一氧化碳 $A^1\Pi$ 态受到 $a^3\Pi$ 态的微扰本应无法探测：探测、机制与意外发现

Stanisław Ryzner, [1,2] **Robert W. Field,** [3] **Wim Ubachs,** [4] **Alan N. Heays,** [5,6] **Asen Pashov,** [7] **Patryk Jasik,** [8,9] **Józef E. Sienkiewicz,** [8,10] **Nelson de Oliveira,** [11] **Kin F. Lai,** [12] **Marzena I. Malicka,** [13] **Aleksandra Stasik,** [1,2] **Wojciech Szajna,** [1] **Izabela Piotrowska,** [1] **和Rafał Hakalla**[1,a)]

[1] 材料光谱实验室，物理研究所，热舒夫大学，Pigonia街1号，35-310热舒夫，波兰。[2] 热舒夫大学博士生院，热舒夫大学，Rejtana街16C号，35-959热舒夫，波兰[3] 化学系，麻省理工学院，美国马萨诸塞州剑桥，MA02139。[4] 物理与天文学系及LaserLaB，阿姆斯特丹自由大学，De Boelelaan 1100，1081 HZ阿姆斯特丹，荷兰。[5] J. Heyrovsky物理化学研究所，Dolejskova 2155/3号，182 23布拉格8，捷克共和国。[6] Manaaki Whenua土地关怀研究中心，生物经济科学研究所，PO Box 69040，Lincoln 7640，新西兰。[7] 物理学院，索非亚大学圣克莱门特·奥赫里德斯基，James Bourchier大道5号，1164索非亚，保加利亚。[8] 应用物理与数学学院，格但斯克工业大学，格但斯克80-233，波兰。[9] BioTechMed中心，格但斯克工业大学，格但斯克80-233，波兰。[10] 先进材料中心，格但斯克工业大学，格但斯克80-233，波兰。[11] SOLEIL同步辐射光源，Orme de Merisiers，St. Aubin，BP 48，F-91192伊韦特河畔吉夫Cedex，法国。[12] 物理系，香港大学，中国香港特别行政区。[13] 数学与应用物理学院，热舒夫理工大学，Powstańców Warszawy街8号，35-959热舒夫，波兰。

[a)] **通讯作者：** rhakalla@ur.edu.pl

摘要

一氧化碳分子中，属于同一电子组态的两个电子态之间，$a^3\Pi$ 与 $A^1\Pi$ 振动能级间的直接微扰应当弱到无法观测，因为其近简并能级的振动重叠积分 $a^3\Pi, v'|A^1\Pi, v''$ 极小。然而，在 $^{13}C^{18}O$ 同位素体中，$a^3\Pi$(振动量子数 = 13) ~ $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 微扰的能级位移和跃迁强度特征显而易见。对 $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$(2, 0)、$B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$(0, 2) 以及 $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi$(0, 2) 光谱等进行详细研究，这些光谱是在六个交叉点（*e*态-和*f*态-对称性，$|\Omega|$ = 0、1、2）的能量区域内通过真空紫外与可见光傅里叶变换互补技术获得的。研究表明，微扰通道是间接的，主要由 $e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 4) 态促成，并且经由其F_{1e} 和F_{3e} 分量发生量子力学干涉。

I. 引言

正如“微扰”一词所暗示的那样，微扰是罕见事件。它们会破坏光谱中预期的常规模式。微扰源于分子哈密顿量中的电子态间相互作用项；在玻恩–奥本海默（BO）近似的指导下，这些项在光谱模型的初步近似中被略去。这些项包括：自旋-轨道、自旋-电子、**L**-解耦、**S**-解耦，以及不同电子态之间的静电相互作用。当两个电子态中具有相同*J*和相同宇称的能级偶然接近简并时，两个态的常规能级结构都会受到破坏：这就是微扰！负责电子态间相互作用的非对角矩阵元取决于可计算的电子、振动和转动因子，以及受微扰电子态与微扰体电子态之间的能量差。完整的去微扰模型由可根据 BO 势能曲线的振动–转动波函数计算得到的因子，以及非绝热相互作用的电子因子组成。

我们中的一位（RWF）为 CO 的 $a^3\Pi$和 $A^1\Pi$ 态（属于 $\pi^4\sigma\pi^*$ 电子组态）以及 $a'^3\Sigma^+$、$e^3\Sigma^-$ $d^3\Delta$、$I^1\Sigma^-$ 和 $D^1\Delta$ 电子态（属于 $\pi^3\sigma^2\pi^*$ 电子组态）建立了一个完整的去微扰模型。[1–3] 这些 $5 \times 2 = 10$ 组态间微扰矩阵元的所有电子因子，都取决于一次从 π 到 σ 轨道的跃迁。振转因子由振动 $v'|v''$ 重叠积分和转动 $v'|\mathbf{B(R)}|v''$ 积分组成，前者依赖于 *J*，二者均可根据 BO 势能曲线准确计算。该去微扰模型唯一未纳入的电子矩阵元是同组态的 $a^3\Pi|\mathbf{H^{SO}}|A^1\Pi$ 因子。之所以将其排除，是因为它先验地已知小到可以忽略。

相同-*J*、相同宇称的受微扰态与微扰体态之间的非对角相互作用，会产生可观测能级位移、强度借用以及量子力学干涉效应。这些效应通过非简并微扰理论和准简并微扰理论进行建模。电子态相互作用因子由多态去微扰模型中参数的最小二乘拟合确定。数十年来，人们开展了许多此类去微扰研究，其中一氧化碳分子及其同位素异构体一直作为基准体系。[4–6] 特别是近年来，研究人员利用可见光区的傅里叶变换（FT）发射光谱技术，以及真空紫外区基于同步辐射的傅里叶变换吸收光谱技术，对不同一氧化碳同位素异构体的$A^1\Pi$ 态及其微扰体进行了高分辨率研究，[7–12] 在某些情况下还辅以激光光谱学。[13–15]

为什么一氧化碳 $a\langle a^3\Pi|\mathbf{H^{SO}}|A态^1\Pi\rangle$矩阵元如此之小？涉及一氧化碳 $a^3\Pi$ 和 A态$^1\Pi$ 态。原因在于这些同组态电子态具有相似的转动-振动常数。同组态电子态之间的振动重叠积分存在一条极强的 $\Delta v = 0$ 倾向规则。$a^3\Pi$ 和 A态$^1\Pi$ 态之间的能量差约为振动频率的十一倍， ω_e。因此，$\langle v_{a^3\Pi}|v_{A^1\Pi}\rangle$ 近简并振动态之间的重叠积分预计会极小（$< 10^{-6}$），而自旋-轨道矩阵元中的电子因子

在一氧化碳中，预计也小到不足以产生影响（< 100 cm^{-1}），因此，直接$A^1\Pi \sim a^3\Pi$自旋-轨道矩阵元将低于现代光谱学在可见光和紫外区的当前精度极限，约为 0.001 – 0.01 cm^{-1}。

然而，由$\pi^3\sigma^2\pi^*$构型的 $e^3\Sigma^-$、$d^3\Delta$、$a'^3\Sigma^+$、 $I^1\Sigma^-$和 $D^1\Delta$ 电子态介导的、$a^3\Pi$ 与 $A^1\Pi$态之间的间接微扰相互作用，原则上是可以观测到的。要观测到这些间接微扰，必须满足几个严格条件：

- 必须在 $A^1\Pi(v)$、$a^3\Pi(v+1)$与 $e^3\Sigma^-$、$d^3\Delta$、$a'^3\Sigma^+$、$I^1\Sigma^-$ 和 $D^1\Delta$ 态组中的某个振动态成员之间确定一个近简并关系。对于 ^{12}碳^{16}O，全部七个电子态的振转常数均已知；而对于 ^{12}碳^{18}O、^{13}碳^{16}O 和^{13}碳^{18}O，同位素位移已计算得到。结果表明，^{13}碳^{18}O 的 $A^1\Pi(v = 2)$、$a^3\Pi(v = 13)$组合提供了最佳的三态振电子近简并。

- 这种振电子近简并必须发生在相同的角动量态 *J*，并且在三个相互作用态中，每一态的能级都必须具有相同的 *e/f* 对称性。

- 每一对扰动态构型间的 5 × 2 对电子因子都必须已知。这些因子确实可以获得。[11,12]

- 必须计算振动重叠和 **B(R)** 积分。尽管预计这些量不强烈依赖于 *J*，但仍对完整的一组 $1< J < 100$ 转动能级进行了计算。

- 必须有一种能够布居中等偏高 *J* 能级、且不会消耗过量 ^{13}C 和 ^{18}O 稀有同位素的一氧化碳源。本研究已实现了这样一种源。

因此，观测到了由 $e^3\Sigma^-(v = 4)$、$d^3\Delta(v = 7)$ 和 $I^1\Sigma^-(v =3)$ 振电子能级介导的间接 $A^1\Pi(v = 2) \sim a^3\Pi(v = 13)$ 微扰。通过在使用 PGOPHER 软件的去微扰模型中关闭各个相互作用矩阵元，并考察拟合质量受到的影响，验证了每一种相互作用的存在。[16,17] 通过对 $A^1\Pi(v = 2)$ 态及其在^{13}C^{18}O中的所有微扰体进行全面的光谱分析，观测到了与 $a^3\Pi(v = 13)$ 态的间接微扰；该分析基于本研究获得的实验 VUV-FT 和 Vis-FT 数据。

II. 实验细节

A态. Vis-FT 发射光谱学

使用了在真空条件下运行的 Bruker IFS 125HR 傅里叶变换光谱仪，其光源由空气冷却空心阴极（HC）放电灯产生的一氧化碳荧光辐射提供。HC 灯的构造已在我们此前的工作中描述。[13,18,19] 关于产生一氧化碳分子辐射的所有细节和步骤，文献中均有描述。[7] 下文仅提供最重要的信息。采集 128 次扫描时，傅里叶变换光谱仪的仪器分辨率为 0.018 cm^{-1} 。一氧化碳 $B^1\Sigma^+ – A^1\Pi(0, 2)$ 的实验光谱以及

碳$^1\Sigma^+$ – A态$^1\Pi$(0, 2) 谱带的最大信噪比（SNR_{max}）分别为 80:1 和 15:1，见 图 1 和 2 以及使用 PGOPHER 程序生成的模拟[16]，模拟是在最终去微扰拟合之后生成的。

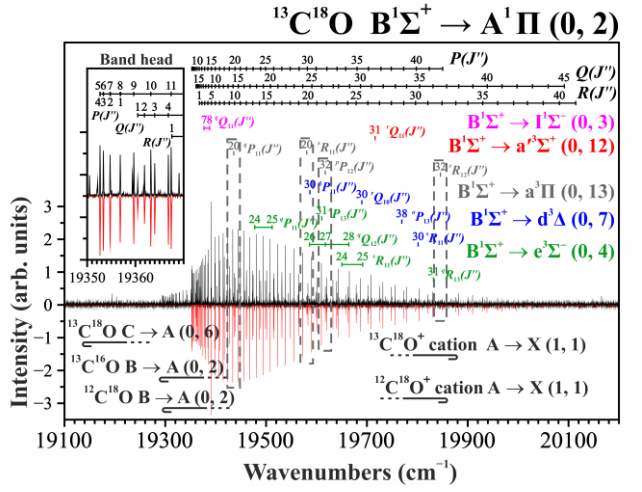


图 1. 采用 Vis-FT 光谱技术获得的$^{13}C^{18}O$ $B^1\Sigma^+$ – $A^1\Pi$(0, 2)发射光谱（上方黑色曲线），

)、

C O B – A ( )、C O A – X ( )和 C O A – X ( )谱带作为所研究谱带的污染谱带予以考

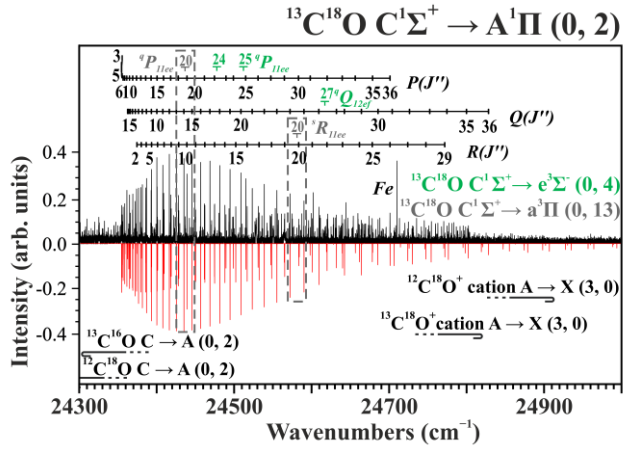


图 2。 采用 Vis-FT 光谱学技术获得的 $^{13}C^{18}O$ $C^1\Sigma^+$ – $A^1\Pi$(0, 2) 发射光谱（上方黑色曲

中考虑了光谱中共存的 C O C – A ( )、C O C – A ( )、C OA – X ( ) 和 C O A – X ( ) 谱

$_sR$( ) 和 $_qP$( )，其中出现了这些意外的额外谱线。这里将这一现象解释为一种极其微

氦氖线（633 nm）由稳频干涉激光器（±1.5 兆赫兹 / 2 h）产生，用于频率轴的校准，所得标准差为 0.004 cm^{-1}。分子跃迁的位置由商用 Bruker 软件 OPUS 8.5,[20] 确定，该软件将沃伊特线型拟合到测得的谱线轮廓上。每条单独的谱线轮廓均进行了独立分析。波数测量的绝对准确度通过高斯误差传播计算得出，其中根据经验布劳特公式计入了校准和线型拟合不确定度。[21] 该公式未考虑复杂（多谱线）轮廓中的谱线相关效应，因此对于混合谱线，不确定度被任意加倍。由此，$B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$ 和 $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$ 的波数分别以约 0.005 cm^{-1} 和 0.02 cm^{-1} 的单谱线和混合谱线准确度获得。结果汇总于补充材料中 $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$ 的表 S1 和 $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$ 的表 S2。记录的光谱中出现了 25 条额外谱线，这些谱线源于禁阻跃迁。额外谱线列于表 S3 中。

记录的 $^{13}C^{18}O$光谱受到灯混合气中同位素富集氧 $^{18}O_2$ 样品（Sigma Aldrich）所含1.9%的 $^{16}O_2$ ，以及将 ^{13}C（Cambridge Isotopes）沉积到空心阴极后残留的0.02% ^{12}C的污染。[15,22] 在 $^{13}C^{18}O$ $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$区域，不需要的谱带包括：$^{12}C^{18}O$ $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$；[9] $^{13}C^{16}O$ $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$；以及$^{13}C^{18}O$ $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 6)$、$^{13}C^{18}O^+$ $A^2\Pi - X^2\Sigma^+(1, 1)$和$^{12}C^{18}O^+$ $A^2\Pi - X^2\Sigma^+(1, 1)$。这些光谱是根据文献中的分子常数，使用PGOPHER模拟得到的。[7,15,24,25] 在 $^{13}C^{18}O$ $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$区域，污染谱带包括$^{12}C^{18}O$ $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$、[9] $^{13}C^{16}O$ $C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$、[26] $^{12}C^{18}O^+$ $A^2\Pi - X^2\Sigma^+(3, 0)$[27] 和 $^{13}C^{18}O^+$ $A^2\Pi - X^2\Sigma^+(3, 0)$，这些谱带是根据文献给出的分子常数，使用 PGOPHER 模拟得到的。[7,15,24]

B. 真空紫外傅里叶变换吸收光谱

利用 SOLEIL 同步辐射设施 DESIRS 光束线上的 VUV-FT 光谱仪，获得了 A态$^1\Pi - X$态$^1\Sigma^+(2, 0)$、$a^3\Pi - X$态$^1\Sigma^+(13, 0)$、e态$^3\Sigma^- - X$态$^1\Sigma^+(4, 0)$、$a'^3\Sigma^+ - X$态$^1\Sigma^+(12, 0)$、$D^1\Delta - X$态$^1\Sigma^+(3, 0)$、d态$^3\Delta - X$态$^1\Sigma^+(7, 0)$ 和 I态$^1\Sigma^- - X$态$^1\Sigma^+(3, 0)$ 谱带的高分辨率吸收光谱。关于该装置的详细说明可见相关文献。[28–31] 本研究在室温下记录了[13]碳[18]一氧化碳的两组光谱，波数范围为 59,800–73,100 cm^{-1} ；测量时，气体在无窗池装置入口处的压力约为 0.04 mbar，另一组则在一段长 1.8 cm、带 MgF_2 窗的池内以 73 mb 的压力测得。低压和高压光谱的信噪比峰值分别达到 530:1 和 80:1。仪器分辨率设为 0.15 cm^{-1}。完整的 VUV-FT 光谱及其指认见图 3，纯 A态$^1\Pi - X$态$^1\Sigma^+(2, 0)$ 光谱见图 4。此外，A态$^1\Pi - X$态$^1\Sigma^+(2, 0)$、$a'^3\Sigma^+ - X$态$^1\Sigma^+(12, 0)$ 和 d态$^3\Delta - X$态$^1\Sigma^+(7, 0)$ 谱带的带头见图 5。图 3 展示了[13]碳[18]一氧化碳 $a^3\Pi - X$态$^1\Sigma^+(13, 0)$ 谱带中观测到的跃迁。图 3 和图 4 中还可见许多其他谱带，它们来自多种同位素异构体（尤其是在高压光谱中），并已纳入最终分析。

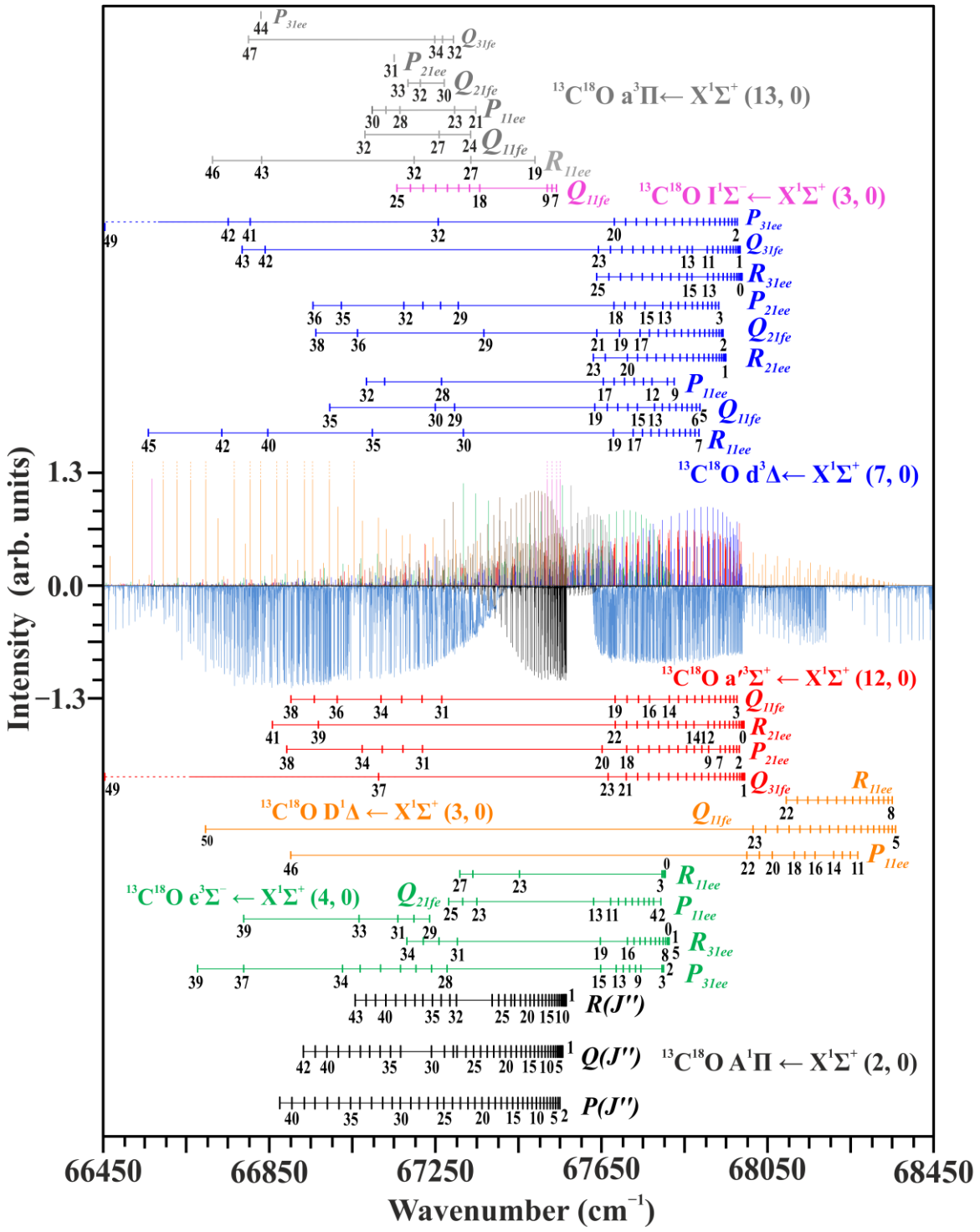


图 3。 使用 VUV-FT 光谱学在 0.0378 mb、300 K（下方黑色曲线）和 73 mb、300 K（下方蓝色曲线；后者的光谱中最强的 A–X 谱线已饱和）条件下

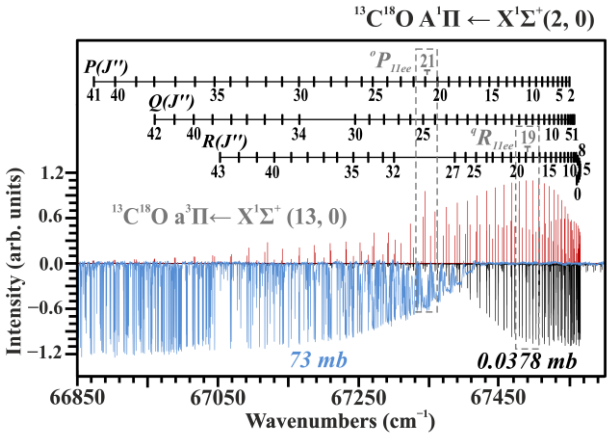


图 4. 采用真空紫外傅里叶变换光谱技术，在压力为 0.0378 mb、温度为 300

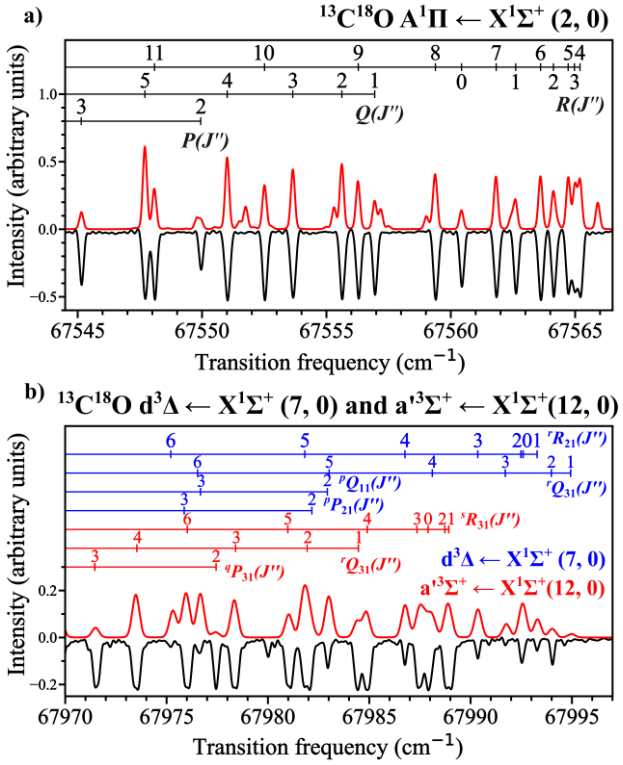


图 5. (a) $A^1\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+(2, 0)$ 谱带的独立带头区域。(b) d

X ( ) 和 a′

X ( ) 谱带的独立谱带区域。下方黑色曲线表示实验光谱，而上方红色曲线表示模

分析详情如下：(i) 将吸收光谱转换为透射光谱；(ii) 使用橡皮筋校正法将基线校正为水平基线，[32] 该方法将基线计算为由 n 个基线点组成的频率多边形。基线点的数量可在 OPUS 软件的相应输入栏中定义；[20] (iii) 在傅里叶变换算法中采用 8 倍因子实施后续零填充过程；(iv) 参照重叠 $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi - X^1\Sigma^+(1, 0)$的已知频率，对光谱进行了绝对频率校准。[7] 最后，低压和高压光谱的绝对波数校准不确定度分别为 0.01 和 0.025 cm^{-1}；(v) 使用 PGOPHER 程序[16] 和文献数据[1–4,7,11–14,33–36] 优化光谱归属过程；(vi) 使用 OPUS 8.5 软件[20] 分别测量每条谱线的跃迁频率，从而能够对谱线轮廓进行 Voigt 线型拟合。按照经验 Brault 方法，通过纳入校准和线型拟合引起的不确定度，评估波数测定的绝对准确度。[21] 对于复杂的多组分轮廓，不确定度增加 2 倍。在这些假设下，所得谱线位置的不确定度约为 0.04 cm^{-1}。$A^1\Pi - X^1\Sigma^+(2, 0)$、$a^3\Pi - X^1\Sigma^+(13, 0)$、$a'^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+(12, 0)$、$I^1\Sigma^- - X^1\Sigma^+(3, 0)$、$D^1\Delta - X^1\Sigma^+(3, 0)$、$d^3\Delta - X^1\Sigma^+(7, 0)$ 和 $e^3\Sigma^- - X^1\Sigma^+(4, 0)$ 谱带的波数及其不确定度列于补充材料的表 S4–S9 中。

基于上述互补的 Vis-FT 和 VUV-FT 实验方法，已对 $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$、$C^1\Sigma^+ - A^1\Pi$、$A^1\Pi - X^1\Sigma^+$、$a^3\Pi - X^1\Sigma^+$、$e^3\Sigma^- - X^1\Sigma^+$、$a'^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$、$d^3\Delta - X^1\Sigma^+$、$D^1\Delta - X^1\Sigma^+$、以及 $I^1\Sigma^- - X^1\Sigma^+$ 光谱进行了高质量分析，并已对 $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi(v = 2)$ 振动能级进行了完整的去微扰。

III. 去微扰分析

$A^1\Pi(v = 2)$态以及在$^{13}C^{18}O$同位素体中被认为会对其产生微扰的能级，通过有效哈密顿量的矩阵元在PGOPHER模型[17] 中表示。微扰体是根据转动-振动-电子项值图（图 S1）选取的，所考察能级附近的区域为 67,000–73,000 cm^{-1}。所有五个$\pi^3\sigma^2\pi^*$ 构型态对$^1\Pi$ 和$^3\Pi$ 态产生的微扰均可进行定量预测。我们已对它们与$A^1\Pi(v = 2)$态和$a^3\Pi(v = 13)$能级之间在统计学上有依据的直接相互作用和间接相互作用进行了广泛检验。详细信息见表 S17。$B^1\Sigma^+(v = 0)$态和$C^1\Sigma^+(v = 0)$态包含一些此前未被识别的、极弱的（≤0.04 cm^{-1}）微扰。[15] 因此，模型中的这些能级以其项值表示。此方法消除了这些B态和C态微扰对$A^1\Pi(v = 2)$能级及其微扰体描述的影响。该模型通过对1008个实验波数进行迭代拟合，这些波数来自$A^1\Pi - X^1\Sigma^+(2, 0)$、$a^3\Pi - X^1\Sigma^+(13,0)$、$a'^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+(12, 0)$、$d^3\Delta - X^1\Sigma^+(7, 0)$、$e^3\Sigma^- - X^1\Sigma^+(4, 0)$、$D^1\Delta - X^1\Sigma^+(3, 0)$、$I^1\Sigma^- - X^1\Sigma^+(3, 0)$、$B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$、$C^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$谱带及其额外谱线，共计16个谱带，这些数据是在

本研究中获得的；此外还包括我们课题组此前获得的$B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+(0,0)$和$C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+(0,0)$谱带。[15]

初始模型基于文献[1,2,4,13,14,34]中提取的分子参数值[1,2,4,13,14,34]并经过同位素缩放后建立。这些数值已重新计算，以便用于不包含自旋的总角动量算符（N）。$C^{18}O$ $X^1\Sigma^+(v=0)$ 基态的分子常数取自 Coxon 和 Hajigeorgiou[33]的研究，并在所有拟合中保持固定。微扰参数的输入值按以下方式计算：

(i) 对于由 η 参数化的 $A^1\Pi \sim (e^3\Sigma^-, a'^3\Sigma^+, d^3\Delta)$ 自旋-轨道相互作用，以及由 ξ 参数化的 $A^1\Pi \sim (I^1\Sigma^-, D^1\Delta)$ 旋转-电子（**L**-解耦）微扰，均基于取自文献的同位素体无关电子参数 $\boldsymbol{a}_{\mathbf{A\sim d,e,a'}}$ 和 $\boldsymbol{b}_{\mathbf{A\sim D,I}}$ ，分别依据 Le Floch 等人[4]和 Ryzner 等人[7]的研究中的方程（1）和（2）–（4）进行了计算；

(ii) 对于 $a^3\Pi \sim (I^1\Sigma^-, D^1\Delta)$ 自旋-轨道微扰，以及 $a^3\Pi \sim (a'^3\Sigma^+, e^3\Sigma^-, d^3\Delta)$ 自旋-轨道/自旋-电子/旋转-电子（L解耦）组合相互作用，微扰参数是根据文献中确定的、与同位素体无关的 $a_{\mathbf{a\sim D,I}}$ 参数以及 $a_{\mathbf{a\sim e,d,a'}}$ 和 $b_{\mathbf{a\sim e,d,a'}}$ 参数计算得到的。[3,37] 请注意，自旋-轨道和自旋-电子相互作用遵循相同的 Ω 依赖关系，因此无法独立确定；由此，$\eta_{a\sim e,q_{a'}}$ 参数代表这两个参数的线性组合。计算中采用了 $\alpha_{a\sim e,q_{a'}}$ ($a_{\mathbf{a\sim e,d,a'}}$) 和 $\beta_{\mathbf{a\sim e,d,a'}}$ ($b_{\mathbf{a\sim e,d,a'}}$) 依赖关系。根据 Ryzner 等人的研究，采用了由 $a^3\Pi \sim e^3\Sigma^-$、$d^3\Delta$、$a'^3\Sigma^+$ 相互作用的 e/f 对称化矩阵元得到的 $\eta_{a\sim e,q_{a'}}$ ($\alpha_{a\sim e,q_{a'}}$) 和 $\xi_{a\sim e,q_{a'}}$ ($\beta_{a\sim e,q_{a'}}$) 关系；[7]

(iii) 振动重叠积分 $v_A|v_{a'}$，e，d 和 $v_a|v_{a'}$，e，d，以及转动算符 i

分 ls $\langle v_A|\mathbf{B(R)}|v_{I,D}\rangle$and $\langle v_a|\mathbf{B(R)}|v_{e,d,a'}\rangle$ 已计算 lculated as described in the li [11 12]
献。，在整个去微扰分析过程中，部分微扰参数保持固定，取此前确定的数值。其中包括数值上显著、但由于表 S17所述原因而无法在拟合中确定的参数。在去微扰分析中，对 A态$^1\Pi$(振动量子数 = 2) 能级及其预期微扰体之间的 35 种分子内相互作用进行了显著性检验；最终模型采用了其中 15 种，其中 10 种经过拟合。通过比较以下两种情况对去微扰拟合残差的影响，检验给定相互作用的显著性：(i) 在拟合中将相互作用参数固定为其初始理论值；(ii) 将相互作用参数设为零，从而关闭该相互作用。

为防止多参数模型过拟合，在整个分析过程中持续监测相关矩阵，以检测参数之间的显著关联。最终模型中包含的所有跃迁的未加权残差的均方根误差（RMSE）为 0.030 cm^{-1}。该数值处于本分析所用各谱带中谱线位置不确定度中位数的算术平均值范围内，因此该模型在统计学上是令人满意的。所有参数的最终数值

分子常数和相互作用参数见表 I。包含明确表述的有效哈密顿量和矩阵元的 PGOPHER 输出（*.log）文件作为补充材料提供。

表 I. A态$^1\Pi$(振动量子数 = 2)能级及其微扰体的去微扰分子常数，以及相互作用参数，适用于^{13}碳^{18}一氧化碳同位素体。[a, b]

常数	A$^1\Pi$(振动量子数 = 2)	D$^1\Delta$(振动量子数 = 3)	I$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 3)	I$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 4)
T_v	67557.92638(88)	68377.912(50)	67579.238(15)	68544.29[g]
B	1.4177051(35)	1.089219(188)	1.09919(23)	1.08405[h]
$D \times 10^6$	6.2440(25)	5.855(80)	5.78(40)	5.71[d]
$H \times 10^{12}$	−12.81[c]	−2.25[d]	2.25[d]	2.25[d]
$q \times 10^5$	−1 .19[c]			
$\xi(A^1\Pi_{v'=2} \sim Y^*_{v''}) \times 10^2$		2.60[e]	−5.042(48)	6.50[e]
$\eta(a^3\Pi_{v'=13} \sim Y^*_{v''})$		−22.86[f]	−11.53[f]	−16.44[f]

常数	a$^3\Pi$(振动量子数 = 13)	a′$^3\Sigma^+$(振动量子数 = 12)	d态$^3\Delta$(振动量子数 = 7)	e态$^3\Sigma^-$(振动量子数 = 4)
T_v	67670.6779(51)	67991.2957(59)	67946.2487(36)	67802.7849(56)
B	1.30813765(56)	1.037593(22)	1.079739(14)	1.097154(30)
$D \times 10^6$	6.0616(46)	5.186(12)	5.1278(80)	5.343(25)
$H \times 10^{12}$		−0.30[d]	−0.60[d]	−1 .50[d]
A	38.115(13)		-16.9899(33)	
A态$_D \times 10^5$	−19.41[i]		−9.17[h]	
λ	−0.018[i]	−1 .1457(91)	1.2316(54)	0.425(12)
$\gamma \times 10^2$	0.32[h]	−0.527(31)	−0.291(26)	
o	0.65[j]			
$p \times 10^3$	8.83[k]			
$q \times 10^5$	2.79[l]			
$\eta(A态^1\Pi_{v'=2} \sim Y^*_{v''})$		−5.902(11)	−9.519(10)	−13.1136(46)
$\eta(a^3\Pi_{v'=13} \sim Y^*_{v''})$		2.39(20)	23.219(44)	24.729(20)
$\xi(a^3\Pi_{v'=13} \sim Y^*_{v''}) \times 10^2$		−1 .12(13)	−6.279(45)	−5.982(26)

[a] 单位为 cm^{-1}。η 和ξ 符号分别表示自旋-轨道和 **L**-解耦相互作用参数。我们采用 Niu等人[14] 给出的定义，该定义与文献中其他地方使用的定义不同。[36,38] 请注意，自旋-轨道和自旋-电子相互作用具有相同的 Ω依赖关系，因此无法独立确定；因此，$\eta_{a\sim e,f a'}$ 参数表示这两种效应的线性组合。

[b] 括号中的数字是分析中拟合参数的标准不确定度1σ，单位为末位有效数字。表示结果及其不确定度时，采用了 Watson[39] 所述的方法，以避免使用本研究获得的数据重建能级时出现非物理精度，因此某些不确定度数值舍入后超过了两位有效数字。

[c] 根据已发表数据[13,14] 和同位素缩放程序计算。
[d] 根据已发表数据[4] 和同位素缩放程序计算。
[e] L解耦相互作用参数根据与同位素体无关的$b_{A\sim I}$ 电子参数[4] 计算，计算依据为Hakalla等人[11] 的论文中的公式（4）以及 Ryzner等人[7] 论文中的公式（3）。转动算符积分〈$v_A|\mathbf{B}(\mathbf{R})|v_I$〉 按照文献中的描述计算。[11,12]

[f] 自旋-轨道相互作用参数根据Field等人给出的与同位素体无关的$a_{a\sim I}$ 或$a_{a\sim D}$ 参数计算，或分别根据Garetz等人[37] 给出的参数计算。计算中使用的微扰参数$\alpha_{a\sim I}(a_{a\sim I})$和$\alpha_{a\sim D}(a_{a\sim D})$依赖关系取自已发表数据。[3,36] $\alpha_{a\sim I}(a_{a\sim I})$关系由a$^3\Pi$ ~ I$^1\Sigma^-$和a$^3\Pi$ ~ D $^1\Delta$ 相互作用的对称化矩阵元得出，并以公式（5）的形式见于Ryzner等人[7] 的论文。振动重叠积分$v_a|v_{I,D}$按照文献中的描述计算。[11,12]

[g] 基于计算值 p已发表数据[1,33] 和同位素缩放 p缩放 g p过程。
[h] 基于已发表数据，[1] 必要时由兆赫兹转换为 cm^{-1}，并进行同位素缩放。
[i] 基于已发表数据[34] 由兆赫兹转换为 cm^{-1} 并进行同位素缩放。对于λ 常数，使用了关系式$\lambda = \frac{3}{2} \times \varepsilon$ 。

[j] 基于已发表数据[2] （o = 碳$^{\delta}$ 氧或 q = 2 × B常数$_{0^+}$）和同位素缩放程序计算。
[k] 基于已发表数据[34,35] 数据以及关于 ^{12}碳^{16}氧中卡梅伦系的未发表数据和同位素缩放程序计算。

[l] 基于已发表数据[2] （q = 2 × B_{0+}）和同位素缩放程序计算得出。

* $Y^{*}_{v''}$ 表示列标题中给出的微扰体，其中列出了相应微扰参数的数值。

所有相关能级的高质量项值及其对应的$^1\Pi$、 $^3\Pi$ 和$^3\Sigma^-$ 分数态成分见表 S10 – S16。

IV. $^1\Pi$态 A（$v = 2$）与~ $a^3\Pi$态（$v = 13$）在$^{13}C^{18}O$中的直接自旋-轨道相互作用?

A. 间接证据

使用以下方法分析所得实验数据:

(i) 研究能级的 $^1\Pi$ 分数态成分，见图 6，计算公式为$C_{ik}^2 \cdot 100\%$；其中，$C_{ik} = \psi_i|\psi_k$是从去微扰分析最终拟合中对角化能量矩阵的特征向量提取出的混合系数；(ii) $A^1\Pi$（v = 2）及其微扰体的约化项值，定义为$T_{red}(J) = T(J) - B_{A(2)}J(J+1) + D_{A(2)}J^2(J+1)^2 - H_{A(2)}J^3(J+1)^3$,，见图 7，以突出与能级相互作用相关的偏差；(iii) 谱线的强度异常和局部减弱，以及在$^{13}C^{18}O$中$A^1\Pi$（v = 2）与$a^3\Pi$（v = 13）能级的绝热交叉区域内存在可探测额外谱线，以上均见图 8,

表明在 $^{13}C^{18}O$ 中，$A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 与 $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 能级之间可能存在直接的自旋轨道微扰。这一推断可能源于以下事实:

- 图 6 显示:

(*i*) 观测到 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 和 $a^3\Pi$(振动量子数 =13) 的能级特征出现了明显、出乎意料且相当显著的混合，这种混合在 总角动量量子数 = 20、32 和 46 时尤为突出;

- 图 7 显示:

(*ii*) 对于 总角动量量子数 = 20，仅存在一个反交叉，即图中以红色箭头标出的 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 与 $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 能级之间的反交叉，且其附近的 总角动量量子数 区域没有其他微扰体；(*iii*) 在该区域（总角动量量子数 = 20），$A^1\Pi$(振动量子数 = 2，F_{1e}， 总角动量量子数 20) 分量出现了约 1 cm^{-1} 的非常明显的偏移，这表明存在直接的 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) ~ $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 相互作用;

- 图 8 显示:

(振动量子数) $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi(0, 2)$ $_rR_{11ee}(20)$ 谱线显著减弱。图 8(d)中清楚地显示了总角动量量子数 J > 20 对应的支强度恢复情况。$_rR_{11ee}(20)$ 谱线因强度借用而减弱，借用强度的是 $B^1\Sigma^+ - a^3\Pi(0, 13)$ $_sR_{11ee}(20)$ 谱线;

(振动量子数) 观测到 6条额外谱线，伴随“主”谱线减弱；否则，这可能会被解释为不可能观测到的 $A^1\Pi$(振动量子数= 2) ~ $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 直接相互作用的证据。这些谱线是在采用两种独立傅里叶变换技术获得的三种不同带系中观测到的，涵盖发射和吸收。此类强度减弱很少能以足够的精度测得，因而无法作为间接微扰机制的决定性证据；

- 从拟合模型中移除 $a^3\Pi$ 态会导致统计上不可接受的能级位移。当忽略 $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 的强度借用时，最终去微扰拟合中纳入的所有谱线的波数未加权残差如图9(b) 所示；与之相反， 图9(a)中包含了 $a^3\Pi$ (振动量子数 = 13) 能级。可以看出，图9展示了拟合的质量：未加权残差均在 ±0.1 cm^{-1} 以内；相比之下，在排除 $a^3\Pi$ 态影响的情况下，计算值（未优化）光谱的偏差范围为 +8 至 −13 cm^{-1}。

