle des $A_i(x)$ montre, que tous les termes $B_i(x)$ sont des polynômes en x . La fonction canonique $\beta(x)$ prend alors la forme :

$$\beta(x) = x + \sum_{i=3}^{\infty} d_i \frac{x^i}{i(i-1)}$$

avec

$$d_i = \sum_{i=1}^{|l-1/2|} b_{i-2i-1}^{i-1}$$

$$b_k^i = \sum_{j=0}^k \frac{b_j^0 b_{k-j}^{i-1}}{(k-j+2i)(k-j+2i+1)}$$

et

$$b_j^0 = a_j^0 \quad \text{quel que soit } j.$$

L'intérêt de ces expressions de $\alpha(x)$ et $\beta(x)$ réside dans leur simplicité et la facilité de leur exploitation (l'usage de l'ordinateur n'est plus indispensable). Un autre intérêt réside dans le fait que ces expressions représentent des relations explicites entre les fonctions canoniques de vibration et les constantes du potentiel de Dunham. Ces dernières dépendant des niveaux d'énergie, les coefficients de $\alpha(x)$ et $\beta(x)$ dépendent explicitement des coordonnées des points de retour du potentiel.

4. Expressions analytiques des fonctions canoniques d'un potentiel numérique. — En considérant le potentiel numérique tel qu'il a été défini dans ce travail, on peut remarquer que ce potentiel est représenté entre deux points de retour consécutifs par une fonction polynomiale et que le facteur d'énergie est lui-même un polynôme. Donc le problème du calcul des fonctions canoniques entre deux points de retour consécutifs se présente, dans sa formulation mathématique, comme celui du potentiel de Dunham.

Quand n niveaux vibrationnels du potentiel sont connus, nous aurons à interpoler la branche droite du potentiel ($x > 0$) sur n intervalles ($[0, x_0], [x_0, x_1], \dots, [x_{n-2}, x_{n-1}]$) et à extrapoler au-delà de x_{n-1} . Nous aurons à faire le même travail pour la branche gauche du potentiel ($x < 0$).

Soit $[x_m, x_{m+1}]$ l'un de ces intervalles. En prenant x_m comme origine des abscisses et en posant $X = x - x_m$,

on peut calculer $\alpha(X)$ et $\beta(X)$ où X varie entre 0 et $x_{m+1} - x_m$. Sur un intervalle le potentiel peut être représenté par la fonction :

$$U(X) = \sum_{i=0}^p \gamma_i X^i$$

où p est le degré du polynôme considéré. Le facteur d'énergie s'écrit alors :

$$f_v(X) = \sum_{i=0}^p a_i X^i$$

où les a_i se déduisent simplement des γ_i et E_v (et varient d'un intervalle à l'autre). Les expressions de $\alpha(X)$ et de $\beta(X)$ sont donc données par les relations

$$\alpha_v(X) = 1 + \sum_{i=2}^{\infty} c_i \frac{X^i}{i(i-1)}$$

$$\beta_v(X) = X + \sum_{i=3}^{\infty} d_i \frac{X^i}{i(i-1)}$$

Les coefficients c_i et d_i étant ceux définis dans le paragraphe précédent.

Mais nous savons déjà que $\alpha_v(x)$ est différente de $\alpha_v(X)$ [resp. $\beta_v(x) \neq \beta_v(X)$]. Or pour déduire $\alpha_v(x)$ de $\alpha_v(X)$ [resp. $\beta_v(x)$ de $\beta_v(X)$], nous pouvons recourir aux formules de transformation suivantes :

$$\alpha(x) = \alpha(x_m) \alpha(X) + \alpha'(x_m) \beta(X)$$

$$\beta(x) = \beta(x_m) \alpha(X) + \beta'(x_m) \beta(X)$$

et ceci pour chaque niveau de vibration v .

Ces mêmes formules de transformation (avec leurs dérivées) permettent d'exprimer $\alpha(x_m)$, $\beta(x_m)$, $\alpha'(x_m)$ et $\beta'(x_m)$ en fonction de $\alpha(x_{m-1})$, $\beta(x_{m-1})$, $\alpha'(x_{m-1})$ et $\beta'(x_{m-1})$. Nous pouvons aller de proche en proche jusqu'à $\alpha(0)$, $\beta(0)$, $\alpha'(0)$ et $\beta'(0)$ qui valent respectivement 1, 0, 0, 1.