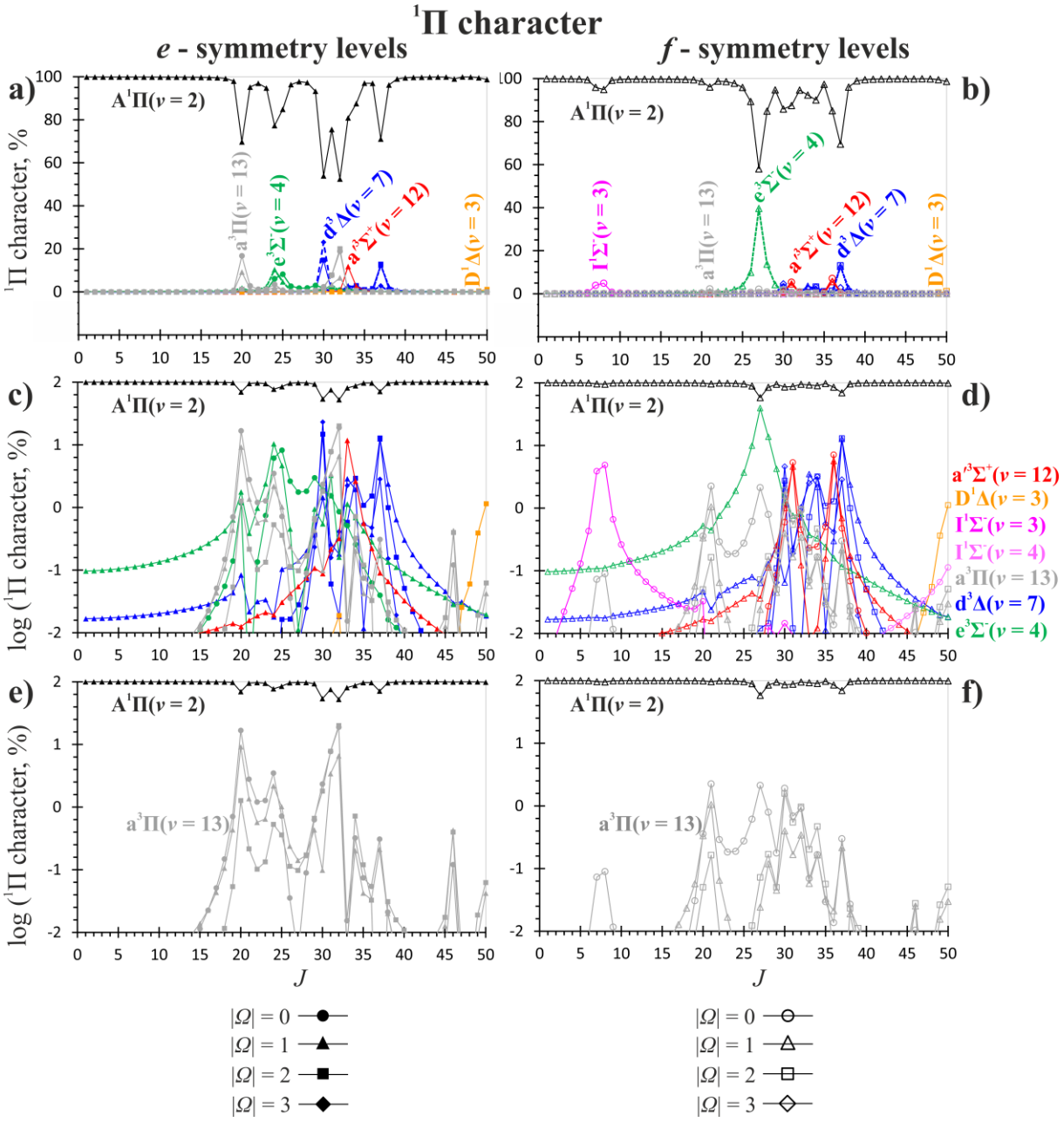


图 6。一氧化碳 A$^1\Pi$(v = 2)能级的*e*和*f*对称性分量以及所有对其具有显著影响的相邻转振能级中，$^1\Pi$ 特征所占的比例（(a)和(b)），以及$^1\Pi$ 特征所占比

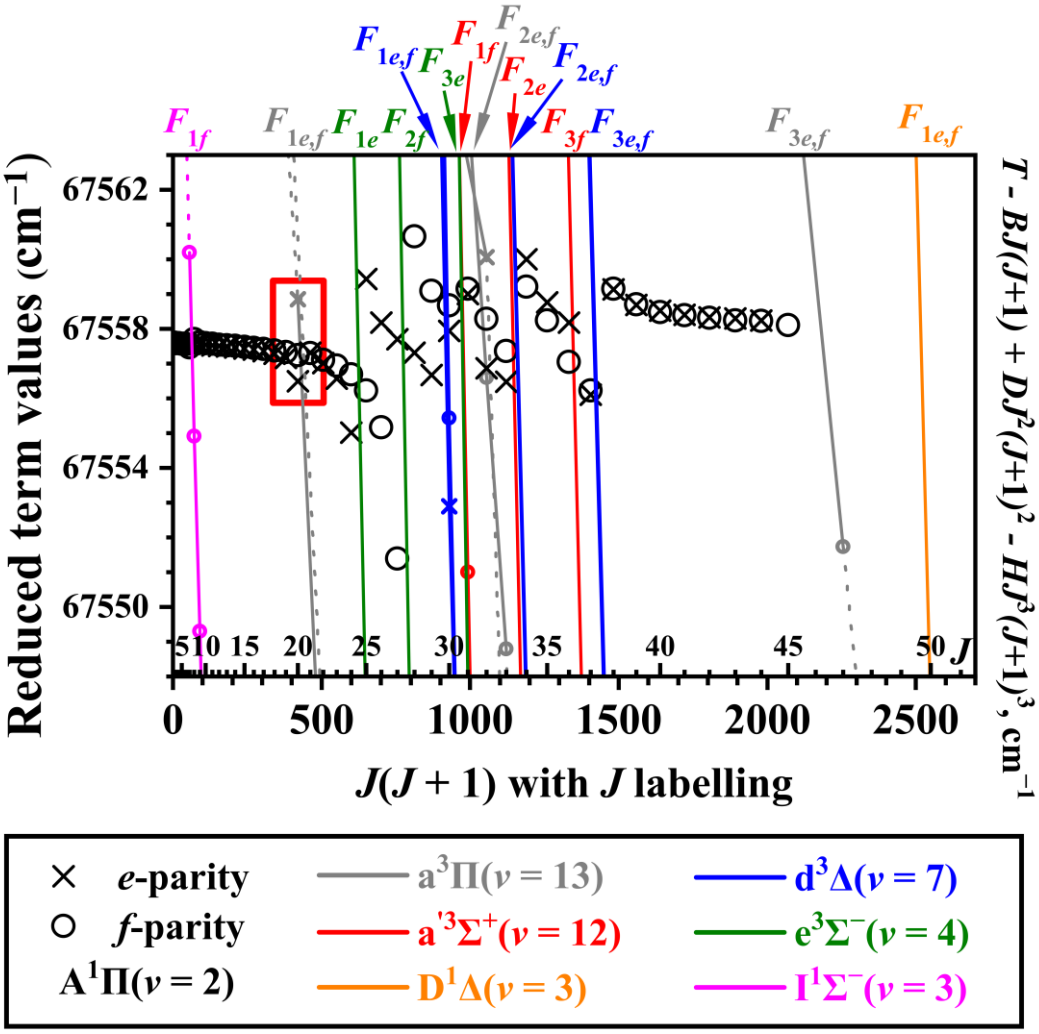


图 7。$^{13}C^{18}O$ 同位素体中 $A^1\Pi$（v = 2）能级及其微扰体的约化转动-振电子项值。实线表示根据实验额外谱线波数推导出的项值，而虚

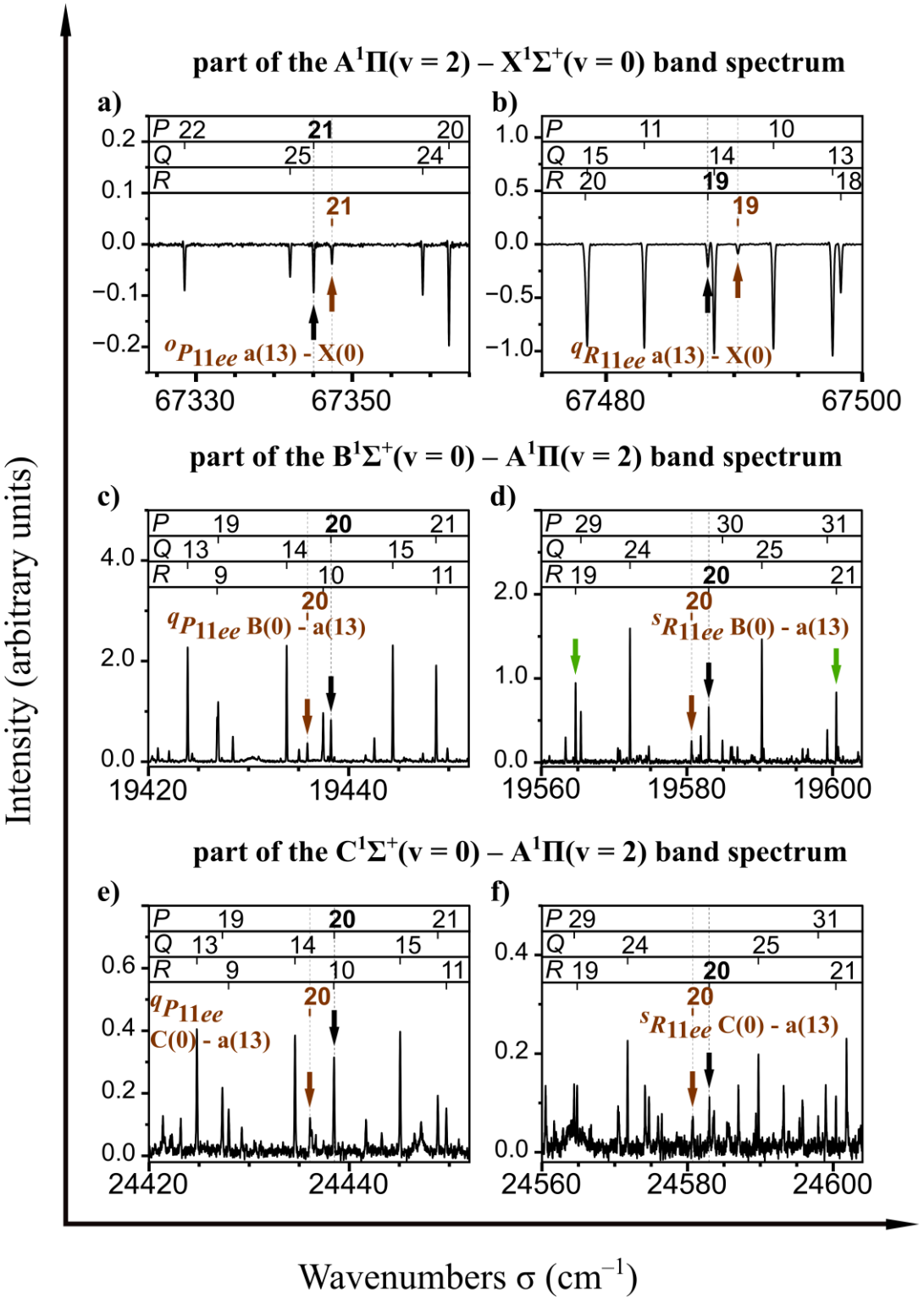


图 8 ^{13} ^{18} $^{1}\Pi$ $^{1}\Sigma^{+}$ 2, 0 $^{1}\Sigma^{+}$ $^{1}\Pi$ 0, 2 $^{1}\Sigma^{+}$ $^{1}\Pi$ 0, . (a)-(b)、(c)-(d) 和 (e)-(f) 区域分别展示了一氧化碳 A态-X态 ( )、B态-A态 ( ) 和 C态-A态 ( ) 谱带光谱，其中最示之归因于不可观

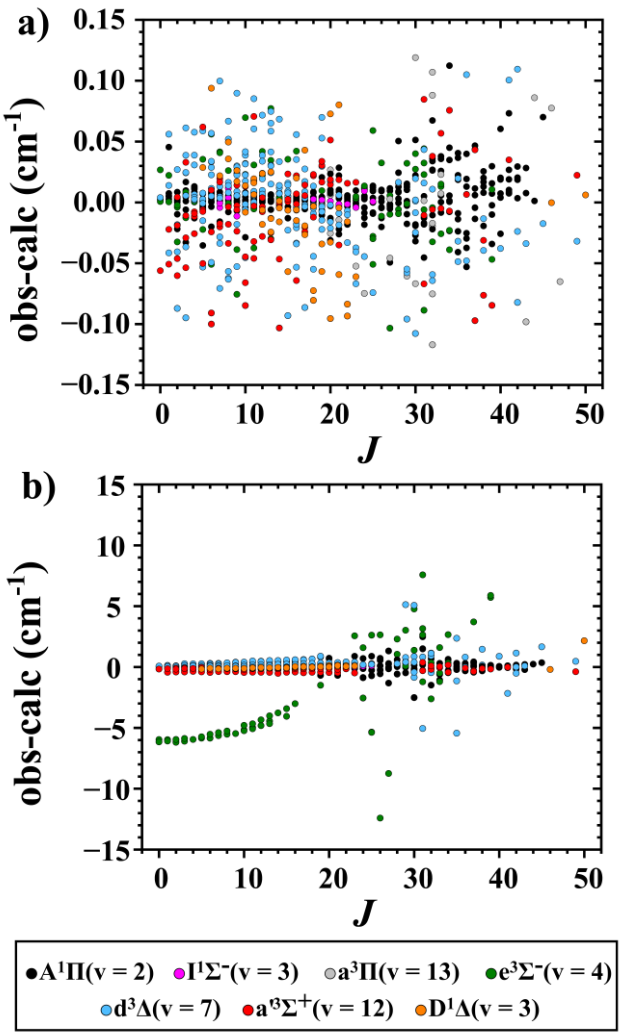


图 9。最终去微扰拟合中包含的所有谱线的波数未加权残差：(a) 包含 $a^3\Pi(v = 13)$

基于这些发现，我们决定研究以下可能性：一氧化碳 $^{13}C^{18}O$ 中是否可能观测到了直接的 A态$^1\Pi(v = 2) \sim a^3\Pi(v = 13)$ 微扰。

B. 关于 对 J 依赖性的可能异常的评估 $\langle a^3\Pi, v = 13 | A^1\Pi, v = 2 \rangle$

$A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ 跃迁是电偶极允许跃迁，但$a^3\Pi - X^1\Sigma^+$ 跃迁是自旋禁戒跃迁。这种禁戒性是绝对的。然而，如果存在一个激发电子态，它与$X^1\Sigma^+$ 态之间存在电偶极允许跃迁，并且能够微扰$a^3\Pi$ 态，那么就可能发生简单的强度借用，并呈现可预测的Ω、J以及e、f对称性强度依赖性。$a^3\Pi - X^1\Sigma^+$ 卡梅伦带对$A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ 强度借用的机制已在附录 A中详细解释。我们将这样的中间态称为“Y”，则与Ω、J以及e、f对称性相关的分数强度借用由混合振幅的平方给出：

$$Mixing\text{-}amplitude = \frac{\langle a_v | \mathbf{H^{SO}} | Y_{v'} \rangle}{[E_{a_v} - E_{Y_{v'}}]}. \quad (1)$$

H^{SO} 矩阵元是振动因子和电子因子的乘积。由于同构构型的$A^1\Pi$ 态和$a^3\Pi$ 态具有相似的势能曲线形状，只有$\Delta v = 0$振动因子是~1的，但由于巨大的$v_a = v_A = 0$能量分母（16,275 cm^{-1}），分数混合极小。这将导致$a^3\Pi$ –X $^1\Sigma^+$ 转动精细结构跃迁强度呈现可预测的模式。当$v_A \neq v_a$（在当前情况下为$\Delta v = 11$）时，H^{SO} 矩阵元的振动因子极小，但在$\Delta v = 11$ 振动重叠积分因可能存在很强的J依赖性而局部增强的区域，仍可能产生可观测效应。因此，在验证的第一阶段，使用两种独立方法计算了 $^{13}C^{18}O$中的J依赖振动重叠积分$\langle a^3\Pi, v = 13 | A^1\Pi, v = 2\rangle$；具体方法详见附录 B，结果见图 11。至关重要的是，其中突出的J依赖性界定了$A^1\Pi$ 态与$a^3\Pi$ 态之间振动重叠的可能范围，即从$+1.2\times10^{-5}$ 到-5×10^{-6}.，使直接微扰在当前测量的不确定度范围内不可观测。需要强调的是，对于较大的Δv，$v|\Delta v$重叠积分非常小，因为被积函数是一个幅值很小且快速振荡的函数。Δv重叠积分相对于Δv呈现小幅波动。然而，这些较大的Δv重叠积分的J依赖性没有波动。因此，对于$J = 20$，$^{13}C^{18}O$中的振动重叠积分$\langle a^3\Pi, v = 13 | A^1\Pi, v = 2\rangle$等于$7.8\times10^{-6}$ 或10.0×10^{-6}，具体取决于所采用的计算方法和所考虑的转动支。这表明该重叠积分具有一定程度的模型依赖性。两种方法相差13%，因此我们将其作为该数值的不确定度。

C. $^{13}C^{18}O$ 中 $A^1\Pi \sim a^3\Pi$ 相互作用的自旋-轨道微扰参数计算值

根据 Lefebvre-Brion 和 Field 的著作第[36] 188页，$A^1\Pi \sim a^3\Pi$ 相互作用的自旋-轨道微扰参数可表示为

$$\langle A^1\Pi, v' | \mathbf{H^{SO}} | a^3\Pi, v'' \rangle = \frac{1}{2} a_{A^1\Pi \sim a^3\Pi} \langle A^1\Pi, v' | a^3\Pi, v'' \rangle \quad (2)$$

由于这两个态属于同一构型，可以作出如下假设：如果 $^1\Pi$ 态和 $^3\Pi$ 态的电子波函数由相同轨道构成，那么这两个态将具有相同的势能曲线，因此

$$a_{A^1\Pi \sim a^3\Pi} = 2A_{a^3\Pi}\,, \quad (3)$$

其中

$a_{A^1\Pi \sim a^3\Pi}$ - 是自旋-轨道 $A^1\Pi \sim a^3\Pi$ 相互作用的同位素体无关微扰参数，而 $A_{a^3\Pi}$ - 是 $a^3\Pi$ 态的对角自旋-轨道分子常数。

拟合得到的 a 态自旋-轨道常数$^3\Pi(v = 13)$（见 $^{13}C^{18}O$（出自 表 I） 为

$$A_{a^3\Pi(v=13)} = 38.115(13)\ cm^{-1}. \quad (4)$$

Gilijamse 等人 [40] 报道了在 $R = 2.3$ 处，由 CASSCF+MRCI 能级获得的 $A^1\Pi \sim a^3\Pi$ 电子自旋-轨道耦合为 image cm^{-1}，其形式为 A态$^1\Pi \sim a^3\Pi$。在本文采用的记号下，结合近似

image $\boldsymbol{a}_{A^1\Pi\sim a^3\Pi} = 2A_{a^3\Pi}$ 与数值 image $A_{a^3\Pi(v=13)} = 38.115(13)\ \mathrm{cm}^{-1}$ ，得到的电子前因子在数量级上基本相当。不过，这两个量不应被视为严格相同：从头算 结果指的是在固定核间距下计算得到的电子矩阵元，而本文采用的光谱值则是根据振动依赖的自旋-轨道常数推断得到的。尽管如此，二者之间的密切对应关系在物理上具有重要意义。本文的光谱估计值和独立的从头算结果均表明，相关电子耦合的量级仅为几十 cm^{-1} 左右。

最终，

$$\left\langle A^1\Pi, v=2\left|\mathbf{H}^{\mathbf{SO}}\right|a^3\Pi, v=13\right\rangle_{\mathrm{calc}} = (3.40 \pm 0.44) \times 10^{-4}\ \mathrm{cm}^{-1} \text{ for } J = 20 \text{ in } {}^{13}\mathrm{C}^{18}\mathrm{O}. \quad (5)$$

观测到的现象表明，$A^1\Pi \sim a^3\Pi$ 微扰可以用一个参数来描述直接的 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) ~ $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 相互作用；然而，这样一来，所需的矩阵元就会比以下实验光谱计算以及电子结构理论的预测值大几个数量级。这么大的电子因子并不合理。因此，本文将观测到的微扰解释为并非直接微扰，而是通过间接微扰机制产生的效应。

V. $^{13}C^{18}O$ 中的间接微扰路径

由于以当前实验的精度不可能观测到直接的 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) ~ $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 微扰，我们考察了经由 $\pi^3\sigma^2\pi^*$ 构型的所有电子态产生的可能间接路径。这些 $\pi^3\sigma^2\pi^*$ 电子态均已通过实验得到充分表征，因此可以预测并模拟 $\pi^3\sigma^2\pi^*$ 态对 $^1\Pi$ 态和 $^3\Pi$ 态造成的所有微扰的位置和强度。我们确定了 3 条可观测间接路径的位置及预测微扰参数。$A^1\Pi$(振动量子数 = 2) ~ $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 相互作用通过以下途径实现：

(i) 对于 J = 20，通过自旋-轨道/自旋-电子/旋转-电子（L-解耦）相互作用，$e^3\Sigma^-$(v = 4)对应24和32 e分量（见图 6(c)），以及 J = 27 f-分量（见图 6(d)）；(ii) 对于 J = 7-8，通过旋转-电子（L-解耦）/自旋-轨道相互作用，$I^1\Sigma^-$(v = 3)（见图 6(d)）；(iii) 对于 J = 37，通过自旋-轨道/自旋-电子/旋转-电子（L-解耦）相互作用，$d^3\Delta$(v = 7)（见图 6(c)和图 6(d)）。

对间接相互作用机制的所有分量的鉴定和讨论已完成。然而，观测到的能级模式以及对拟合模型的系统性检验表明，在 J = 20区域内，涉及 $a^3\Pi$(v = 13) 能级 e 分量的额外谱线，不可能仅由一氧化碳 $^{13}C^{18}O$ 中间接的 $A^1\Pi$(v = 2) ~ $e^3\Sigma^-$(v = 4) ~ $a^3\Pi$(v = 13) 微扰所致。这说明，$A^1\Pi$(v = 2) 态与 $e^3\Sigma^-$(v = 4) 态的交叉发生在远离 $A^1\Pi$(v = 2) 态和 $a^3\Pi$(v = 13) 态的绝热交叉所在 J 能级区域的位置，即 J = 24 - 25（见图 7）。此外，自旋-轨道相互作用只允许发生在具有 $\Delta|\Omega| = 0$ 的分量之间，而最近的 $a^3\Pi$(v = 13, F_{2e}, $|\Omega| = 1$) ~ $e^3\Sigma^-$(v = 4) 交叉发生在

比 $a^3\Pi$(振动量子数 = 13, F_{1e}, $|\Omega| = 0$) ~ $A^1\Pi$(振动量子数 = 2, F_{1e}, $|\Omega| = 1$) 反交叉高约 67 cm^{-1}。在 总角动量量子数 =20 处。

VI. 多条间接微扰路径之间的干涉

由于直接的 $A^1\Pi(v = 2) \sim a^3\Pi(v = 13)$ 微扰和孤立路径的间接 $A^1\Pi(v =2) \sim e^3\Sigma^-(v = 4) \sim a^3\Pi(v = 13)$ 路径都不足以解释图 8 所示额外谱线的探测，我们研究了一种模型，其中涉及一氧化碳中 $A^1\Pi(v = 2)$ 与 $a^3\Pi(v = 13)$ 基态之间多条间接微扰路径的干涉。这些路径由 $a^3\Pi(v =13)$、$^3\Pi_1 \sim {}^3\Pi_0$、 $^3\Pi_1 \sim {}^3\Pi_2$ 和 $e^3\Sigma^-(v = 4)$、$F_{1e} \sim F_{3e}$ 态内 S 解耦相互作用介导，补充材料 III.1 节对此有详细描述。

A. $^{13}C^{18}O$ 的特殊优势

当初始基态与最终基态之间存在多条中间基态路径时，就会发生量子力学干涉。事实证明，$^{13}C^{18}O$ 中的 $A^1\Pi(v = 2)$、$a^3\Pi(v = 13)$ 对为观测这一现象提供了最有利的条件，因为在 $^{13}C^{18}O$ 中，$e^3\Sigma^-(v = 4, F_1) \sim a^3\Pi(v = 13, F_2)$ 相互作用的最大值几乎恰好出现在 J = 20 处；同时，在能量低得多的位置，$A^1\Pi(v = 2, F_1)$ 能级与 $a^3\Pi(v = 13, F_1)$ 能级也发生透热交叉。此外，$e^3\Sigma^-(v = 4)$ 能级的三个自旋分量都会对 $A^1\Pi(v = 2)$ 产生微扰：F_1 和 F_3 微扰 e 对称分量，而 F_2 微扰 f对称分量。由于 $A^1\Pi \sim e^3\Sigma^-$ 微扰矩阵元的数值很大，即使在远离 $A^1\Pi(v = 2)$–$e^3\Sigma^-(v = 4)$ 能级交叉的位置，即 J = 24-25、27-28 和 30-31 处，$e^3\Sigma^-(v = 4)$ 态的转振能级中仍含有少量但足够的 $A^1\Pi(v = 2)$ 成分（比较图 6 和图 7 ）。$e^3\Sigma^-(v = 4)$ 态的三个自旋分量通过 e ↔ e 和 f ↔ f 选择定则，对 $a^3\Pi(v = 13)$ 态的自旋分量产生微扰。此外，$e^3\Sigma^-(v = 4)$ 和 $a^3\Pi(v = 13)$ 能级中 $\Omega = 1$ 和 0 成分之间还存在显著的态内 S 解耦相互作用。这些相互作用导致 $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 和 $a^3\Pi(v = 13)$ 能级中存在少量 $A^1\Pi(v = 2)$ 成分；因此，对于描述跃迁至以 $a^3\Pi(v = 13)$ 成分为主的能级的额外谱线跃迁的观测相对强度而言，它们至关重要（见图 8）。

B常数. 一氧化碳中的干涉

之间的路径 $^3\Pi_{\Omega e}$ 和 $^1\Pi_{1e}$ 基态通过 $^3\Sigma^-_{F_1 e}$ 和 $^3\Sigma^-_{F_3 e}$ 基态实现。原则上，存在四对相互干涉的中间基态路径。它们列于表 II。

表 II. 通过指定的中间态[a]，$^{13}C^{18}O$ 中 $A^1\Pi(v=2)$ 态与 $a^3\Pi(v=13)$ 能级之间多条中间基态路径的干涉

干涉数量	间接微扰数量	间接相互作用路径	相互作用性质	干涉中间态
I	1	$a^3\Pi_1$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{1e}}$ ~ $A^1\Pi_1$	(H^{SO},$H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	$^3\Sigma^-_{F_{1e}} \sim {}^3\Sigma^-_{F_{3e}}$
	2	$a^3\Pi_1$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{3e}}$ ~ $A^1\Pi_1$	(H^{SO},$H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	
II	3	$a^3\Pi_0$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{1e}}$ ~ $A^1\Pi_1$	(H^{SO},$H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	$^3\Sigma^-_{F_{1e}} \sim {}^3\Sigma^-_{F_{3e}}$
	4	$a^3\Pi_0$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{3e}}$ ~ $A^1\Pi_1$	(H^{SO},$H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	
III	5	$a^3\Pi_2$ ~ $a^3\Pi_1$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{1e}}$ ~ A态$^1\Pi_1$	$H^{S\text{-}U}$, (H^{SO}, $H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	$^3\Sigma^-_{F_{1e}} \sim {}^3\Sigma^-_{F_{3e}}$
	6	$a^3\Pi_2$ ~ $a^3\Pi_1$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{3e}}$ ~ A态$^1\Pi_1$	$H^{S\text{-}U}$, (H^{SO}, $H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	and $^3\Pi_2 \sim {}^3\Pi_1$
IV	7	$a^3\Pi_0$ ~ $a^3\Pi_1$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{1e}}$ ~ A态$^1\Pi_1$	$H^{S\text{-}U}$, (H^{SO}, $H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	$^3\Sigma^-_{F_{1e}} \sim {}^3\Sigma^-_{F_{3e}}$
	8	$a^3\Pi_0$ ~ $a^3\Pi_1$ ~ e态$^3\Sigma^-_{F_{3e}}$ ~ A态$^1\Pi_1$	$H^{S\text{-}U}$, (H^{SO}, $H^{L\text{-}U}$), H^{SO}	and $^3\Pi_0 \sim {}^3\Pi_1$

[a] 此处，矩形标出了相互作用的分量对，这些分量对导致了指定间接微扰路径之间的干涉。

路径 1、2 最强，尤其在低总角动量量子数J时。路径 3、4 弱于路径 1、2，并且严重依赖于$^3\Pi_{1e}$ 态和$^3\Sigma^-_{\Omega e}$ 态的近简并。路径 5、6 和路径 7、8 对 $^3\Pi_{\Omega e}$ 的$\Omega = 0$ 和$\Omega = 2$分量的布居相同，其强度与J^2成正比。为评估连接初始$A^1\Pi$(v = 2)和最终 $a^3\Pi$(v = 13)基态、位于 $^{13}C^{18}O$中的干涉，最终模型采用显式的分量分辨基组构建。$e^3\Sigma^-$(v = 4)和$a^3\Pi$(v = 13)能级被拆分为F_1, F_2, 和F_3 e/f宇称分量，并显式引入相应的非对角态内相互作用矩阵元。这些项采用Western的[16,17] 基于微扰的转动哈密顿量形式实现。本文所用程序的细节见补充材料III.2 节。随后，通过开/关基准测试，考察了$e^3\Sigma^-$(v = 4)和$a^3\Pi$(v = 13)能级中相互干涉的e对称分量之间的流形内耦合。通过平方本征矢系数（$C_{ik}^2 \cdot 100\%$），将移除这些耦合对$A^1\Pi$(v = 2, F_{1e})特征的影响与最终模型进行比较。结果汇总于图10，展示了该机制对若干相互竞争效应的敏感性；分析以最终去微扰模型为参照（带三角标记的黑线），并基于该模型中的具体测试:

(i) 关闭 e态$^3\Sigma^-$($v = 4$), $F_{1e} \sim F_{3e}$ 能级内相互作用（带圆形标记的绿色线），其中 I-IV 干涉被关闭，而 1-8 间接微扰路径处于活跃状态（见表 II）。与参考轨迹（所有相互作用和干涉均开启）相比，该比较显示，四个干涉项 I–IV 在几乎整个转动流形中的净贡献主要表现为相长干涉（正值）；但在J = 26-28处出现了具有诊断意义的例外，此时 I-IV 干涉的综合效应变为相消干涉（负值）；

(ii) 关闭 $a^3\Pi(v = 13)$、$F_{1e} \sim F_{2e}$ 和$F_{3e} \sim F_{2e}$ 相互作用（带方形标记的灰色线），其中 III 和 IV 干涉以及 5-8 微扰路径受到抑制。与参考（黑色）轨迹相比，在将 $A^1\Pi(v = 2、F_{1e})$特征转移至其他相互作用态的过程中，大多数转动能级的强度都显著降低。这一行为揭示了 III 和 IV 干涉的净相长效应，以及孤立的间接微扰路径 5-8 所产生的贡献。例外出现在J = 22-23、26-28、30-31、34-36 和 38，此时这些过程的累积效应为相消干涉；

(iii) 并且关闭 $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 和 $a^3\Pi(v = 13)$ 态内相互作用（带叉形标记的橙色线），此时 I–IV 干涉和 5–8 微扰路径均被关闭。在这种情况下，几乎整个范围内（不包括 J = 26-28、34-36 和 38），都呈现出建设性结果，这是 I–IV 干涉与独立的 5–8 间接微扰路径共同作用的结果。

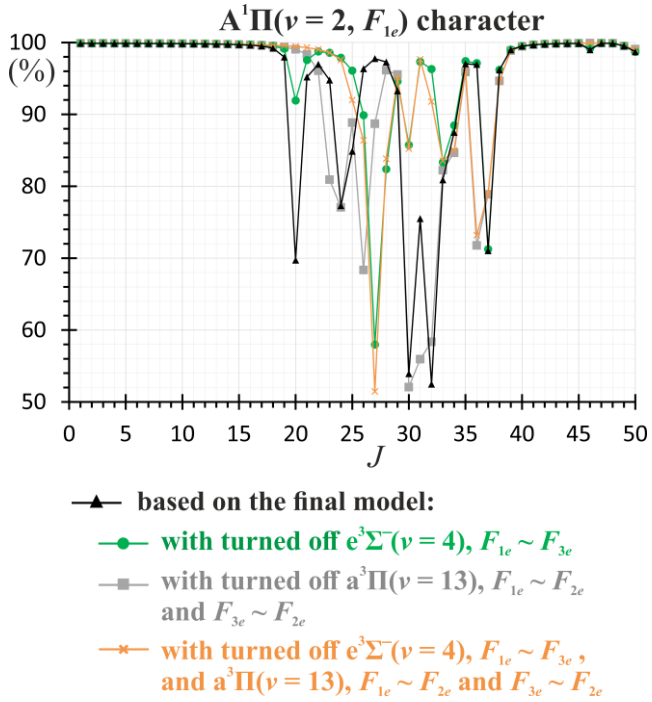


图 10。 以最终去微扰模型为参照（带三角形标记的黑线），展示固有的分数 [13]

从我们对 $^{13}C^{18}O$ 中 $a^3\Pi$（v = 13）和 $A^1\Pi$（v = 2）能级之间微扰的分析来看，J = 20 附近的 e 对称分量区域最为重要，同时在 J = 24 和 J = 32处还存在显著效应。在这些区域，$a^3\Pi$ 的 e 对称能级表现出最强的 $^1\Pi$ 特征借用（见图 6(e)）。在那里，总干涉 I–IV 呈现强烈的相长干涉，唯一的例外是干涉 III 和 IV 的合并贡献极其微弱地呈现相消干涉；该贡献由 $a^3\Pi$、$F_{1e} \sim F_{2e}$ 和 $F_{2e} \sim F_{3e}$ 相互作用在 J = 24处介导。总体而言，相长干涉增强了介导 $A^1\Pi$（v = 2）～$a^3\Pi$（v = 13）相互作用的多步耦合链效应。

VII. 结论

本文完整描述了 CO 中长期研究的微扰现象，涵盖 $\pi^3\sigma^2\pi^*$ 和 $\pi^4\sigma\pi^*$电子组态的电子态之间的全部（$5 \times 2 = 10$）微扰机制。该模型采用了严格的转动、振动和同位素异构体依赖性，其中大多数依赖于所有七个电子态经实验精修的势能曲线。在所有 CO 同位素异构体和振动态中，$A^1\Pi \sim a^3\Pi$ 近简并的最佳可能情况是在 $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi$（$v = 2$）$\sim a^3\Pi$（$v = 13$）中发现的。所需的光谱数据取自最先进的 $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$、$B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$、$C^1\Sigma^+ - A^1\Pi$、$e^3\Sigma^- - X^1\Sigma^+$、$a'^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$、$D^1\Delta - X^1\Sigma^+$、$d^3\Delta - X^1\Sigma^+$和 $I^1\Sigma^- - X^1\Sigma^+$ 电子跃迁光谱，包括 16 个谱带、787 条谱线以及截至 $J_{max} = 50$ 为 $^{13}C^{18}O$ 的 428 个转动项值。本文的显著之处在于，它将光谱微扰研究拓展到了此前未被探索的领域。$A^1\Pi$ 和 $a^3\Pi$ 电子态属于同一电子组态，但它们之间的能级间隔约为其 ω_e 振动频率的 11 倍。这两个电子态的近简并（$\Delta v = 11$）振动态之间的振动重叠积分非常小，因此局部自旋-轨道微扰引起的能级位移将远小于现代电子光谱学 0.001 - 0.01 cm^{-1} 的精度。然而，本文报告了对这一“ 不可能的微扰” 的观测及其完整表征。这是一种由微扰促成的微扰，在 $^{13}C^{18}O$ 中，$A^1\Pi$（$v = 2$）态和 $a^3\Pi$（$v = 13$）态均受到 $e^3\Sigma^-$（$v = 4$）态的微扰。此外，由于该模型涉及三个或更多转振能级之间的同时相互作用，因此将 $e^3\Sigma^-$（$v = 4$）和 $a^3\Pi$（$v = 13$）中间能级分解为其相互作用的三重态分量，并通过每次关闭一个拟合参数，观察拟合是否以及如何劣化，来验证每一项分析结论。结果表明，在同一对名义上的 $a^3\Pi$ 和 $A^1\Pi$转振能级之间，$e^3\Sigma^-$ 态的 F_{1e} 和 F_{3e} 自旋分量之间存在量子力学相长干涉。

补充材料

本文的补充材料提供：（i）使用 Vis-FT 和真空紫外傅里叶变换光谱记录的谱线波数；（*ii*）实验项值；以及（iii）本研究去微扰分析的详细信息（“补充材料 (1).docx”文件）。

致谢

RH 感谢 LASERLAB-EUROPE 对本研究的支持，资助编号为 [EUH2020-RIP- 654148 和 EC’s-SPF-284464]。RH、SR、WSz、AS 和 IP 感谢欧洲区域发展基金和波兰国家预算在喀尔巴阡区域运营计划框架内提供的支持，[资助编号为 RPPK.01.03.0 0-18-0 01/10] ，该支持用于热舒夫大学自然科学与工程知识创新与转移中心。RWF 感谢美国国家科学基金会（资助编号 CHE-1800410）支持其研究，其中包括大量合作。AP 感谢保加利亚国家复苏与韧性计划提供的部分支持，合同编号 BG-RRP-2.004-0008-C01，SUMMIT：索非亚大学创新与技术转移动力项目，项目编号 3.1.4。作者感谢 SOLEIL同步辐射光源的全体工作人员和技术人员运行设施并提供光束时间，项目编号为 20120653 和 20160118。

作者声明

利益冲突

作者没有需要披露的利益冲突。

作者贡献

Stanisław Ryzner：概念构思、方法学、软件、验证、正式分析、调查、资源、数据整理、撰写初稿、审阅与编辑、可视化。**Robert W. Field**：概念构思、方法学、撰写初稿、审阅与编辑、监督、经费获取。**Wim Ubachs**：调查、资源、撰写初稿、审阅与编辑、监督。**Alan N. Heays**：软件、验证、正式分析、调查、数据整理。**Asen Pashov**：方法学、软件、正式分析、数据整理、撰写初稿、经费获取。**Patryk Jasik**：方法学、软件、正式分析、调查、数据整理、撰写初稿。**Józef E. Sienkiewicz**：软件、验证、监督。**Nelson de Oliveira**：验证、调查、审阅与编辑。**Kin F. Lai**：方法学、软件、正式分析、数据整理。**Marzena I. Malicka**：软件、正式分析、数据整理、可视化。**Aleksandra Stasik**：正式分析、调查、数据整理、可视化。**Wojciech Szajna**：审阅与编辑、可视化。**Izabela Piotrowska**：审阅与编辑、可视化。**Rafał Hakalla**：概念构思、方法学、软件、验证、正式分析、调查、资源、数据整理、撰写初稿、审阅与编辑、可视化、监督、项目管理、经费获取。

数据可用性

支持本研究结论的数据可在本文及其补充材料中获取，包括使用 PGOPHER 程序进行最终拟合所得的输出 LOG （“Supplementary material (2).txt” 文件）。

附录 A：一氧化碳中 $a^3\Pi - X^1\Sigma^+$ 卡梅伦带的强度

上文论述认为，自旋-轨道相互作用矩阵元 $A^1\Pi|\mathbf{H^{SO}}|a^3\Pi$过小，无法在光谱中造成可观测的谱线位移，至少以目前已达到的先进精度而言是如此。然而，文献已证实，卡梅伦最早观测到的 $a^3\Pi - X^1\Sigma^+$ 系，其强度源于对一氧化碳第四正带系 $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ 系的强度借用，而这一过程正是通过同一个极小的自旋-轨道相互作用矩阵元实现的。尽管这看似有悖直觉，但其解释在于卡梅伦带的强度确实非常微弱。$A^1\Pi - X^1\Sigma^+(0, 0)$带的谱带振子强度为 $f_{0,0} = 1.65 \times 10^{-2}$,[42]，而卡梅伦系中(0, 0)带的振子强度仅为 $f_{0,0} = 1.63 \times 10^{-7}$，弱了五个数量级。[43–45] 谱带强度测量以及与 $a^3\Pi$ 态寿命测量的对比表明，卡梅伦带 99% 的强度来自 $a^3\Pi$ 与 $A^1\Pi$之间的自旋-轨道相互作用。[35,46] 低J能级上的 $a^3\Pi_1$ 分量通过从 $A^1\Pi_1$借用强度而获得强度，这一观测也证实了这一点。对于较高J能级，通向 $a^3\Pi_0$ 和 $a^3\Pi_2$ 分量的跃迁则因三重态流形中转动能增加而导致 Ω- 分量混合，从而获得强度（另见图 S2 ）。在一项灵敏度极高的激光激发研究中，观测到了激发至 $a^3\Pi_0(v = 0, J = 0)$ 的$P(1)$跃迁，尽管其强度极弱。[35] 这表明卡梅伦带也会从与某个 $^1\Sigma^+$ 态的相互作用中获得强度，尽管所占比例极小。

附录 B：总角动量量子数相关的振动重叠积分 $\langle a^3\Pi,\ v = 13|A^1\Pi,\ v = 2\rangle$ 见于 $^{13}C^{18}O$

总角动量量子数相关的振动重叠积分 $a^3\Pi, v = 13|A^1\Pi, v = 2$ 在 $^{13}C^{18}O$ 中通过两种方法进行了计算：

方法 1： 振动波函数 $|A^1\Pi, v = 2$ 和 $|a^3\Pi, v = 13$ 是通过对转动量子数 $J\epsilon\langle 1, 100\rangle$ 的径向薛定谔方程进行数值求解得到的。求解时，$A^1\Pi$ 态使用区间〈0.99 Å , 2.4 Å〉内包含 5000 个点的等间距网格，$a^3\Pi$ 态使用区间〈0.8 Å , 2.6 Å〉内包含 5000 个点的等间距网格。利用两种态的 RKR 势能曲线计算了 $a^3\Pi, v = 13|A^1\Pi, v = 2$ 振动重叠积分。RKR 曲线根据 Field、[1] Field 等人、[3], 的同位素校正的平衡振转常数计算得出

Lefebvre-Brion 和 Field，[36] Le Floch 等人，[4] 以及 Kittrell 等人。[47] 使用 Jung 开发的 FRACONB程序[48] 和 Jakubek[49]。结果以圆圈表示于图 11。

方法 2： 振动重叠积分 $a^3\Pi, v = 13 | A^1\Pi, v = 2$ 通过数值求解径向薛定谔方程得到的振动波函数计算获得。利用基于分子常数的 RKR方法，构建了 $^{13}C^{18}O$ 的 $a^3\Pi$ 和 $A^1\Pi$ 电子态的 *J*-依赖势能曲线。为计算两个 Klein积分，开发了 Python代码，以求出 RKR方法所依据的经典转向点。[50] 通过添加修正项，对原始 RKR方法的振动积分和转动积分（*f*积分和*g*积分）进行了轻微修改，以防止在上积分限$v' \rightarrow v$处出现奇点。这些方程为:

$$f(v) = \frac{h}{\pi\sqrt{2\mu}}\left(\int_{v_{min}}^{v-\delta} \frac{dv'}{\sqrt{G(v)-G(v')}} + 2\sqrt{\frac{\delta}{Q(v)}}\right), \tag{B1}$$

$$g(v) = \frac{4\pi\sqrt{2\mu}}{h}\left(\int_{v_{min}}^{v-\delta} \frac{B(v')}{\sqrt{G(v)-G(v')}} dv' + 2B(v)\sqrt{\frac{\delta}{Q(v)}}\right), \tag{B2}$$

其中，G(v) 和 B(v) 是标准的、依赖于 v 的函数，基于与 Dunham级数相关的关于 (v + 1/2) 的幂级数。$Q(v) = {}^{dG}(v)\, d(v+\frac{1}{2})$ 是函数 G(v) 关于 (v + 1/2) 的导数，而 δ 是一个小参数，通常设为 10^{-5}，并进行调整以确保收敛性。在此处采用的约定中，函数 $f(v)$ 和 $g(v)$ 分别与经典内侧 $r_-(v)$ 和外侧 $r_+(v)$ 转向点通过 $f(v) = r_+(v) - r_-(v)$ 以及 $g(v) = {}_{r_-}^{1}(v)^{-} r_+(v)$ 相关联。因此，函数 $f(v)$ 和 $g(v)$ 是 Le Roy 所定义的相应函数的两倍。[49] 按照这一约定，转向点为

$$r_\pm(v) = \frac{f(v)}{2}\left[\sqrt{1 + \frac{4}{f(v)g(v)}} \pm 1\right], \tag{B3}$$

这在代数上等价于 Le Roy 的转折点表达式。

计算 $a^3\Pi$ 态和 $A^1\Pi$ 态 CO分子 的振动和转动平衡常数所需的参数，用于获得 $f(v)$ 和 $g(v)$ 函数；这些常数取自 Field[1] 的学位论文（附录2b），并按照先前所述的方法针对 $^{13}C^{18}O$ 分子同位素体重新计算。

利用 $a^3\Pi$ 态和 $A^1\Pi$ 态的 RKR 势能曲线，计算了振动波函数 $v = 13$ （对应 $a^3\Pi$ 态）以及 $v = 2$ （对应 $A^1\Pi$ 态）的振动波函数，*J*取值范围为 1 至 100。所有波函数均使用 sPYtroscopy程序[51] 计算，该程序采用傅里叶正弦基上的离散变量表示法。利用所得波函数计算了依赖于*J*的振动重叠积分 $\langle a^3\Pi, v = 13, J \mid A^1\Pi, v = 2, J$。结果以叉号标示于图 11中。

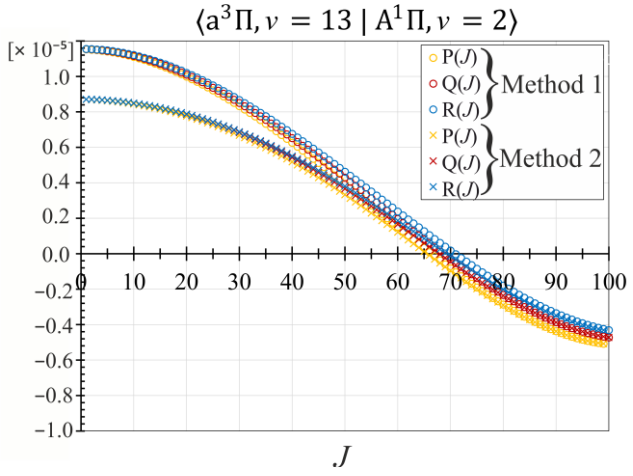


图 11。 $^{13}C^{18}O$ 中 $A^1\Pi$（振动量子数 = 2）与 $a^3\Pi$（振动量子数 = 13）之间振动重

参考文献

(1) Field, R. W.《CO 和 CS 激发态的光谱学与微扰分析》。博士论文，哈佛大学，1971年。(2) Field, R. W.; Tilford, S. G.; Howard, R. A.; Simmons, J. D.《CO $a^3\Pi$ 态的精细结构与微扰分析》。《分子光谱学杂志》1972, 44 (2), 347–382。https://doi.org/10.1016/0022-2852(72)90110-5 (3) Field, R. W.; Wicke, B. G.; Simmons, J. D.; Tilford, S. G.《CO $a^3\Pi$ 态和 $A^1\Pi$ 态的微扰分析》。《分子光谱学杂志》1972, 44 (2), 383–399。https://doi.org/10.1016/0022- 2852(72)90111-7 (4) Le Floch, A. C.; Launay, F.; Rostas, J.; Field, R. W.; Brown, C. M.; Yoshino, K.《CO $A^1\Pi$ 态及其微扰的重新研究：v = 0 能级》。《分子光谱学杂志》1987年, 121 (2), 337–379。https://doi.org/10.1016/0022-2852(87)90056-7 (5) Eidelsberg, M.; Launay, F.; Ito, K.; Matsui, T.; Hinnen, P. C.; Reinhold, E.; Ubachs, W.; Huber, K. P.《CO 的里德伯-价态相互作用及表征价态的光谱学证据》。《化学物理学杂志》2004年, 121, 292–308。https://doi.org/http://doi.org/10.1063/1.1756579 (6) Haridass, C.; Reddy, S. P.; Le Floch, A. C.《$^{12}C^{18}O$ 和 $^{13}C^{18}O$ 的第四正带（$A^1\Pi$ –$X^1\Sigma^+$）系统：$A^1\Pi$ 态中的微扰》。《分子光谱学杂志》1994年, 167 (2), 334–352。https://doi.org/http://doi.org/10.1006/jmsp.1994.1240 (7) Ryzner, S.; Malicka, M. I.; Heays, A. N.; Field, R. W.; de Oliveira, N.; Szajna, W.; Ubachs, W.; Hakalla, R.《一氧化碳稀有 $^{13}C^{18}O$ 同位素体的真空紫外-可见傅里叶变换光谱学：$A^1\Pi$(v = 1) 多重微扰能级的分析》。《光谱化学学报A：分子与生物分子光谱学》2022年, 279, 121367。https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121367 (8) Malicka, M. I.; Ryzner, S.; Heays, A. N.; de Oliveira, N.; Field, R. W.; Ubachs, W.; Hakalla, R.《$^{12}C^{18}O$ 中 $A^1\Pi$(v = 1) 能级的高分辨率傅里叶变换光谱学与去微扰分析》。《定量光谱学与辐射传递》2020年, 255, 107243。https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2020.107243 (9) Malicka, M. I.; Ryzner, S.; Heays, A. N.; de Oliveira, N.; Field, R. W.; Ubachs, W.; Hakalla, R.《$^{12}C^{18}O$ 同位素体中 $A^1\Pi$(v = 2) 能级的去微扰分析》。《定量光谱学与辐射传递》2021年, 273, 107837。https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107837 (10) Malicka, M. I.; Field, R. W.; Ryzner, S.; Stasik, A.; Ubachs, W.; Heays, A. N.; de Oliveira, N.; Szajna, W.; Hakalla, R.《$^{12}C^{18}O$ 稀有同位素体的傅里叶变换光谱学及 A

$^1\Pi$ = 3 **2024**, *312*, (v) 能级的去微扰分 124011 10 1016 2024 124011 析》。《光谱化学学报A：分子与生物分子光谱学》。https://doi.org/ . /j.saa. . (11) Hakalla, R.; Niu, M. L.; Field, R. W.; Salumbides, E. J.; Heays, A. N.; Stark, G.; Lyons, J. R.; Eidelsberg, M.; Lemaire, J. L.; Federman, S. R.; Zachwieja, M.; Szajna, W.; Kolek, P.; Piotrowska, I.; Ostrowska-Kopeć, M.; Kępa, R.; de Oliveira, N.; Ubachs, W.《$^{12}C^{17}O$ 的可见光与真空紫外光谱学及 $A^1\Pi$、v = 1 –5 能级的去微扰分析》。《RSC Advances》2016年, 6 (38), 31588–31606。https://doi.org/10.1039/C6RA01358A

(12) Hakalla, R.；Niu, M. L.；Field, R. W.；Heays, A. N.；Salumbides, E. J.；Stark, G.；Lyons, J. R.；Eidelsberg, M.；Lemaire, J. L.；Federman, S. R.；Oliveira, N. de；Ubachs, W. 一氧化碳 $^{13}C^{17}O$的傅里叶变换光谱学及$A^1\Pi$(v = 0 – 3)能级的去微扰分析。《定量光谱学与辐射传递》2017年，189，312–328。https://doi.org/http://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.12.012 (13) Niu, M. L.；Salumbides, E. J.；Heays, A. N.；Oliveira, N. de；Field, R. W.；Ubachs, W. CO $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ (2,0)、(3,0)和(4,0)谱带的光谱学与微扰分析。《分子物理学》2016年，114（5），627–636。https://doi.org/10.1080/00268976.2015.1108472 (14) Niu, M. L.；Salumbides, E. J.；Zhao, D.；Oliveira, N. de；Joyeux, D.；Nahon, L.；Field, R. W.；Ubachs, W. CO A $^1\Pi$ $^1\Sigma^+$ 0, – X（ ）和 0 1, 0 **2013**, *111*, 2163 2174 （ ）谱带的高分辨率光谱学与微扰分析。《分子物理学》– 。https://doi.org/https://doi.org/10.1080/00268976.2013.793889 (15) Hakalla, R.；Trivikram, T. M.；Heays, A. N.；Salumbides, E. J.；de Oliveira, N.；Field, R. W.；Ubachs, W. $^{13}C^{18}O$的$A^1\Pi$(v = 0)态的精密光谱学与微扰全面分析。《分子物理学》2019年，117（1），79–96。https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1495848 (16) Western, C. M. PGOPHER：用于模拟转动、振动和电子光谱的程序。《定量光谱学与辐射传递》2017年，186，221–242。https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.04.010 (17) Western, C. M. Pgopher：模拟光谱的转动、振动和电子结构。（开发版，测试版 11.0.142）。布里斯托大学，布里斯托，2021年。http://www.pgopher.chm.bris.ac.uk (18) Hakalla, R.；Szajna, W.；Zachwieja, M. 稀有 $^{12}C^{17}O$同位素体中Ångström带系（$B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$）的扩展分析。《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》2012年，45（21），215102。https://doi.org/http://doi.org/10.1088/0953-4075/45/21/215102 (19) Trivikram, T. M.；Hakalla, R.；Heays, A. N.；Niu, M. L.；Scheidegger, S.；Salumbides, E. J.；de Oliveira, N.；Field, R. W.；Ubachs, W. 通过互补光谱技术研究 $^{12}C^{18}O$的$A^1\Pi$、v = 0 态中的微扰。《分子物理学》2017年，115（24），3178–3191。https://doi.org/10.1080/00268976.2017.1356477 (20) Bruker。OPUS：用于红外、近红外和拉曼光谱先进测量、处理与评估的光谱软件。v.8.5.29.；Bruker Optik GmbH，2019年。(21) Brault, J. W. 高精度傅里叶变换光谱测量：相位校正的关键作用。《微化学学报》1987年，93（1），215–227。https://doi.org/10.1007/bf01201691 (22) Hakalla, R.；Zachwieja, M.；Szajna, W. Ångström（B $^1\Sigma^+$ $^1\Pi$ ^{13} ^{17} **2013**, – A ）带系中1 - v” *117* 47 12299 12312 10 1021 4077239 级进的首次分析。《物理化学杂志A》（ ），– 。https://doi.org/ . /jp (23) Hakalla, R.；Szajna, W.；Zachwieja, M.；Kępa, R. $^{13}C^{16}O$同位素分子中Ångström系（$B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$）的重新分析。《波兰物理学报A》2012年，122（4），674–682。https://doi.org/10.12693/APhysPolA.122.674 (24) Kępa, R.；Kocan, A.；Ostrowska-Kopeć, M.；Piotrowska-Domagała, I.；Zachwieja, M. CO^+ 分子的彗尾（$A^2\Pi_i - X^2\Sigma^+$）系的新光谱学研究。《分子光谱学杂志》2004年，228（1），66–75。https://doi.org/10.1016/j.jms.2004.06.014 (25) Szajna, W. C O的B $^2\Sigma^+$ $^2\Sigma^+$ ^{12} ^{18} $^+$ **2007**, – X系发射光谱学。*41* 2 261 265 10 1140 2006 00219 7 《欧洲物理学杂志D》（ ），– 。https://doi.org/ . /epjd/e - - (26) Kępa, R. $^{13}C^{16}O$以及部分 $^{12}C^{16}O$分子中Herzberg带系的分析。《匈牙利科学院物理学报》1978年，45（2），133–147。https://doi.org/10.1007/bf03156146 (27) Kępa, R.；Piotrowska, I.；Ostrowska-Kopeć, M. $^{12}C^{18}O^+$ 分子的彗尾（$A^2\Pi_i - X^2\Sigma^+$）系的新光谱学研究。《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》2009年，42（14），145701。https://doi.org/10.1088/0953-4075/42/14/145701 (28) Nahon, L.；de Oliveira, N.；Garcia, G. A.；Gil, J.-F.；Pilette, B.；Marcouillé, O.；Lagarde, B.；Polack, F. DESIRS：SOLEIL上用于光谱学和二色性研究、具有高分辨率和可变偏振功能的先进真空紫外光束线。《同步辐射杂志》2012年，19（4），508–520。https://doi.org/10.1107/S0909049512010588 (29) Oliveira, N. de；Joyeux, D.；Phalippou, D.；Rodier, J. C.；Polack, F.；Vervloet, M.；Nahon, L. 用于真空紫外波段的无分束器傅里叶变换光谱仪：

从光学设计到首次紫外光谱。《科学仪器评论》2009年，80（4），043101。https://doi.org/10.1063/1.3111452 (30) Oliveira, N. de；Roudjane, M.；Joyeux, D.；Phalippou, D.；Rodier, J.-C.；Nahon, L. 真空紫外波段中低至40 nm的高分辨率宽带傅里叶变换吸收光谱学。《自然·光子学》2011年，5（3），149–153。https://doi.org/https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.314 (31) de Oliveira, N.；Joyeux, D.；Roudjane, M.；Gil, J.-F.；Pilette, B.；Archer, L.；Ito, K.；Nahon, L. SOLEIL真空紫外光束线 DESIRS上的高分辨率吸收光谱学支线。《同步辐射杂志》2016年，23（4），887–900。https://doi.org/https://doi.org/10.1107/S1600577516006135 (32) Shen, X.；Ye, S.；Xu, L.；Hu, R.；Jin, L.；Xu, H.；Liu, J.；Liu, W. 不同信噪比下傅里叶变换红外光谱的基线校正方法研究。《应用光学》2018年，57（20），5794。https://doi.org/10.1364/AO.57.005794 (33) Coxon, J. A.；Hajigeorgiou, P. G. CO $X^1\Sigma^+$ 基态的直接势能拟合分析。《化学物理学杂志》2004年，121（7），2992–3008。https://doi.org/10.1063/1.1768167 (34) Yamamoto, S.；Saito, S. 电子激发态（$a^3\Pi_r$ 和$a'^3\Sigma^+$）中CO的微波光谱。《化学物理学杂志》1988年，89（4），1936–1944。https://doi.org/10.1063/1.455091 (35) de Nijs, A. J.；Salumbides, E. J.；Eikema, K. S. E.；Ubachs, W.；Bethlem, H. L. CO（$a^3\Pi$）的紫外频率计量：同位素效应及对质子与电子质量比变化的敏感性。《物理评论A》2011年，84（5），052509。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.84.052509 (36) Lefebvre-Brion, H.；Field, R. W. 《双原子分子的光谱与动力学》；爱思唯尔：阿姆斯特丹，2004年。(37) Garetz, B. A.；Kittrell, C.；Le Floch, A. C. CO中双光子D $^1\Delta - X^1\Sigma^+$ 跃迁的分析：（10 – 0）谱带中的微扰。《化学物理学杂志》1991年，94，843–853。https://doi.org/https://doi.org/10.1063/1.459973 (38) Kovács, I. 《双原子分子光谱中的转动结构》；Adam Hilger Ltd.：伦敦，1969年。(39) Watson, J. K. G. 最小二乘参数报告中的舍入误差。《分子光谱学杂志》1977年，66（3），500–502。https://doi.org/10.1016/0022-2852(77)90308-3 (40) Gilijamse, J. J.；Hoekstra, S.；Meek, S. A.；Metsälä, M.；Van De Meerakker, S. Y. T.；Meijer, G.；Groenenboom, G. C. 亚稳态CO（$a^3\Pi$，v = 0）的辐射寿命。《化学物理学杂志》2007年，127（22），221102。https://doi.org/10.1063/1.2813888 (41) Cameron, W. H. B. XXXII. 在氖存在下产生碳、氧和氮的某些光谱。《哲学杂志·科学辑》1926年，1（2），405–417。https://doi.org/10.1080/14786442608633641 (42) Eidelsberg, M.；Rostas, F.；Breton, J.；Thieblemont, B. CO的$A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ 系的振动谱带振子强度和偶极跃迁矩。《化学物理学杂志》1992年，96（8），5585。https://doi.org/10.1063/1.462700 (43) James, T. C. CO的Cameron系$a^3\Pi - X^1\Sigma^+$（0,0）谱带的强度测量。《分子光谱学杂志》1971年，40（3），545–553。https://doi.org/10.1016/0022-2852(71)90256-6 (44) James, T. C. 禁阻跃迁的跃迁矩、弗兰克–康登因子和寿命：CO Cameron系强度的计算。《化学物理学杂志》1971年，55（8），4118–4124。https://doi.org/10.1063/1.1676710 (45) Hasson, V.；Nicholls, R. W. CO的（$a^3\Pi - X^1\Sigma^+$）Cameron带系的绝对吸收振子强度测量。《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》1971年，4（5），681–683。https://doi.org/10.1088/0022-3700/4/5/009 (46) Slanger, T. G.；Black, G. CO（$a^3\Pi$）的产生、探测、退激和辐射寿命。《化学物理学杂志》1971年，55（5），2164–2173。https://doi.org/10.1063/1.1676387 (47) Kittrell, C.；Garetz, B. A. 双光子激发观测到的CO中$D^1\Delta - X^1\Sigma^+$ 跃迁分析。《光谱化学学报》1989年，45A（1），31–40。https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0584-8539(89)80024-8 (48) Jung, Ch. FRACON 量子化学程序文档；1979年。(49) Jakubek, Z. FRACONB 量子化学程序文档 FRACON（B版）；1988年。(50) Le Roy, R. J. RKR1：实现一阶 RKR方法、用于确定双原子分子势能函数的计算机程序。《定量光谱学与辐射传递》2017年

(51) Jasik, P. sPYtroscopy——用于计算双原子分子转动-振动光谱的 Python 程序，可包含任意数量和类型的电子态间耦合，未发表。**2024年**。(52) Cacciani, P.; Hogervorst, W.; Ubachs, W. $^{12}C^{16}O$ 和 $^{13}C^{16}O$ 的 $E^1\Pi$、振动量子数=0 和振动量子数=1 态中的偶然预解离现象。《化学物理学杂志》**1995年**，*102*（21），8308–8320。https://doi.org/https://doi.org/10.1063/1.468823 (53) Mosyagin, N. S.; Oleynichenko, A. V.; Zaitsevskii, A.; Kudrin, A. V.; Pazyuk, E. A.; Stolyarov, A. V. CO分子的 $a^3\Pi - X^1\Sigma^+$、$A'^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ 和 $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ 系统的从头算相对论处理。《定量光谱学与辐射传递》**2021年**，*263*，107532。https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107532

《一氧化碳 A态$^1\Pi$ 受 a态$^3\Pi$微扰本应无法探测：探测、机制与意外发现》的补充材料

补充材料提供了：（I）本研究采用两种互补的 Vis-FT 和 VUV-FT 光谱学技术记录并分析的谱线波数；（II）实验项值；以及（III）本次去微扰分析的详细信息。

目录

I. 使用 Vis-FT 和 VUV-FT 光谱学记录的谱线波数.34

表 S 1 $^{-1}$ $^{1}\Pi$ 0, 2 ^{13} ^{18} ^{a}。CO 的 $B^{1}\Sigma^{+} \rightarrow$ A（）、 34
Vis-FT 发射带的波数（单位：cm ）.

表 S 2 $^{-1}$ $^{1}\Pi$ 0, 2 ^{13} ^{18} ^{a}。一氧化碳的 $C^{1}\Sigma^{+} \rightarrow$ A（） 35
Vis-FT 发射带的波数（单位：cm ）.

表 S3。一氧化碳的 $B^{1}\Sigma^{+} \rightarrow$ $A^{1}\Pi(0, 2)$ 和 $C^{1}\Sigma^{+} \rightarrow$ $A^{1}\Pi(0, 2)$ Vis-FT 发射带中观测到的相互作用诱导谱线的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .36

表 S4。一氧化碳的 $A^{1}\Pi \leftarrow$ $X^{1}\Sigma^{+}(2, 0)$ VUV-FT 吸收带的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .37

表 S5。一氧化碳的 $a^{3}\Pi \leftarrow$ $X^{1}\Sigma^{+}(13, 0)$ VUV-FT 吸收带的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .38

表 S6。$^{13}C^{18}O$ 的 $a'^{3}\Sigma^{+} \leftarrow X^{1}\Sigma^{+}$ (12, 0) 和 $I^{1}\Sigma^{-} \leftarrow$ $X^{1}\Sigma^{+}(3, 0)$ 真空紫外傅里叶变换吸收带的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .39

表 S7。$^{13}C^{18}O$ 的 $D^{1}\Delta \leftarrow$ $X^{1}\Sigma^{+}(3, 0)$ 真空紫外傅里叶变换吸收带的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .40

表 S8。$^{13}C^{18}O$ 的 $d^{3}\Delta \leftarrow$ $X^{1}\Sigma^{+}$ (7, 0) 真空紫外傅里叶变换吸收带的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .41

表 S9。$^{13}C^{18}O$ 的 $e^{3}\Sigma^{-} \leftarrow$ $X^{1}\Sigma^{+}(4, 0)$ 真空紫外傅里叶变换吸收带的波数（单位：cm^{-1}）。[a] .43

II. 实验项值.44

表 S10。$^{13}C^{18}O$ 中 $A^{1}\Pi(v = 2)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）。[a, b, c] .44

表 S11。$^{13}C^{18}O$ 中 $d^{3}\Delta(v = 7)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）。[a, b, c] .45

表 S12。$^{13}C^{18}O$ 中 $a'^{3}\Sigma^{+}(v = 12)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）。[a, b, c] .47

表 S13。$^{13}C^{18}O$ 中 $e^{3}\Sigma^{-}(v = 4)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）。[a, b, c] .48

表 S14。$^{13}C^{18}O$ 中 $D^{1}\Delta(v = 3)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）。[a, b, c] .49

表 S15. $^{13}C^{18}O$ 中 $a^{3}\Pi(v = 13)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）.[a, b, c] .50

表 S16. $^{13}C^{18}O$ 中 $I^{1}\Sigma^{-}(v = 3)$ 能级的项值（单位：cm^{-1}）.[a, b, c] .51

III. 去微扰 本次去微扰分析的详细内容.5

2图 S1. $^{13}C^{18}O$ 中 $A^{1}\Pi(v = 2)$ 能级附近的转动振电子项系列.52 表 S17. 在 $^{13}C^{18}O$ $A^{1}\Pi(v = 2)$ 能级的去微扰分析中考察的所有态间相互作用的描述.53

III.1. 态内 $^{3}\Pi$ 和 $^{3}\Sigma^{-}$ 相互作用.54

图 S2. (a) $^{13}C^{18}O$ $a^{3}\Pi$(振动量子数 = 13) 能级的三个*e*态宇称自旋分量的 $^{3}\Pi_{1e}$ 占比。(b) 图 (a) 中最相关区域总角动量量子数 = 15-45 的放大图。对于 $a^{3}\Pi$ 态的自旋分量之间不存在相互作用的假设情况，给出了 $|\Omega|$ 标记.55

图 S3。（a）CO $e^{3}\Sigma^{-}$（$v = 4$）能级的 e 奇宇称自旋分量 F_{1e} 和 F_{3e} 中分数$^{3}\Sigma 1e$ – 成分。（b）图（a）中最相关区域，即$J = 5$-35的放大图。$|\Omega|$ 标记仅为示意性标签，因为 $e^{3}\Sigma^{-}$ 的F_1, F_2, 和F_3 分量更准确地说是Hund情形(b)自旋-转动分量，而非纯-Ω 分量。..... 56**III.2. 间接微扰路径之间干涉的分析方法.57**

表 S18。$e^3\Sigma^-$ 态的有效哈密顿量矩阵元。[a] .58

表 S19. $a^3\Pi$ 态的有效哈密顿量矩阵元。[a] .59

I. 使用 Vis-FT 和 VUV-FT 光谱学记录的谱线波数。

表 S1。 $B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$ (0, 2) 的波数（单位：cm^{-1}）、Vis-FT 发射带的^{13}碳^{18}O。[a]

	$^{r}R_{11ee}(J'')$		$^{q}Q_{11ef}$		$^{p}P_{11ee}(J'')$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
0						
1	19367.55[b]	0.02	19360.477[b]	0.007	19356.94[b]	0.02
2	19372.50[b]	0.01	19361.875	0.005	19354.810[b]	0.009
3	19378.158[b]	0.007	19364.002	0.005	19353.374[b]	0.009
4	19384.512[b]	0.006	19366.825	0.005	19352.674[b]	0.005
5	19391.578[b]	0.006	19370.357	0.005	19352.642[b]	0.005
6	19399.343[b]	0.006	19374.604	0.005	19353.348[b]	0.005
7	19407.821[b]	0.005	19379.616	0.005	19354.744[b]	0.005
8	19417.005[b]	0.006	19385.013	0.005	19356.850[b]	0.005
9	19426.875[b]	0.005	19391.442[b]	0.005	19359.662	0.005
10	19437.463[b]	0.005	19398.515	0.005	19363.184	0.005
11	19448.762[b]	0.005	19406.283	0.005	19367.415[b]	0.005
12	19460.755	0.005	19414.757	0.005	19372.359[b]	0.005
13	19473.461	0.005	19423.933	0.005	19378.005[b]	0.005
14	19486.875	0.005	19433.819	0.005	19384.364[b]	0.005
15	19500.997	0.005	19444.414	0.005	19391.439[b]	0.005
16	19515.790	0.005	19455.720	0.005	19399.227[b]	0.005
17	19531.381	0.005	19467.695	0.005	19407.740[b]	0.005
18	19547.663[b]	0.005	19480.467	0.005	19416.944[b]	0.005
19	19564.700	0.005	19493.926	0.005	19426.980[b]	0.005
20	19582.978	0.005	19508.112	0.005	19438.239	0.005
21	19600.493	0.005	19522.867[b]	0.005	19448.731[b]	0.005
22	19619.814	0.005	19538.577	0.005	19461.040	0.005
23	19639.992[b]	0.005	19554.975	0.005	19474.210	0.005
24	19661.974	0.005	19572.168	0.005	19489.192	0.005
25	19678.712[b]	0.006	19590.271	0.005	19498.926[b]	0.005
26	19701.822	0.005	19609.697[b]	0.005	19515.046	0.005
27	19724.847	0.005	19632.545	0.005	19531.094	0.005
28	19748.500	0.005	19643.051	0.005	19547.772[b]	0.005
29	19773.112	0.005	19665.116	0.005	19565.419	0.005
30	19796.52[b]	0.02	19686.738	0.005	19581.884[b]	0.008
31	19820.848	0.006	19708.164	0.005	19599.253	0.005
32	19849.09[b]	0.02	19731.655	0.005	19620.538	0.006
33	19876.28[b]	0.01	19755.933	0.005	19640.794[b]	0.008
34	19900.300	0.006	19778.141	0.005	19657.868[b]	0.008
35	19929.75[b]	0.01	19803.895	0.005	19680.416	0.006
36	19959.263	0.007	19830.546	0.005	19703.047	0.006
37	19990.98[b]	0.02	19857.570[b]	0.008	19727.852	0.008
38	20018.317	0.007	19881.564	0.005	19748.299	0.007
39	20049.83[b]	0.02	19909.667[b]	0.008	19772.943	0.007
40	20081.81[bw]	0.06	19938.204	0.006	19798.026	0.007
41	20114.4[bw]	0.2	19967.40[bw]	0.03	19823.771	0.009
42			19997.25[bw]	0.03	19850.22[w]	0.02
43			20027.83[bw]	0.04		
44			20059.10[bw]	004		
45			20091.16[bw]	005		

[a] u(σ) 数值表示一个标准差，反映了波数测量的校准误差与拟合误差的综合影响。仪器分辨率为 0.0179 cm^{-1}。绝对校准不确定度为 0.004 cm^{-1}。波数测量的绝对准确度估计为 0.005 cm^{-1}。上标 *p*, *q*, 和 *r*表示不包括自旋在内的总角动量变化。混合和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”表示。

表 S1 的替代文本： 此表列出了 $^{13}C^{18}O$ $B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi(0, 2)$ Vis-FT 发射带中已指认转动支的随 J 变化的波数及不确定度。上标用于标识支类型、混合特征和弱谱线。

表 S2. 碳$^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$ (0, 2) 的 Vis-FT 发射带的波数（单位：cm^{-1}），^{13}碳^{18}O。[a]

	$^{r}R_{11ee}(J'')$		$^{q}Q_{11ef}(J'')$		$^{p}P_{11ee}(J'')$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
0						
1			24361.97[bw]	0.08		
2	24373.89[bw]	0.04	24363.32[b]	0.03		
3	24379.51[bw]	0.05	24365.42[b]	0.03	24354.83[bw]	0.05
4	24385.85[bw]	0.04	24368.22[b]	0.02	24354.08[b]	0.02
5	24392.89	0.02	24371.709	0.008	24354.00[b]	0.03
6	24400.59[bw]	0.05	24375.922	0.007	24354.69[b]	0.03
7	24409.03[b]	0.02	24380.89[b]	0.01	24356.04[b]	0.02
8	24418.15	0.01	24386.227	0.007	24358.11[b]	0.02
9	24427.96[b]	0.02	24392.604[b]	0.009	24360.90[b]	0.02
10	24438.46[b]	0.02	24399.603[b]	0.007	24364.339	0.008
11	24449.70[b]	0.02	24407.303	0.006	24368.504	0.008
12	24461.614	0.009	24415.703[b]	0.008	24373.37[b]	0.02
13	24474.23[b]	0.02	24424.792[b]	0.008	24378.945	0.007
14	24487.55[b]	0.02	24434.589	0.006	24385.220	0.007
15	24501.561	0.009	24445.087[b]	0.008	24392.209	0.007
16	24516.30[b]	0.02	24456.292	0.006	24399.90[b]	0.02
17	24531.75[b]	0.02	24468.201	0.006	24408.31[b]	0.02
18	24547.91[b]	0.02	24480.825	0.006	24417.45[b]	0.02
19	24564.82[b]	0.03	24494.158	0.006	24427.334	0.008
20	24582.95[bw]	0.03	24508.24[b]	0.02	24438.50[b]	0.02
21	24600.35	0.02	24522.854	0.007	24448.84[b]	0.02
22	2461952[bw]	0.04	24538.437	0.007	24461.03[b]	0.02
23	2463958	0.02	24554.70[b]	0.02	24474.07[b]	0.02
24	24661.43[bw]	0.03	24571.749	0.007	24488.93[b]	0.02
25	24678.00[bw]	0.04	24589.716	0.008	24498.51[b]	0.02
26	24700.97[bw]	0.09	24608.991	0.009	24514.47[b]	0.02
27	24723.79[bw]	0.04	24631.70[b]	0.02	24530.39[b]	0.03
28	24747.34[bw]	0.04	24642.05[b]	0.03	24546.97[bw]	0.04
29	24771.81[bw]	0.06	24663.96	0.02	24564.42[b]	0.02
30			24685.42[b]	0.02	24580.73	0.03
31			24706.68[bw]	0.04	24597.92[bw]	0.04
32			24730.02[w]	0.02	24619.06[bw]	0.6
33			24754.15[bw]	0.06	24639.16[bw]	0.06
34			24776.18[bw]	0.04	24656.05[bw]	0.07
35			24801.78[bw]	0.07	24678.44[bw]	0.07
36			24828.22[w]	0.04	24700.88[bw]	0.05

[a] u(σ) 数值表示一个标准差，反映波数测量的校准误差与拟合误差的综合影响。仪器分辨率为 0.0179 cm^{-1}。绝对校准不确定度为 0.004 cm^{-1}。波数测量的绝对准确度估计为 0.007 cm^{-1}。重叠和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”标示。上标*p, q,* 和*r*表示不包括自旋的总角动量变化。

表 S2 的替代文本： 该表报告了 $^{13}C^{18}O$ $C^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$ (0, 2) Vis-FT 发射带中已归属转动支的依赖于总角动量量子数的波数及其不确定度。谱线标注指明支类型、谱线混合以及信号微弱、信噪比较低的特征。

表 S3。 $^{13}C^{18}O$ 的 $B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi(0, 2)$ 和 $C^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi(0, 2)$ Vis-FT 发射带中观测到的相互作用诱导谱线的波数（单位：cm^{-1}）。

	$^sR_{11ee}$		$^rR_{12ee}$		$^qR_{13ee}$		$^rQ_{11ef}$		$^qQ_{12ef}$		$^qP_{11ee}$		$^pP_{12ee}$		$^oP_{13ee}$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
							B常数$^1\Sigma^+$ - I态$^1\Sigma^-$(0, 3)									
7							19376.87[bw]	0.03								
8							19387.81[b]	0.03								
							B常数$^1\Sigma^+$ - $a^3\Pi$(0, 13)									
20	19580.621	0.006									19435.887	0.005				
…																
32			19845.89[b]	0.02									19617.340[b]	0.008		
							B常数$^1\Sigma^+$ - e态$^3\Sigma^-$(0, 4)									
24	19650.21[b]	0.02									19477.424[b]	0.009				
25	19691.71[b]	0.03									19511.93[b]	0.02				
26									19586.20[b]	0.02						
27									19617.640[b]	0.006						
28									19663.96[b]	0.02						
…																
31					19832.03[bw]	0.04									19610.45[b]	0.03
							B常数$^1\Sigma^+$ - d态$^3\Delta$(0, 7)									
30	19801.58[b]	0.02					19689.97	0.01			19586.93[b]	0.06				
…																
38															19769.20[b]	0.02
							B常数$^1\Sigma^+$ - a′态$^3\Sigma^+$(0, 12)									
31							19716.32[b]	0.02								
							碳$^1\Sigma^+$ - $a^3\Pi$(0, 13)									
20	24580.68[bw]	0.04									24436.09[b]	0.03				
							碳$^1\Sigma^+$ - e态$^3\Sigma^-$(0, 4)									
24											24477.15[w]	0.03				
25											24511.50[w]	0.03				
…																
27									24616.78[w]	0.02						

[a] u(σ) 数值表示一个标准差，代表波数测量的校准误差与拟合误差的组合。仪器分辨率为 0.0179 cm^{-1}。绝对校准不确定度为 0.004 cm^{-1}。波数测量的绝对准确度估计为 0.02 cm^{-1}。混合谱线和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”表示。上标 *o*， *p*、*q*、 和*s*表示不包括自旋在内的总角动量发生变化。

表 S3 的替代文本：该表列出了在 $^{13}C^{18}O$ $B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$ (0, 2) 和 $^{13}C^{18}O$ $C^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$ (0, 2) Vis-FT 发射带中观测到的相互作用诱导额外谱线的波数及其不确定度，并按转动支和上态归属对这些谱线进行整理。

表 S4。 A态$^1\Pi \leftarrow$ X态$^1\Sigma^+(2, 0)$ 的$^{13}C^{18}O$[a]真空紫外傅里叶变换吸收带波数（单位：cm^{-1}）。

	$^rR_{11ee}(J'')$		$^qQ_{11fe}$		$^pP_{11ee}(J'')$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
0	67560.43	0.02				
1	67562.61	0.02	67556.94	0.02		
2	67564.12	0.02	67555.62	0.02	67549.95	0.02
3	67564.97[b]	0.02	67553.65	0.02	67545.15	0.02
4	67565.19[b]	0.02	67551.01	0.02	67539.68	0.02
5	67564.72[b]	0.02	67547.71[b]	0.02	67533.56	0.02
6	67563.61	0.02	67543.75	0.02	67526.77	0.02
7	67561.82	0.02	67539.06	0.02	67519.33	0.02
8	67559.38	0.02	67534.03	0.02	67511.23	0.02
9	67556.28	0.02	67528.02	0.02	67502.47	0.02
10	67552.51	0.02	67521.42	0.02	67493.05	0.02
11	67548.09[b]	0.02	67514.16	0.02	67482.98	0.02
12	67543.00	0.02	67506.24	0.02	67472.24	0.02
13	67537.24	0.02	67497.67	0.02	67460.84	0.02
14	67530.81	0.02	67488.43	0.02	67448.79	0.02
15	67523.71	0.02	67478.53[b]	0.02	67436.07	0.02
16	67515.94	0.02	67467.96	0.02	67422.68	0.02
17	67507.49	0.02	67456.73	0.02	67408.63	0.02
18	67498.31	0.02	67444.82	0.02	67393.91	0.02
19	67487.93	0.02	67432.25[b]	0.02	67378.51	0.02
20	67478.38[b]	0.02	67418.98	0.02	67362.39	0.02
21	67467.01	0.02	67405.19	0.02	67345.08	0.02
22	67454.85	0.02	67390.48	0.02	67328.57	0.02
23	67440.92	0.02	67375.13	0.02	67310.29	0.02
24	67432.3[bw]	0.2	67359.04	0.02	67291.21	0.02
25	67417.31	0.02	67342.06	0.02	67270.37	0.02
26	67402.43	0.02	67323.82	0.02	67254.82	0.02
27	67386.97	0.03	67302.20[b]	0.04	67232.93[b]	0.06
28			67292.98[b]	0.04	67211.18	0.05
29			67272.18[b]	0.05	67188.8[bw]	0.2
30			67251.93[b]	0.09	67165.61	0.05
31					67143.48[b]	0.04
32	67300.75[b]	0.04			67120.64[b]	0.04
33	67285.10[b]	0.04			67093.93[b]	0.03
34	67264.07[b]	0.04	67166.44[b]	0.03	67068.22[b]	0.03
35	67243.00[b]	0.03	67142.17[b]	0.03	67045.76	0.03
36	67219.77	0.03	67117.08	0.03	67017.88	0.03
37	67200.95[b]	0.03	67091.66[b]	0.03	66989.99	0.03
38	67177.97	0.03	67069.34[b]	0.03	66959.93	0.03
39	67154.53[b]	0.03	67042.95	0.03	66934.34[b]	0.04
40	67130.62	0.03	67016.14[b]	0.04	66904.52[b]	0.04
41	67105.97[b]	0.06	66988.77[b]	0.05	66874.33[b]	0.06
42	67080.59	0.03	66960.71	0.04		
43	67054.6[w]	0.2				

[a] u(σ)数值表示一个标准差，代表波数测量的校准误差和拟合误差的组合。仪器分辨率为 0.15 cm^{-1}，绝对校准不确定度为 0.01 cm^{-1}，中等强度和孤立谱线的谱线频率测量绝对准确度估计为 0.03 cm^{-1}。上标 p、q 和 r表示不包括自旋在内的总角动量变化。混合谱线和/或弱谱线（SNR < 3）分别用上标“b”和/或“w”表示。

表 S4 的替代文本：该表列出了已指认的 $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+(2, 0)$ 真空紫外傅里叶变换吸收带中各转动支随 总角动量量子数变化的波数及其不确定度。上标标示支类型、混合谱线和较弱的光谱特征。

表 S5. $^{-1}$ cm^{-1} 中的波数：$^{13}C^{18}O$ 的 $a^3\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+(13, 0)$ VUV-FT 吸收带。[a]

	$^qR_{11ee}$		$^pQ_{11fe}$		$^qQ_{21fe}$		$^rQ_{31fe}$		$^oP_{11ee}$		$^pP_{21ee}$		$^qP_{31ee}$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
19	67490.29	0.02												
...														
21									67347.42	0.02				
...														
23									67296.47[b]	0.04				
24			67335.15[b]	0.05										
...														
27	67337.30[b]	0.04	67259.45[b]	0.07										
28									67172.87[b]	0.03				
29									67139.13	0.03				
30						0.03			67105.82[b]	0.09				
31											67151.05	0.03		
32	67200.59[b]	0.03	67110.18	0.04	67208.13	0.03	67297.15[b]	0.03						
33					67178.46[b]	0.03	67268.5[bw]	0.2						
34							67248.82[b]	0.03						
...														
43	66834.20	0.03												
44													66803.81[b]	0.04
...														
46	66716.15	0.03												
47							66803.90[b]	0.06						

[a] u(σ) 值表示一个标准差，代表波数测量中校准误差和拟合误差的组合。仪器分辨率为 0.15 cm^{-1}。绝对校准不确定度为 0.025 cm^{-1}。波数测量的绝对准确度估计为 0.04 cm^{-1}。混合谱线和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”标示。上标*o, p, q, r,* 和 s 表示不包括自旋的总角动量变化。

表 S5 的替代文本：该表列出了已指认的$^{13}C^{18}O$ $a^3\Pi \leftarrow X^1\Sigma^+(13, 0)$ 真空紫外傅里叶变换吸收带中各转动支随 总角动量量子数变化的波数及其不确定度。谱线标注标明支类型、谱线混合情况以及较弱的信噪比特征。