Afin de donner des expressions analytiques simples de $\alpha_v(x)$ et $\beta_v(x)$, nous avons écrit les formules de transformation sous la forme généralisée suivante :

$$\alpha(a, x_j) = \alpha(a, x_i) \alpha(x_i, x_j) + \alpha'(a, x_i) \beta(x_i, x_j)$$

$$\alpha'(a, x_j) = \alpha(a, x_i) \alpha'(x_i, x_j) + \alpha'(a, x_i) \beta'(x_i, x_j)$$

$$\beta(a, x_j) = \beta(a, x_i) \alpha(x_i, x_j) + \beta'(a, x_i) \beta(x_i, x_j)$$

$$\beta'(a, x_j) = \beta'(a, x_i) \alpha'(x_i, x_j) + \beta'(a, x_i) \beta'(x_i, x_j)$$

où a est une origine arbitraire et x_j et x_i sont deux valeurs quelconques de x .

En prenant $a = 0$ et $x = x$; $x \in [x_m, x_{m+1}]$, les expressions analytiques exactes des fonctions canoniques d'un potentiel numérique sont données par la relation matricielle :

$$\begin{pmatrix} \alpha(0, x) & \beta(0, x) \\ \alpha'(0, x) & \beta'(0, x) \end{pmatrix} = \prod_{k=0}^m \begin{pmatrix} \alpha(x_k, x_{k+1}) & \beta(x_k, x_{k+1}) \\ \alpha'(x_k, x_{k+1}) & \beta'(x_k, x_{k+1}) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

où les x_k ($1 \leq k \leq m$) sont les abscisses des points de retour sur l'intervalle $[0, x]$ avec $x_0 = 0$ et $x_{k+1} = x$.

Notons que cette relation matricielle permet aussi de calculer les dérivées des fonctions canoniques et qu'elle est valable pour tout niveau de vibration v et pour toute abscisse.

5. Application numérique. — Nous avons appliqué les expressions analytiques trouvées des fonctions canoniques à un potentiel numérique de l'état fondamental de la molécule N_2^+ [7]. Nous avons calculé les fonctions canoniques et leurs dérivées pour $v = 0$ aux divers points de retour.

Les résultats obtenus sont donnés dans les tableaux I, II, III, et IV où nous donnons les valeurs calculées à partir des expressions analytiques établies dans ce travail et celles calculées par une intégration numérique directe de l'équation radiale de Schrödinger (méthode de Runge-Kutta avec un pas de 10^{-3} Å).

Cette comparaison montre que l'écart entre deux valeurs homologues croît avec l'abscisse. Ceci est dû à ce que la méthode de Runge-Kutta étant numérique, les erreurs s'accumulent à mesure que x croît.

Nous avons par ailleurs cherché à comparer nos résultats à ceux obtenus à partir de la méthode de Runge-Kutta pour divers pas h d'intégration. Le résultat de ce travail est présenté dans le tableau V pour certains niveaux d'un potentiel numérique [8] de

TABLEAU II

Comparaison des valeurs α'_c calculées par application de nos relations à celles de Runge-Kutta (Niveau 0 de l'état $X\Sigma - N_2^+$).

[Comparison of values for α'_c (calculated by applying our expressions) with those for α'_{R-K} (calculated with the Runge-Kutta method) (0 level of state $X\Sigma - N_2^+$).]

x_v	α'_c	α'_{R-K}
0,050	- 13,665 018	- 13,665 6
0,091	- 9,693 337	- 9,694 4
0,121	- 13,585 794	- 13,589 5
0,149	- 48,326 805	- 48,342 6
0,170	- 166,067 282	- 166,112 2
0,195	- 853,915 529	- 854,197 9
0,214	- 3 328,591 803	- 3 329,688 4
0,234	- 15 536,314 476	- 15 541,388 6
- 0,045	12,558 471	12,560 7
- 0,074	7,103 669	7,106 6
- 0,092	0,322 304	0,328 0
- 0,103	- 6,248 695	- 6,238 2
- 0,118	- 23,642 483	- 23,615 5
- 0,129	- 52,981 751	- 52,924 5
- 0,138	- 105,050 614	- 104,938 3
- 0,142	- 145,921 814	- 145,766 1

TABLEAU I

Comparaison des valeurs α_c calculées par application de nos relations à celles de Runge-Kutta α_{R-K} (Niveau 0 de l'état $X\Sigma - N_2^+$).

[Comparison of values for α_c (calculated by applying our expressions) with those for α_{R-K} (calculated with the Runge-Kutta method) (0 level of state $X\Sigma - N_2^+$).]

x_v	α_c	α_{R-K}
0,050	0,554 310	- 0,554 3
0,091	0,068 068	0,068 8
0,121	- 0,244 696	- 0,244 7
0,149	- 0,976 428	- 0,976 7
0,170	- 2,950 394	- 2,951 3
0,195	- 13,333 160	- 13,337 5
0,214	- 47,574 677	- 47,590 3
0,234	- 204,779 572	- 204,846 2
- 0,045	0,634 443	0,634 4
- 0,074	0,329 149	0,329 0
- 0,092	0,258 028	0,257 8
- 0,103	0,287 593	0,287 3
- 0,118	0,493 883	0,493 3
- 0,129	0,893 739	0,892 8
- 0,138	1,576 149	1,574 4
- 0,142	2,072 394	2,070 1

TABLEAU III

Comparaison des valeurs β_c calculées par application de nos relations à celles de Runge-Kutta β_{R-K} (Niveau 0 de l'état $X\Sigma - N_2^+$).

[Comparison of values for β_c (calculated by applying our expressions) with those for β_{R-K} (calculated with the Runge-Kutta method) (0 level of state $X\Sigma - N_2^+$).]

x_v	β_c	β_{R-K}
0,050	0,043 586	0,043 5
0,091	0,089 020	0,089 0
0,121	0,215 369	0,215 3
0,149	0,708 509	0,708 5
0,170	2,114 308	2,114 1
0,195	9,542 374	9,541 8
0,214	34,046 615	34,044 8
0,234	146,549 439	146,540 8
- 0,045	- 0,040 290	- 0,040 2
- 0,074	- 0,069 458	- 0,069 5
- 0,092	- 0,113 383	- 0,113 2
- 0,103	- 0,170 838	- 0,170 8
- 0,118	- 0,351 814	- 0,351 7
- 0,129	- 0,660 741	- 0,660 6
- 0,138	- 1,175 981	- 1,175 8
- 0,142	- 1,548 810	- 1,548 6

TABLEAU IV

Comparaison des valeurs β'_c calculées par application de nos relations à celles de Runge-Kutta β'_{R-K} (Niveau 0 de l'état $X\Sigma - N_2^+$).

[Comparison of values for β'_c (calculated by applying our expressions) with those for β'_{R-K} (calculated with the Runge-Kutta method) (0 level of state $X\Sigma - N_2^+$).

x_v	β'_c	β'_{R-K}
0,050	0,729 548	0,729 4
0,091	2,014 033	2,013 9
0,121	7,870 800	7,870 4
0,149	34,045 982	34,044 2
0,170	118,660 874	118,654 6
0,195	611,061 525	611,029 1
0,214	2 382,078 619	2 381,948 7
0,234	11 118,478 542	11 117,839 4
- 0,045	0,778 658	0,778 5
- 0,074	1,536 936	1,536 7
- 0,092	3,734 031	3,733 6
- 0,103	7,188 999	7,188 3
- 0,118	18,866 314	18,864 5
- 0,129	40,288 254	40,284 4
- 0,138	70,088 264	70,084 1
- 0,142	109,537 629	109,527 0

l'état fondamental de la molécule CO. Pour chacun de ces niveaux nous calculons les quantités

$$l^+ = - \lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(x)}{\beta(x)} \quad \text{et} \quad l^- = - \lim_{x \rightarrow -r_e} \frac{\alpha(x)}{\beta(x)}$$

à partir de nos relations et à partir de la méthode de Runge-Kutta effectuée avec les pas 10^{-2} , 10^{-3} , 5×10^{-4} et 10^{-4} Å respectivement.

Nous constatons de ce tableau qu'à mesure que la méthode d'intégration numérique est plus précise (le pas h décroît), la valeur calculée de l^+ et l^- converge vers la valeur exacte donnée par notre travail.