表 S6。 a′态X态（12, 0）和 I态X态（3, 0）的波数（单位：cm^{-1}），VUV-FT

^{13}碳^{18}O 的真空紫外傅里叶变换吸收带。

[a]

	a′态$^3\Sigma^+$ ←X态$^1\Sigma^+$ (12, 0)								I态$^1\Sigma^-$ ←X态$^1\Sigma^+$(3, 0)	
	$^rR_{21ee}(J'')$		$^pQ_{11fe}$(总角动量量子数″)		$^rQ_{31fe}$(总角动量量子数″)		$^rP_{21ee}$(总角动量量子数″)		$^qQ_{11fe}$(总角动量量子数″)	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
0	67992.59[b]	0.05								
1	67993.28	0.04			67994.9[bw]	0.3				
2	67992.48[b]	0.05	67982.94[b]	0.04	67993.98[b]	0.06	67982.17[b]	0.05		
3	67990.35	0.03	67976.68[b]	0.07	67991.71[b]	0.08	67975.87[b]	0.04		
4	67986.76[b]	0.04	67969.00[b]	0.07	67988.11[b]	0.06	67968.07[b]	0.08		
5	67981.82[b]	0.05	67959.87[b]	0.05	67983.01[b]	0.07	67958.93[b]	0.05		
6	67975.19[b]	0.06	67949.29[b]	0.06	67976.53[b]	0.08	67948.36[b]	0.04		
7	67967.48[b]	0.07	67937.32	0.03	67968.74[b]	0.06	67936.38[b]	0.05	67541.79	0.02
8	67958.19[b]	0.04	67923.90[b]	0.04	67959.46[b]	0.07			67531.24	0.02
9	67947.48[b]	0.04	67909.11[b]	0.04	67948.78[b]	0.06	67908.13[b]	0.06	67519.71[b]	0.03
10	67935.31[b]	0.05	67892.85[b]	0.04	67936.6[b]	0.1	67891.88[b]	0.05		
11	67921.87	0.03	67875.16[b]	0.04	67923.11[b]	0.08	67874.27[b]	0.04		
12	67906.92[b]	0.04	67856.13[b]	0.05	67908.12[b]	0.06	67855.12[b]	0.06		
13			67835.61[b]	0.04	67891.80[b]	0.05	67834.62[b]	0.05		
14	67872.78	0.03	67813.67[b]	0.04	67873.95[b]	0.04	67812.72[b]	0.03		
15	67853.57	0.03			67854.84[b]	0.05	67789.43[b]	0.08		
16	67832.95	0.03	67765.63[b]	0.04	67834.24[b]	0.06	67764.59[b]	0.05		
17	67810.91	0.03	67739.46[b]	0.04	67812.15[b]	0.07	67738.50[b]	0.05		
18	67787.振动量子数.04		67711.90[b]	0.04	67788.73[b]	0.09	67710.91	0.04	67357.06[b]	0.05
19	67762.57[b]	0.05	67682.94[b]	0.04	67763.86[b]	0.03			67332.48[b]	0.04
20	67736.30[b]	0.06			67737.54	0.05	67651.54[b]	0.03	67306.61	0.03
21	67708.49[b]	0.04			67709.81[b]	0.08			67279.43	0.03
22	67679.39[b]	0.06							67250.96[b]	0.04
23					67650.10[b]	0.06			67221.18[b]	0.05
24									67190.12[b]	0.07
25									67157.73	0.06
…										
31			67223.80[b]	0.03			67223.63[b]	0.04		
32			67176.99	0.03			67176.42[b]	0.06		
33			67128.24[b]	0.08			67127.65	0.03		
34			67078.17[b]	0.04			67078.08[b]	0.04		
35										
36			66973.22[b]	0.03						
37			66918.53	0.03	67072.54	0.04				
38			66862.79[w]	0.06			66861.89[b]	0.04		
39	66965.94	0.03								
40										
41	66855.13[b]	0.03								

[a] u(σ) 值表示一个标准差，反映波数测量中校准误差与拟合误差的综合影响。仪器分辨率为 0.15 cm^{-1}，绝对校准不确定度为 0.025 cm^{-1}；a′$^3\Sigma^+$ ← X$^1\Sigma^+$(12, 0) 和 I$^1\Sigma^-$ ← X$^1\Sigma^+$(3, 0) 的波数测量绝对准确度分别估计为 0.05 和 0.04 cm^{-1}。混合谱线和／或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和／或“w”标示。上标 *o, p, q, r* 和 *s* 表示不包括自旋的总角动量变化。

表 S6 的替代文本：该表报告了 $^{13}C^{18}O$ a′$^3\Sigma^+$ ← X$^1\Sigma^+$(12, 0) 和 I$^1\Sigma^-$ ← X$^1\Sigma^+$(3, 0) VUV-FT 吸收带中已指认分支的波数及其不确定度，并对支类型、混合谱线和弱跃迁作了标注。

表 S7。 $D^1\Delta \leftarrow X^1\Sigma^+(3, 0)$ 的波数（单位：cm^{-1}）、$^{13}C^{18}O$ 的 VUV-FT 吸收带。[a]

	$^{r}R_{11ee}(J'')$		$^{q}Q_{11fe}(J'')$		$^{p}P_{11ee}(J'')$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
...						
5			68358.5[bw]	0.3		
6			68350.7[bw]	0.5		
7			68341.4[bw]	0.2		
8	68350.5[bw]	0.2	68330.9[bw]	0.3		
9	68340.8[bw]	0.2	68319.0[bw]	0.2		
10	68329.8[bw]	0.3	68305.9[bw]	0.2		
11	68317.5[bw]	0.2	68291.4[bw]	0.2	68267.5[bw]	0.4
12	68303.94[b]	0.05	68275.6[bw]	0.2	68249.5[bw]	0.3
13	68289.0[bw]	0.2	68258.53[w]	0.07	68230.3[bw]	0.2
14	68272.7[bw]	0.2	68240.1[bw]	0.2	68209.7[bw]	0.4
15	68255.1[bw]	0.2	68220.4[bw]	0.2		
16	68236.3[b]	0.2	68199.4[bw]	0.2	68164.61[b]	0.05
17	68216.08	0.06	68177.07[b]	0.09	68140.08	0.04
18	68194.5[bw]	0.3	68153.28[b]	0.09	68114.27[b]	0.04
19	68171.69[b]	0.07	68128.3[bw]	0.2		
20	68147.5[bw]	0.3	68102.0[bw]	0.2	68058.7[b]	0.2
21	68122.1[bw]	0.3	68074.4[bw]	0.3	68028.97	0.04
22	68095.2[w]	0.1	68045.5[bw]	0.3	67997.7[bw]	0.2
23			68015.2[bw]	0.3		
...						
46					66856.25[b]	0.05
...						
50			66700.8[bw]	0.2		

[a] u(σ) 数值表示一个标准差，代表波数测量的校准误差与拟合误差的组合。对于强单谱线，仪器分辨率为 0.15 cm^{-1}，绝对校准不确定度为 0.025 cm^{-1}，而谱线频率测量的最佳绝对准确度估计为 0.2 cm^{-1}。上标 p、q、和r表示不包括自旋在内的总角动量变化。混合谱线和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”表示。

表 S7 的替代文本：该表列出了 $^{13}C^{18}O$ $D^1\Delta \leftarrow X^1\Sigma^+(3, 0)$ VUV-FT 吸收带中已指认转动支的 J 依赖波数及其不确定度。上标用于标明支类型、混合特征和弱谱线。

表 S8。波数　　CO 的 $d^3\Delta \leftarrow X^1\Sigma^+$ (7, 0) 真空紫外傅里叶变换吸收带的数值（单位：cm^{-1}）。[a]

	$^qR_{11ee}(J'')$		$^rR_{21ee}(J'')$		$^sR_{31ee}(J'')$		$^pQ_{11fe}(J'')$		$^qQ_{21fe}$(总角动量量子数″)		$^rQ_{31fe}$(总角动量量子数″)		$^oP_{11ee}$(总角动量量子数″)		$^pP_{21ee}$(总角动量量子数″)		$^{o}P_{31ee}$(总角动量量子数″)	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ))	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
0					67987.90[b]	0.04												
1			67949.9[b]	0.1	67988.92[b]	0.04					67984.46[b]	0.03						
2			67949.37[b]	0.06	67988.73[b]	0.04			67942.91[b]	0.06	67981.94[b]	0.05					67977.44[b]	0.03
3	67908.振动量子数.04		67947.振动量子数.04		67987.35[b]	0.04			67938.92	0.03	67978.40[b]	0.05			67932.47[b]	0.08	67971.振动量子数.03	
4	67904.80[b]	0.05	67944.40[b]	0.03	67984.90[b]	0.04			67933.60[b]	0.03	67973.54[b]	0.04			67924.94[b]	0.06	67964.40[b]	0.03
5	67899.59[b]	0.05	67939.91	0.03	67980.98[b]	0.04			67926.99[b]	0.04	67967.39[b]	0.04			67916.13[b]	0.04	67956.08[b]	0.03
6	67892.90[b]	0.06	67934.07[b]	0.03	67976.02[b]	0.04	67878.7[bw]	0.3	67918.96[b]	0.03	67960.13[b]	0.04			67906.01[b]	0.04	67946.50[b]	0.03
7	67885.01[b]	0.09	67926.88[b]	0.03	67969.72[b]	0.04	67868.52[w]	0.07	67909.63[b]	0.03	67951.52[b]	0.04			67894.51	0.03	67935.74[b]	0.03
8	67875.41[b]	0.09	67918.35[b]	0.03	67962.24[b]	0.04	67856.89[b]	0.03	67898.98[b]	0.03	67941.82[b]	0.04			67881.71[b]	0.04	67923.56[b]	0.03
9	67864.81	0.06	67908.53[b]	0.04	67953.41[b]	0.04	67844.00[b]	0.09	67887.00[b]	0.03	67930.73[b]	0.04	67825.62[b]	0.06	67867.56[b]	0.03		
10	67852.20[b]	0.07	67897.42	0.03	67943.36[b]	0.04	67829.62[b]	0.07	67873.62[b]	0.03	67918.47[b]	0.04	67809.10[b]	0.07	67852.08[b]	0.03		
11	67838.53[b]	0.06	67884.92[b]	0.03	67932.03[b]	0.04	67813.79[b]	0.04	67859.03[b]	0.03	67904.94[b]	0.04					67835.29[b]	0.03
12	67823.35	0.04	67871.10[b]	0.03	67919.46[b]	0.04	67796.64[b]	0.03	67843.05		0.03		67771.92	0.05			67817.18[b]	0.03
13	67806.88[b]	0.05	67855.90[b]	0.03	67905.67[b]	0.04	67777.98[b]	0.04	67825.75[b]	0.03	67874.17[b]	0.04	67751.25[b]	0.05	67797.71[b]	0.03		
14	67788.93[b]	0.05	67839.42[b]	0.03						67807.11[b]	0.03	67856.83[b]	0.04	67729.13	0.04			
15	67769.65[b]	0.04	67821.57[b]	0.03	67874.04	0.04	67736.60[b]	0.04	67787.10[b]	0.03	67838.07[b]	0.03	67705.65[b]	0.07	67754.77[b]	0.03		
16	67748.96[b]	0.05	67802.35[b]	0.03	67856.36[b]	0.03	67713.82[b]	0.04	67765.82[b]	0.03	67818.32[b]	0.03			67680.76[b]	0.05	67731.30[b]	0.03
17	67726.87	0.03	67781.89[b]	0.03	67837.38[b]	0.03	67689.70	0.03	67743.13	0.03	67797.12[b]	0.04	67654.57[b]	0.06	67706.50			0.03
18			67760.05	0.03	67817.04[b]	0.04	67664.19[b]	0.04			67774.62[b]	0.03					67680.32[b]	0.03
19	67678.87[b]	0.03	67736.87[b]	0.03	67795.53[b]	0.04	67637.41[b]	0.03	67693.82[b]	0.03			67750.84[b]	0.03				
20			67712.34[b]	0.03	67772.60[b]	0.03					67725.80[b]	0.03					67681.18[b]	0.04
21					67748.40	0.03			67639.20[b]	0.04	67699.44[b]	0.03						
22			67659.32[b]	0.03	67722.89[b]	0.03					67671.79[b]	0.03						
23			67630.75[b]	0.06	67696.08[b]	0.03					67642.80[b]	0.04						
24					67667.97[b]	0.03												
25					67638.52	0.03												
…																		
28													67274.95[b]	0.04				
29							67297.51[b]	0.04	67367.09[b]	0.06					67305.35[b]	0.09		
30	67314.38	0.03					67248.70[b]	0.05							67262.83	0.03		
31											67364.17	0.05	67138.49[b]	0.03	67219.81[b]	0.03		
32													67095.56	0.04	67175.12[b]	0.05	67253.39[b]	0.06
33															67129.34	0.03		
34															67082.91	0.03		
35	67094.52[b]	0.05					67015.38	0.03							67033.37[b]	0.03		

表 S8。– 续表

	$^{q}R_{11ee}(J'')$		$^{r}R_{21ee}(J'')$		$^{s}R_{31ee}(J'')$		$^{p}Q_{11fe}(J'')$		$^{q}Q_{21fe}(J'')$		$^{r}Q_{31fe}$(总角动量量子数″)		$^{o}P_{11ee}$(总角动量量子数″)		$^{p}P_{21ee}$(总角动量量子数″)		$^{o}P_{31ee}$(总角动量量子数″)	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ))	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
36									67058.82	0.04					66981.19[b]	0.03		
37																		
38									66959.39	0.05								
39																		
40	66843.61	0.04																
41																	66803.29	0.05
42											66840.25	0.03					66748.72	0.03
43											66784.振动量子数	0.03						
44																		
45	66557.75	0.03																
…																		
49																	66318.53	0.04

[a] u(σ) 数值表示一个标准差，代表波数测量的校准误差和拟合误差的组合。仪器分辨率为 0.15 cm^{-1}。绝对校准不确定度为 0.025 cm^{-1}。波数测量的绝对准确度估计为 0.04 cm^{-1}。混合和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”表示。上标 *o, p, q, r,* 和 s 表示不包括自旋的总角动量变化。

表 S8 的替代文本：该表报告了已指认的$^{13}C^{18}O$ $d^{3}\Delta \leftarrow X^{1}\Sigma^{+}(7, 0)$ VUV-FT 吸收带各转动支中随总角动量量子数变化的波数及其不确定度。谱线标注说明了支类型、谱线混合以及信噪比较弱的特征。

表 S9. $^{-1}$（cm为单位）e态$^{3}\Sigma^{-}$ ← X态$^{1}\Sigma^{+}$(4, 0)碳^{13}碳^{18}氧[a]的 VUV-FT 吸收谱带波数。

	$^{q}R_{11ee}$		$^{s}R_{31ee}$		$^{q}Q_{21fe}$		$^{o}P_{11ee}$		$^{q}P_{31ee}$	
J''	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)	σ	u(σ)
0	67803.89[b]	0.03	67810.21[b]	0.04						
1	67802.57[b]	0.03	67813.33[b]	0.03						
2	67799.96[b]	0.03					67793.38	0.03	67799.70[b]	0.04
3	67796.09[b]	0.03							67795.86[b]	0.04
4							67775.51[b]	0.03		
5			67812.70[b]	0.04			67764.69[b]	0.03		
6			67809.38[b]	0.03			67752.45[b]	0.04		
7			67804.67[b]	0.03			67739.11[b]	0.03		
8			67798.64[b]	0.03			67724.37[b]	0.03		
9							67708.25[b]	0.07	67745.24[b]	0.03
10			67782.83[b]	0.03			67691.05[b]	0.03	67732.33[b]	0.03
11			67772.84[b]	0.04			67672.46[b]	0.03	67718.04[b]	0.04
12			67761.72[b]	0.03					67702.53[b]	0.03
13			67749.30[b]	0.03			67631.47[b]	0.05	67685.60[b]	0.04
14			67735.46[b]	0.03						
15			67720.42[b]	0.03					67648.09[b]	0.03
16			67704.12[b]	0.04						
...										
19			67647.56[b]	0.03						
...										
23	67452.69	0.03					67350.26[b]	0.04		
24							67316.07[b]	0.04		
25							67282.2[b]	0.1		
26	67335.34[b]	0.08								
27	67303.58[b]	0.05								
28									67278.39	0.03
29					67236.34[b]	0.03			67241.04[b]	0.03
30					67198.57	0.03			67203.51[b]	0.03
31			67295.13[b]	0.03	67159.75	0.03			67166.20[b]	0.03
32			67259.15[b]	0.04					67109.46	0.03
33			67221.28[b]	0.08	67070.68	0.04			67069.50[b]	0.04
34			67181.81[b]	0.03					67026.64[b]	0.07
...										
37									66887.93[b]	0.03
...										
39					66788.53[b]	0.05			66788.45[b]	0.06

[a] u(σ) 值表示一个标准差，代表波数测量的校准误差与拟合误差的组合。仪器分辨率为 0.15 cm^{-1}。绝对校准不确定度为 0.025 cm^{-1}。波数测量的绝对准确度估计为 0.04 cm^{-1}。混合线和/或弱谱线（信噪比 < 3）分别用上标“b”和/或“w”标示。上标*o*、*q*和*s*表示不包括自旋在内的总角动量发生变化。

表 S9 的替代文本：该表列出了已指认的 $^{13}C^{18}O$ $e^{3}\Sigma^{-}$ ← $X^{1}\Sigma^{+}$(4, 0) VUV-FT 吸收带各转动支中随总角动量量子数变化的波数及其不确定度。

上标标示支类型、混合特征和较弱的谱线。

基于上述互补的 Vis-FT 和 VUV-FT 实验方法，已对 $B^{1}\Sigma^{+}$–$A^{1}\Pi$、$C^{1}\Sigma^{+}$–$A^{1}\Pi$、$A^{1}\Pi$–$X^{1}\Sigma^{+}$、$a^{3}\Pi$–$X^{1}\Sigma^{+}$、$e^{3}\Sigma^{-}$–$X^{1}\Sigma^{+}$、$a'^{3}\Sigma^{+}$–$X^{1}\Sigma^{+}$、$d^{3}\Delta$–$X^{1}\Sigma^{+}$、$D^{1}\Delta$–$X^{1}\Sigma^{+}$、以及 $I^{1}\Sigma^{-}$–$X^{1}\Sigma^{+}$ 光谱进行了高质量分析，并已对 $^{13}C^{18}O$ $A^{1}\Pi(v = 2)$ 振动能级进行了完整的去微扰。

II. 实验项值

表 S10。 项值（单位：cm⁻¹）A态¹Π（振动量子数 = 2）能级的 ¹³碳¹⁸O。[a,b,c]

	A¹Π（振动量子数 = 2）							
J	F_{1e} （cm⁻¹）	¹Π （%）	³Π （%）	³Σ⁻ (%)	F_{1f} (cm⁻¹)	¹Π (%)	³Π (%)	³Σ⁻ (%)
1	67560.427(6)	99.9	4.4E-03	0.1	67560.426(6)	99.9	4.4E-03	9.4
2	67566.096(5)	99.9	4.6E-03	0.1	67566.104(4)	99.9	4.5E-03	9.5
3	67574.601(5)	99.9	4.8E-03	0.1	67574.597(4)	99.9	4.6E-03	9.6
4	67585.930(4)	99.9	5.1E-03	0.1	67585.929(4)	99.8	4.8E-03	9.8
5	67600.109(3)	99.9	5.5E-03	0.1	67600.093(4)	99.7	5.0E-03	0.1
6	67617.105(3)	99.9	6.0E-03	0.1	67617.078(4)	99.4	5.4E-03	0.1
7	67636.938(3)	99.9	6.8E-03	0.1	67636.835(4)	95.9	5.8E-03	0.1
8	67659.599(3)	99.9	7.8E-03	0.1	67659.744(4)	94.9	6.3E-03	0.1
9	67685.092(3)	99.8	9.2E-03	0.1	67685.153(4)	99.2	7.1E-03	0.1
10	67	99.8	1.1E-02	0.1	67713.454(4)	99.6	8.0E-03	0.1
11	67	99.8	1.4E-02	0.1	67744.591(3)	99.7	9.3E-03	0.1
12	67	99.8	1.8E-02	0.2	67778.554(4)	99.7	1.1E-02	0.1
13	67	99.8	2.6E-02	0.2	67815.342(4)	99.7	1.4E-02	0.2
14	67	99.7	4.6E-02	0.2	67854.948(3)	99.7	1.8E-02	0.2
15	67	99.7	6.6E-02	0.2	67897.372(4)	99.7	2.5E-02	0.2
16	67	99.6	7.7E-02	0.3	67942.607(3)	99.7	4.0E-02	0.2
17	67	99.5	0.2	0.3	67990.653(3)	99.6	7.7E-02	0.2
18	68	99.2	0.4	0.4	68041.502(3)	99.6	0.2	0.2
19	68	98.0	1.5	0.5	68095.150(3)	99.4	0.2	0.3
20	68	69.7	29.6	0.7	68151.573(4)	98.6	0.9	0.4
21	68	95.2	3.8	1.0	68210.944(4)	96.1	3.3	0.5
22	68	97.0	1.2	1.8	68272.867(4)	98.8	0.4	0.7
23	68	94.8	0.8	4.4	68337.609(4)	98.6	0.4	0.9
24	68	77.3	0.6	22.0	68405.062(4)	97.8	0.9	1.1
25	68	84.9	0.6	14.4	68475.097(4)	95.9	0.9	3.1
26	68	96.3	0.6	2.8	68547.313(4)	89.3	0.4	10.1
27	68	97.8	1.1	0.9	68619.598(4)	58.0	0.2	41.5
28	68	97.3	1.2	1.3	68707.712(4)	84.9	0.1	14.6
29	68	93.3	4.5	1.9	68787.757(4)	94.7	0.1	4.4
30	68	53.9	10.3	3.2	68871.720(4)	85.8	0.5	1.9
31	68	75.5	6.3	16.6	68959.354(4)	87.4	1.2	0.9
32	69	52.5	41.4	3.8	69048.400(4)	94.6	3.2	0.3
33	69	80.9	0.9	1.5	69140.141(5)	90.0	0.1	0.4
34	69	87.5	0.3	0.8	69237.410(5)	97.3	0.5	0.3
35	69	97.0	0.7	0.5	69334.607(5)	85.0	0.4	0.2
36	69	96.9	0.2	0.3	69434.322(5)	69.5	0.1	0.2
37	69	71.0	8.9E-02	0.2	69537.143(8)	96.0	4.3E-02	0.1
38	69	96.2	6.4E-02	0.2	69646.440(5)	98.9	1.1E-02	0.1
39	69	99.0	9.2E-02	0.1	69755.075(7)	99.5	5.6E-02	9.6
40	69	99.5	9.0E-02	0.1	69866.670(6)	99.7	8.8E-02	7.5
41	69	99.7	2.1E-02	7.8	69981.10(3)	99.8	2.6E-02	6.4
42	70	99.8	1.0E-02	6.5	70098.24(3)	99.8	9.8E-03	5.2
43	70	99.8	9.8E-03	5.5	70218.10(4)	90.0	6.7E-03	4.5
44	70	99.9	1.3E-02	4.6	70340.70(4)	99.9	5.7E-03	3.9
45					70465.89(4)	99.9	8.0E-03	3.4

[a]所有项值均以 ¹³C¹⁸O 中 X¹Σ⁺（*v* = 0, *J* = 0）能级为基准给出。[b]括号中的数字表示以末位有效数字为单位的随机（拟合）不确定度；[c]“¹Π ³Π ³Σ⁻ ¹³C¹⁸O ¹Π = 2 ³Π = 13 ³Σ⁻ = (%)”、“ (%)”和“ (%)”分别表示参与 A（*v* = 4）¹Π = 2 微扰的转振能级中，COA（*v*）、a（*v*）和 e（*v*）态字符所占的分数。

表 S10 的替代文本：该表列出了相对于 X¹Σ⁺(*v* = 0, *J* = 0) 的 ¹³C¹⁸O A¹Π(*v* =2) 能级的、依赖于*J* 的项值。表中还包括拟合不确定度，以及描述微扰诱导的混合的分数¹Π、³Π和³Σ⁻ 特征。

表 S11。 项值（单位：cm^{-1}）$d^3\Delta$（振动量子数 = 7）能级，位于 ^{13}碳^{18}O 中。[a,b,c]

	$d^3\Delta$（v = 7）							
J	F_{1e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{1f} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)
4	67929.54(4)	1.6E-09	5.5E-04	2.0E-09				
5	67939.73(6)	4.7E-09	9.7E-04	9.2				
6	67	1.1E-08	1.5			1.1E-08	1.5	
7	67	2.2E-08	2.2			2.4E-08	2.2	
8	67	4.1E-08	3.1			3.3E-08	3.1	
9	68	7.4E-08	4.2			6.8E-08	4.2	
10	68	1.3E-07	5.7			1.2E-07	5.7	
11	68	2.2E-07	7.5			2.0E-07	7.5	
12	68	3.6E-07	9.9			3.4E-07	1.0	
13	68	6.0E-07	1.3			5.5E-07	1.3	
14	68	1.0E-06	1.7E-02	7.0				
15	68	1.7E-06	1.9			1.5E-06	2.3	
16	68	3.0E-06	3.1			2.5E-06	3.1	
17	68	5.6E-06	4.4			4.3E-06	4.1	
18	68	1.2E-05	6.3			7.9E-06	4.5	
19								
20	68	4.5E-04	0.2	2.9E-03				
...								
27	68	6.1E-03	0.9	20.2				
...								
29					68813.06(5)	6.5E-02	21.4	1.1E-03
30	68	23.1	13.6	2.7	68868.49(2)	4.6	12.1	2.5E-03
31	68	0.2	3.7	4.2	68934.83(7)	0.2	3.7	2.2E-02
...								
35					69207.84(4)	0.6	22.8	2.4E-02
36	69	0.5	7.7	0.1				
...								
41	69	1.7E-03	12.5	1.6E-03				
...								
43	69	3.5E-04	0.8	3.7E-04				
...								
46	70	9.2E-05	0.6	3.9E-03				

J	F_{2e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{2f}	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (	$^3\Sigma^-$ (%)
2	67	1.1E-06	0.2	3.7E-07	67	1.1E-06	0.2	3.6E-07
3	67	2.9E-06	0.2	9.1E-07	67	2.9E-06	0.2	8.5E-07
4	67	5.4E-06	0.2	1.6E-06	67	5.4E-06	0.2	1.4E-06
5	67	8.7E-06	0.2	2.4E-06	67	8.8E-06	0.2	1.9E-06
6	67	1.3E-05	0.2	3.3E-06	67	1.3E-05	0.2	2.2E-06
7	68	1.9E-05	0.2	4.7E-06	68	1.9E-05	0.2	2.2E-06
8	68	2.6E-05	0.2	7.0E-06	68	2.2E-05	0.2	1.8E-06
9	68	3.5E-05	0.2	1.2E-05	68	3.3E-05	0.2	8.2E-07
10	68	4.6E-05	0.2	2.7E-05	68	4.4E-05	0.2	1.1E-08
11	68	6.1E-05	0.2	7.2E-05	68	5.9E-05	0.2	1.7E-06
12					68115.37(4)	7.7E-05	0.2	1.3E-05
13	68	1.1E-04	0.2	9.6E-04	68	1.0E-04	0.2	5.9E-05
14	68	1.4E-04	0.2	7.7E-03	68	1.3E-04	0.3	2.1E-04
15	68	1.9E-04	0.2	4.4E-02	68	1.8E-04	0.3	7.6E-04
16	68	2.7E-04	0.3	7.1E-03	68	2.4E-04	0.3	2.9E-03
17	68	3.9E-04	0.3	3.4E-03	68	3.2E-04	0.3	1.3E-02
18	68	6.1E-04	0.4	2.2E-03				
19	68	1.3E-03	0.5	1.5E-03	68	7.2E-04	0.4	9.0E-02
20	68	9.5E-03	0.5	4.7E-03				
21	68	3.1E-05	0.7	3.5E-02	68	1.4E-03	0.7	5.2E-02
...								
23	68	8.2E-05	0.9	0.8				
24	68	6.1E-04	16.7	0.7				
...								
28	68	7.05E-02	2.8	2.0				
29	68	0.4	9.4	0.9	68882.64(7)	0.1	17.8	4.5E-07
30	68	14.8	7.3	0.5				
31	69	0.1	1.9	1.6				
...								
34	69	2.9	17.4	2.6E-02				
35	69	1.1	24.3	1.1E-02				
36					69376.09(5)	1.3	4.4	3.8E-02
...								
38					69536.49(6)	1.0	0.4	2.9E-02

表 S11。– 续表

	$d^3\Delta$(振动量子数 = 7)							
J	F_{3e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{3f} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)
1 67		1.7E-02	9.1E-02	2.4			9.1E-02	2.4E-03
2 67		1.7E-02	9.1E-02	2.5			9.1E-02	2.5E-03
3 67		1.7E-02	9.2E-02	2.5			9.2E-02	2.5E-03
4 68		1.7E-02	9.3E-02	2.6			9.3E-02	2.6E-03
5 68		1.8E-02	9.4E-02	2.7			9.4E-02	2.7E-03
6 68		1.8E-02	9.6E-02	2.9			9.6E-02	2.9E-03
7 68		1.8E-02	9.8E-02	3.0			9.8E-02	3.0E-03
8 68		1.9E-02	0.1	3.3E-03	68		0.1	3.3E-03
9 68		2.0E-02	0.1	3.5E-03	68		0.1	3.5E-03
10 68		2.0E-02	0.1	3.9E-03	68		0.1	3.9E-03
11 68		2.1E-02	0.1	4.4E-03	68		0.1	4.4E-03
12 68		2.2E-02	0.1	5.2E-03				
13 68		2.3E-02	0.1	6.6E-03	68		0.1	5.9E-03
14 68		2.5E-02	0.1	1.1E-02	68		0.1	7.1E-03
15 68		2.6E-02	0.1	4.8E-03	68		0.1	9.2E-03
16 68		2.9E-02	0.1	4.2E-03	68		0.1	1.3E-02
17 68		3.1E-02	0.1	6.0E-03	68		0.1	2.1E-02
18 68		3.6E-02	0.2	7.9E-03	68		0.1	4.1E-02
19 68		4.4E-02	0.2	9.8E-03	68		0.2	4.0E-04
20 68		8.3E-02	0.1	1.0E-02	68		0.2	1.4E-03
21 68		2.2E-02	0.2	3.4E-02	68		0.2	5.5E-03
22 68		3.1E-02	0.2	3.9E-02	68		0.2	1.2E-02
23 68		3.4E-02	0.2	3.1E-02	68		0.2	2.6E-02
24 68		1.8E-02	1.3	8.3E-02				
25 68		0.1	1.1	9.2E-02				
26 68		0.1	1.0	0.5				
...								
31 69		0.4	1.5	0.1				
...								
38 69		2.4	2.3	9.1E-02				
...								
40 69		0.3	21.0	1.1E-02				
41 69		0.2	14.9	3.0E-03				
42					69977.82(4)	0.1	3.5	1.6E-02
43					70070.96(4)	8.3	1.1	2.0E-02
...								
48 70		2.5E-02	1.5	0.6				

[a]所有项值均以{10}C{11}O中$X^1\Sigma^+$（$v = 0$, $J = 0$）能级为基准给出。[b]括号中的数字是不确定度，表示以末位有效数字为单位的随机（拟合）不确定度。[c]“$^1\Pi$ (%)”、“$^3\Pi$ (%)”和“$^3\Sigma^-$ (%)”分别表示微扰所涉及的转振能级中$d^3\Delta$（$v = 7$）的$^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi$（$v = 2$）、$a^3\Pi$（$v = 13$）和$e^3\Sigma^-$（$v = 4$）分的分数。

表 S11 的替代文本： 该表报告以 $X^1\Sigma^+$(振动量子数 = 0, 总角动量量子数 = 0) 为参照的^{13}碳^{18}一氧化碳 $d^3\Delta$(振动量子数 = 7) 能级的随总角动量量子数变化的项值。表中还包括与 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 微扰相关的拟合不确定度和分数电子态成分。

表 S12. a⁻¹′态的项值（单位：cm⁻¹），振动量子数 $^3\Sigma^+$（振动量子数 = 12）能级，位于 ^{13}碳^{18}O。[a,b,c]

	a′³Σ⁺（振动量子数 = 12）											
J	F_{1f} (cm⁻¹)	¹Π (%)			F_{2e} (cm⁻¹)	¹Π (%)			F_{3f} (cm⁻¹)	¹Π (%)		
1					67992.62(4)	6.2E				3.1E-07	1.5	
2	6	6.3E-03	9.0									
3	6	6.3E-03	9.1							2.0E-06	1.5	
4	6	6.4E-03	9.2									
5	6	6.5E-03	9.4									
6	6	6.7E-03	9.6									
7	6	6.6E-03	9.8			6.9E-03	9.9					
8	6	6.7E-03	1.0									
9	6	7.3E-03	1.0									
10	68	7.6E-03	1.1							2.1E-05	1.8	
11	68	8.0E-03	1.1							2.9E-05	1.8	
12	68	8.4E-03	1.2									
13	68	8.9E-03	1.2									
14	68	9.4E-03	1.3									
15					68239.28(3)	1.0E						
16	68	1.1E-02	1.4									
17	68	1.2E-02	1.4									
18	68	1.3E-02	1.3							2.2E-04	2.8	
19	68	1.5E-02	2.1									
20					68425.48(5)	1.3E						
21					68468.90(7)	1.6E				1.5E-04	1.5	
22					68514.25(4)	1.9E-02	3.3					
23					68561.78(7)	2.1E						
...												
30					68951.10(4)	0.2	0.1	3.6E-02				
31	68	4.6	2.1E-02	1.0		0.3	0.1	7.0E-02				
32	69	0.1	5.8E-02	1.4		11.8	0.8	2.9E-02				
33	69	8.0E-03	0.4	1.0E-02	69	2.6	0.1	1.7E-02				
34	69	1.2E-02	0.2	6.0E-03								
...												
36	69	5.6	0.6	3.8E-03								
37	69	0.7	0.2	3.9E-03	69					0.5	0.2	2.8E-03
38	69	0.2	9.5	4.5E-03								
...												
40					69678.07(4)	3.2E-02	0.2	0.1				
...												
42					69847.49(4)	1.8E-02	1.0					
...												
49									70604.11(4)	2.2E-04	3.5	

[a] 所有项值均以^{13}C^{18}O中X¹Σ⁺（v = 0, J = 0）能级为参照。[b] 括号中的数字表示以末位有效数字为单位的随机（拟合）不确定度。[c] “¹Π (%)”、“³Π (%)”和“³Σ⁻ (%)”分别表示参与微扰的转振能级中a′³Σ⁺（v = 12）、^{13}C^{18}O A¹Π（v = 2）、a³Π（v = 13）和e³Σ⁻（v = 4）成分的分数。

表 S12 的替代文本： 该表列出以 X¹Σ⁺(振动量子数 = 0, 总角动量量子数 = 0) 为参照的 ^{13}碳^{18}一氧化碳 a′³Σ⁺能级随总角动量量子数变化的项值。表中给出了拟合不确定度，以及 ¹Π、³Π 和 ³Σ⁻ 的分数成分。

表 S13。 项值（单位：cm^{-1}）的 $e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 4）能级，属于 ^{13}碳^{18}O。[a,b,c]

	$e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 4)											
J	F_{1e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{2f} (厘米$^{-1}$)	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{3e} (厘米$^{-1}$)	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)
1	6	9.7E-02	0.6	99.3					67810.20(3)	1.7E-05	0.7	99.3
2	6	9.8E-02	0.6	99.3					67816.82(3)	5.1E-05	0.7	99.3
3	67810.44(3)	9.9E-02	0.6	99.3								
4	67817.06(3)	0.1	0.6	99.3								
5	67825.79(4)	0.1	0.7	99.2								
6	6	0.1	0.7	99.2					67865.09(4)	4.4E-04	0.8	99.2
7	6	0.1	0.7	99.1					67882.72(4)	6.4E-04	0.8	99.2
8	6	0.1	0.8	99.1					67902.41(3)	9.1E-04	0.8	99.2
9	6	0.1	0.9	99.0					67924.36(3)	1.3E-03	0.9	99.1
10	6	0.1	1.0	98.9					67948.48(4)	1.8E-03	0.9	99.1
11									67974.86(3)	2.5E-03	1.0	99.0
12	6	0.2	1.5	98.4					68003.28(3)	3.5E-03	1.1	98.9
13									68034.03(4)	5.0E-03	1.4	98.6
14									68066.96(3)	7.3E-03	3.1	96.9
15									68101.99(4)	1.1E-02	14.3	85.7
16									68139.26(4)	1.7E-02	4.1	95.9
17									68178.77(4)	2.9E-02	3.4	96.6
...												
20									68310.46(4)	1.2	9.1	89.7
...												
22	68312.74(5)	1.0	12.9	86.1								
23	68362.10(5)	2.4	29.8	67.8								
24	6	10.3	15.5	72.4								
25	68465.30(2)	4.7	16.8	76.8								
26					68570.81(2)	9.9	6.9	53.4				
27	6	1.1E-02	24.1	60.0	68634.504(7)	39.6	4.6	81.4	68693.15(4)	1.8	19.1	62.3
28	6	0.1	17.4	77.8	68686.80(2)	13.7	4.2	91.0	68756.60(4)	1.8	12.9	80.1
29					68751.90(4)	4.2	7.1	90.9	68823.31(4)	3.0	9.3	81.6
30					68818.37(4)	1.2	16.7	82.4	68893.68(4)	1.9	17.0	74.7
31					68887.22(4)	0.8	49.8	49.4	68948.02(2)	1.5	18.5	79.3
32									69022.61(3)	0.9	8.3	90.7
33					69023.80(5)	0.4	15.9	83.6	69097.73(4)	0.5	4.2	95.1
34									69174.4(1)	0.3	1.9	97.1
35									69252.89(4)	0.1	1.4	98.2
36									69333.41(4)	6.3E-02	0.9	98.8
37												
38									69500.57(7)	1.6E-02	1.7	98.2
39					69500.66(6)	8.7E-02	0.6	99.2				

[a]所有项值均相对于 $^{13}C^{18}O$ 中 $X^1\Sigma^+$(振动量子数 = 0, 总角动量量子数 = 0) 能级给出。[b]括号中的数字表示以末位有效数字为单位的随机（拟合）不确定度。[c]“$^1\Pi$ (%)”、“$^3\Pi$ (%)”和“$^3\Sigma^-$ (%)”分别表示参与 $e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 4) 微扰的转振能级中，$^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi$(振动量子数 = 2)、$a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 和 e^-(振动量子数 = 4) 的分数态成分。

表 S13 的替代文本：该表报告了以 $X^1\Sigma^+$(v = 0，J = 0) 为参考的$^{13}C^{18}O$ $e^3\Sigma^-$(v = 4) 能级的依赖于J的项值。其中包括拟合不确定度，以及参与 $A^1\Pi$(v = 2) 微扰的分数态成分。

表 S14。 项值（单位：cm^{-1}）的 $D^1\Delta$(振动量子数 = 3）能级，位于 ^{13}碳^{18}O。[a,b,c]

J	$D^1\Delta$(振动量子数 = 3)							
	F_{1e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{1f} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)
5					68410.9(4)	2.7E-06 3.9		
6					68424.0(6)	3.8E-06 4.(		
7					68439.2(2)	4.8E-06 4.(		
8					68456.6(3)	6.9E-06 4.(		
9	68476.2(3)	8.6E-06 4.1			68476.2(3)	8.9E-06 4.1		
10	68	1.1E-05 4.1			68497.9(2)	1.1E-05 4.1		
11	68	1.3E-05 4.2			68521.9(2)	1.3E-05 4.2		
12	68	1.5E-05 4.3			68547.9(3)	1.6E-05 4.3		
13	68	1.8E-05 4.3			68576.21(8)	1.9E-05 4.3		
14	68	2.1E-05 4.3			68606.7(2)	2.2E-05 4.4		
15	68	2.3E-05 3.8			68639.3(2)	2.5E-05 4.5		
16	68	2.5E-05 4.(			68674.0(2)	2.8E-05 4.(		
17	68	2.6E-05 4.7			68711.0(2)	3.1E-05 4.5		
18	68	2.2E-05 4.9			68750.0(1)	3.3E-05 3.8		
19	68	7.7E-06 5.(			68791.2(2)	3.1E-05 4.1		
20	68	2.3E-04 5.1			68834.6(2)	1.2E-05 4.7		
21	68	3.0E-04 5.1			68880.1(3)	2.6E-04 5.(		
22	68	2.3E-04 5.(			68927.9(3)	1.2E-04 5.2		
23	68	2.8E-04 3.(			68977.6(4)	1.1E-04 5.1		
...								
45	7(	5.1E-03	0.5	1.1E-05				
...								
50					71121.3(3)	1.1	15.6	6.7E-06

[a]所有项值均以 $^{13}C^{18}O$ 中 $X^1\Sigma^+$(v = 0, 总角动量量子数 = 0) 能级为基准。[b]括号中的数字表示随机（拟合）不确定度，单位为末位有效数字。[c]“$^1\Pi$ (%)”、“$^3\Pi$ (%)”和“$^3\Sigma^-$ (%)”分别表示参与 $D^1\Delta(v = 3)$ 微扰的转振能级中，$^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi(v$ 2)、$a^3\Pi(v = 13)$ 和 $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 态的分数占比。

表 S14 的替代文本：该表列出了以 $X^1\Sigma^+(v = 0, J = 0)$ 为参考的 $^{13}C^{18}O$ $D^1\Delta(v =3)$ 能级的依赖于J的项值。其中包括拟合不确定度，以及与 $A^1\Pi(v = 2)$ 相互作用的能级的分数态特征信息。

表 S15. a态的项值（单位：cm^{-1}），$a^3\Pi$(振动量子数 = 13）能级，位于 ^{13}碳^{18}O。[a,b,c]

	$a^3\Pi$（振动量子数 = 13）							
J	F_{1e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)	F_{1f} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)
20 6		16.8	73.0	10.2				
21								
22 6		1.2	93.1	5.7				
…								
24					68381.18(6)	0.2	90.8	6.5
…								
27 6		4.3E-03	76.8	23.1	68576.8(1)	2.1	93.0	3.7
28 6		8.9E-02	83.0	16.3				
29 6		0.6	78.3	14.8				
…								
32					68948.76(5)	0.9	68.4	5.0
33 6			91.2	3.5				
…								
44 7			99.1	0.4				
…								
47 7			89.1	0.3				
J	F_{2e} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (			$^1\Pi$ (%)	^{3}	
30 6			88.5	7.7	68885.56(5)	0.4	97.2	0.9
…								
32 6		6.6	85.2	4.8	69046.72(4)	0.3	78.3	17.7
33					69131.58(4)	5.8	78.6	8.6
总角		$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (			$^1\Pi$ (%)	^{3}	
32					69135.74(4)	1.0	89.5	4.1
33					69221.6(2)	0.2	82.9	2.0
34					69319.90(4)	0.5	75.3	0.8
…								
43 7		7.7E-03	98.5	2.7E-02				
…								
47					70718.15(8)	1.2	96.4	1.1E-02

[a]所有项值均以$^{13}C^{18}O$中的$X^1\Sigma^+$（振动量子数 = 0，总角动量量子数 = 0）能级为基准给出。[b]括号中的数字是不确定度，单位为末位有效数字。[c]“ $^1\Pi$ $^3\Pi$ $^3\Sigma^-$ ^{13} ^{18} $^1\Pi$ = 2 $^3\Pi$ = (%)”、“ (%)” 13 $^3\Sigma^-$ = 4 和“ (%)”分别表示参与$a^3\Pi$（振动量子数 = 13）微扰的转振能级中C O A（振动量子数 ）、a（振动量子数 ）和e（振动量子数 ）字符的分数。

表 S15 的替代文本：该表列出了 $^{13}C^{18}O$ $a^3\Pi$(v = 13) 能级依赖于J的项值，参考能级为 $X^1\Sigma^+$ (v = 0, J = 0)。表中还包括拟合不确定度，以及用于量化微扰诱导混合的 $^1\Pi$、$^3\Pi$ 和 $^3\Sigma^-$ 分数态成分。

表 S16. 项值（单位：cm^{-1}）的 I态$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 3）能级，属于 ^{13}碳^{18}O。[a,b,c]

J	$I^1\Sigma^-$ (振动量子数 = 3)			
	F_{1f} (cm^{-1})	$^1\Pi$ (%)	$^3\Pi$ (%)	$^3\Sigma^-$ (%)
7	67639.57(2)	3.9	1.9	1.3E-05
8	67656.95(2)	4.9	1.8	1.9E-05
9	67676.85(3)	0.7	1.6	2.7E-05
...				
18	67953.74(6)	2.5E-02	0.6	4.0E-03
19	67995.39(4)	2.5E-02	0.6	8.2E-04
20	68039.21(4)	3.2E-02	0.5	6.0E-05
21	68085.20(4)	5.5E-05	0.5	4.4E-05
22	68133.35(5)	6.1E-03	0.4	5.0E-04
23	68183.66(5)	6.8E-03	0.4	2.3E-03
24	68236.15(9)	6.1E-03	0.3	9.5E-03
25	68290.77(7)	4.9E-03	0.2	4.1E-02

[a]所有项值均相对于 $^1\Sigma^+C^{18}O$ 中的 $X^1\Sigma^+(v = 0, J = 0)$ 能级给出。[b]括号中的数字是以末位有效数字为单位的随机（拟合）不确定度[c] “$^1\Pi$ (%)”、“$^3\Pi$ (%)”和“$^3\Sigma^-$ (%)”分别表示参与 $I^1\Sigma^-(v = 3)$ 微扰的转振能级中，$^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi(v = 2)$、$a^3\Pi(v = 13)$ 和 $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 态的分[illegible]态成分。

表 S16 的替代文本： 该表列出了相对于 $X^1\Sigma^+$(振动量子数 = 0, 总角动量量子数 = 0)的 $^{13}C^{18}O$ $I^1\Sigma^-$(振动量子数 =3) 能级的、依赖于总角动量量子数的项值。表中还包括拟合不确定度，以及与涉及 $A^1\Pi$(振动量子数 {v21) 的间接微扰路径相关的分数电子态成分。

2).