6. Conclusion. — Dans ce travail, nous avons considéré un potentiel numérique d'un état électronique d'une molécule diatomique donné par un ensemble de points (points de retour ou non) et par des interpolations (et extrapolations) polynomiales.

Nous avons trouvé les expressions analytiques exactes des fonctions canoniques de vibration d'un tel potentiel ainsi que pour le potentiel de Dunham. Le calcul de ces expressions est simple dans le sens qu'il ne nécessite pas l'usage d'un ordinateur.

Les applications numériques présentées en exemples, ont permis de comparer nos résultats à ceux

TABLEAU V

Valeurs de l^+ et de l^- calculées par la méthode de Runge-Kutta pour différents pas d'intégration et par la nouvelle méthode (*). (Etat $X\Sigma - CO$: potentiel d'Albritton [8])

[Values of l^+ and l^- calculated using the Runge-Kutta method for different integration steps and with our new method (*). (State $X\Sigma - CO$: potential of Albritton [8])]

v	Runge-Kutta				Nouvelle méthode
	$h = 10^{-2}$ Å	$h = 10^{-3}$ Å	$h = 5 \times 10^{-4}$ Å	$h = 10^{-4}$ Å	
0	- 3,390 0	0,513 7	0,733 7	0,910 2	1,143 7
	5,974 3	1,986 7	1,765 4	1,588 4	1,544 7
1	151,566 9	- 394,022 9	- 328,733 4	- 290,063 2	- 216,463 9
	- 53,981 1	- 131,833 3	- 141,790 5	- 150,840 6	- 153,217 4
2	- 9,111 8	10,671 0	11,817 1	12,741 0	19,561 9
	63,252 5	26,770 9	25,356 2	24,235 1	23,913 3
3	774,584 5	- 122,448 5	- 113,943 7	- 107,8 074	- 66,985 6
	- 16,443 6	- 54,120 8	- 57,147 0	- 59,712 8	- 61,043 0
4	29,558 4	97,705 6	104,776 8	110,969 3	97,438 1
	7 670,144 5	198,898 1	92,408 9	87,580 2	107,996 1
5	- 102,071 1	- 25,846 5	- 23,208 5	- 21,131 4	- 13,730 1
	40,939 5	- 4,886 8	- 7,233 5	- 9,134 3	- 11,063 6
6	87,111 9	2 869,724 6	- 6 547,968 8	- 1 807,832 0	- 386,207 0
	- 47,238 9	- 213,540 8	- 241,935 7	- 270,258 1	- 308,634 2
7	- 20,405 2	41,226 8	45,304 7	48,699 1	57,265 3
	898,723 9	74,792 0	69,088 4	64,763 0	61,182 1

(*) Pour chaque niveau, la première ligne correspond à l^+ , la deuxième à l^- .

(*) For each level, the first line corresponds to l^+ , the second to l^- .

obtenus à partir d'une méthode numérique. Nous avons pu constater que le résultat de la méthode numérique s'approche du nôtre à mesure que la

précision de la méthode numérique s'améliore. L'extension de ce travail au calcul de la fonction d'onde de vibration-rotation fera l'objet d'un autre article.

Bibliographie

- [1] RYDBERG, R., *Z. Phys.* **73** (1931) 376.
KLEIN, O., *Z. Phys.* **76** (1932) 226.
REES, A. L., *Proc. Phys. Sci.* **59** (1947) 998.
 - [2] KOBEISSI, H., Thèse, Lyon (1972).
KOBEISSI, H. et HAJJ, F. Y., *J. Phys.* **7** (1974).
 - [3] KOBEISSI, H. et TERGIMAN, S., *J. Physique*, **35** (1974) 635.
 - [4] TERGIMAN, S., Thèse de 3^e Cycle, Lyon (1973).
 - [5] KOBEISSI, H. et ALAMEDDINE, M. A., 6^e Réunion Scientifique ALAS, Beyrouth (1974).
 - [6] DUNHAM, J. L., *Phys. Rev.* **41** (1932) 721.
 - [7] KOBEISSI H., *J. Physique* **34** (1973) 235.
 - [8] ALBRITTON, D. L., *J. Mol. Spectrosc.* (1971) 180.
-