III. 本次去微扰分析的详细内容

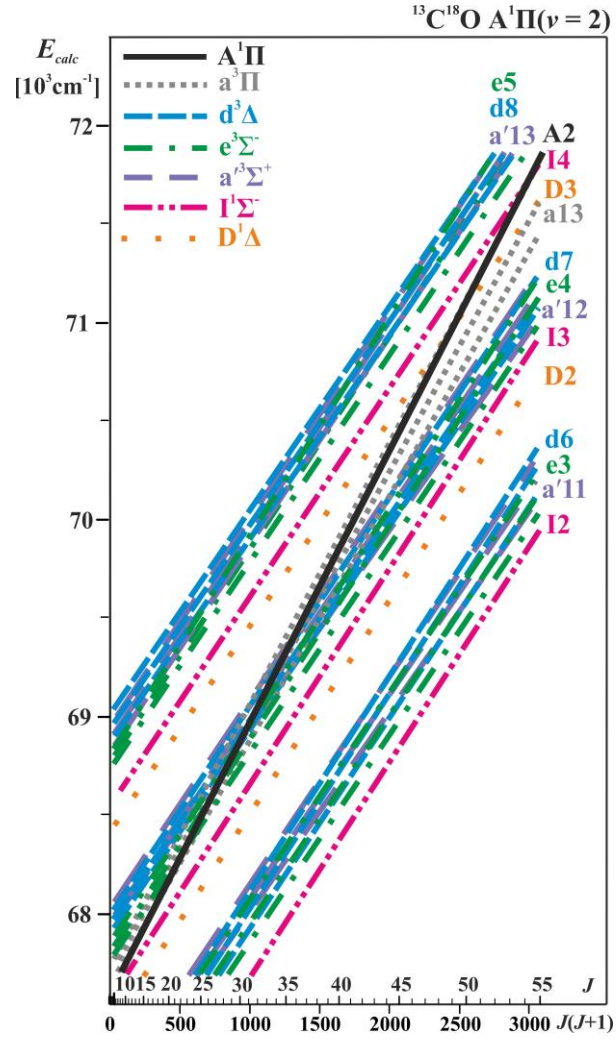


图 S1. 在 67,500–72,000 cm^{-1} 区间内，$^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi(v = 2)$ 能级附近的转动振电子项系列。每个项系列上端的符号表示电子态及该电子态的振动量子数。显然，通过微扰，所有预测为接近 $A^1\Pi(v = 2)$ 的电子态的跃迁，都可能在光谱中呈现为可检测的特征。

图 S1 的替代文本： 图中展示了 67,500–72,000 cm^{-1} 范围内 $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 能级附近的转动振电子项系列。图示表明，若干相邻电子态可通过微扰获得足够的 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 成分，从而成为可检测的光谱特征。

表 S17. $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi$(振动量子数 = 2)能级去微扰分析中所考察的所有态间相互作用的描述。

N[o]	相互作用			相互作用的性质	$v_i\|v_j$ [a] or $v_i\|\mathbf{B(R)}\|v_j$[b]	考虑 into 状态[c]	状态	注释[d]
1	A态$^1\Pi$(振动量子数 = 2)	~	e态$^3\Sigma^-$(振动量子数 = 3)	自旋-轨道	0.282[a]	No	-	未检测到。
2	-||-	~	$e^3\Sigma^-$（振动量子数 = 4）	-||-	−0.304[a]	Yes	拟合	-
3	-||-	~	$e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 5)	-||-	0.216[a]	No	-	未检测到。
4	-||-	~	$d^3\Delta$(振动量子数 = 6)	-||-	0.050[a]	No	-	未检测到。
5	-||-	~	$d^3\Delta$(振动量子数 = 7)	-||-	−0.165[a]	Yes	拟合	-
6	-||-	~	$d^3\Delta$(振动量子数 = 8)	-||-	0.233[a]	No	-	未检测到。
7	-||-	~	$a'^3\Sigma^+$(振动量子数 = 11)	-||-	−0.200[a]	No	-	未检测到。
8	-||-	~	$a'^3\Sigma^+$(振动量子数 = 12)	-||-	0.163[a]	Yes	拟合	-
9	-||-	~	$a'^3\Sigma^+$(振动量子数 = 13)	-||-	−0.130[a]	No	-	未检测到。
10	-||-	~	I态$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 2)	转动-电子（**L**-解耦)	−0.014[b]	No	-	未检测到。
11	-||-	~	I态$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 3)	-||-	0.303[b]	Yes	拟合	-
12	-||-	~	I态$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 4)	-||-	−0.405[b]	Yes	固定	已检测到。具有统计学依据。该反交叉位于实验范围之外。没有额外谱线源自 I(4)。因此，拟合数值与预测值或可靠值相差甚远。
13	-||-	~	$I^1\Sigma^-$(振动量子数 = 5)	-||-	0.349[b]	No	-	未检测到。
14	-||-	~	$D^1\Delta$(振动量子数 = 2)	-||-	0.067[b]	No	-	未检测到。
15	-||-	~	$D^1\Delta$(振动量子数 = 3)	-||-	0.235[b]	Yes	固定	已检测到。拟合结果发散。
16	-||-	~	$D^1\Delta$(振动量子数 = 4)	-||-	−0.381[b]	No	-	未检测到。
17	$a^3\Pi$(振动量子数 = 13)	~	$e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 3)	自旋-轨道 / 自旋-电子转动-电子（**L**-解耦）	0.228[a]	No	-	未检测到。
18	-||-	~	-||-		0.197[b]	No	-	未检测到。
19	-||-	~	$e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 4)	自旋-轨道 / 自旋-电子转动-电子（**L**-解耦）	0.395[a]	Yes	拟合	-
20	-||-	~	-||-		0.353[b]	Yes	拟合	-
21	-||-	~	$e^3\Sigma^-$(振动量子数 = 5)	自旋-轨道 / 自旋-电子转动 电子（**L**-解耦）	0.294[a]	No	-	未检测到。
22	-||-	~	-||-		0.271[b]	No	-	未检测到。
23	-||-	~	d态$^3\Delta$（振动量子数 = 7）	自旋-轨道 / 自旋-电子转动-电子（**L**-解耦）	−0.257[a]	Yes	拟合	-
24	-||-	~	-||-		−0.253[b]	Yes	拟合	-
25	-||-	~	$a'^3\Sigma^+$(振动量子数 = 11)	自旋-轨道 / 自旋-电子转动-电子（**L**-解耦）	−0.167[a]	No	-	未检测到。
26	-||-	~	-||-		−0.187[b]	No	-	未检测到。
27	-||-	~	$a'^3\Sigma^+$(振动量子数 = 12)	自旋-轨道 / 自旋-电子转动-电子（**L**-解耦）	−0.057[a]	Yes	拟合	-
28	-||-	~	-||-		−0.065[b]	Yes	拟合	-
29	-||-	~	$a'^3\Sigma^+$（振动量子数 = 13）	自旋-轨道 / 自旋-电子转动-电子（**L**-解耦）	0.196[a]	No	-	未检测到。
30	-||-	~	-||-		0。232[b]	No	-	未检测到。

31	-||-	~	$I^1\Sigma^-$(振动量子数 = 2)	自旋-轨道	0.108[a]	No	-	未检测到。
32	-||-	~	$I^1\Sigma^-$(振动量子数 = 3)	-||-	0.281[a]	Yes	固定	已检测到。拟合结果发散。
33	-||-	~	I态$^1\Sigma^-$(振动量子数 = 4)	-||-	0.401[a]	Yes	固定	已检测到。拟合结果发散。
34	-||-	~	$D^1\Delta$(振动量子数 = 2)	-||-	0.143[a]	No	-	未检测到。
35	-||-	~	$D^1\Delta$(振动量子数 = 3)	-||-	0.325[a]	Yes	固定	已检测到。拟合结果发散。

[a] 振动重叠积分 $v_i|v_j$，按文献所述方法计算。[11,12] [b] 转动算符积分 $\langle v_i|\mathbf{B}(\mathbf{R})|v_j\rangle$，单位为 cm^{-1}，按文献所述方法计算。[11,12c] 在最终拟合中。[d]参数的显著性按照我们先前工作的表8脚注中的详细说明进行了检验。[7]

表 S17 的替代文本：该表汇总了在对 $^{13}C^{18}O$ $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 能级进行去微扰分析时检验的所有态间相互作用，包括振动重叠积分和转动算符积分、拟合参数及其在最终模型中的统计显著性。

III.1. 态内 $^3\Pi$ 和 $^3\Sigma^-$ 相互作用

态内 a($^3\Pi_1 \sim {}^3\Pi_0$, $^3\Pi_1 \sim {}^3\Pi_2$) 和 e$^3\Sigma^-$($F_{1e} \sim F_{3e}$) **S-**解耦相互作用的大小，通过参与间接微扰的各态特征之间的相互混合程度量化，展示于图 S2 和 S3。

图 S2 中，a$^3\Pi$(振动量子数 = 13, F_2, $|\Omega| = 1$)态中借得相当多的特征，在更高的总角动量量子数下甚至更多（最高达 47%）。在总角动量量子数 = 19附近，$^3\Pi$ 态的三个分量具有相似的$^3\Pi_1$ 含量，这是从洪德情形 (a)向洪德情形 (b)转变的结果。随着总角动量量子数增加，$^3\Pi_1$ 分量逐渐成为$^3\Pi_2$ 和$^3\Pi_0$的线性组合，而标称$^3\Pi_1$ 态的特征进一步减弱，在总角动量量子数 = 38以上降至 10% 以下。CO分子中 a$^3\Pi$ 态的Ω分量之间的**S**解耦相互作用已广为人知[52]。Mosyagin等人[53] 给出了以下公式：

$$\langle {}^3\Pi_0|\mathbf{H}|{}^3\Pi_1\rangle = -B\sqrt{2X}, \tag{1}$$

$$\langle {}^3\Pi_1|\mathbf{H}|{}^3\Pi_2\rangle = -B\sqrt{2(X-2)}, \tag{2}$$

其中 $X = J'(J'+1)$ 和 $B(R) = \hbar\frac{2}{2\mu R^2}$。

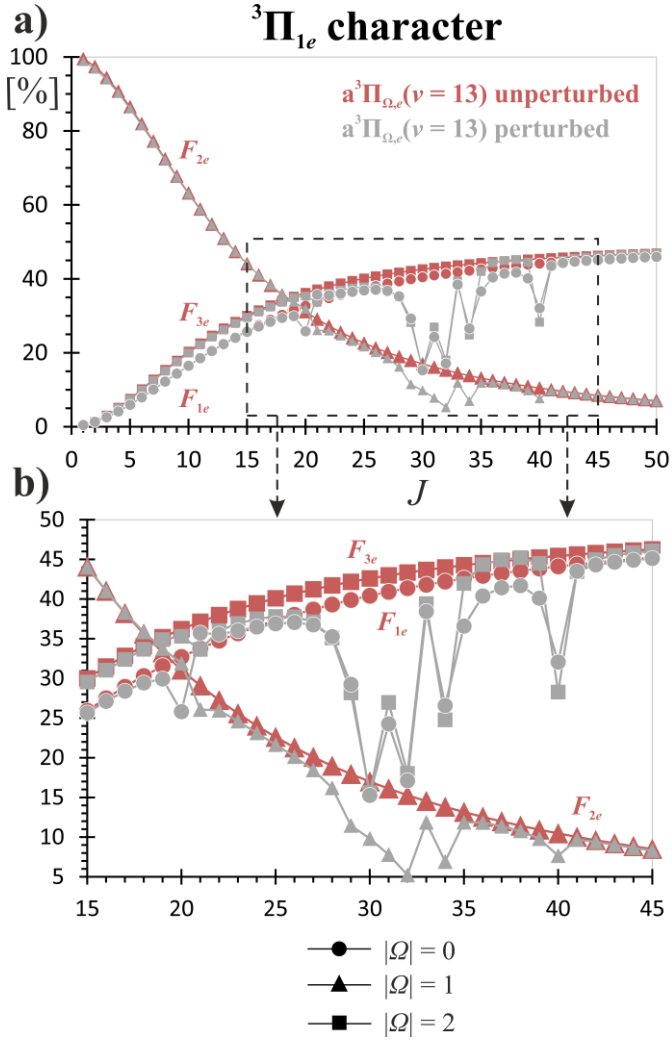


图 S2。 (a) $^3\Pi_{1e}$ 一氧化碳 $a^3\Pi(v = 13)$ 能级的三个*e*-宇称自旋分量的分数[13]特征。(b) 图 (a) 中最相关区域（J = 15-45）的放大图。$|\Omega|$ 标记对应于假设 $a^3\Pi$ 态的自旋分量之间不存在相互作用的情况。

图注 图 S2： 图中显示了一氧化碳中 $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 能级三个*e*宇称自旋分量的 $^3\Pi_{1e}$ 组分占比。对于总角动量量子数 > 2，所有分量都具有 $^3\Pi_{1e}$ 组分，这决定了间接 $a^3\Pi$(振动量子数 = 13) 与 $A^1\Pi$(振动量子数 = 2) 相互作用的强度，以及一氧化碳中间接微扰路径之间的干涉。

接下来，在图 S3 还揭示了更为重要的一点，即两个**S**-解耦混合中，$|\Omega|$ = 0 和 1 特征几乎各占 50%，分别对应两个*e*-对称分量 F_{1e}和F_{3e}，它们属于 $e^3\Sigma^-$ 态。这意味着，e*e*态的两个$^3\Sigma^-$-对称基态由 25%（Ω = +1）、25%（Ω = –1）和 50%（Ω = 0）混合而成。

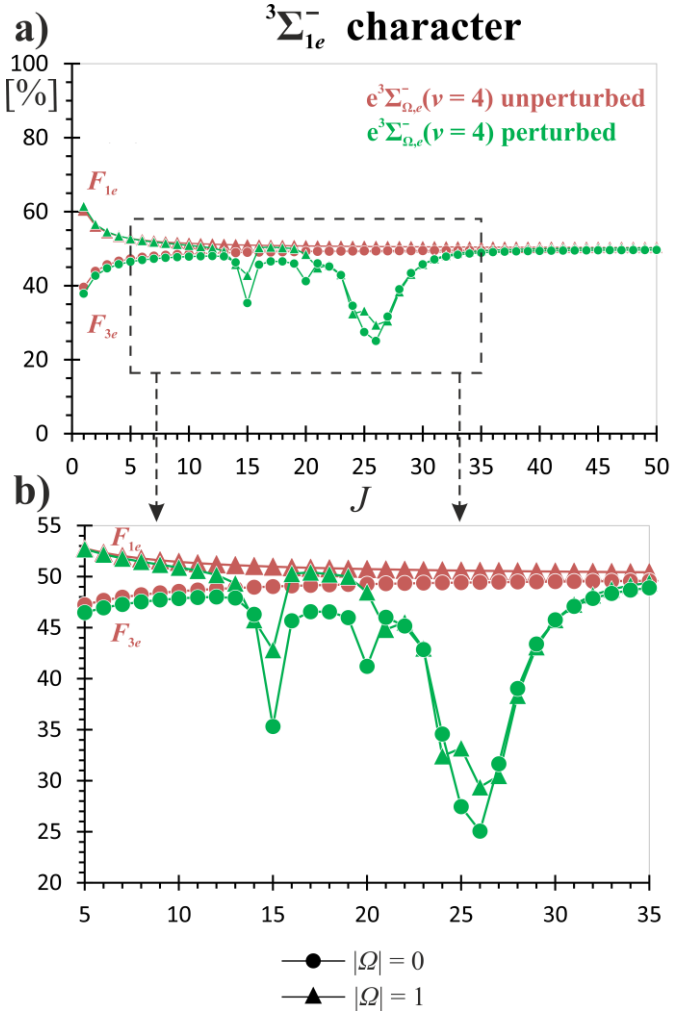


图 S3. (a) 一氧化碳 e态（振动量子数 = 4）能级中，e 奇偶性自旋分量F_{1e} 和F_{3e} 的 $^3\boldsymbol{\Sigma^-_{1e}}$ 特征分数。(b) 图 (a) 中最相关区域总角动量量子数 = 5–35 的放大图。|Ω|标记仅为示意性标签，因为 $e^3\Sigma^-$ 的F_1, F_2, 和F_3 分量更准确地说是 Hund 情形 (b) 自旋-转动分量，而非纯 Ω 分量。

替代文本： 图 S3：图中显示了 $^3\Sigma^-_{1e}$ 特征在 $^{13}C^{18}O$ $e^3\Sigma^-$（振动量子数 = 4）的 *e*-宇称自旋-转动分量中的比例。F_{3e} 中强烈的 $^3\Sigma^-_{1e}$ 混合成分决定了间接 $a^3\Pi$（振动量子数 = 13）~ $A^1\Pi$（振动量子数 = 2）相互作用的强度，以及一氧化碳 $^{13}C^{18}O$ 中间接微扰路径之间的干涉。

图 S2 显示，对于 J > 2，$^3\Pi$ 态的所有 F_{1e}、F_{2e} 和 F_{3e} 分量都具有 $^3\Pi_{1e}$特征；而图 S3 显示，在整个转动能级 J 范围内，$e^3\Sigma^-(F_{3e})$分量都表现出很强的 $^3\Sigma^-_{1e}$特征混合成分。这些特征决定了 $a^3\Pi$(v = 13) 与 $A^1\Pi$(v = 2) 之间间接微扰的强度，以及一氧化碳中各间接微扰路径之间的干涉（详情见表 II）。

III.2. 间接微扰路径之间干涉的分析方法

通过将一氧化碳中连接初始 $A^1\Pi(v = 2)$ 基态与最终 $a^3\Pi(v = 13)$ 基态的 $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 和 $a^3\Pi(v = 13)$ 能级分解为多重态分量（F_1, 、F_2, 和 F_3），并将表示分量间相互作用的显式形式纳入修正模型，详细研究了多个中间基态路径（见表 II）之间干涉的存在与性质。正如 Western 在 PGOPHER 程序中所展示的，标准转动哈密顿量完全可以用对角微扰表示。其中定义的特定因子使这一处理成为可能。这种方法不仅可用于生成分子常数的另一种表示方式，从而完整描述给定电子态的多重态分量之间的相互作用机制，还可用于引入其他项，例如高阶离心畸变项或 Λ 倍增项。

将 $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 能级划分为 F_{1e}、F_{2f} 和 F_{3e} 分量。其有效转动哈密顿量

$$\mathbf{H}_{\mathrm{rot}} = T + BN^2 - DN^4 + HN^6 + \gamma\,\mathbf{N}\cdot\mathbf{S} + \tfrac{2}{3}\lambda(3S_z^2 - S^2), \tag{3}$$

随后，通过在分离后的各分量之间显式引入相应的相互作用，重构了矩阵元，详见 表 S18。在 PGOPHER 的实现中，$F_{1e} \sim F_{3e}$ $e^3\Sigma^-(v = 4)$ 内的态内相互作用通过以下微扰项表示

$$B\,\langle e^3\Sigma^-(v = 4, F_{1e})|N^2|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{3e})\rangle, \tag{4}$$

$$-D\,\langle e^3\Sigma^-(v = 4, F_{1e})|N^4|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{3e})\rangle, \tag{5}$$

$$H\,\langle e^3\Sigma^-(v = 4, F_{1e})|N^6|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{3e})\rangle, \tag{6}$$

and

$$\gamma\,\langle e^3\Sigma^-(v = 4, F_{1e})|\mathbf{N}\cdot\mathbf{S}|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{3e})\rangle. \tag{7}$$

然而，在最终计算中，自旋-转动相互作用被设为零，因为文献中没有可用于 γ $e^3\Sigma^-$ 的数值，而在本次去微扰分析中尝试确定该数值时，要么得到统计上不显著的结果，要么与$a^3\Pi(v = 13)$的分子常数（尤其是A和D）存在强相关。反过来，自旋-自旋项仅对分离的$e^3\Sigma^-(v = 4)$分量的对角结构有贡献，并不贡献于$F_{1e} \sim F_{3e}$ 相互作用。此外，$A^1\Pi(v = 2)$与各个独立$e^3\Sigma^-(v = 4)$分量之间的态间相互作用被引入为

$$\langle A^1\Pi(v = 2)|\mathbf{H}^{\mathrm{SO}}|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{1e})\rangle, \tag{8}$$

$$\langle A^1\Pi(v = 2)|\mathbf{H}^{\mathrm{SO}}|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{2f})\rangle, \tag{9}$$

and

$$\langle A^1\Pi(v = 2)|\mathbf{H}^{\mathrm{SO}}|e^3\Sigma^-(v = 4, F_{3e})\rangle. \tag{10}$$

表 S18。 $e^3\Sigma^-$ 态的有效哈密顿量矩阵元。[a]

$e^3\Sigma^-$	F_{1e}	F_{2f}	F_{3e}
F_{1e}	$T_v + Bx - D(x^2+4x) + H(x^3+12x^2+8x) + \frac{2}{3}\lambda - \gamma$		$-2B\sqrt{x} + 4D(x+1)\sqrt{x} - 2H(3x^2+10x+4)\sqrt{x} + \gamma\sqrt{x}$
F_{2f}		$T_v + Bx - Dx^2 + Hx^3 + \frac{2}{3}\lambda - \gamma$	
F_{3e}			$T_v + B(x+2) - D(x^2+8x+4) + H(x^3+18x^2+28x+8) - \frac{4}{3}\lambda - 2\gamma$

[a] $x = J(J+1)$；矩阵是对称的，因此哈密顿量中未显示的左侧非对角元等同于右侧非对角元；T_v – 表示相对于 $X^1\Sigma^+(v=0)$ 能级的无旋转能量；基函数缩写为 F_{1e}、F_{2f}、F_{3e}。

替代文本： 表 S18： $e^3\Sigma^-$态有效哈密顿量的矩阵元表，按F_{1e}、F_{2f}和F_{3e}分量排列。对角元包含项能量和转动贡献，而非对角元表示自旋分量之间的耦合。

对于 $a^3\Pi(v=13)$ 能级，采用了更明确的分量分辨构造。这里将该态分为 $F_{1e,f}$、$F_{2e,f}$ 和 $F_{3e,f}$ 分量，分别对应 $\Omega = 0$、1 和 2。有效哈密顿量

$$T_v + BN^2 - DN^4 + HN^6 + \tfrac{2}{3}\lambda(3S_z^2 - S^2) + \gamma(\mathbf{N}\cdot\mathbf{S}) + A(L_zS_z) + \tfrac{1}{2}A_D(N^2L_zS_z + L_zS_zN^2) + o(S_+^2L_-^2 + S_-^2L_+^2) - p(N_+S_+L_-^2 + N_-S_-L_+^2) + q(N_+^2L_-^2 + N_-^2L_+^2), \quad (11)$$

其矩阵元汇总于 表 S19，通过在分离的多重态分量之间显式引入态内相互作用，重构了该有效哈密顿量。在这种形式下，$F_{1e,f} \sim F_{2e,f}$、$F_{2e,f} \sim F_{3e,f}$ 和 $F_{1e,f} \sim F_{3e,f}$ 相互作用分别定义，而不是隐含地嵌入有效 $a^3\Pi$ 哈密顿量中。在 PGOPHER记号中，$F_1 \sim F_2$ 和 $F_2 \sim F_3$ 相互作用由微扰项表示

$$B\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|N^2\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (12)$$

$$-D\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|N^4\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (13)$$

$$H\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|N^6\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (14)$$

$$\gamma\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|\mathbf{N}\cdot\mathbf{S}\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (15)$$

and

$$A_D\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|\frac{1}{2}[N^2,L_zS_z]_+\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (16)$$

以及相应的 p 型和 q 型相互作用，

$$p\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|N_+S_+L_-^2 + N_-S_-L_+^2\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (17)$$

and

$$q\left\langle a^3\Pi(v=13,F_{1e,f})\middle|N_+^2L_-^2 + N_-^2L_+^2\middle|a^3\Pi(v=13,F_{2e,f})\right\rangle, \quad (18)$$

以及类似地，在 $F_2 \sim F_3$, 之间，除了 p 型和 q 型微扰之外。反过来，a³Π 态内的 $F_1 \sim F_3$相互作用，是通过负责 $\Delta\Omega = 2$结构的项引入的，即

$$-D\left\langle \mathrm{a}^3\Pi\left(v = 13, F_{1e,f}\right)\middle| N^4 \middle|\mathrm{a}^3\Pi\left(v = 13, F_{3e,f}\right)\right\rangle, \tag{19}$$

$$q\left\langle \mathrm{a}^3\Pi(v = 13, F_{1e,f})\middle| N_+^2 L_-^2 + N_-^2 L_+^2 \middle|\mathrm{a}^3\Pi(v = 13, F_{3e,f})\right\rangle. \tag{20}$$

表 S19。 a³Π 态的有效哈密顿量矩阵元。[a]

a³Π	$F_{1e,f}$	$F_{2e,f}$	$F_{3e,f}$
$F_{1e,\ f}$	$T_v - A + (B - A_D)(x + 2) - D(x^2 + 6x + 4) + \lambda - \frac{2}{3}\gamma \pm (o + p + q)$	$-\sqrt{2x}\,[B - 2D(x + 2) - \gamma \quad \frac{1}{2} \quad -A\frac{1}{2} \pm (\ p + \frac{1}{2}q)\,]$	$-\sqrt{x(x - 2)\,(2D \mp q)} \quad \frac{1}{2}$
$F_{2e,\ f}$		$T_v + B\ (x + 2) - D\ (x^2 + 8x) - \frac{4}{3}\lambda - 2\gamma \pm \frac{1}{2}qx$	$-\sqrt{2(x - 2)[B - 2Dx - \frac{1}{2}\gamma + \frac{1}{2}A_D\ ]}$
$F_{3e,\ f}$			$T_v + A + (B + A_D)(x - 2) - D(x2 - 4x) + \lambda \quad \frac{2}{3}$

[a] $x = J(J + 1)$；矩阵是对称的，因此哈密顿量中未显示的左侧非对角元等同于右侧非对角元；T_v – 表示相对于 X态¹Σ⁺($v = 0$)能级的无旋转能量；上、下符号（± 或 ∓）分别指 e 和 f 分量。

替代文本： 表 S19： a³Π态有效哈密顿量的矩阵元表，按 F_{1ef}、F_{2ef} 和 F_{3ef} 分量排列。对角元包含项能量和转动贡献，而非对角元表示自旋分量之间的耦合，包括宇称相关项。

当保留所有对应的相互作用时，这些分量分辨表示在代数上等价于紧凑的有效态表示。它们的优势在于方法论，而非形式，因为每个基态通道都得到显式表示，并且可以单独开启或关闭选定的相互作用，从而直接检验特定中间路径在观测到的间接微扰和干涉模式中所起的作用。

补充材料（否 2）

一氧化碳 A态1Π 受 a3Π 微扰本应无法探测：探测、机制与意外发现

PGOPHER 11.0.142 2020年4月1日 21 8:30 64 位 Unicode（Delphi 33/33）

PGOPHER 44b8c50a90149a6c e53e669f4a0e44afc86f1abd
lutils 65f951dfa553c7f9bc5 01632d3360a85cd1a0165
utils ec0cac7863199e6535 5ae4c6ab78dbe3037fae3b
lforms d4dfa0031586b0cf5 ffd76ff4d8f7aee2a9f8932
wutils 9bb7abdf4436dd4d7 dfed61ce7fb7c6bc914386c
GraphicEx bfb0df9494191c3 a10d6089c21fe439fcd763090

混合物：13C18O 去微扰 一氧化碳 A（v=2）能级.pgo

单位 cm⁻¹ 打印级别 谱线表 精度 4 基组阶数 boDefault 量子数格式 J 拟合循环次数 1 拟合详情 否 自动重新绘图 是 允许复数 是 无线列表 否 显示估计不确定度 否 显示导数 否 奇异值分解限制 5 显示子基组 否 允许零核自旋 否 缩放参数 是 固定跃迁相位 否 旧超精细顺序 否 旧颜色顺序 否 单残差图 否 上态颜色 否 奇异值分解阈值 1E-6

舍弃低于最大特征值此比例的奇异值分解特征值；<0 使用 QR 分解。

缩放变化 1 拟合产生的缩放变化量，通常为 1

小量阈值 2E-18 小于此值的矩阵元将被舍弃

物种：一氧化碳

总角动量量子数最大值 63 浓度 1

物种的相对浓度

LinearMolecule：13C18O J对称性调整 True 分块矩阵 True 绝对E False 对称 False 对称权重 1 非对称权重 1 R平方H False 显示 J True 显示 Ω False 显示 N True 显示 F 数 True 显示 ef True 丰度 1

该同位素的丰度；默认值为 1

假定原点 1E99 玻尔兹曼计算的能量原点；1e99 表示自动估算。目前为 0

LinearManifold：X态 初始 True 本征值搜索 True 极限搜索 True 自动 Q 收敛 True 使用布居参数 False 覆盖能量 True 线性：X态 X态振动量子数=0状态：活跃 Λ Σ +

Ω 阶数：自动 => R

规则

B 1.746408199 转动常数。

D 5.0488146E-6 四次离心畸变。

H 4.35471E-12 六次离心畸变。

L -2.4821E-17 J^8 离心畸变。

M 2.99E-23 J^10 离心畸变。

PP -4.5E-28 J^12 离心畸变 .（不用 P，以免与 p 混淆。）

<J，Λ=0，Ω= 0|B|J，Λ=0，Ω=0> = J*（J+1）

对称化：<J，Λ=0，Ω= 0|B|J，Λ=0，Ω=0> = J*（J+1）

<总角动量量子数,Λ=0,Ω= 0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

对称化：<总角动量量子数,Λ=0,Ω= 0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0 |H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1)

对称化：<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0 |H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1)

<总角动量量子数,Λ=0,Ω= 0|L|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^4*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+4)+6)+4)+1)

对称化：
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|L|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^4*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+4)+6)+4)+1)

<总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0|M|总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0> = 总角动量量子数^5*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+5)+10)+10)+5)+1) 对称化： <总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0|M|总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0> = 总角动量量子数^5*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+5)+10)+10)+5)+1)

<总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0|PP|总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0> = 总角动量量子数^6*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+6)+15)+20)+15)+6)+1) 对称化： <总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0|PP|总角动量量子数,Lambda=0,Omega=0> = 总角动量量子数^6*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+6)+15)+20)+15)+6)+1)

线性微扰：X态 < =0| ^14| =0> X态振动量子数N X态振动量子数 O（转动常数）数值 -2.2E-33 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|N^14|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^7*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1)

对称化矩阵元 < =0| ^14| =0> X态振动量子数N X态振动量子数 总角动量量子数,Λ,Ω=0|N^14|总角动量量子数,Λ ,Ω=0> = 总角动量量子数^7*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1)

线性流形：碳 初始 真 本征值搜索 真 极限搜索 假 自动 Q 收敛 真 使用布居参数 假 覆盖能量 真 E 0 e 1 91918.81461769

能量对应总角动量量子数 J=E 0 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 0 0 F1e
E 1 e态 1 91922.3501979315 能量对应总角动量量子数 J=E 1 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 1 1 F1e
E 2 e态 1 91929.41460931 能量对应总角动量量子数 J=E 2 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 2 2 F1e
E 3 e态 1 91940.0087911758 能量对应于总角动量量子数=E 3 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 3 3 F1e
E 4 e态 1 91954.1391754158 能量对应于总角动量量子数=E 4 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 4 4 F1e
E 5 e态 1 91971.8047483651 能量对应于总角动量量子数=E 5 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 5 5 F1e
E 6 e态 1 91992.9963415625 能量：总角动量量子数=E 6 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 6 6 F1e
E 7 e态 1 92017.7210158785 能量：总角动量量子数=E 7 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 7 7 F1e
E 8 e态 1 92045.9729147246 能量：总角动量量子数=E 8 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 8 8 F1e
E 9 e态 1 92077.7548931101 总角动量量子数=E 9 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 9 9 F1e
E 10 e态 1 92113.0587701987 总角动量量子数=E 10 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 10 10 F1e
E 11 e态 1 92151.8966952636 总角动量量子数=E 11 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 11 11 F1e
E 12 e态 1 92194.2576663392 总角动量量子数=E 12 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 12 12 F1e
E 13 e态 1 92240.1328568783 总角动量量子数=E 13 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 13 13 F1e
E 14 e态 1 92289.5374084555 总角动量量子数=E 14 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 14 14 F1e
E 15 e态 1 92342.4615531966 总角动量量子数=E 15 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 15 15 F1e
E 16 e态 1 92398.9025159008 总角动量量子数=E 16 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 16 16 F1e
E 17 e态 1 92458.8587353746 总角动量量子数=E 17 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 17 17 F1e
E 18 e态 1 92522.3290731028 总角动量量子数=能级的能量 18 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 18 18 F1e
E 19 e 1 92589.3126987891 总角动量量子数=能级能量 19 e态 1 能级：C 振动量子数=0 19 19 F1e
E 20 e态 1 92659.8038563447 总角动量量子数=振动量子数 20 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 20 20 F1e
E 21 e态 1 92733.8006230299 总角动量量子数=E 21 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 21 21 F1e
E 22 e态 1 92811.3031429715 总角动量量子数=E 22 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 22 22 F1e
E 23 e态 1 92892.3079897717 总角动量量子数=E 23 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 23 23 F1e
E 24 e态 1 92976.822314948 能量对应总角动量量子数 J=E 24 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 24 24 F1e
E 25 e态 1 93064.8231465903 能量对应总角动量量子数 J=E 25 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 25 25 F1e
E 26 e态 1 93156.3176170672 能量对应总角动量量子数 J=E 26 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 26 26 F1e
E 27 e态 1 93251.2988822767 能量对应总角动量量子数 J=E 27 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 27 27 F1e
E 28 e态 1 93349.7667497678 能量对应总角动量量子数 J=E 28 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 28 28 F1e
E 29 e态 1 93451.7189577959 能量对应总角动量量子数 J=E 29 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 29 29 F1e
E 30 e态 1 93557.148271242 总角动量量子数=能量 30 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 30 30 F1e
E 31 e 1 93666.0549149757 总角动量量子数=e态 31 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 31 31 F1e
E 32 e态 1 93778.4343213518 总角动量量子数=能量 32 e态 1 能级：C 振动量子数=0 32 32 F1e
E 33 e 1 93894.2815297818 总角动量量子数=E 33 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 33 33 F1e
E 34 e态 1 94013.591760117 总角动量量子数=E 34 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 34 34 F1e
E 35 e态 1 94136.3569127458 总角动量量子数=E 35 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 35 35 F1e
E 36 e态 1 94262.5809686937 能量：总角动量量子数=E 36 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 36 36 F1e
E 37 e态 1 94392.253689726 能量：总角动量量子数=E 37 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 37 37 F1e
E 38 e态 1 94525.3757684531 能量：总角动量量子数=E 38 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 38 38 F1e
E 39 e态 1 94661.9366784378 能量，对应总角动量量子数 J=E 39 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 39 39 F1e
E 40 e态 1 94801.9378743053 能量，对应总角动量量子数 J=E 40 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 40 40 F1e
E 41 e态 1 94945.3716418562 能量，对应总角动量量子数 J=E 41 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 41 41 F1e
E 42 e态 1 95092.2322481804 能量：总角动量量子数=E 42 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 42 42 F1e
E 43 e态 1 95242.507641775 能量：总角动量量子数=E 43 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 43 43 F1e
E 44 e态 1 95396.2059026634 能量：总角动量量子数=E 44 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 44 44 F1e
E 45 e态 1 95553.3147425169 总角动量量子数=能量 45 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 45 45 F1e
能量 46 e态 1 95713.8389547786 总角动量量子数=能量 46 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 46 46 F1e
能量 47 e态 1 95877.7430647896 总角动量量子数=能量 47 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 47 47 F1e
能量 48 e态 1 96045.0535799167 J=振动量子数E 48 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 48 48 F1e
E 49 e态 1 96215.7478896832 总角动量量子数=振动量子数 49 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 49 49 F1e
E 50 e态 1 96389.8321659005 总角动量量子数=能量 E 50 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 50 50 F1e
E 51 e态 1 96567.2766128028 总角动量量子数=E 51 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 51 51 F1e
E 52 e态 1 96748.0881671828 总角动量量子数=E 52 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 52 52 F1e
E 53 e态 1 96932.2837485302 总角动量量子数=E 53 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 53 53 F1e
E 54 e态 1 97119.8371091712 能量：总角动量量子数=E 54 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 54 54 F1e
E 55 e态 1 97310.7208844101 能量：总角动量量子数=E 55 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 55 55 F1e
E 56 e态 1 97504.930642673 能量：总角动量量子数=E 56 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 56 56 F1e
E 57 e态 1 97702.5267856525 总角动量量子数=E 57 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 57 57 F1e
E 58 e态 1 97903.4396484547 总角动量量子数=能级的能量：碳 振动量子数=0 58 58 F1e
E 59 e态 1 98107.6243997471 总角动量量子数=e态 59 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 59 59 F1e
E 60 e态 1 98315.1990419085 总角动量量子数=振动量子数 60 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 60 60 F1e
E 61 e态 1 98526.0359657192 能量对应的总角动量量子数=振动量子数 61 e态 1 能级
E 62 e态 1 98740.1821395715 能量对应的总角动量量子数=振动量子数 62 e态 1 能级
E 63 e态 1 98957.6207414145 总角动量量子数=E 63 e态 1 能级的能量
E 64 e态 1 99178.3440172057 总角动量量子数=E 64 e态 1 能级的能量
E 65 e态 1 99402.3440898222 总角动量量子数=E 65 e态 1 能级的能量

线性：碳 振动量子数=0状态：活跃 Λ Σ + Ω 阶数：自动 => 常规

原点 91918 79 = 91918 79 。态原
1 76641191315359
点。估计最低能级。B。转动常数。D 5.12833508732762E-6 四次离心畸变。<J,Λ=0,Ω=0|
B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<总角动量量子数,Lambda=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Lambda=0,Ω=0> = -总角动量量子数^2
(总角动量量子数(总角动量量子数+2)+1) 对称化：<总角动量量子数,Lambda=0,Ω=0|D|总角动
量量子数,Lambda=0,Ω=0> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

线性流形：B常数 初始 真 本
征值搜索 真 极限搜索 假 自动 Q 收
敛 真 使用布居参数 假 覆盖能量 真
E 0 e 态 1 86917.3573438145

总角动量量子数=对应的能量 E 0 e态 1 能级：B常数 Bv=0 0 0 F1e
E 1 e态 1 86920.8990798371 总角动量量子数=对应的能量 E 1 e态 1 能级：B常数 Bv=0 1 1 F1e
E 2 e态 1 86927.9802287834 总角动量量子数=E 2 e态 1 能级：B常数 Bv=0 2 2 F1e
E 3 e态 1 86938.5975955474 总角动量量子数=E 3 e态 1 能级：B常数 Bv=0 3 3 F1e
E 4 e态 1 86952.7535165513 总角动量量子数=E 4 e态 1 能级：B常数 Bv=0 4 4 F1e
E 5 e态 1 86970.4485900942 总角动量量子数=E 5 e态 1 能级：B常数 Bv=0 5 5 F1e
E 6 e态 1 86991.6808705965 总角动量量子数=E 6 e态 1 能级：B常数 Bv=0 6 6 F1e
E 7 e态 1 87016.4501212347 总角动量量子数=E 7 e态 1 能级：B常数 Bv=0 7 7 F1e
E 8 e态 1 87044.7550139408 总角动量量子数=能量 E 8 e态 1 能级：B常数 Bv=0 8 8 F1e
E 9 e态 1 87076.5945102899 总角动量量子数=能量 E 9 e态 1 能级：B常数 Bv=0 9 9 F1e
E 10 e态 1 87111.9673665656 总角动量量子数=能量 E 10 e态 1 能级：B常数 Bv=0 10 10 F1e
E 11 e态 1 87150.8722462898 总角动量量子数=能量 11 e态 1 能级：B常数 Bv=0 11 11 F1e
E 12 e态 1 87193.3103335359 总角动量量子数=能量 12 e态 1 能级：B常数 Bv=0 12 12 F1e
E 13 e态 1 87239.2738059414 总角动量量子数=能量 13 e态 1 能级：B常数 Bv=0 13 13 F1e
E 14 e态 1 87288.7659451284 总角动量量子数=能量 E 14 e态 1 能级：B常数 Bv=0 14 14 F1e
E 15 e态 1 87341.7838423505 总角动量量子数=能量 E 15 e态 1 能级：B常数 Bv=0 15 15 F1e
E 16 e态 1 87398.3239892327 总角动量量子数=能量 E 16 e态 1 能级：B常数 Bv=0 16 16 F1e
E 17 e态 1 87458.3457386672 总角动量量子数=能量 E 17 e态 1 能级：B常数 Bv=0 17 17 F1e
E 18 e态 1 87521.9669176787 总角动量量子数=能量 E 18 e态 1 能级：B常数 Bv=0 18 18 F1e
E 19 e态 1 87589.0729980635 总角动量量子数=能量 E 19 e态 1 能级：B常数 Bv=0 19 19 F1e
E 20 e态 1 87659.6848539994 总角动量量子数=能量 20 e态 1 能级：B常数 Bv=0 20 20 F1e
E 21 e态 1 87733.8093501407 总角动量量子数=能量 21 e态 1 能级：B常数 Bv=0 21 21 F1e
E 22 e态 1 87811.4434750138 总角动量量子数=能量 22 e态 1 能级：B常数 Bv=0 22 22 F1e
E 23 e态 1 87892.5833524621 总角动量量子数=E 23 e态 1 能级:B常数 Bv=0 23 23 F1e 的能量
E 24 e态 1 87977.2254359612 总角动量量子数=E 24 e态 1 能级:B常数 Bv=0 24 24 F1e 的能量
E 25 e态 1 88065.3655819688 总角动量量子数=E 25 e态 1 能级:B常数 Bv=0 25 25 F1e 的能量
E 26 e态 1 88157.0074638094 总角动量量子数=能量 26 e态 1 能级:B常数 Bv=0 26 26 F1e
E 27 e态 1 88252.1428727514 总角动量量子数=能量 27 e态 1 能级:B常数 Bv=0 27 27 F1e
E 28 e态 1 88350.7622038786 总角动量量子数=能量 28 e态 1 能级:B常数 Bv=0 28 28 F1e
E 29 e态 1 88452.8714734024 总角动量量子数=能量 29 e态 1 能级：B常数 Bv=0 29 29 F1e
E 30 e态 1 88558.4573652084 总角动量量子数=能量 30 e态 1 能级：B常数 Bv=0 30 30 F1e
E 31 e态 1 88667.5170675484 总角动量量子数=能量 31 e态 1 能级：B常数 Bv=0 31 31 F1e
E 32 e态 1 88780.0530157549 总角动量量子数=的能量E 32 e态 1 能级：B常数 Bv=0 32 32 F1e
E 33 e态 1 88896.0732697678 总角动量量子数=的能量E 33 e态 1 能级：B常数 Bv=0 33 33 F1e
E 34 e态 1 89015.5479117331 总角动量量子数=的能量E 34 e态 1 能级：B常数 Bv=0 34 34 F1e
E 35 e态 1 89138.5007753021 总角动量量子数=能量 E 35 e态 1 能级：B常数 Bv=0 35 35 F1e
E 36 e态 1 89264.8671434128 总角动量量子数=能量 E 36 e态 1 能级：B常数 Bv=0 36 36 F1e
E 37 e态 1 89394.712613204 总角动量量子数=能量 E 37 e态 1 能级：B常数 Bv=0 37 37 F1e
E 38 e态 1 89528.0033885644 总角动量量子数=能量 38 e态 1 能级：B常数 Bv=0 38 38 F1e
E 39 e态 1 89664.7427100465 总角动量量子数=能量 39 e态 1 能级：B常数 Bv=0 39 39 F1e
E 40 e态 1 89804.8732821819 总角动量量子数=能量 40 e态 1 能级：B常数 Bv=0 40 40 F1e
E 41 e态 1 89948.4826520769 总角动量量子数=E 41 e态 1 能级：B常数 Bv=0 41 41 F1e
E 42 e态 1 90095.4817872327 总角动量量子数=E 42 e态 1 能级：B常数 Bv=0 42 42 F1e
E 43 e态 1 90245.9288501256 总角动量量子数=E 43 e态 1 能级：B常数 Bv=0 43 43 F1e
E 44 e态 1 90399.7945833577 总角动量量子数=E 44 e态 1 能级：B常数 Bv=0 44 44 F1e
E 45 e态 1 90557.048472636 总角动量量子数=E 45 e态 1 能级：B常数 Bv=0 45 45 F1e
E 46 e态 1 90717.7471747185 总角动量量子数=E 46 e态 1 能级：B常数 Bv=0 46 46 F1e
E 47 e态 1 90881.7572647896 总角动量量子数=E 47 e态 1 能级:B常数 Bv=0 47 47 F1e
E 48 e态 1 91049.1774976252 总角动量量子数=E 48 e态 1 能级:B常数 Bv=0 48 48 F1e
E 49 e态 1 91220.0533896832 总角动量量子数=E 49 e态 1 能级:B常数 Bv=0 49 49 F1e
E 50 e态 1 91394.1969159005 总角动量量子数=E 50 e态 1 能级：B常数 Bv=0 50 50 F1e
E 51 e态 1 91571.8211856604 能量对应总角动量量子数=E 51 e态 1 能级
E 52 e态 1 91752.7615313151 能量对应总角动量量子数=E 52 e态 1 能级
E 53 e态 1 91937.0582069911 J=E 53 e 1 能级的能量
E 54 e态 1 92124.7041674308 J=E 54 e 1 能级的能量
E 55 e 1 92315.6922344469 J=E 55 e 1 能级的能量

线性：B常数 Bv=0状态：活跃
Λ Σ + Ω 阶数:

自动 => Regu
lar

原点 86917.360320496 态原点。估计最低能级 = 86917.360320496
B常数 1.76976443875216 转动常数。
D 5.53872463797865E-6 四次离心畸变。
碳 振动量子数对应的矩阵元 =0

线性流形：激发态 初始:
否 本征值搜索 是 极限搜索 是
自动 Q 收敛 是 U

sePopP参数 False

覆盖能量 True

线性：激发态 A态振动量子数=2

状态：活跃

Λ Π

Ω 阶数：自动 => 常规

原点 67557.9263807482 浮点数，标准差 = 0.000878566892884828 态原点。估计最低能级 = 67557.9263807482

B常数 1.41770507032897 浮点数 ，标准差 = 3.51295994438537E-6 转动常数。

q -1.187706E-5 Λ倍增常数。

D 6.24399485577261E -6 浮点数，标准差 = 2 .53609150054505E-9 四次离心畸变。

H -1.280902E-11 六次离心畸变。

<J,Lambda=-1,O兆= ,Lambda=-1,O兆= -1> = J*(J+1)

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数*（总角动量量子数+1）

对称化：

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数*（总角动量量子数+1）

<J,Λ=1,Ω=1|B常数|J,Λ=1,Ω=1> = J*(J+1)

< = 1, = 1| | =1 =1> = +1 2 J,Λ - Ω -

< =1 =1| | = 1, = 1> = +1

qJ,Λ ,Ω (J*(J))/ J,Λ ,Ω q J,Λ - Ω - (J*(J))/2 对称化：

< =1 =1| | =1 =1> = +1 2 J,Λ ,Ω q J,Λ ,Ω

< =1 =1 =1> = +1 2

(J*(J))/ J,Λ ,Ω=1|q|J,Λ ,Ω (J*(J))/

<J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化： <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=-1,Ω=-1|H|J,Λ=-1,Ω=-1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性：激发态 振动量子数=3

状态：活跃

颜色：紫红色

Lambda Sigma-

Ω 阶数：自动 => 常规

原点 67579.2383904013 浮点数，标准差 = 0.0154787716797877 态原点。估计最低能级 = 67579.2383904013

B常数 1.09918701526773 浮点数 ，标准差 = 0.000226636002436598 转动常数。

D 5.77973239037241E-6 浮点数，标准差 = 4.04347248069572E-7 四次离心畸变。

H 2.247197E-12 六次离心畸变。

<J，Λ=0，Ω=0|B常数|J，Λ=0，Ω=0> = J*(J+1)

对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性：激发态 振动量子数=4

状态：活跃

颜色：紫红色

Lambda Sigma-

Ω 阶数：自动 => 常规

原点 68544.2939028 态原点。估计最低能级 = 68544.2939028

B常数 1.0840499034 转动常数。

D 5.712347E-6 四次离心畸变。

H 2.247197E-12 六次离心畸变。

<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

对称化：

<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：

<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+ 1)

<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 <A态振动量子数=2|J+L-|I态振动量子数=3>

数值 -0.0504224240425148 浮点数，标准差 = 0.000477162968858135 微扰大小。

<J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(J*(J+1))

<J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1))

对称化矩阵元 < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-Iv

< =1 + =0

J,Lambda ,Omega=1|J L-|J,Lambda ,Omega=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < =2| + | =4> A态振动量子数 J

0 06495

L-I 数值。微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = sqrt(J*(J+1))

对称化矩阵元 < =2| + | =4> A态振动量子数 J L-Iv

< =1 + =0

J,Lambda ,Ω=1|J L-|J,Lambda ,Ω=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性：激发态振动量子数=4
状态：活跃
颜色 酸橙色
S 1
Λ Σ⁻
Ω 阶数：自动 => 反转
原点 67802.7849165451 浮点数，标准差 = 0.00556026375325388 态原点。估计最低能级 = 67802.2187789372
B 1.09715336874161 浮点数，标准差 = 3.00716570600556E-5 转动常数。
LambdaSS 0.424603205929654 浮点数，标准差 = 0.0115162602834212 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。
D 5.34314012526997E-6 浮点数，标准差 = 2.51620227317152E-8 四次离心畸变。
H -1.498131E-12 六次离心畸变。
<J,Λ=0,Ω=-1|B|J,Λ=0,Ω=-1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1)
<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1)+2
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 J,Lambda ,Ω - LambdaSS J,Lambda ,Ω - / J,Lambda ,Ω =0| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Ω - /
< =0 =0 =0> = 4 < =0 =0 =1> = 2
J,Lambda ,Ω =1| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 J,Λ, Ω ΛSSJ,Λ, Ω / J,Λ, Ω
< =0 =0 =1> = 4
=1| | 3 ΛSSJ,Λ, Ω - / J,Λ, Ω=0|ΛSSJ,Λ, Ω /
< =0 =0 =0> = 2 3

<J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)
*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+1)
*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4 J,Λ,
< =0 =0 =1> = 2 +1 +1 2
Ω DJ,Λ, Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ, Ω=0|DJ,Λ, Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|DJ,Λ=0,Ω=-1> = -
2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|DJ,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|DJ,Λ=0,Ω=1> = -
J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+3)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|
J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega
=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8
< =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2
J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|HJ,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-
)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|HJ,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|
J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega
=1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 2*总角动量量子数*(总角动量量子数*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =4> A态振动量子数 LS振动量子数 数值 - .
13 1135785220975
浮点数，标准差 = 0.00455861064639965 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS|J,Λ=0,Ω=-1> = -1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS|
J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < =2| | =4> A态振动量子数 LS振
< =1 =0
动量子数 J,Λ , Ω=1|LSJ,Λ , Ω=1> = -1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LSJ,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态振动量子数=7状态：活跃 颜色：蓝色 S 1 Λ 双重态 Ω 阶数：自动 => 反转原点
67946 2486612564 = 0 00364331290227751 = 67913 089899836 。浮点数，标准差。
1 07973878060191 = 1 39032711556845 5
态原点。估计最低能级。B常数。浮点数，标准差。E-转动常数。A -16.9899246280871 浮点数，标准差 = 0.00331391148225554 自旋-轨道耦合常数。
LambdaSS 1.23163175363889 浮点数，标准差 = 0.00538387977440938 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。伽马 -0.00290463321309688 浮点数，标准差 = 0.000257537521412191 自旋-转动耦合常数。D 5.12786503880413E-6 浮点数，标准差 = 8.04194689239351E-9 四次离心畸变。H -
5.992526E-13 六次离心畸变。AD -9.172647E-5 A的离心畸变。 < = 2, = 3| | = 2, = 3> = +1 4 J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω -
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 2
J*(J)- J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω - -sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-2|B|J,Λ=-2,Ω=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-2|B|J,Λ=-2,Ω=-2> = J*(J+1)+2

<J,Λ=-2,Ω=-2|B|J,Λ=-2,Ω=-1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|B|J,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 2, = 1| | = 2, = 1> = +1 +4 J,Λ - Ω - < =2 =2 =1> = +1 BJ,Λ - Ω - J*(J) J,Λ ,Ω =1| | +4 B J,Λ ,Ω < =2 =2 =2> = 2 J*(J) J,Λ ,Ω=1|B|J,Λ ,Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =2 =2| | =2 =2> = +1 +2 J,Λ ,Ω B J,Λ ,Ω J*(J) J,Λ ,Ω=2| < =2 =2 =3> = 2 BJ,Λ ,Ω -sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|BJ,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =3> = +1 4 J,Λ ,Ω B J,Λ ,Ω J*(J)- 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = +1 4 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))

< =2 =3| | =2 =2> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

< =2 =2| | =2 =2> = +1 +4 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =1> = 2 数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) < =2 =1| | =2 =2> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 2 J,Λ - Ω - A态J,Λ - Ω - J,Λ - Ω - < = 2, = 1| | = 2, = 1> = A 态 J,Λ - Ω - - 2 J,Λ ,Ω < =2 =2 =1> = =1| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω < =2 =2 =3| | =3> = 2 A态J,Λ ,Ω 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = 2 J,Λ ,Ω A态J,Λ ,Ω J,Λ ,Ω < =2 =2 =3> = =3| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω < =2 =2 =1> = =1| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω=1|A态J,Λ ,Ω < =2 =2 =1> = 2

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 2 3 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - / 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - - / 3 总角动量 < = 2, = 2| | = 2, = 2> = 4 < = 2, = 1| | = 2, = 1> = 2 量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - / 3 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =1> = 2 < =2 =2 =2> = 4 =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 对称化： < =2 =2 =3> = 2

< =2 =3| | =2 =3> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =3> = 4 < =2 =2 =2> = 2 =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / < =2 =2 =2> = 2 < =2 =2 =1> = 4 < =2 =2 =1> = 2 3

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 1 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(2 +1 6 2 *(J*(J)-))/ < = 2, = 3| | = 2, = 2> = < = 2, = 2| | = 2, = 3> = 2 +1 6 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(*(J*(J)-))/ 2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - - 2 < = 2, = 2| | = 2, = 2> = < = 2, = 2| | = 2, = 1> = J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(2 +1 2 2 *(J*(J)-))/ J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(*(J*(J)-))/ < = 2, = 1| | = 2, = 2> = 2 +1 2 2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - - 3 J,Lambda ,Omega < = 2, = 1| | = 2, = 1> = < =2 =2 =1> = =1| | 3 gammaJ,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega 2 +1 2 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =2 =2> = < =2 =2 =1> = 2 +1 2 =2| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega =2| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega < =2 =2 =2> = =2| | 2 +1 6 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =3| | =2 =3> = 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ < =2 =2 =2> = 2 +1 6 < =2 =2 J,Lambda ,Omega =3| | =3> = 1 gammaJ,Lambda ,Omega 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = =3> = 1 总角动量量子数,Λ ,Ω 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 2 +1 6 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =3> = < =2 =2 =2> = 2 +1 6 =3| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =2> = < =2 =2 =3> = =2| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总 < =2 =2 =3> = 2 +1 2 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 3 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 3 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 2 +1 2 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =2> = < =2 =2 =1> = 2 +1 2 =2| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω < =2 =2 =2> = < =2 =2 =2> = < =2 =2 =2> = 2 +1 6 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|伽马|总角动量量子数,Λ ,Ω

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = +2 5 6 4 总角动量量子数,Λ - Ω - D总角动量量子数,Λ - Ω - -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-)- 总角动量量子数,Λ - Ω - D总角动量量子数,Λ - Ω - - *(-总角动量量子数*(总角动量量子数))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3|D|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -2*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|D|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = -2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))

< = 2, = 2| | = 2, = 2> = +2 +9 +8 +12 总角动量量子数,Λ - Ω - D总角动量量子数,Λ - Ω - -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))) 总角动量量子数,Λ - Ω - D总角动量量子数,Λ - Ω - *(总角动量量子数*(总角动量量子数))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1|D|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = -2*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1|D|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+3)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

< = 2, = 1| | = 2, = 1> = +2 +11 +10 12 总角动量量子数,Λ - Ω - D总角动量量子数,Λ - Ω - -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))) 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 12 D总角动量量子数,Λ ,Ω -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))- 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(总角动量量子数*(总角动量量子数))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -2*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12)

<J,Lambda=2,Omega=2|D|J,Lambda=2,Omega=1> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +2 +9 +8 +12 J,Lambda ,Omega DJ,Lambda ,
< =2 =2 =3> = 2 +1 +1 2
Omega -J*(J*(J*(J))) J,Lambda ,Omega=2|D|J,Lambda ,Omega - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=2,O
mega=3|D|J,Lambda=2,Omega=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,Omega=3|D|J,Lambda=2,Omega
=2> = -2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =3> = +2 5 6 4

J,Lambda ,Omega DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))- 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = +2 5 6 4 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =3> = 2 +1 +1 2
J*(J*(J*(J)-)-)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|
D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -
2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =1> = +2 +9 +8 +12 总角
< =2 =2 =1> = 2 +1 +3 2
动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <总
角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角
动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +2 +11 +10 12 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =2> = +2 +11 +10
J*(J*(J*(J)))- 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 12
< =2 =2 =1> = 2 +1 +3 2
D总角动量量子数,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <总角
动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动
量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =1| | =2 =3> = +2 +9 +8 +12 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =2> = 2 +1 +1 2
J*(J*(J*(J))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|
D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -
2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)-5)-6)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J)-)-)-) J,Lambda - Omega - HJ,Lambda -
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 3 +2 1 +2 +4
Omega - (J*(J*(- *J*(J)-)))*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=-2,Omega=-3|H|J,Lambda=-2,Omega=-1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-2|H|J,Lambda=-2,Omega=-
3> = J*(J*(-3*J*(J+2)+1)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) < = 2, = 2| | = 2, = 2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,
< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 3 +2 23 20 2 +1
Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-
72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=-2,Omega=-1|H|J,Lambda=-2,Omega=-3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-1|H|J,Lambda=-2,Omega=-2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
25)-22)-12)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 2, = 1| | = 2, = 1> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J*(J)))))
< =2 =2 =1> = +3 +21 +37 +74 +56
J,Lambda ,Omega =1| | +24 HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=1|H|J,Lambda ,O
< =2 =2 =2> = 3 +2 25 22 12 2
mega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=2,Omega=1|H|J,Lambda=2,Omega=3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,Omega=2|H|J,Lambda=2,Omega=1> =
J*(J*(-3*J*(J+2)-23)-20)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Lambda ,Omega=2|H|J,Lambda ,O
< =2 =2 =3> = 3 +2 +1 +4 2 +1
mega J*(J*(- *J*(J)))*sqrt(*(J*(J)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <J,Lambda=2,Omega=3|H|J,Lambda=2,Omega=1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,
Omega=3|H|J,Lambda=2,Omega=2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda ,Omega

HJ,Lambda ,Omega J *(J*(J*(J*(J)-)-)-) 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数 *(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-)-)-) 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|H|总
角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)-)))*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总
角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)+4)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量
子数+1)-6))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-7)-19)+18)+28)-24)) < =2 =3| | =2 =1> = +3 +21 +37 2 20 24 总角动量量子数,
< =2 =2 =1> = 3 +2 23 20 2 +1
Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数)))-)-)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|H|总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子
数)-)-)*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-2))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动
量量子数,Λ=2,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = (总角动量量子数
(总角动量量子数(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-25)-22)-12)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) < =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,
< =2 =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56
Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))))) 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | +24 H总角动量量子数,Λ ,Ω 总
< =2 =2 =1> = 3 +2 25 22 12 2
角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)-)-)-)*sqrt(*(总角动量量
子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量
量子数,Λ=2,Ω=3> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-23)-20)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角
动量量子数+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) < =2 =1| | =2 =3> = +3 +21 +37 2 20 24 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子
< =2 =2 =2> = 3 +2 +1 +4 2 +1
数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数)))-)-)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-
6))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动
量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量
子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-3)-11)-6)+8

<J, Λ=-2, Ω=-3|AD|J, Λ=-2, Ω=-3> = 2*(J*(J+1)-4) <J, Λ=-2, Ω=-3|AD|J, Λ=-2, Ω=-
2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=-2, Ω=-2|AD|J, Λ=-2, Ω=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=-
2, Ω=-2|AD|J, Λ=-2, Ω=-1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=-2, Ω=-1|AD|J, Λ=-2, Ω=-2> =
sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=-2, Ω=-1|AD|J, Λ=-2, Ω=-1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J, Λ=2, Ω=1|AD|J,
Λ=2, Ω=1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J, Λ=2, Ω=1|AD|J, Λ=2, Ω=2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=2,
Ω=2|AD|J, Λ=2, Ω=1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=2, Ω=2|AD|J, Λ=2, Ω=3> = -
sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=2, Ω=3|AD|J, Λ=2, Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=2, Ω=3|
AD|J, Λ=2, Ω=3> = 2*(J*(J+1)-4) 对称化:

<J,Λ=2,Ω=3|A态D|J,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)-4) <J,Λ=2,Ω=3|A态D|J,Λ=2,Ω=3> = -
sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|A态D|J,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|A态D|
J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|A态D|J,Λ=2,Ω=3> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,
Ω=2|A态D|J,Λ=2,Ω=3> = 2*(-J*(J+1)-4) <J,Λ=2,Ω=2|A态D|J,Λ=2,Ω=1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J,Λ=2,
Ω=2|A态D|J,Λ=2,Ω=1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=1|A态D|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(J*(J+1)-
2)) <J,Λ=2,Ω=1|A态D|J,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=1|A态D|J,Λ=2,Ω=1> = -
sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=1|A态D|J,Λ=2,Ω=1> = 2*(J*(J+1)-4)

线性微扰：激发态 < =2| | =7> A态振动量子数 LS耦合振动量子数 V
alue -9.51850056737858 Fl oat, Std D振动量子数 = 0.0104778117014898 微扰大小。

<J,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|J,Λ=-2,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < =2| | =7> A态振动量子数 < =1 =2
LS振动量子数 总角动量量子数,Λ, Ω=1|LS|总角动量量子数,Λ, Ω=1> = 1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1, Ω=1|LS|总角动量量子数,Λ=2, Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 a'态振动量子数=12
状态：活跃
颜色：红色
S 1
Λ Σ+
Ω 阶数：自动 => 反转
原点 67991.2956897487 浮点数，标准差 = 0.00589179423262914 态原点。估计最低能级 = 67990.5318805452
B常数 1.03759347733243 浮点数 ，标准差 = 2.24926190351211E-5 转动常数。
LambdaSS -1.14571380522651 浮点数，标准差 = 0.00908941623482264 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。
伽马 -0.00527072942354211 浮点数，标准差 = 0.000311699571001926 自旋-转动耦合常数。
D 5.18562812216526E-6 浮点数，标准差 = 1.22271031507727E-8 四次离心畸变。
H -2.996263E-13 六次离心畸变。
<J，Λ=0，Ω=-1|B|J，Λ=0，Ω=-1> = J*(J+1)
<J，Λ=0，Ω=-1|B|J，Λ=0，Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J，Λ=0，Ω=0|B|J，Λ=0，Ω=-1> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J，Λ=0，Ω=0|B|J，Λ=0，Ω=0> = J*(J+1)+2
<J，Λ=0，Ω=0|B|J，Λ=0，Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J,Λ=0,Ω=1|B常数|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J,Λ=0,Ω=1|B常数|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=1|B常数|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|B常数|J,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|B常数|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))
< =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 J,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω
< =0 =0 =0> = 2
J*(J) J,Λ ,Ω=0|B常数|J,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 J,Λ,Ω - ΛSS J,
< =0 =0 =0> = 4
Λ,Ω - / J,Λ,Ω =0| | 3 ΛSSJ,Λ,Ω - /
< =0 =0 =1> = 2
J,Λ,Ω =1| | 3 ΛSSJ,Λ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 J,Λ,Ω ΛSSJ,Λ,Ω / J,Λ,Ω
< =0 =0 =1> = 4
=1| | 3 ΛSSJ,Λ,Ω - / J,Λ,Ω=0|ΛSSJ|,Λ,Ω /
< =0 =0 =0> = 2 3

< =0 = 1| | =0 = 1> = 1 J,Λ,Ω - 伽马 J,Λ,Ω - - J,Λ,Ω - 1| | 2 +1 2 伽马 J,Λ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω
< =0 = =0 =0> = < =0 =0 = 1> = 2 +1
=0| | 2 伽马J,Λ,Ω - sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω =0| | 2 伽马J,Λ,Ω - J,Λ,Ω =0| | 2 +1 2 伽马J,
< =0 =0 =0> = < =0 =0 =1> = < =0 =0 =0> = 2 +1
Λ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω =1| | 2 伽马J,Λ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω =1| | 1 伽马J,Λ,Ω - S
< =0 =0 =1> =

ymmetrized:
< =0 =1| | =0 =1> = 1 总角动量量子数,Λ ,Ω 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 =1| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω
< =0 =0 =1> = < =0 =0 =0> = 2 +1
=1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω-0|伽马|总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(2*总角动量量子数
< =0 =0 =1> = < =0 =0 =0> =
*(总角动量量子数+1))/2

<J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4
< =0 =0 =1> = 2 +1 2
J,Lambda ,Omega DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))- J,Lambda ,Omega=0|D|J,Lambda ,Omega *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+3)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+9)+8)-4

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω J*(J*(J*(J*(J*(J))))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ ,Ω (J*(J*(-*J*(J) -) -) -)*sqrt(*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 2*总角动量量子数*(总角动量量子数*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =12> A态振动量子数 LS耦合a'态振动量子数 数值 - . 浮点数，标准差 = 0.0114841933161004 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)
5 90222571840932

对称化矩阵元: < =2| | =12> A态振动量子数
< =1 =0
LS耦合a'态振动量子数 J,Λ ,Ω=1|LS耦合|J,Λ ,Ω=1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=0,Ω
=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 Dsv=3
状态：活跃
颜色：橙色
Λ 双重态
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 68377.9123376615 浮点数，标准差 = 0.0503654794741688 态原点。估计最低能级 = 68377.9123376615
B态 1.08921917955507 浮点数 ，标准差 = 0.000187517727013344 转动常数。
D态 5.85540454591073E-6 浮点数，标准差 = 7.96670714380823E-8 四次离心畸变。
H态 -2.247197E-13 六次离心畸变。
<J，总角动量量子数=-2，Ω=-2|B态|J，总角动量量子数=-2，Ω=-2> = J*(J+1)
<J，总角动量量子数=2，Ω=2|B态|J，总角动量量子数=2，Ω=2> = J*(J+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B常数|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
<总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B常数|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角
动量量子数+1)
<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|D|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子
数*(总角动量量子数+2)+1) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -总角动量量子
数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) 对称化：<总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子
数,Λ=2,Ω=2> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) <总角动量量子数,Λ=2,
Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

<J,Lambda=-2,Omega=-2|H|J,Lambda=-2,Omega=-2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,
Lambda=2,Omega=2|H|J,Lambda=2,Omega=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,La
mbda=2,Omega=2|H|J,Lambda=2,Omega=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Lambda=2,Omega=2|
H|J,Lambda=2,Omega=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 < =2| + | =3> A态振动量子
0 02597
数 J L-Δv 数值。微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-1|J+L-|J,Lambda=-2,Omega=-2> =
sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=2,Omega=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元: < =2| + | =3> A态v J L-Δv J,La
< =1 + =2 =2> =
mbda ,Omega=1|J L-|J,Lambda ,Omega sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=2,
Omega=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

线性：激发态 a3Pv=13状态：活跃 颜色：银色 S 1 Λ Π Ω 阶数：自动 => 常规原点
67670 6782977856 = 0 00506807720509925 = 67632 5507030479 . 浮点数，标准差 . 态
1 30813665955102 = 5 56682832240352 7
原点。估计最低能级 . B常数 . 浮点数，标准差 . E- 转动常数。A态 38.1154482644111 浮点数，标准差 = 0.0129516607117093 自旋-轨道耦合常数。
LambdaSS -0.01821971 自旋-自旋耦合常数 (=1.5*ε)。o 0.6497647 自旋-自旋耦合常数，给出 Ω = 0 态的Λ倍增。伽马 0.003153713 自旋-转动耦合常数。
p 0.008831129 Λ倍增常数。q 2.786443E-5 Λ倍增常数。D 6.06110427245085E-6 浮点数，标准差 = 4.64500829284345E-9 四次离心畸变。AD -
0.0001940953 A的离心畸变。 < = 1, = 2| | = 1, = 2> = +1 2 J,Lambda - Omega - B常数J,Lambda - Omega - J*(J)-
< = 1, = 2| | = 1, = 1> = 2
J,Lambda - Omega - B 常数 J,Lambda - Omega - -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=-1,Omega=-1|B 常数 |J,Lambda=-1,Omega=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< = 1, = 1| | = 1, = 1> = +1 +2 J,Lambda - Omega - B常数J,Lambda - Omega - J*(J) J,Lambda - Omega - B常数
< = 1, = 1| | = 1, =0> = 2
J,Lambda - Omega -sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=-1,Omega=0|B常数|J,Lambda=-1,Omega=-1> = -sqrt(2*J*(J+1))
< = 1, =0| | = 1, =0> = +1 +2 J,Lambda - Omega B常数 J,Lambda - Omega J*(J) J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> = +1
=0| | +2 B常数 J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=0|B常数|J,Lambda ,Omega -sqrt(
< =1 =1 =1> = 2
J(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|B常数|J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =1 =1| | =1 =1> = +1 +2
< =1 =1 =2> = 2
J,Lambda ,Omega B常数 J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数|J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=2|B常数|
J,Lambda=1,Omega=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Lambda ,Omega B常数 J,Lambda ,

Omega J*(J)- 对称化： < =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Lambda ,Omega B常数 J,Lambda ,Omega J*(J)- J,La
< =1 =1 =2> = 2
mbda ,Omega=2|B常数|J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=2|B常数|J,Lambda=1,Omega=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =1 =2| | =1 =1> = +1 +2 J,Lambda ,Omega B常数 J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数|
< =1 =1 =2> = 2
J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|B常数|J,Lambda=1,Omega=2> = -sqrt(2*J*(J+1))
< =1 =1| | =1 =1> = +1 +2 J,Lambda ,Omega B常数 J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = +1
=1| | +2 B常数 J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数|J,Lambda ,Omega -sqrt(
< =1 =1 =0> = 2
J(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|B常数|J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =1 =0| | =1 =1> = +1 +2
< =1 =1 =1> = 2
J,Lambda ,Omega B常数 J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=0|B常数|J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=0|B常数|
J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=0|B常数|J,Lambda=1,Omega=0> = J*(J+1)-2

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 1 总角动量量子数,Λ - Ω - A态
< = 1, =0| | = 1, =0> =
总角动量量子数 ,Λ - Ω - 总角动量量子数 ,Λ - Ω A 态总角动量量子数 ,Λ - Ω -
1 总角动量量子数,Λ ,Ω
< =1 =1 =0> =
=0| | 1 A态 总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动
< =1 =1
量量子数,Λ ,Ω =2| | =2> = 1 A态 总角动量量子数,

Λ ,Ω 对称化：<总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|A态|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = 1



<= 1 =2| | =1 =2> = 1 总角动量量子数,Λ ,Ω A态总角动
<= 1 =1 =0> =
量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 1
< =1 =1 =0> = 1
A态总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω=0|A态|总角动量量子数,Λ ,Ω

<= 1, = 2| | = 1, = 2> = 2 3 J、Λ - Ω - LambdaSSJ、Λ - Ω - / J、Λ - Ω - LambdaSSJ、Λ - Ω - - / 3 J、Λ - Ω LambdaSS J、Λ - Ω /
<= 1, = 1| | = 1, = 1> = 4 < = 1, =0| | = 1, =0> = 2
3 J、Λ、Ω =0| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω / J、Λ、Ω =1| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω - / J、Λ、
< =1 =1 =0> = 2 < =1 =1 =1> = 4 < =1 =1 =2> = 2
Ω =2| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω / 对称化:

<= 1 =2| | =1 =2> = 2 3 J、Λ、Ω LambdaSSJ、Λ、Ω / J、Λ、Ω
<= 1 =1 =2> = 4
=2| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω - / J、Λ、Ω
< =1 =1 =1> = 2
=1| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω / J、Λ、Ω
< =1 =1 =1> = 2
=1| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω / J、Λ、Ω
< =1 =1 =0> = 4
=0| | 3 LambdaSSJ、Λ、Ω - / J、Λ、Ω=0|
< =1 =1 =0> = 2 3
LambdaSSJ|J、Λ、Ω /
<= 1, =0| | =1 =0> = 1 总角动量量子数,Λ - Ω o总角动量
<= 1 =0| | = 1,
量子数,Λ, Ω 总角动量量子数,Λ, Ω o 总角动量量子数,Λ - Ω
=0> = 1 对称化:

< =1 =0| | =1 =0> = 1 总角动量量子数,Λ, Ω o 总角动量量子
< =1 =1 =0> = 1
数,Λ, Ω 总角动量量子数,Λ, Ω=0|o|总角动量量子数,Λ, Ω

<= 1, = 2| | = 1, = 1> = 2 +1 2 2 总角动量量子数,Λ - Ω - 伽马总角动量量子数,Λ - Ω - sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ - Ω - 伽马总角动量量子数,Λ - Ω - sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/
<= 1, = 1| | = 1, = 2> = 2 +1 2
2 总角动量量子数,Λ - Ω - 伽马总角动量量子数,Λ - Ω - - 2 总角动量量子数,Λ - Ω - 伽马总角动量量子数,Λ - Ω sqrt(
< = 1, = 1| | = 1, = 1> = < = 1, = 1| | = 1, =0> =
2 +1 2 *总角动量量子数*(总角动量量子数)/ 总角动量量子数,Λ - Ω 伽马 总角动量量子数,Λ - Ω - sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 2 总角动量量子数,Λ - Ω 伽马 总角动量量
< = 1, =0| | = 1, = 1> = 2 +1 < = 1, =0| | = 1, =0> =
子数,Λ - Ω - 2 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子
< =1 =1 =0> = < =1 =1 =1> = < =1 =1 =0> = 2 +1
数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = < =1 =1 =2> =
=1| | 2 +1 2 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =2| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 对称
化: < =1 =2| | =1 =1> = 2 +1 2 2 总角动量量子数,Λ,Ω 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =2| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总
< =1 =1 =1> = 2 +1 2 < =1 =1 =2> =
角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =2> = < =1 =1 =1> = 2 +1
=1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = < =1 =1 =0> =
=1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =0> = < =1 =1 =1> = 2 +1
=0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = < =1 =1 =0> =
=0| | 2 +1 2 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω=0|伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/
< =1 =1 =0> = 2 +1 2 2

< = 1, = 1| | =1 =0> = 2 +1 2 J,Lambda - Omega - p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J)))/ J,Lambda - Omega pJ,Lambda ,Omega =0> = 1 J,Lambda - Omega pJ,Lambda ,Omega (-sqrt(
< = 1, =0| | =1 < = 1, =0| | =1 =1> =
2 +1 2 *J*(J)))/ J,Lambda ,Omega p J,Lambda - Omega - (-sqrt(*J*(J)))/ 2 J,Lambda ,Omega p J,Lambda - Omega =0> = 1 J,Lambda ,
< =1 =0| | = 1, = 1> = 2 +1 < =1 =0| | = 1, < =1 =1| | = 1, =0> =
Omega p J,Lambda - Omega (-sqrt(2 +1 2 *J*(J)))/ 对称化: < =1 =1| | =1 =0> = 2 +1 2 J,Lambda ,Omega p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J)))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1
=1| | =0> = 1 p J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega =0| | 2 +1 2 p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J)))/ J,Lambda ,Omega =0| | 2 p J,Lambda ,Omega (-sqrt(
< =1 =1 =0> = < =1 =1 =0> = 2 +1 < =1 =1
J(J)))/ J,Lambda ,Omega =0| | =1> = 1 p J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega=0|p|J,Lambda ,Omega (-sqrt(2*J*(J+1)))/2
< =1 =1 =1> =

<= 1, = 2| | =1 =0> = +1 2 +1 2 J,Lambda - Omega - q J,Lambda ,Omega
<= 1, = 1| | =1 =0> = 2 +1
sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Lambda - Omega - q J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J))
< = 1, = 1| | =1 =1> = +1 2 J,Lambda - Omega - q J,Lambda ,Omega (J*(J))/ J,Lambda -
< = 1, =0| | =1
Omega qJ,Lambda ,Omega =0> = 1 J,Lambda - Omega qJ,Lambda ,Omega -
< = 1, =0| | =1 =1> =
sqrt(2*J*(J+1)) < = 1, =0| | =1 =2> = +1 2 +1 2 J,Lambda - Omega qJ,Lambda ,
< =1 =0| | = 1, = 2> = +1 2 +1
Omega sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega - sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/
2 J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega - -sqrt(
< =1 =0| | = 1, = 1> = 2 +1
J(J)) < =1 =0| | = 1, =0> = 1 J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega J,Lambda ,Omega q
< =1 =1| | = 1, = 1> =
J,Lambda - Omega - (J*(J +1 2))/ J,Lambda ,Omega q J,Lambda -
< =1 =1| | = 1, =0> = 2
Omega -sqrt(*J*(J+1)) < =1 =2| | = 1, =0> = +1 2 +1 2 J,Lambda ,Omega q
J,Lambda - Omega sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ 对称化: < =1 =2| | =1 =0> = +1 2 +1 2
< =1 =1 =0> = 2 +1
J,Lambda ,Omega q J,Lambda ,Omega sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Lambda ,Omega=2|q|J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J))
< =1 =1| | =1 =0> = +1 2 J,Lambda ,Omega q J,Lambda ,Omega (J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1
=1| | =0> = 1 q J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega=1|q|J,Lambda ,Omega -sqrt(2*J*(J+1))
< =1 =1 =1> =
< =1 =1| | =1 =1> = +1 2 +1 2 J,Lambda ,Omega q J,Lambda ,Omega sqrt(J*(J*(J)-)
< =1 =1 =0> = +1 2 +1
*(J))/ J,Lambda ,Omega =0| | 2 q J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> = 2 +1
sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Lambda ,Omega=0|q|J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J)) < =1 =0| | =1 =1> = 1
< =1 =1 =1> =
J,Lambda ,Omega q J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega =0| | +1 2 q
J,Lambda ,Omega (J*(J))/ J,Lambda ,Omega=0|q|J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|q|J,Lambda=1,Omega
=2> = sqrt(J*(J*(J+1)-2)*(J+1))/2

<J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) <J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = 2*J*(J+1)
sqrt(2(J*(J+1)-2))

<J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1))

< = 1, =0| | = 1, =0> = +2 +7 +6 4 J,Λ - Ω DJ,Λ - Ω -
< =1 =1 =0> = +2 +7 +6
J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω =0| | 4 D
< =1 =1 =1> = 2 +1 +2 2
J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω=0|D|J,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) 对称化：

<J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1))

< =1 =1| | =1 =1> = +2 +7 +6 4 J,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =1 =1 =1> = +2 +7 +6
J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω =1| | 4
< =1 =1 =0> = 2 +1 +2 2
DJ,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω=1|D|J,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2)

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = +1 2 J,Lambda - Omega - AD J,Lambda - Omega - J*(J)- J,Lambda - Omega - AD J,Lambda - Omega - (-sqrt(*(J*(J +1 2 2)-)))/
< = 1, = 2| | = 1, = 1> = 2 < = 1, = 1| | = 1, = 2> = 2 +1 2
J,Lambda - Omega - AD J,Lambda - Omega - (-sqrt(*(J*(J)-))))/ 2 J,Lambda - Omega - AD J,Lambda - Omega sqrt(*J*(J))/
< = 1, = 1| | = 1, =0> = 2 +1
2 J,Lambda - Omega ADJ,Lambda - Omega - sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda - Omega ADJ,Lambda - Omega -J*(J)-
< = 1, =0| | = 1, = 1> = 2 +1 < = 1, =0| | = 1, =0> = +1
2 J,Lambda ,Omega =0| | 2 AD J,Lambda ,Omega -J*(J)- J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> = +1 < =1 =1 =1> = 2
=0| | +1 2 AD J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega =1| | 2 AD J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> = 2 +1 < =1 =1 =2> = 2 +1
=1| | 2 2 AD J,Lambda ,Omega (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Omega =2| | 2 AD J,Lambda ,Omega (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,
< =1 =1 =1> = 2 +1 2 < =1 =1 =2> = +1
Omega =2| | 2 AD J,Lambda ,Omega J*(J)- 对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Lambda ,Omega ADJ,Lambda ,Omega J*(J)- J,Lambda ,Omega =2| | +1 2 2 ADJ,Lambda ,Omega (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =2> = 2 +1 2 < =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 ADJ,Lambda ,Omega (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Omega =2| | 2 ADJ,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = 2 +1 < =1 =1 =2> = 2 +1 2 ADJ,Lambda ,Omega -J*(J)- J,Lambda ,Omega < =1 =1 =1| | =1 =0> = 2
< =1 =1 =2> = +1 2 ADJ,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega =1| | +1 2 ADJ,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega =0| | 2 ADJ,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
Omega -J*(J)- J,Lambda ,Omega < =1 =1 =1> = 2 +1 < =1 =1 =1> = 2 +1
=0| | 2 2 ADJ,Lambda ,Omega (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Omega =0| | 2 ADJ,Lambda ,Omega (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Omega=0|ADJ,Lambda ,Omega J*(J)-
< =1 =1 =0> = 2 +1 2 < =1 =1 =0> = +1 2

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =3> a
11 5278
Pv LSIv 数值 - 。微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=0|LSJ,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=0|LSJ,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

< 3 =13| | =3> a Pv LSIv J,Λ ,Ω=0|LS|J,Λ ,Ω -
< =1 =0 =0> =
1/sqrt(3) 的对称化矩阵元

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a
16 442
Pv LSIv 数值 - 。微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=0|LSJ,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=0|LSJ,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a Pv LS振动量子
< =1 =0 =0> =
数 J,Λ, Ω=0|LS|J,Λ, Ω -1/sqrt(3)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a Pv LS振动量子数 数值。浮点数,
24 7288685468983
标准差 = 0.0197211631393428 微扰大小。<J,Λ=-1, Ω=-1|LS|J,Λ=0, Ω=-1> = 1/sqrt(6) <J,Λ=-1, Ω=0|LS|J,Λ=0, Ω=0> = 1/sqrt(6) <J,Λ=1, Ω=0|LS|J,Λ=0, Ω=0> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1, Ω=1|LS|J,Λ=0, Ω=1> = -1/sqrt(6)

< 3 =13| | =4> a Pv LS振动量子数 总角动量
< =1 =0 =1> = 1
量子数,Λ ,Ω=1|LS|总角动量量子数,Λ ,Ω /sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS|总角动量量子数=0,Ω=1> = 1/sqrt(6) <总角动量量子数=1,Ω=0|LS|总角动量量子数=0,Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =4> a Pv J L-振动量子数 Value - . 浮点数, 标准差 = 0.
0 0598221863162786
000255625514810117 微扰大小。

<J,Λ=-1,Ω=-2|J+L-|J,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|J+L-|J,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|J+L-|J,Λ=0,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=2|J+L-|J,Λ=0,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =4> a P_v J L-ev < =1 + =0 =1> = J,Lambda ,Omega=2|J L-|J,Lambda ,Omega -sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1,Omega=2|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|LS耦合振动量子数=7>dv

数值 23 .2188654276278 浮点数，标准差 = 0 .0441226740988454 微扰大小 .

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-2|LS耦合|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(6)

< 3 =13| | =7> a态 P微扰 LS耦合振动量子数 总角动量量子数,Λ < =1 =2 =2> = Λ=1,Ω=2|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|总角动量量子数+L-|振动量子数=7>

数值 -0.062795149954351 浮点数，标准差 = 0.000453447699962488 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-2|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = sqrt(J*(J+1)-6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-6)

< 3 =13| + | =7> a态 P态 v振动量子数 < =1 + =2 =3> = J态 L态-dv J态，Λ，Ω=2|J态 L态-|J态，Λ，Ω√(J*(J+1)-6) <J态，Λ=1，Ω=2|J+L态-|J态，Λ=2，Ω=3> = √(J*(J+1)-2) <J态，Λ=1，Ω=1|J+L态-|J态，Λ=2，Ω=2> = √(J*(J+1)) <J态，Λ=1，Ω=1|J+L态-|J态，Λ=2，Ω=2> = √(J*(J+1)) <J态，Λ=1，Ω=0|J+L态-|J态，Λ=2，Ω=1> = √(J*(J+1)-2) <J态，Λ=1，Ω=0|J+L态-|J态，Λ=2，Ω=1> = √(J*(J+1)-6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =12> a Pv LSa'v 数值 . 浮点数，标准差 .203999893082939 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=-1> = -1/sqrt(6) <J,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|J,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=0|LS耦合|J,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6)

2 39113881014602 = 0

< 3 =13| | =12> a Pv LSa'v < =1 =0 =1> = 1 J,Λ,Ω=1|LS耦合|J,Λ,Ω - /sqrt(6) 的对称化矩阵元 <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=0|LS耦合|J,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =12> a Pv J L-a'态振动量子数 数值 - .

0 0112468031812311 = 0

浮点数，标准差 .00125606908675765 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-2|J+L-|J,Λ=0,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|J+L-|J,Λ=0,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|J+L-|J,Λ=0,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=2|J+L-|J,Λ=0,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =12> a态 Pv J L-a'态振动量子数 J,Lambda, Omega=2|J L-|J,Lambda, Omega sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Omega=2|J+L-|J,Lambda=0, Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=1|J+L-|J,Lambda=0, Omega=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=0|J+L-|J,Lambda=0, Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=0|J+L-|J,Lambda=0, Omega=1> = sqrt(J*(J+1))

< =1 + =0 =1> =

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =3> a态 Pv

22 8568

LSΔv 数值 -。微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-2|LS|J,Lambda=-2,Omega=-2> = 1/sqrt(3) <J,Lambda=1, Omega=2|LS|J,Lambda=2, Omega=2> = -1/sqrt(3)

< 3 =13| | =3> a态 P态 LS耦合Δv J，总角动量量子数，Λ，Ω=2|LS耦合|总角动量量子数，Λ，Ω /sqrt(3) <总角动量量子数，Λ=1，Ω=2|LS耦合|总角动量量子数，Λ=2，Ω=2> = -1/sqrt(3)

< =1 =2 =2> = 1

跃迁矩：< | | > 激发态 μ X态 球形跃迁矩：激发态 | | >< =2| 1 | =0> μ X态 振动量子数 T( )X态振动量子数 秩 分量 自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——注意，相对强度与此数值的平方成正比。

< 1

< =2| 1 | =0> 振动量子数 T( ) X态振动量子数 总角动量量子数- Λ - Ω - T( )总角动量量子数,Λ ,Ω < 1, = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 1 2 sqrt(*(总角动量量子数-))/ 总角动量量子数- Λ ,Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω < 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 2 1 sqrt(*(总角动量量子数-))/ 2 总角动量量子数,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/sqrt(*(2*总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*(2*总角动量量子数+1)) <总角动量量子数+1,Λ=-1,Ω=-1|T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(2*(总角动量量子数+2))/2

< = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +1 2

< +1 =1 =1| 1 | =0 =0> = 2 +2 2 总角动量量子数 ,Λ ,Ω T( )总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt *(总角动量量子数))/ 来自 =2| | =0> 振动量子数 T( ) X态振动量子数的线强度 S 总角动量量子数- Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ < 1 < 1, = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 1 2 ,Ω (总角动量量子数-)/ S 总角动量量子数- Λ ,Ω T( )总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数-)/ 2 S 总角动量量子数,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/
< 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 1 < 1, = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +1 2 S 总角动量量子数,Λ ,Ω 2 S 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 2 T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/- S 总角动量量子数 ,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/
< =1 1 =0 =0> = 2 1 < +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = +2 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω =1| | 2 T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/ =2| | =0> 振动量子数 T( ) X态振动量子数的对称化约化矩阵元 总角动量量子数- Λ ,Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(总角动量量子数-1) <总角动量量子数,Λ−1,Ω=1 - |T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*总角动量量子数+1) <总角动量量子数+1,Λ=1,Ω=1 + |T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(总角动量量子数+2) 来自
< +1 =1 =1| 1 | =0 =0> = +2 < 1, =1 =1 + | 1 | =0 =0> = < 1, =1 =1 + | 1 | =0 =0> = < =2| 1 | =0> 振动量子数 T( )X态振动量子数的对称化约化强度 S 总角动量量子数- Λ ,Ω T( )总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数- S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数
< =1 =1 1 =0 =0> = 2 < +1 =1 =1 + | 1 | =0 =0> = +2 1 T( )总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/- S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数

禁戒跃迁矩: < | | > < 3 =13| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < 3 =13| 1,1 | =0> a态 Pv fT( )X态振动量子数 J- Λ - Ω - fT( ) J,Λ , Ω =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/ < 1, =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 J,Λ - Ω - fT( )J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = < = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - fT( )J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω sqrt(< +1 =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 *(J))/ 2 来自 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 的线强度

< 3 =13| 1,1 | =0> S J- Λ - Ω - fT( )J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( )J,Λ , < 1, = 1, = 1| 1,1 | < 1, =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 Ω (J-)/ 2 S J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- < = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- < =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ < +1 = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ < +1 =1 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 的对称化约化矩阵元

< 3 =13| 1,1 | =0> J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=1,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=1,Ω =1 - |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) < 3 =13| 1,1 | =0> a态 Pv fT( ) X态振动量子数 的对称化线强度 S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω < 1, =1 =1 | 1,1 | =0 =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J- < =1 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2 1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω J < +1 =1 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | > < =7| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 振动量子数 dv fT( )X态振动量子数 X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与该数值的平方成正比。 < =7| 1,1 | =0> 振动量子数 dv fT( )X态振动量子数 总角动量量子数 J- Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω < 1, = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/ < 1, =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 J,Λ - Ω - fT( )J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=2,Ω=1|fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = < = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - fT( )J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω sqrt(< +1 =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 *(J))/ 2 来自振动量子数 dv fT( ) X态振动量子数的线强度

< =7| 1,1 | =0> S J- Λ - Ω - fT( )J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω (J-)/ < 1, = 2, = 1| 1,1 | < 1, =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 2 S J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- < = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- < =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ < +1 = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ < +1 =2 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 振动量子数 dv fT( )X态振动量子数的对称化约化矩阵元

< =7| 1,1 | =0> J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=2,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=2,Ω=1 - | < 1, =2 =1 | 1,1 | =0 =0> = fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 < =7| 1,1 | =0> 振动量子数 dv fT( )X态振动量子数的对称化线强度 S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ , < 1, =2 =1 | 1,1 | =0 Ω =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J- < =2 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2 1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω J < +1 =2 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | > < =12| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =12| 1,1 | =0> a'态振动量子数 fT( ) < 1, =0 = 1| 1,1 | =0 X态振动量子数 J- Λ,Ω - fT( ) J,Λ,Ω =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ,Ω fT( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J-))/ < 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 J,Λ,Ω - fT( ) J,Λ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = < =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ , < +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 Ω sqrt(*(J))/ 2 来自 a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数的线强度

< =12| 1,1 | =0> S J- Λ,Ω - fT( ) J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ,Ω fT( ) < 1, =0 = 1| 1,1 | < 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 J,Λ,Ω (J-)/ 2 S J,Λ,Ω - fT( ) J,Λ,Ω (- *J-)/- < =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J,Λ,Ω fT( ) J,Λ,Ω (- *J-)/- < =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ,Ω (J)/ < +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ,Ω (J)/ < +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2

对称化约化矩阵元: < =12| 1,1 | =0> a'态振动量子数 < 1, =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = fΓ( ) X态振动量子数 J- Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=0,Ω=1 + |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1, Λ=0,Ω=1 - |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 < =12| 1,1 | =0> a' < 1, =0 =1 | 1,1 | =0 态振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数的对称化线强度 S J- Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fΓ( ) J,Λ ,Ω (- *J- < =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2 1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω J < +1 =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | > < =4| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 ev fΓ( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜 —— 请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =4| 1,1 | =0> ev fΓ( ) X 态振动量子数 J- Λ,Ω - fΓ( )J,Λ,Ω < 1, =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 sqrt(*(J-))/ J- Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J-))/ < 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 J,Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ,Ω (*J)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = < =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1 2 (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J))/ J ,Λ,Ω fΓ( )J,Λ,Ω sqrt(*(J))/ < +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 ev fΓ( )X态振动量子数 =0> S J- Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ < =4| 1,1 | < 1, =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ,Ω fΓ( )J,Λ,Ω (J-)/ < 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 2 S J,Λ,Ω - fΓ( )J,Λ,Ω (*J)/ 2 < =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1 < =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 S J,Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω (- *J-)/- 2 S J ,Λ,Ω - fΓ( )J,Λ,Ω (J)/ < +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S J ,Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω (J)/ 2 < +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 < =4| 1,1 | ev fΓ( ) X态振动量子数 =0> J- Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=0,Ω=1 - |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = < 1, =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=1 + |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) S

对称性 ized Line S强度 hs f来自 <振动量子数= 4|fΓ(1 ,1)|X 0 v=S < 1, =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 1 J- Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω J- S J,Λ,Ω - fΓ( )J,Λ,Ω (- *J- < =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = 2 1 1)/- S J,Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω J 禁戒跃迁矩: < +1 =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = +2 < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态 μ X Iv fΓ( ) Xv 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此值的平方成正比。禁戒跃迁矩: < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态 μ X Dsv fΓ( ) Xv 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此值的平方成正比。跃迁矩: < | | > B μ X 球形跃迁矩: B < | | > < =0| 1 | =0> μ X Bv T( ) Xv 秩 分量自动 => 0 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此值的平方成正比。 < =0| 1 | =0> Bv T( ) Xv 的约化矩阵元 J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω=0> = -sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0| < 1, =0 =0| 1 | =0 T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1) < =0| 1 | =0> Bv T( )Xv 的线强度 S J- Λ,Ω T( )J,Λ=0,Ω=0> = J S < 1, =0 =0| 1 | < +1 =0 =0| 1 | =0 =0> = +1 J,Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω J Bv =0| | =0> T( ) < 1 < 1, =0 =0| 1 | =0 =0> = Xv 的对称化约化矩阵元 J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω -sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1) < =0| 1 | =0> Bv < 1, =0 =0| 1 | =0 T( )Xv 的对称化线强度 S J- Λ,Ω T( )J,Λ,Ω=0> = J S<J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = J+1跃迁矩: < | | > B μ 激发态 球形跃迁矩: < B | | > < =0| 1 | =2> μ 激发态 Bv T( ) Av 秩 分量自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此值的平方成正比。 < =0| 1 | =2> Bv T( ) Av 的约化矩阵元 J- Λ,Ω T( ) J,Λ - Ω < 1, =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 +1 2 - sqrt(*(J))/ J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J))/ < 1, =0 =0| 1 | =1 =1> = 2 +1 2 J,Λ,Ω T( )J,Λ - Ω - (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/ < =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 1 2 sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 2 J,Λ,Ω T( )J,Λ - Ω - sqrt(*J)/ J,Λ,Ω < +1 =0 1 =1 =1> = 2 =0| | 2 T( )J,Λ,Ω sqrt(*J)/ Bv =0| | =2> T( )Av 的线强度 S J- < 1 < 1, =0 =0| 1 | Λ,Ω T( )J,Λ = 1, = 1> = +1 2 - Ω - (J)/ S J- Λ,Ω T( )J,Λ,Ω (J)/ < 1, =0 =0| 1 | =1 =1> = +1 2 S J,Λ,Ω T( ) J,Λ - Ω - (- *J-)/- < =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 1 2 S J,Λ,Ω =0| | 2 T( ) J, < =0 1 =1 =1> = 2 +1 < +1 =0 =0| 1 | = 1, = 1> = Λ,Ω (*J)/ S J,Λ,Ω T( ) J,Λ - Ω - J/ 2 S J,Λ,Ω < +1 =0 1 =1 =1> = =0| | 2 T( ) J,Λ,Ω J/ Bv =0| | =2> T( ) Av 的对 < 1 < 1, =0 =0| 1 | + =1 =1> = 称化约化矩阵元 J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω sqrt(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)| - J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)| + J,Λ=1,Ω=1> = sqrt(J) < =0| 1 | =2> Bv T( )Av 的对称化线强度 S J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω < 1, =0 =0| 1 | + =1 =1> = +1 J S J,Λ,Ω T( ) - J,Λ,Ω *J +1 < =0 =0| 1 | =1 =1> = 2 < +1 =0 =0| 1 | + =1 =1> = S J,Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω J

跃迁矩： < | | > C μX 球形跃迁矩：C | | > < =0| 1 | =0> μ X Cv T( ) Xv 秩 分量自动 => 0 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此值的平方成正比。矩阵元同 < | | > < =0| 1 | =0> B μ X Bv T( ) Xv。跃迁矩：C | | > μ 激发态 球形跃迁矩：C | | > < =0| 1 | =2> μ 激发态 Cv T( ) Av 秩 分量自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此值的平方成正比。矩阵元同 < | | > < =0| 1 | =2> B μ 激发态 Bv T( ) Av。模拟：模拟 强度因子：0.333333333333333（1 来自 Spol）强度单位 任意 寿命模型 lmNone 绘图单位 cm^{-1} 荧光 否 nDF

50000 宽度倍数 6 自动最小值 是 自动最大值 是 显示总和 否 显示分量 是 显示Fortrat图 是 使用上态 否 显示对称性 否 显示ΔJ 是 缩放刻度标记大小 是 使用对称性 否 使用态编号 否 Fortrat量子数 J 保持面积 否 分离刻度 否 对数刻度 否 显示二维图 否 自动二维Y轴 是 Fmin 19713.4264274956 绘图范围左边界。Fmax 19725.7352925044 绘图范围右边界。Ymax 7.90431110974814E-183 绘图范围顶部；若设置了自动最大值，则会自动更新。温度 300 转动温度（开尔文）。高斯 0.08 高斯线宽贡献（半峰全宽）。若同时设置此值和洛伦兹线宽（见下文），结果将是二者的卷积。洛伦兹 0.02 洛伦兹线宽贡献（半峰全宽）。也可在主窗口中设置此值和高斯宽度。谱边余量 -1 所需光谱两端额外计算的点数。O阈值 0.0001 忽略小于最大峰强度此比例的峰。振动温度 -1 振动温度（开尔文）；设为 -1（默认值）时，所有玻尔兹曼因子均使用转动温度。最小强度 1E-15 Fortrat图中绘制的最弱跃迁强度，以最强跃迁强度的比例表示。自旋温度 -1 自旋温度；设为 -1（默认值）时，不同自旋态达到平衡。IScale 1 应用于所有谱线强度的缩放因子。绘图分割 0.5 分割绘图时模拟所用的绘图区域比例（-1..1）。CODATA 2018基本常数：h=6.62607015E-34 k=1.380649E-23 NA=6.02214076E23 e=1.602176634E-19 me=9.1093837015E-31

分子 流形' J' S' #'流形" J" S" #" 位置 I 上能级能量 下能级能量 Spol A 宽度 13C18O 碳 1 e态 1 X态 0 e态 1 91922.3502 .3333333 91922.3502 0.0000 .3333333 81197804 0.000000 : rR(0) : 碳 振动量子数=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e 13C18O 碳 0 e态 1 X态 1 e态 1 91915.3218 .3277961 91918.8146 3.4928 .3333333 2.4354e8 0.000000 : pP(1) : 碳 振动量子数=0 0 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e 13C18O 碳 2 e态 1 X态 1 e态 1 91925.9218 .6555922 91929.4146 3.4928 .6666667 97448723 0.000000 : rR(1) : 碳 振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e 13C18O 碳 1 e态 1 X态 2 e态 1 91911.8719 .6339926 91922.3502 10.4783 .6666667 1.6234e8 0.000000 : pP(2) : 碳 振动量子数=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e 13C18O 碳 3 e态 1 X态 2 e态 1 91929.5305 .9509888 91940.0088 10.4783 1.000000 1.0442e8 0.000000 : rR(2) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e 13C18O 碳 2 e态 1 X态 3 e态 1 91908.4584 .9043813 91929.4146 20.9562 1.000000 1.4609e8 0.000000 : pP(3) : 碳 振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e 13C18O 碳 4 e态 1 X态 3 e态 1 91933.1830 1.205842 91954.1392 20.9562 1.333333 1.0830e8 0.000000 : rR(3) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e 13C18O 碳 3 e态 1 X态 4 e态 1 91905.0826 1.127699 91940.0088 34.9261 1.333333 1.3912e8 0.000000 : pP(4) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e 13C18O 碳 5 e态 1 X态 4 e态 1 91936.8786 1.409623 91971.8047 34.9261 1.666667 1.1078e8 0.000000 : rR(4) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e 13C18O 碳 4 e态 1 X态 5 e态 1 91901.7515 1.296383 91954.1392 52.3877 1.666667 1.3524e8 0.000000 : pP(5) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e 13C18O 碳 6 e态 1 X态 5 e态 1 91940.6086 1.555660 91992.9963 52.3877 2.000000 1.1249e8 0.000000 : rR(5) : 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e 13C18O 碳 5 e态 1 X态 6 e态 1 91898.4645 1.406934 91971.8047 73.3402 2.000000 1.3277e8 0.000000 : pP(6) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e 13C18O 碳 7 e态 1 X态 6 e态 1 91944.3808 1.641423 92017.7210 73.3402 2.333333 1.1376e8 0.000000 : rR(6) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e 13C18O 碳 6 e态 1 X态 7 e态 1 91895.2133 1.459856 91992.9963 97.7830 2.333333 1.3105e8 0.000000 : pP(7) : 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e 13C18O 碳 8 e态 1 X态 7 e态 1 91948.1899 1.668407 92045.9729 97.7830 2.666667 1.1473e8 0.000000 : rR(7) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e 13C18O 碳 7 e态 1 X态 8 e态 1 91892.0058 1.459230 92017.7210 125.7152 2.666667 1.2979e8 0.000000 : pP(8) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e 13C18O 碳 9 e态 1 X态 8 e态 1 91952.0397 1.641634 92077.7549 125.7152 3.000000 1.1550e8 0.000000 : rR(8) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e 13C18O 碳 8 e态 1 X态 9 e态 1 91888.8371 1.411991 92045.9729 157.1358 3.000000 1.2882e8 0.000000 : pP(9) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e 13C18O 碳 10 e态 1 X态 9 e态 1 91955.9229 1.568879 92113.0588 157.1358 3.333333 1.1612e8 0.000000 : rR(9) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e 13C18O 碳 9 e态 1 X态 10 e态 1 91885.7111 1.327033 92077.7549 192.0438 3.333333 1.2805e8 0.000000 : pP(10) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e 13C18O 碳 11 e态 1 X态 10 e态 1 91959.8529 1.459736 92151.8967 192.0438 3.666667 1.1664e8 0.000000 : rR(10) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e 13C18O 碳 10 e态 1 X态 11 e态 1 91882.6208 1.214243 92113.0588 230.4379 3.666667 1.2743e8 0.000000 : pP(11) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e 13C18O 碳 12 e态 1 X态 11 e态 1 91963.8197 1.324628 92194.2577 230.4379 4.000000 1.1708e8 0.000000 : rR(11) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e 13C18O 碳 11 e态 1 X态 12 e态 1 91879.5799 1.083595 92151.8967 272.3168 4.000000 1.2691e8 0.000000 : pP(12) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e 13C18O 碳 13 e态 1 X态 12 e态 1 91967.8160 1.173894 92240.1329 272.3168 4.333333 1.1746e8 0.000000 : rR(12) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e 13C18O 碳 12 e态 1 X态 13 e态 1 91876.5786 .9443794 92194.2577 317.6791 4.333333 1.2648e8 0.000000 : pP(13) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e 13C18O 碳 14 e态 1 X态 13 e态 1 91971.8583 1.017024 92289.5374 317.6791 4.666667 1.1779e8 0.000000 : rR(13) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e 13C18O 碳 13 e态 1 X态 14 e态 1 91873.6097 .8046310 92240.1329 366.5231 4.666667 1.2611e8 0.000000 : pP(14) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e 13C18O 碳 15 e态 1 X态 14 e态 1 91975.9384 .8621046 92342.4616 366.5231 5.000000 1.1807e8 0.000000 : rR(14) : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e 13C18O 碳 14 e态 1 X态 15 e态 1 91870.6902 .6707753 92289.5374 418.8472 5.000000 1.2578e8 0.000000 : pP(15) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e 13C18O 碳 16 e态 1 X态 15 e态 1 91980.0553 .7154937 92398.9025 418.8472 5.333333 1.1833e8 0.000000 : rR(15) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e 13C18O 碳 15 e态 1 X态 16 e态 1 91867.8120 .5474926 92342.4616 474.6496 5.333333 1.2550e8 0.000000 : pP(16) : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e 13C18O 碳 17 e态 1 X态 16 e态 1 91984.2091 .5817108 92458.8587 474.6496 5.666667 1.1856e8 0.000000 : rR(16) : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e 13C18O 碳 16 e态 1 X态 17 e态 1 91864.9742 .4377629 92398.9025 533.9283 5.666667 1.2525e8 0.000000 : pP(17) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e 13C18O 碳 18 e态 1 X态 17 e态 1 91988.4008 .4635137 92522.3291 533.9283 6.000000 1.1876e8 0.000000 : rR(17) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e 13C18O 碳 17 e态 1 X态 18 e态 1 91862.1775 .3430504 92458.8587 596.6812 6.000000 1.2503e8 0.000000 : pP(18) : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e 13C18O 碳 19 e态 1 X态 18 e态 1 91992.6315 .3621088 92589.3127 596.6812 6.333333 1.1895e8 0.000000 : rR(18) : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e

13C18O 碳 18 e态 1 X态 19 e态 1 91859.4228 .2635741 92522.3291 662.9063 6.333333 1.2483e8 0.000000 : pP(19) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 碳 20 e态 1 X态 19 e态 1 91996.8976 .2774464 92659.8039 662.9063 6.666667 1.1912e8 0.000000 : rR(19) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 碳 19 e态 1 X态 20 e态 1 91856.7115 .1986167 92589.3127 732.6012 6.666667 1.2465e8 0.000000 : pP(20) : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 碳 21 e态 1 X态 20 e态 1 92001.1995 .2085475 92733.8006 732.6012 7.000000 1.1927e8 0.000000：rR(20)：碳 振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 碳 20 e态 1 X态 21 e态 1 91854.0405 .1468316 92659.8039 805.7634 7.000000 1.2449e8 0.000000：pP(21)：碳 振动量子数=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 碳 22 e态 1 X态 21 e态 1 92005.5398 .1538236 92811.3031 805.7634 7.333333 1.1941e8 0.000000：rR(21)：碳 振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 碳 21 e态 1 X态 22 e态 1 91851.4102 .1065175 92733.8006 882.3904 7.333333 1.2434e8 0.000000 : pP(22) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 碳 23 e态 1 X态 22 e态 1 92009.9176 .1113592 92892.3080 882.3904 7.666667 1.1955e8 0.000000 : rR(22) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 碳 22 e态 1 X态 23 e态 1 91848.8235 .0758425 92811.3031 962.4797 7.666667 1.2420e8 0.000000 : pP(23) : 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 碳 24 e态 1 X态 23 e态 1 92014.3427 .0791400 92976.8223 962.4797 8.000000 1.1967e8 0.000000：rR(23)：碳 振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 碳 23 e态 1 X态 24 e态 1 91846.2797 .0530124 92892.3080 1046.0283 8.000000 1.2408e8 0.000000：pP(24)：碳 振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 碳 25 e态 1 X态 24 e态 1 92018.7949 .0552212 93064.8231 1046.0283 8.333333 1.1978e8 0.000000：rR(24)：碳 振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 碳 24 e态 1 X态 25 e态 1 91843.7889 .0363821 92976.8223 1133.0334 8.333333 1.2396e8 0.000000 : pP(25) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 碳 26 e态 1 X态 25 e态 1 92023.2842 .0378374 93156.3176 1133.0334 8.666667 1.1989e8 0.000000 : rR(25)支跃迁 : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 碳 25 e态 1 X态 26 e态 1 91841.3312 .0245194 93064.8231 1223.4920 8.666667 1.2386e8 0.000000 : pP(26) : 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 碳 27 e态 1 X态 26 e态 1 92027.8069 .0254625 93251.2989 1223.4920 9.000000 1.1999e8 0.000000 : rR(26) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 碳 26 e态 1 X态 27 e态 1 91838.9167 .0162294 93156.3176 1317.4009 9.000000 1.2376e8 0.000000 : pP(27) : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 碳 28 e态 1 X态 27 e态 1 92032.3659 .0168305 93349.7667 1317.4009 9.333333 1.2009e8 0.000000 : rR(27) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 碳 27 e态 1 X态 28 e态 1 91836.5420 .0105517 93251.2989 1414.7569 9.333333 1.2366e8 0.000000 : pP(28) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 碳 29 e态 1 X态 28 e态 1 92036.9621 .0109285 93451.7190 1414.7569 9.666667 1.2018e8 0.000000 : rR(28) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 碳 28 e态 1 X态 29 e态 1 91834.2102 .0067392 93349.7667 1515.5565 9.666667 1.2358e8 0.000000 : pP(29) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 碳 30 e态 1 X态 29 e态 1 92041.5917 .0069716 93557.1483 1515.5565 10.00000 1.2027e8 0.000000 : rR(29) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 碳 29 e态 1 X态 30 e态 1 91831.9226 .0042288 93451.7190 1619.7964 10.00000 1.2350e8 0.000000 : pP(30) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 碳 31 e态 1 X态 30 e态 1 92046.2585 .0043698 93666.0549 1619.7964 10.33333 1.2035e8 0.000000 : rR(30) : 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 碳 30 e态 1 X态 31 e态 1 91829.6755 .0026073 93557.1483 1727.4728 10.33333 1.2342e8 0.000000 : pP(31) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 碳 32 e态 1 X态 31 e态 1 92050.9615 .0026914 93778.4343 1727.4728 10.66667 1.2043e8 0.000000 : rR(31) : 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 碳 31 e态 1 X态 32 e态 1 91827.4729 .0015796 93666.0549 1838.5820 10.66667 1.2335e8 0.000000 : pP(32) : 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 碳 33 e态 1 X态 32 e态 1 92055.6995 .0016290 93894.2815 1838.5820 11.00000 1.2050e8 0.000000 : rR(32) : 碳 振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 碳 32 e态 1 X态 33 e态 1 91825.3141 .0009405 93778.4343 1953.1202 11.00000 1.2328e8 0.000000 : pP(33) : 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 碳 34 e态 1 X态 33 e态 1 92060.4715 .0009690 94013.5918 1953.1202 11.33333 1.2057e8 0.000000 : rR(33) : 碳 振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 碳 33 e态 1 X态 34 e态 1 91823.1981 .0005503 93894.2815 2071.0834 11.33333 1.2321e8 0.000000 : pP(34) : 碳 振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 碳 35 e态 1 X态 34 e态 1 92065.2735 .0005665 94136.3569 2071.0834 11.66667 1.2064e8 0.000000 : rR(34) : 碳 振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 碳 34 e态 1 X态 35 e态 1 91821.1243 .0003165 94013.5918 2192.4675 11.66667 1.2315e8 0.000000 : pP(35) : 碳 振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 碳 36 e态 1 X态 35 e态 1 92070.1135 .0003255 94262.5810 2192.4675 12.00000 1.2071e8 0.000000 : rR(35) : 碳 振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 碳 35 e态 1 X态 36 e态 1 91819.0887 .0001789 94136.3569 2317.2682 12.00000 1.2310e8 0.000000 : pP(36) : 碳 振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 碳 37 e态 1 X态 36 e态 1 92074.9855 .0001839 94392.2537 2317.2682 12.33333 1.2077e8 0.000000 : rR(36) : 碳 振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 碳 38 e态 1 X态 37 e态 1 92079.8945 .0001021 94525.3758 2445.4813 12.66667 1.2083e8 0.000000：rR(37)：碳 振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O B常数 1 e态 1 X态 0 e态 1 86920.8991 .3333333 86920.8991 0.0000 .3333333 68652057 0.000000：rR(0)：B常数 Bv=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O B常数 0 e态 1 X态 1 e态 1 86913.8645 .3277961 86917.3573 3.4928 .3333333 2.0591e8 0.000000：pP(1)支：B常数 Bv=0 0 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O B常数 2 e态 1 X态 1 e态 1 86924.4874 .6555922 86927.9802 3.4928 .6666667 82392672 0.000000：rR(1)：B B常数=0 2 2 F1e - X X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O B常数 1 e态 1 X态 2 e态 1 86910.4208 .6339926 86920.8991 10.4783 .6666667 1.3725e8 0.000000：pP(2)：B B常数=0 1 1 F1e - X X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O B常数 3 e态 1 X态 2 e态 1 86928.1193 .9509888 86938.5976 10.4783 1.000000 88288929 0.000000：rR(2)：B B常数=0 3 3 F1e - X X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O B 2 e 1 X态 3 e 1 86907.0241 .9043813 86927.9802 20.9562 1.000000 1.2351e8 0.000000 : pP(3) : B常数 B常数振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O B 4 e 1 X态 3 e 1 86931.7973 1.205842 86952.7535 20.9562 1.333333 91570511 0.000000 : rR(3) : B常数 B常数振动量子数=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O B 3 e 1 X态 4 e 1 86903.6715 1.127699 86938.5976 34.9261 1.333333 1.1762e8 0.000000 : pP(4) : B常数 B常数振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O B常数 5 e态 1 X态 4 e态 1 86935.5224 1.409623 86970.4486 34.9261 1.666667 93663699 0.000000 : rR(4) : B常数 Bv=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O B常数 4 e态 1 X态 5 e态 1 86900.3658 1.296383 86952.7535 52.3877 1.666667 1.1434e8 0.000000 : pP(5) : B常数 Bv=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O B常数 6 e态 1 X态 5 e态 1 86939.2932 1.555660 86991.6809 52.3877 2.000000 95117055 0.000000 : rR(5) : B常数 Bv=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O B常数 5 e态 1 X态 6 e态 1 86897.1084 1.406934 86970.4486 73.3402 2.000000 1.1225e8 0.000000：pP(6)：B B常数振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O B常数 7 e态 1 X态 6 e态 1 86943.1099 1.641423 87016.4501 73.3402 2.333333 96186578 0.000000：rR(6)：B B常数振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O B常数 6 e态 1 X态 7 e态 1 86893.8978 1.459856 86991.6809 97.7830 2.333333 1.1080e8 0.000000：pP(7)：B B常数振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O B常数 8 e态 1 X态 7 e态 1 86946.9720 1.668407 87044.7550 97.7830 2.666667 97007795 0.000000 : rR(7) : B Bv=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O B常数 7 e态 1 X态 8 e态 1 86890.7349 1.459230 87016.4501 125.7152 2.666667 1.0973e8 0.000000 : pP(8) : B Bv=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O B常数 9 e态 1 X态 8 e态 1 86950.8793 1.641634 87076.5945 125.7152 3.000000 97659169 0.000000 : rR(8) : B Bv=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O B常数 8 e态 1 X态 9 e态 1 86887.6192 1.411991 87044.7550 157.1358 3.000000 1.0891e8 0.000000 : pP(9) : B B常数振动量子数=0 8 8 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O B常数 10 e态 1 X态 9 e态 1 86954.8315 1.568879 87111.9674 157.1358 3.333333 98189272 0.000000 : rR(9) : B B常数振动量子数=0 10 10 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O B常数 9 e态 1 X态 10 e态 1 86884.5507 1.327033 87076.5945 192.0438 3.333333 1.0826e8 0.000000 : pP(10) : B B常数振动量子数=0 9 9 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O B常数 11 e态 1 X态 10 e态 1 86958.8284 1.459736 87150.8722 192.0438 3.666667 98629781 0.000000：rR(10)：B B常数振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O B常数 10 e态 1 X态 11 e态 1 86881.5294 1.214243 87111.9674 230.4379 3.666667 1.0774e8 0.000000：pP(11)：B B常数振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O B常数 12 e态 1 X态 11 e态 1 86962.8724 1.324628 87193.3103 230.4379 4.000000 99002246 0.000000：rR(11)：B B常数振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O B常数 11 e态 1 X态 12 e态 1 86878.5554 1.083595 87150.8722 272.3168 4.000000 1.0730e8 0.000000：pP(12)：B B常数振动量子数=0 11 11 F1e - X X态X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O B常数 13 e态 1 X态 12 e态 1 86966.9570 1.173894 87239.2738 272.3168 4.333333 99321802 0.000000：rR(12)：B B常数振动量子数=0 13 13 F1e - X X态X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O B常数 12 e态 1 X态 13 e态 1 86875.6313 .9443794 87193.3103 317.6791 4.333333 1.0693e8 0.000000：pP(13)：B B常数振动量子数=0 12 12 F1e - X X态X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O B常数 14 e态 1 X态 13 e态 1 86971.0869 1.017024 87288.7659 317.6791 4.666667 99599443 0.000000 : rR(13) : B常数 B常数振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O B常数 13 e态 1 X态 14 e态 1 86872.7507 .8046310 87239.2738 366.5231 4.666667 1.0661e8 0.000000 : pP(14) : B常数 B常数振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O B常数 15 e态 1 X态 14 e态 1 86975.2607 .8621046 87341.7838 366.5231 5.000000 99843309 0.000000 : rR(14) : B常数 B常数振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O B常数 14 e态 1 X态 15 e态 1 86869.9187 .6707753 87288.7659 418.8472 5.000000 1.0634e8 0.000000 : pP(15) : B常数 B常数v=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O B常数 16 e态 1 X态 15 e态 1 86979.4768 .7154937 87398.3240 418.8472 5.333333 1.0006e8 0.000000 : rR(15) : B常数 B常数v=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O B常数 15 e态 1 X态 16 e态 1 86867.1343 .5474926 87341.7838 474.6496 5.333333 1.0610e8 0.000000 : pP(16) : B常数 B常数v=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
13C18O B常数 17 e态 1 X态 16 e态 1 86983.6962 .5817108 87458.3457 474.6496 5.666667 1.0025e8 0.000000：rR(16)支：B B常数振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
13C18O B常数 16 e态 1 X态 17 e态 1 86864.3957 .4377629 87398.3240 533.9283 5.666667 1.0589e8 0.000000：pP(17)：B B常数振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O B常数 18 e态 1 X态 17 e态 1 86988.0386 .4635137 87521.9669 533.9283 6.000000 1.0043e8 0.000000：rR(17)：B B常数振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O B常数 17 e态 1 X态 18 e态 1 86861.6645 .3430504 87458.3457 596.6812 6.000000 1.0570e8 0.000000：pP(18)：B常数 B常数振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O B常数 19 e态 1 X态 18 e态 1 86992.3917 .3621088 87589.0730 596.6812 6.333333 1.0059e8 0.000000：rR(18)支：B常数 B常数振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O B常数 18 e态 1 X态 19 e态 1 86859.0606 .2635741 87521.9669 662.9063 6.333333 1.0554e8 0.000000：pP(19)：B常数 B常数振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O B常数 20 e态 1 X态 19 e态 1 86996.7785 .2774464 87659.6849 662.9063 6.666667 1.0073e8 0.000000：rR(19)：B Bv=0 20 20 F1e - X Xv=0 19 19 F1e
13C18O B常数 19 e态 1 X态 20 e态 1 86856.4718 .1986167 87589.0730 732.6012 6.666667 1.0538e8 0.000000：pP(20)：B Bv=0 19 19 F1e - X Xv=0 20 20 F1e
13C18O B常数 21 e态 1 X态 20 e态 1 87001.2082 .2085475 87733.8094 732.6012 7.000000 1.0086e8 0.000000：rR(20)：B Bv=0 21 21 F1e - X Xv=0 20 20 F1e
13C18O B常数 20 e态 1 X态 21 e态 1 86853.9215 .1468316 87659.6849 805.7634 7.000000 1.0525e8 0.000000：pP(21)：B B常数振动量子数=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O B常数 22 e态 1 X态 21 e态 1 87005.6801 .1538236 87811.4435 805.7634 7.333333 1.0098e8 0.000000：rR(21)：B B常数振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O B常数 21 e态 1 X态 22 e态 1 86851.4189 .1065175 87733.8094 882.3904 7.333333 1.0512e8 0.000000：pP(22)：B B常数振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O B常数 23 e态 1 X态 22 e态 1 87010.1929 .1113592 87892.5834 882.3904 7.666667 1.0110e8 0.000000：rR(22)支：B B常数振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O B常数 22 e态 1 X态 23 e态 1 86848.9638 .0758425 87811.4435 962.4797 7.666667 1.0501e8 0.000000：pP(23)支：B B常数振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O B常数 24 e态 1 X态 23 e态 1 87014.7458 .0791400 87977.2254 962.4797 8.000000 1.0120e8 0.000000：rR(23)支：B B常数振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O B常数 23 e态 1 X态 24 e态 1 86846.5551 .0530124 87892.5834 1046.0283 8.000000 1.0490e8 0.000000：pP(24)：B B常数振动量子数=0 23 23 F1e - X X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O B常数 25 e态 1 X态 24 e态 1 87019.3373 .0552212 88065.3656 1046.0283 8.333333 1.0130e8 0.000000：rR(24)：B B常数振动量子数=0 25 25 F1e - X X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O B常数 24 e态 1 X态 25 e态 1 86844.1920 .0363821 87977.2254 1133.0334 8.333333 1.0480e8 0.000000：pP(25)：B B常数振动量子数=0 24 24 F1e - X X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O B常数 26 e态 1 X态 25 e态 1 87023.9741 .0378374 88157.0075 1133.0334 8.666667 1.0139e8 0.000000：rR(25)支跃迁：B B常数振动量子数=0 26 26 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O B常数 25 e态 1 X态 26 e态 1 86841.8736 .0245194 88065.3656 1223.4920 8.666667 1.0471e8 0.000000：pP(26)：B B常数振动量子数=0 25 25 F1e - X X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O B常数 27 e态 1 X态 26 e态 1 87028.6509 .0254625 88252.1429 1223.4920 9.000000 1.0148e8 0.000000：rR(26)：B B常数振动量子数=0 27 27 F1e - X X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O B 26 e 1 X态 27 e 1 86839.6066 .0162294 88157.0075 1317.4009 9.000000 1.0463e8 0.000000 : pP(27) : B常数 B常数v=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O B 28 e 1 X态 27 e 1 87033.3613 .0168305 88350.7622 1317.4009 9.333333 1.0156e8 0.000000 : rR(27) : B常数 B常数v=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e

13C18O B常数 27 e态 1 X态 28 e态 1 86837.3860 .0105517 88252.1429 1414.7569 9.333333 1.0455e8 0.000000 : pP(28) : B B常数振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O B常数 29 e态 1 X态 28 e态 1 87038.1146 .0109285 88452.8715 1414.7569 9.666667 1.0164e8 0.000000 : rR(28) : B B常数振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O B常数 28 e态 1 X态 29 e态 1 86835.2057 .0067392 88350.7622 1515.5565 9.666667 1.0448e8 0.000000 : pP(29) : B B常数振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O B常数 30 e态 1 X态 29 e态 1 87042.9008 .0069716 88558.4574 1515.5565 10.00000 1.0172e8 0.000000 : rR(29) : B B常数振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O B常数 29 e态 1 X态 30 e态 1 86833.0751 .0042288 88452.8715 1619.7964 10.00000 1.0441e8 0.000000 : pP(30) : B B常数振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O B常数 31 e态 1 X态 30 e态 1 87047.7207 .0043698 88667.5171 1619.7964 10.33333 1.0179e8 0.000000 : rR(30) : B B常数振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O B常数 30 e态 1 X态 31 e态 1 86830.9846 .0026073 88558.4574 1727.4728 10.33333 1.0434e8 0.000000 : pP(31) : B常数 B常数v=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O B常数 32 e态 1 X态 31 e态 1 87052.5802 .0026914 88780.0530 1727.4728 10.66667 1.0186e8 0.000000 : rR(31) : B常数 B常数v=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O B常数 31 e态 1 X态 32 e态 1 86828.9350 .0015796 88667.5171 1838.5820 10.66667 1.0428e8 0.000000 : pP(32) : B常数 B常数v=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O B常数 33 e态 1 X态 32 e态 1 87057.4912 .0016290 88896.0733 1838.5820 11.00000 1.0192e8 0.000000 : rR(32) : B B常数振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O B常数 32 e态 1 X态 33 e态 1 86826.9328 .0009405 88780.0530 1953.1202 11.00000 1.0422e8 0.000000 : pP(33) : B B常数振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O B常数 34 e态 1 X态 33 e态 1 87062.4277 .0009690 89015.5479 1953.1202 11.33333 1.0198e8 0.000000 : rR(33) : B B常数振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O B常数 33 e态 1 X态 34 e态 1 86824.9899 .0005503 88896.0733 2071.0834 11.33333 1.0417e8 0.000000 : pP(34) : B B常数振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O B常数 35 e态 1 X态 34 e态 1 87067.4174 .0005665 89138.5008 2071.0834 11.66667 1.0204e8 0.000000 : rR(34) : B B常数振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O B常数 34 e态 1 X态 35 e态 1 86823.0804 .0003165 89015.5479 2192.4675 11.66667 1.0412e8 0.000000 : pP(35) : B B常数振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O B常数 36 e态 1 X态 35 e态 1 87072.3997 .0003255 89264.8671 2192.4675 12.00000 1.0210e8 0.000000 : rR(35) : B B常数振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O B常数 35 e态 1 X态 36 e态 1 86821.2326 .0001789 89138.5008 2317.2682 12.00000 1.0407e8 0.000000 : pP(36) : B B常数振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O B常数 37 e态 1 X态 36 e态 1 87077.4444 .0001839 89394.7126 2317.2682 12.33333 1.0216e8 0.000000 : rR(36) : B B常数振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O B常数 38 e态 1 X态 37 e态 1 87082.5221 .0001021 89528.0034 2445.4813 12.66667 1.0221e8 0.000000 : rR(37) : B常数 B态振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O 激发态 1 e态 1 X态 0 e态 1 67560.4283 .5936401 67560.4283 0.0000 .5936401 57411990 0.000000 : rR(0) : 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e态 2 X态 0 e态 1 67635.7484 .0038055 67635.7484 0.0000 .0038055 369271.7 0.000000 : rR1(0) : 激发态 a3P振动带=13 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 3 X态 0 e 1 67675.0379 .8221444 67675.0379 0.0000 .8221444 79916381 0.000000: sR21(0): 激发态 a3P振动带=13 1 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 4 X态 0 e 1 67803.8618 .3684105 67803.8618 0.0000 .3684105 36016169 0.000000: qR1(0): 激发态 振动量子数=4 1 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 5 X态 0 e 1 67810.2130 .2262324 67810.2130 0.0000 .2262324 22122914 0.000000: sR31(0): 激发态 振动量子数=4 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 6 X态 0 e 1 67987.8961 .6252122 67987.8961 0.0000 .6252122 61620389 0.000000: sR31(0): 激发态 振动量子数=7 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 7 X态 0 e 1 67992.6434 .6938881 67992.6434 0.0000 .6938881 68403357 0.000000: rR21(0): 激发态 a'态振动量子数=12 1 1 F2e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 f 1 X态 1 e 1 67556.9350 .8756358 67560.4278 3.4928 .8904273 86101447 0.000000: qQ(1): 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 3 X态 1 e 1 67636.0701 .0061962 67639.5629 3.4928 .0063009 611420.3 0.000000 : qQ1(1) : 激发态 a3P振动带=13 1 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 4 X态 1 e 1 67671.5588 1.212154 67675.0516 3.4928 1.232630 1.1980e8 0.000000 : rQ21(1) : 激发态 a3P振动带=13 1 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 5 X态 1 e 1 67802.7807 .8770838 67806.2735 3.4928 .8918997 87188805 0.000000 : qQ21(1) : 激发态 振动量子数=4 1 1 F2f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 6 X态 1 e 1 67984.4030 .9145238 67987.8958 3.4928 .9299722 91643150 0.000000: rQ31(1): 激发态 振动量子数=7 1 2 F3f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 7 X态 1 e 1 67987.6666 .8269967 67991.1594 3.4928 .8409665 82884114 0.000000: pQ1(1): 激发态 a'态振动量子数=12 1 0 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 8 X态 1 e 1 67994.9809 .2042622 67998.4737 3.4928 .2077126 20478385 0.000000: rQ31(1): 激发态 a'态振动量子数=12 1 2 F3f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 1 X态 1 e 1 67562.6044 .8751036 67566.0972 3.4928 .8898860 51642466 0.000000: rR(1): 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 2 X态 1 e 1 67637.1322 .0165777 67640.6250 3.4928 .0168578 981541.8 0.000000: qR1(1): 激发态 a3P振动带=13 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 3 X态 1 e 1 67676.7124 1.188186 67680.2051 3.4928 1.208257 70474278 0.000000: rR21(1): 激发态 a3P振动带=13 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 4 X态 1 e 1 67710.2950 .0150915 67713.7878 3.4928 .0153464 896446.3 0.000000 : sR31(1) : 激发态 a3P振动带=13 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 5 X态 1 e 1 67802.5469 .4989530 67806.0397 3.4928 .5073815 29759530 0.000000 : qR1(1) : 激发态 振动量子数=4 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 6 X态 1 e 1 67813.3319 .3772959 67816.8247 3.4928 .3836693 22514157 0.000000 : sR31(1) : 激发态 振动量子数=4 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 7 X态 1 e 1 67949.8912 .0058195 67953.3840 3.4928 .0059178 349367.4 0.000000: rR21(1): 激发态 振动量子数=7 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 8 X态 1 e 1 67988.9639 .9136136 67992.4567 3.4928 .9290466 54942218 0.000000: sR31(1): 激发态 振动量子数=7 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 9 X态 1 e 1 67993.3010 1.026301 67996.7938 3.4928 1.043637 61730728 0.000000: rR21(1): 激发态 a'态振动量子数=12 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 e 1 X态 2 e 1 67549.9500 .2822726 67560.4283 10.4783 .2968201 28692641 0.000000 : pP(2) : 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 2 X态 2 e 1 67625.2701 .0018095 67635.7484 10.4783 .0019028 184550.1 0.000000 : pP1(2) : 激发态 a3P振动带=13 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 3 X态 2 e 1 67664.5596 .3909251 67675.0379 10.4783 .4110722 39939633 0.000000 : qP21(2) : 激发态 a3P振动带=13 1 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 4 X态 2 e 1 67793.3836 .1751772 67803.8618 10.4783 .1842053 17999737 0.000000: oP1(2): 激发态 振动量子数=4 1 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 5 X态 2 e 1 67799.7347 .1075722 67810.2130 10.4783 .1131162 11056330 0.000000: qP31(2): 激发态 振动量子数=4 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 6 X态 2 e 1 67977.4179 .2972849 67987.8961 10.4783 .3126061 30795951 0.000000: qP31(2): 激发态 振动量子数=7 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 7 X态 2 e 1 67982.1651 .3299399 67992.6434 10.4783 .3469441 34185869 0.000000: pP21(2): 激发态 a'态振动量子数=12 1 1 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 1 X态 2 e 1 67555.6174 1.410271 67566.0957 10.4783 1.482952 86032992 0.000000: qQ(2): 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 2 X态 2 e 1 67573.8534 .0004560 67584.3317 10.4783 .0004795 27838.58 0.000000: qQ(2): 激发态 I态振动量子数=3 2 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 3 X态 2 e 1 67633.9224 .0293554 67644.4007 10.4783 .0308683 1797051 0.000000: pQ1(2): 激发态 a3P振动带=13 2 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 4 X态 2 e 1 67669.7673 1.912436 67680.2455 10.4783 2.010998 1.1726e8 0.000000: qQ21(2): 激发态 a3P振动带=13 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 5 X态 2 e 1 67703.3096 .0243487 67713.7879 10.4783 .0256035 1495143 0.000000: rQ31(2): 激发态 a3P振动带=13 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 6 X态 2 e 1 67800.1912 1.411988 67810.6694 10.4783 1.484758 87076685 0.000000 : qQ21(2) : 激发态 振动量子数=4 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 7 X态 2 e 1 67942.9057 .0093790 67953.3840 10.4783 .0098624 582059.4 0.000000 : qQ21(2) : 激发态 d态振动量子数=7 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 8 X态 2 e 1 67981.9756 1.352777 67992.4539 10.4783 1.422495 84097958 0.000000 : rQ31(2) : 激发态 d态振动量子数=7 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 9 X态 2 e 1 67982.9521 1.281734 67993.4304 10.4783 1.347791 79684911 0.000000 : pQ1(2) : 激发态 a'态振动量子数=12 2 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 10 X态 2 e 1 67994.0273 .4921611 68004.5056 10.4783 .5175256 30612414 0.000000 : rQ31(2) : 激发态 a'态振动量子数=12 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 1 X态 2 e 1 67564.1219 1.127253 67574.6002 10.4783 1.185348 49138264 0.000000 : rR(2) : 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 2 X态 2 e 1 67637.4665 .0417760 67647.9448 10.4783 .0439290 1827001 0.000000: qR1(2): 激发态 a3P振动带=13 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 3 X态 2 e 1 67677.4821 1.487100 67687.9604 10.4783 1.563741 65151259 0.000000: rR21(2): 激发态 a3P振动带=13 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 4 X态 2 e 1 67711.7562 .0469985 67722.2345 10.4783 .0494207 2062179 0.000000: sR31(2): 激发态 a3P振动带=13 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e态 5 X态 2 e态 1 67799.9593 .6184552 67810.4376 10.4783 .6503286 27242475 0.000000 : qR1(2) : 激发态 振动量子数=4 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e态 6 X态 2 e态 1 67815.1327 .5095982 67825.6110 10.4783 .5358614 22462479 0.000000 : sR31(2) : 激发态 振动量子数=4 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e态 8 X态 2 e态 1 67949.3909 .0184130 67959.8692 10.4783 .0193619 816453.0 0.000000 : rR21(2) : 激发态 d态振动量子数=7 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 9 X态 2 e 1 67988.8161 1.160224 67999.2944 10.4783 1.220019 51535247 0.000000 : sR31(2): 激发态 振动量子数=7 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 10 X态 2 e 1 67992.5409 1.330062 68003.0192 10.4783 1.398609 59088866 0.000000 : rR21(2): 激发态 a'态振动量子数=12 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 e 1 X态 3 e 1 67545.1411 .5365309 67566.0972 20.9562 .5932574 34401621 0.000000 : pP(3) : 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 2 X态 3 e 1 67619.6688 .0101639 67640.6250 20.9562 .0112385 653854.5 0.000000 : oP1(3) : 激发态 a3P振动带=13 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 3 X态 3 e 1 67659.2490 .7284836 67680.2051 20.9562 .8055049 46946491 0.000000 : pP21(3) : 激发态 a3P振动带=13 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 4 X态 3 e 1 67692.8316 .0092527 67713.7878 20.9562 .0102309 597168.6 0.000000 : qP31(3) : 激发态 a3P振动带=13 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 5 X态 3 e 1 67785.0836 .3059109 67806.0397 20.9562 .3382543 19824361 0.000000: oP1(3): 激发态 ev=4 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 6 X态 3 e 1 67795.8685 .2313222 67816.8247 20.9562 .2557795 14997845 0.000000: qP31(3): 激发态 ev=4 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 7 X态 3 e 1 67932.4278 .0035680 67953.3840 20.9562 .0039452 232732.1 0.000000: pP21(3): 激发态 dv=7 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 8 X态 3 e 1 67971.5005 .5601416 67992.4567 20.9562 .6193644 36599928 0.000000 : qP31(3) : 激发态 振动量子数=7 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 9 X态 3 e 1 67975.8376 .6292307 67996.7938 20.9562 .6957582 41122117 0.000000 : pP21(3) : 激发态 a'态振动量子数=12 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 1 X态 3 e 1 67553.6406 1.875400 67574.5968 20.9562 2.073682 85923883 0.000000 : qQ(3) : 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 2 X态 3 e 1 67569.9977 .0013338 67590.9538 20.9562 .0014749 61155.68 0.000000: qQ(3): 激发态 振动量子数=3 3 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 3 X态 3 e 1 67630.7086 .0758726 67651.6648 20.9562 .0838944 3488112 0.000000: pQ1(3): 激发态 a3P振动带=13 3 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 4 X态 3 e 1 67667.0824 2.468487 67688.0385 20.9562 2.729476 1.1367e8 0.000000: qQ21(3): 激发态 a3P振动带=13 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 5 X态 3 e态 1 67701.2788 .0783690 67722.2350 20.9562 .0866548 3614170 0.000000 : rQ31(3) : 激发态 a3P振动带=13 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 6 X态 3 e态 1 67796.3071 1.876507 67817.2633 20.9562 2.074906 86904451 0.000000 : qQ21(3) : 激发态 振动量子数=4 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 8 X态 3 e态 1 67938.9130 .0306392 67959.8692 20.9562 .0338786 1427929 0.000000 : qQ21(3) : 激发态 振动量子数=7 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 9 X态 3 e 1 67976.7064 1.252944 67997.6626 20.9562 1.385415 58490562 0.000000: pQ1(3): 激发态 a'态振动量子数=12 3 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 10 X态 3 e 1 67978.3417 2.125488 67999.2979 20.9562 2.350212 99230264 0.000000: rQ31(3): 激发态 振动量子数=7 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 11 X态 3 e 1 67991.7609 .7660011 68012.7171 20.9562 .8469891 35782615 0.000000: rQ31(3): 激发态 a'态振动量子数=12 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 1 X态 3 e 1 67564.9806 1.338211 67585.9368 20.9562 1.479698 47711043 0.000000: rR(3): 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 2 X态 3 e 1 67636.7569 .0803359 67657.7131 20.9562 .0888297 2873343 0.000000: qR1(3): 激发态 a3P振动带=13 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 3 X态 3 e 1 67677.3519 1.701584 67698.3080 20.9562 1.881489 60969519 0.000000: rR21(3): 激发态 a3P振动带=13 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 4 X 3 e 1 67712.5220 .0962723 67733.4782 20.9562 .1064510 3454916 0.000000 : sR31(3) : 激发态 a3P振动带=13 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 5 X 3 e 1 67796.0846 .7175174 67817.0407 20.9562 .7933793 25844947 0.000000 : qR1(3) : 激发态 振动量子数=4 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e

13C18O 激发态 4 e态 6 X态 3 e态 1 67815.6299 .6204992 67836.5861 20.9562 .6861035 22369688 0.000000：sR31(3)：激发态 ev=4 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e态 7 X态 3 e态 1 67908.5618 .0002169 67929.5180 20.9562 .0002399 7852.716 0.000000：qR1(3)：激发态 振动量子数=7 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e态 8 X态 3 e态 1 67947.5591 .0384518 67968.5152 20.9562 .0425173 1394338 0.000000：rR21(3)：激发态 振动量子数=7 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 9 X态 3 e 1 67987.4493 1.346585 68008.4055 20.9562 1.488957 48915810 0.000000：sR31(3)：激发态 振动量子数=7 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 10 X态 3 e 1 67990.3630 1.596838 68011.3192 20.9562 1.765669 58013926 0.000000：rR21(3)：激发态 a'态振动量子数=12 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 e 1 X态 4 e 1 67539.6741 .7519026 67574.6002 34.9261 .8890113 36813706 0.000000：pP(4)：激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 2 X态 4 e 1 67613.0186 .0278655 67647.9448 34.9261 .0329468 1368766 0.000000：oP1(4)：激发态 a3P振动带=13 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 3 X态 4 e 1 67653.0343 .9919286 67687.9604 34.9261 1.172806 48810509 0.000000：pP21(4)：激发态 a3P振动带=13 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 4 X态 4 e 1 67687.3083 .0313490 67722.2345 34.9261 .0370655 1544959 0.000000：qP31(4)：激发态 a3P振动带=13 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 5 X态 4 e 1 67775.5114 .4125233 67810.4376 34.9261 .4877465 20409762 0.000000：oP1(4)：激发态 振动量子数=4 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 6 X态 4 e 1 67790.6848 .3399132 67825.6110 34.9261 .4018960 16828646 0.000000：qP31(4)：激发态 振动量子数=4 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 8 X态 4 e 1 67924.9430 .0122819 67959.8692 34.9261 .0145215 611679.0 0.000000：pP21(4)：激发态 d态振动量子数=7 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 9 X态 4 e 1 67964.3682 .7738951 67999.2944 34.9261 .9150141 38609754 0.000000： qP31(4)： 激发态 振动量子数=7 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 10 X态 4 e 1 67968.0930 .8871806 68003.0192 34.9261 1.048957 44268863 0.000000： pP21(4)： 激发态 a'态振动量子数=12 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 1 X态 4 e 1 67551.0038 2.250952 67585.9299 34.9261 2.661411 85760682 0.000000： qQ支(4)： 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 2 X态 4 e 1 67564.8563 .0031554 67599.7824 34.9261 .0037308 120293.1 0.000000：qQ(4)：激发态 振动量子数=3 4 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 3 X态 4 e 1 67626.4374 .1463351 67661.3636 34.9261 .1730191 5594027 0.000000：pQ1(4)：激发态 a3P振动带=13 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 4 X态 4 e 1 67663.5066 2.853027 67698.4328 34.9261 3.373274 1.0924e8 0.000000：qQ21(4)：激发态 a3P振动带=13 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 5 X态 4 e 1 67698.5533 .1625550 67733.4795 34.9261 .1921967 6233976 0.000000：rQ31(4)：激发态 a3P振动带=13 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 6 X态 4 e 1 67791.1288 2.250649 67826.0549 34.9261 2.661053 86666848 0.000000：qQ21(4)：激发态 振动量子数=4 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 7 X态 4 e 1 67894.5919 .0003651 67929.5180 34.9261 .0004317 14124.37 0.000000：pQ1(4)：激发态 d态振动量子数=7 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 8 X态 4 e 1 67933.5891 .0647120 67968.5152 34.9261 .0765122 2507640 0.000000：qQ21(4)：激发态 振动量子数=7 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 9 X态 4 e 1 67969.0113 1.522801 68003.9375 34.9261 1.800483 59102071 0.000000：pQ1(4)：激发态 a'态振动量子数=12 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 10 X态 4 e 1 67973.4818 2.432568 68008.4080 34.9261 2.876144 94430017 0.000000：rQ31(4)：激发态 振动量子数=7 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 11 X态 4 e 1 67988.1161 .9994898 68023.0422 34.9261 1.181746 38824330 0.000000：rQ31(4)：激发态 a'态振动量子数=12 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 1 X态 4 e 1 67565.1800 1.499192 67600.1062 34.9261 1.772568 46763002 0.000000：rR(4)：激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 2 X态 4 e 1 67635.0106 .1304710 67669.9367 34.9261 .1542623 4082303 0.000000：qR1(4)：激发态 a3P振动带=13 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e态 3 X态 4 e态 1 67676.3267 1.824761 67711.2528 34.9261 2.157505 57199579 0.000000 : rR21(4) : 激发态 a3P振动带=13 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e态 4 X态 4 e态 1 67712.5788 .1597001 67747.5049 34.9261 .1888212 5014061 0.000000 : sR31(4) : 激发态 a3P振动带=13 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e态 5 X态 4 e态 1 67790.9193 .7909811 67825.8454 34.9261 .9352157 24920519 0.000000 : qR1(4) : 激发态 振动量子数=4 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e态 6 X态 4 e态 1 67814.8273 .7062360 67849.7534 34.9261 .8350174 22274105 0.000000 : sR31(4) : 激发态 振动量子数=4 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 7 X态 4 e 1 67904.7964 .0006204 67939.7225 34.9261 .0007336 19645.50 0.000000 : qR1(4) : 激发态 振动量子数=7 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 8 X态 4 e 1 67944.3952 .0651661 67979.3213 34.9261 .0770491 2067089 0.000000： rR21(4)： 激发态 振动量子数=7 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 9 X态 4 e 1 67984.8590 1.446077 68019.7851 34.9261 1.709768 45952010 0.000000 : sR31(4) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 10 X态 4 e 1 67986.7676 1.834535 68021.6938 34.9261 2.169060 58300945 0.000000 : rR21(4) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 e 1 X态 5 e 1 67533.5491 .9207626 67585.9368 52.3877 1.183758 38115591 0.000000 : pP(5) : 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 2 X态 5 e 1 67605.3254 .0552755 67657.7131 52.3877 .0710638 2295471 0.000000：oP1(5)：激发态 a3P振动带=13 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 3 X态 5 e 1 67645.9203 1.170783 67698.3080 52.3877 1.505191 48707688 0.000000：pP21(5)：激发态 a3P振动带=13 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 4 X态 5 e 1 67681.0905 .0662406 67733.4782 52.3877 .0851608 2760086 0.000000：qP31(5)：激发态 a3P振动带=13 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e态 5 X态 5 e态 1 67764.6530 .4936913 67817.0407 52.3877 .6347035 20647213 0.000000 : oP1(5) : 激发态 ev=4 4 3 F1e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e态 6 X态 5 e态 1 67784.1984 .4269374 67836.5861 52.3877 .5488828 17870879 0.000000 : qP31(5) : 激发态 ev=4 4 5 F3e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e态 7 X态 5 e态 1 67877.1303 .0001493 67929.5180 52.3877 .0001919 6273.453 0.000000 : oP1(5) : 激发态 dv=7 4 3 F1e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 8 X态 5 e 1 67916.1275 .0264570 67968.5152 52.3877 .0340138 1113923 0.000000：pP21(5)：激发态 振动量子数=7 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 9 X态 5 e 1 67956.0178 .9265241 68008.4055 52.3877 1.191165 39078398 0.000000：qP31(5)：激发态 振动量子数=7 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 10 X态 5 e 1 67958.9315 1.098712 68011.3192 52.3877 1.412535 46346804 0.000000：pP21(5)：激发态 a'态振动量子数=12 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 1 X态 5 e 1 67547.7051 2.522906 67600.0928 52.3877 3.243518 85502513 0.000000 : qQ(5) : 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 2 X态 5 e 1 67558.4301 .0071856 67610.8178 52.3877 .0092380 243638.0 0.000000 : qQ(5) : 激发态 振动量子数=3 5 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 3 X态 5 e 1 67621.1196 .2356965 67673.5073 52.3877 .3030180 8013943 0.000000 : pQ1(5) : 激发态 a3P振动带=13 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 4 X态 5 e 1 67659.0428 3.060305 67711.4305 52.3877 3.934414 1.0423e8 0.000000 : qQ21(5) : 激发态 a3P振动带=13 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 5 X态 5 e 1 67695.1199 .2704059 67747.5076 52.3877 .3476414 9224320 0.000000 : rQ31(5) : 激发态 a3P振动带=13 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 6 X态 5 e 1 67784.6566 2.521465 67837.0443 52.3877 3.241666 86356152 0.000000 : qQ21(5) : 激发态 振动量子数=4 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 7 X态 5 e 1 67887.3348 .0010459 67939.7225 52.3877 .0013446 35981.90 0.000000：pQ1(5)：激发态 振动量子数=7 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 8 X态 5 e 1 67926.9336 .1098305 67979.3213 52.3877 .1412012 3785255 0.000000：qQ21(5)：激发态 振动量子数=7 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 9 X态 5 e 1 67959.8791 1.678517 68012.2668 52.3877 2.157949 57933484 0.000000：pQ1(5)：激发态 a'态振动量子数=12 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 10 X态 5 e 1 67967.4005 2.671773 68019.7882 52.3877 3.434906 92246010 0.000000 : rQ31(5) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 11 X态 5 e 1 67983.0719 1.181086 68035.4596 52.3877 1.518437 40806545 0.000000 : rQ31(5) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 1 X态 5 e 1 67564.7200 1.605082 67617.1077 52.3877 2.063538 46063031 0.000000 : rR(5) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 2 X态 5 e 1 67632.2358 .1881011 67684.6235 52.3877 .2418280 5414370 0.000000 : qR1(5) : 激发态 a3P振动带=13 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 3 X态 5 e 1 67674.4117 1.859534 67726.7994 52.3877 2.390669 53625705 0.000000 : rR21(5) : 激发态 a3P振动带=13 6 6 F2e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 4 X态 5 e 1 67711.9117 .2313094 67764.2994 52.3877 .2973779 6681654 0.000000 : sR31(5) : 激发态 a3P振动带=13 6 7 F3e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 5 X 5 e 1 67784.4626 .8360968 67836.8503 52.3877 1.074910 24229390 0.000000 : qR1(5) : 激发态 ev=4 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 6 X 5 e 1 67812.7260 .7643332 67865.1137 52.3877 .9826482 22177457 0.000000 : sR31(5) : 激发态 ev=4 6 7 F3e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 7 X 5 e 1 67899.5909 .0013532 67951.9786 52.3877 .0017398 39415.78 0.000000 : qR1(5) : 激发态 dv=7 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 8 X态 5 e 1 67939.8989 .0965021 67992.2866 52.3877 .1240658 2815834 0.000000：rR21(5)：激发态 振动量子数=7 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 9 X态 5 e 1 67981.0370 1.307750 68033.4247 52.3877 1.681280 38228163 0.000000：sR31(5)：激发态 振动量子数=7 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 10 X态 5 e 1 67981.7577 2.184621 68034.1454 52.3877 2.808610 63862916 0.000000：rR21(5)：激发态 a'态振动量子数=12 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 e 1 X态 6 e 1 67526.7660 1.039119 67600.1062 73.3402 1.477140 38902738 0.000000：pP(6)：激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 2 X态 6 e 1 67596.5965 .0904320 67669.9367 73.3402 .1285519 3396126 0.000000：oP1(6)：激发态 a3P振动带=13 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 3 X态 6 e 1 67637.9126 1.264778 67711.2528 73.3402 1.797921 47585194 0.000000：pP21(6)：激发态 a3P振动带=13 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 4 X态 6 e 1 67674.1647 .1106913 67747.5049 73.3402 .1573510 4171277 0.000000：qP31(6)：激发态 a3P振动带=13 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 5 X态 6 e 1 67752.5052 .5482446 67825.8454 73.3402 .7793464 20731816 0.000000：oP1(6)：激发态 振动量子数=4 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 6 X态 6 e 1 67776.4132 .4895061 67849.7534 73.3402 .6958478 18530229 0.000000：qP31(6)：激发态 振动量子数=4 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e态 7 X态 6 e态 1 67866.3823 .0004300 67939.7225 73.3402 .0006113 16343.48 0.000000：oP1(6)：激发态 振动量子数=7 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e态 8 X态 6 e态 1 67905.9811 .0451679 67979.3213 73.3402 .0642076 1719654 0.000000：pP21(6)：激发态 振动量子数=7 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e态 9 X态 6 e态 1 67946.4449 1.002305 68019.7851 73.3402 1.424807 38228467 0.000000：qP31(6)：激发态 振动量子数=7 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 10 X态 6 e 1 67948.3535 1.271552 68021.6938 73.3402 1.807550 48501814 0.000000：pP21(6)：激发态 a'态振动量子数=12 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 1 X态 6 e 1 67543.7379 2.679802 67617.0781 73.3402 3.809421 84956051 0.000000：qQ(6)：激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 2 X态 6 e 1 67550.7243 .0195970 67624.0645 73.3402 .0278577 621463.5 0.000000：qQ(6)：激发态 振动量子数=3 6 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 3 X态 6 e 1 67614.7670 .3348028 67688.1073 73.3402 .4759324 10647559 0.000000：pQ1(6)：激发态 a3P振动带=13 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 4 X态 6 e 1 67653.6934 3.103161 67727.0337 73.3402 4.411238 98858747 0.000000：qQ21(6)：激发态 a3P振动带=13 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 5 X态 6 e 1 67690.9639 .3906124 67764.3041 73.3402 .5552674 12464486 0.000000：rQ31(6)：激发态 a3P振动带=13 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 6 X态 6 e态 1 67776.8912 2.683627 67850.2314 73.3402 3.814858 85961385 0.000000：qQ21(6)：激发态 振动量子数=4 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 7 X态 6 e态 1 67878.6384 .0022722 67951.9786 73.3402 .0032301 73112.17 0.000000：pQ1(6)：激发态 d态振动量子数=7 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 8 X态 6 e态 1 67918.9464 .1619889 67992.2866 73.3402 .2302722 5221489 0.000000：qQ21(6)：激发态 d态振动量子数=7 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 9 X态 6 e 1 67949.3192 1.762262 68022.6595 73.3402 2.505110 56880337 0.000000：pQ1(6)：激发态 a'态振动量子数=12 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 10 X态 6 e 1 67960.0920 2.797999 68033.4323 73.3402 3.977442 90353666 0.000000：rQ31(6)：激发态 振动量子数=7 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 11 X态 6 e 1 67976.6198 1.305662 68049.9600 73.3402 1.856038 42193503 0.000000：rQ31(6)：激发态 a'态振动量子数=12 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 1 X态 6 e 1 67563.6000 1.654636 67636.9402 73.3402 2.352115 45501854 0.000000：rR(6)：激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 2 X态 6 e 1 67628.4414 .2477355 67701.7816 73.3402 .3521635 6832265 0.000000：qR1(6)：激发态 a3P振动带=13 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 3 X态 6 e 1 67671.6113 1.816499 67744.9515 73.3402 2.582209 50192996 0.000000：rR21(6)：激发态 a3P振动带=13 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 4 X态 6 e 1 67710.5054 .3038720 67783.8456 73.3402 .4319633 8410991 0.000000：sR31(6)：激发态 a3P振动带=13 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 5 X态 6 e 1 67776.7146 .8522155 67850.0549 73.3402 1.211450 23658070 0.000000：qR1(6)：激发态 振动量子数=4 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e

13C18O 激发态 7 e 6 X态 6 e 1 67809.3268 .7940898 67882.6671 73.3402 1.128823 22076301 0.000000 : sR31(6): 激发态 振动量子数=4 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 7 X态 6 e 1 67892.9510 .0024716 67966.2912 73.3402 .0035135 68968.18 0.000000 : qR1(6): 激发态 振动量子数=7 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 8 X态 6 e 1 67934.0698 .1295309 68007.4101 73.3402 .1841322 3620968 0.000000 : rR21(6): 激发态 振动量子数=7 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 9 X态 6 e 1 67975.3097 1.519712 68048.6499 73.3402 2.160317 42560159 0.000000 : rR21(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 10 X态 6 e 1 67976.0013 2.058800 68049.3416 73.3402 2.926646 57659289 0.000000 : sR31(6) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 e 1 X态 7 e 1 67519.3247 1.106621 67617.1077 97.7830 1.768747 39403069 0.000000 : pP(7) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e态 2 X态 7 e态 1 67586.8405 .1296860 67684.6235 97.7830 .2072812 4631550 0.000000 : oP1(7) : 激发态 a3P振动带=13 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e态 3 X态 7 e态 1 67629.0163 1.282053 67726.7994 97.7830 2.049145 45872454 0.000000 : pP21(7) : 激发态 a3P振动带=13 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e态 4 X态 7 e态 1 67666.5163 .1594760 67764.2994 97.7830 .2548953 5715621 0.000000 : qP31(7) : 激发态 a3P振动带=13 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e态 5 X态 7 e态 1 67739.0672 .5764458 67836.8503 97.7830 .9213511 20726351 0.000000: oP1(7): 激发态 ev=4 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e态 6 X态 7 e态 1 67767.3307 .5269684 67865.1137 97.7830 .8422699 18971099 0.000000: qP31(7): 激发态 ev=4 6 7 F3e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e态 7 X态 7 e态 1 67854.1956 .0009330 67951.9786 97.7830 .0014912 33717.23 0.000000: oP1(7): 激发态 d态振动量子数=7 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 8 X态 7 e 1 67894.5036 .0665333 67992.2866 97.7830 .1063422 2408737 0.000000 : pP21(7) : 激发态 振动量子数=7 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 9 X态 7 e 1 67935.6416 .9016262 68033.4247 97.7830 1.441097 32701399 0.000000 : qP31(7) : 激发态 振动量子数=7 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 10 X态 7 e 1 67936.3624 1.506184 68034.1454 97.7830 2.407380 54630057 0.000000 : pP21(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 1 X态 7 e 1 67539.0504 2.631313 67636.8335 97.7830 4.205709 81271120 0.000000: qQ(7): 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 2 X态 7 e 1 67541.7893 .1327384 67639.5724 97.7830 .2121598 4100276 0.000000: qQ(7): 激发态 振动量子数=3 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 3 X态 7 e 1 67607.3925 .4326530 67705.1755 97.7830 .6915227 13403591 0.000000: pQ1(7): 激发态 a3P振动带=13 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 4 X态 7 e 1 67647.4609 3.007651 67745.2439 97.7830 4.807221 93342779 0.000000: qQ21(7): 激发态 a3P振动带=13 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 5 X态 7 e 1 67686.0700 .5100054 67783.8530 97.7830 .8151574 15855193 0.000000: rQ31(7): 激发态 a3P振动带=13 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 6 X态 7 e 1 67767.8333 2.739235 67865.6163 97.7830 4.378203 85467087 0.000000: qQ21(7): 激发态 振动量子数=4 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 7 X态 7 e 1 67868.5082 .0041201 67966.2912 97.7830 .0065852 129124.6 0.000000 : pQ1(7) : 激发态 振动量子数=7 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 8 X态 7 e 1 67909.6270 .2158203 68007.4101 97.7830 .3449523 6776185 0.000000 : qQ21(7) : 激发态 振动量子数=7 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 9 X态 7 e 1 67937.3361 1.782314 68035.1191 97.7830 2.848728 56028463 0.000000 : pQ1(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 10 X态 7 e 1 67951.5510 2.812667 68049.3340 97.7830 4.495572 88473921 0.000000 : rQ31(7) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 11 X态 7 e 1 67968.7555 1.372800 68066.5385 97.7830 2.194188 43214948 0.000000 : rQ31(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 1 X态 7 e 1 67561.8196 1.650285 67659.6027 97.7830 2.637702 45019864 0.000000 : rR(7) : 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 2 X态 7 e 1 67623.6365 .3035469 67721.4195 97.7830 .4851684 8303527 0.000000 : qR1(7) : 激发态 a3P振动带=13 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 3 X态 7 e 1 67667.9293 1.711181 67765.7124 97.7830 2.735034 46901407 0.000000 : rR21(7) : 激发态 a3P振动带=13 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 4 X态 7 e 1 67708.3446 .3704383 67806.1276 97.7830 .5920829 10171468 0.000000 : sR31(7) : 激发态 a3P振动带=13 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e态 5 X态 7 e态 1 67767.6764 .8405361 67865.4594 97.7830 1.343455 23140107 0.000000: qR1(7): 激发态 振动量子数=4 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e态 6 X态 7 e态 1 67804.6300 .7966035 67902.4131 97.7830 1.273236 21966530 0.000000: sR31(7): 激发态 振动量子数=4 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e态 7 X态 7 e态 1 67884.8825 .0039652 67982.6656 97.7830 .0063377 109730.7 0.000000: qR1(7): 激发态 振动量子数=7 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 8 X态 7 e 1 67926.9075 .1609936 68024.6905 97.7830 .2573210 4463497 0.000000 : rR21(7) : 激发态 振动量子数=7 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 9 X态 7 e 1 67967.4636 1.783716 68065.2466 97.7830 2.850969 49541614 0.000000 : rR21(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 10 X态 7 e 1 67969.7061 1.763524 68067.4891 97.7830 2.818695 48985640 0.000000 : sR31(7) : 激发态 振动量子数=7 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 e 1 X态 8 e 1 67511.2250 1.126216 67636.9402 125.7152 2.058101 39721603 0.000000: pP(8): 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 2 X态 8 e 1 67576.0664 .1686193 67701.7816 125.7152 .3081431 5964353 0.000000: oP1(8): 激发态 a3P振动带=13 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 3 X态 8 e 1 67619.2363 1.236387 67744.9515 125.7152 2.259433 43816976 0.000000: pP21(8): 激发态 a3P振动带=13 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 4 X态 8 e 1 67658.1304 .2068282 67783.8456 125.7152 .3779679 7342552 0.000000: qP31(8): 激发态 a3P振动带=13 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 5 X态 8 e 1 67724.3397 .5800542 67850.0549 125.7152 1.060019 20652858 0.000000: oP1(8): 激发态 振动量子数=4 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 6 X态 8 e 1 67756.9519 .5404915 67882.6671 125.7152 .9877201 19272038 0.000000: qP31(8): 激发态 振动量子数=4 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 7 X态 8 e 1 67840.5760 .0016823 67966.2912 125.7152 .0030743 60207.61 0.000000 : oP1(8) : 激发态 振动量子数=7 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 8 X态 8 e 1 67881.6949 .0881643 68007.4101 125.7152 .1611156 3161025 0.000000 : pP21(8) : 激发态 振动量子数=7 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 9 X态 8 e 1 67922.9347 1.034381 68048.6499 125.7152 1.890277 37154125 0.000000 : pP21(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 10 X态 8 e态 1 67923.6264 1.401307 68049.3416 125.7152 2.560816 50335350 0.000000: qP31(8): 激发态 振动量子数=7 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f态 1 X态 8 e态 1 67531.2381 .1109338 67656.9533 125.7152 .2027257 3455394 0.000000: qQ(8): 激发态 振动量子数=3 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f态 2 X态 8 e态 1 67534.0283 2.621588 67659.7435 125.7152 4.790815 81667996 0.000000: qQ(8): 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 3 X态 8 e 1 67599.0088 .5186946 67724.7240 125.7152 .9478874 16205120 0.000000 : pQ1(8) : 激发态 a3P振动带=13 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 4 X态 8 e 1 67640.3470 2.806919 67766.0623 125.7152 5.129498 87855078 0.000000 : qQ21(8) : 激发态 a3P振动带=13 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 5 X态 8 e 1 67680.4228 .6163484 67806.1380 125.7152 1.126345 19325690 0.000000 : rQ31(8) : 激发态 a3P振动带=13 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 6 X态 8 e态 1 67757.4841 2.696916 67883.1993 125.7152 4.928473 84851343 0.000000 : qQ21(8) : 激发态 振动量子数=4 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 7 X态 8 e态 1 67856.9503 .0065473 67982.6656 125.7152 .0119649 206903.0 0.000000 : pQ1(8) : 激发态 d态振动量子数=7 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 8 X态 8 e态 1 67898.9753 .2656480 68024.6905 125.7152 .4854578 8410382 0.000000 : qQ21(8) : 激发态 d态振动量子数=7 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 9 X态 8 e 1 67923.9320 1.746109 68049.6472 125.7152 3.190923 55342561 0.000000: pQ1(8): 激发态 a'态振动量子数=12 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 10 X态 8 e 1 67941.7716 2.728658 68067.4868 125.7152 4.986481 86552435 0.000000: rQ31(8): 激发态 振动量子数=7 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 11 X态 8 e 1 67959.4766 1.385955 68085.1918 125.7152 2.532761 43996564 0.000000: rQ31(8): 激发态 a'态振动量子数=12 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 1 X态 8 e 1 67559.3783 1.597613 67685.0936 125.7152 2.919555 44580347 0.000000 : rR(8) : 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 2 X态 8 e 1 67617.8304 .3503696 67743.5456 125.7152 .6402822 9802232 0.000000 : qR1(8) : 激发态 a3P振动带=13 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 3 X态 8 e 1 67663.3686 1.561241 67789.0838 125.7152 2.853088 43766899 0.000000 : rR21(8) : 激发态 a3P振动带=13 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 4 X态 8 e 1 67705.4141 .4255777 67831.1293 125.7152 .7777211 11952642 0.000000: sR31(8): 激发态 a3P振动带=13 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 5 X态 8 e 1 67757.3493 .8037185 67883.0645 125.7152 1.468754 22624974 0.000000: qR1(8): 激发态 振动量子数=4 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 6 X态 8 e 1 67798.6359 .7745556 67924.3511 125.7152 1.415460 21843908 0.000000: sR31(8): 激发态 振动量子数=4 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 7 X 8 e 1 67875.3917 .0057490 68001.1070 125.7152 .0105060 162683.4 0.000000 : qR1(8) : 激发态 振动量子数=7 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 8 X 8 e 1 67918.4116 .1878530 68044.1268 125.7152 .3432916 5325931 0.000000 : rR21(8) : 激发态 振动量子数=7 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 9 X 8 e 1 67958.1946 1.783243 68083.9098 125.7152 3.258784 50646675 0.000000 : rR21(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e态 10 X态 8 e态 1 67962.1699 1.630265 68087.8851 125.7152 2.979225 46310002 0.000000 : sR31(8) : 激发态 振动量子数=7 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 e态 1 X态 9 e态 1 67502.4668 1.103529 67659.6027 157.1358 2.344624 39912284 0.000000 : pP(9) : 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 2 X态 9 e态 1 67564.2837 .2029788 67721.4195 157.1358 .4312608 7361495 0.000000 : oP1(9) : 激发态 a3P振动带=13 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 3 X态 9 e态 1 67608.5765 1.144250 67765.7124 157.1358 2.431141 41580534 0.000000 : pP21(9) : 激发态 a3P振动带=13 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 4 X态 9 e态 1 67648.9918 .2477084 67806.1276 157.1358 .5262959 9017549 0.000000 : qP31(9) : 激发态 a3P振动带=13 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 5 X态 9 e态 1 67708.3235 .5620582 67865.4594 157.1358 1.194182 20514987 0.000000 : oP1(9) : 激发态 振动量子数=4 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 6 X态 9 e态 1 67745.2772 .5326809 67902.4131 157.1358 1.131765 19474573 0.000000: qP31(9): 激发态 振动量子数=4 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 7 X态 9 e态 1 67825.5297 .0026515 67982.6656 157.1358 .0056335 97282.75 0.000000: oP1(9): 激发态 振动量子数=7 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 8 X态 9 e态 1 67867.5547 .1076548 68024.6905 157.1358 .2287298 3957162 0.000000: pP21(9): 激发态 振动量子数=7 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 9 X态 9 e 1 67908.1108 1.192753 68065.2466 157.1358 2.534194 43921724 0.000000 : pP21(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 10 X态 9 e 1 67910.3532 1.179251 68067.4891 157.1358 2.505507 43428823 0.000000 : qP31(9) : 激发态 振动量子数=7 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 1 X态 9 e 1 67519.7238 .0092461 67676.8596 157.1358 .0196449 299441.2 0.000000 : qQ(9) : 激发态 振动量子数=3 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 2 X态 9 e 1 67528.0167 2.609114 67685.1525 157.1358 5.543478 84528685 0.000000 : qQ(9) : 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 3 X态 9 e 1 67589.6287 .5846166 67746.7645 157.1358 1.242111 18991990 0.000000 : pQ1(9) : 激发态 a3P振动带=13 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 4 X态 9 e 1 67632.3531 2.535687 67789.4890 157.1358 5.387470 82531205 0.000000 : qQ21(9) : 激发态 a3P振动带=13 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 5 X态 9 e 1 67674.0072 .7003669 67831.1431 157.1358 1.488041 22837595 0.000000 : rQ31(9) : 激发态 a3P振动带=13 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 6 X态 9 e 1 67745.8452 2.570388 67902.9811 157.1358 5.461198 84082533 0.000000 : qQ21(9) : 激发态 振动量子数=4 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 7 X态 9 e 1 67843.9711 .0093885 68001.1070 157.1358 .0199473 308452.5 0.000000 : pQ1(9) : 激发态 d态振动量子数=7 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 8 X态 9 e 1 67886.9910 .3064623 68044.1268 157.1358 .6511279 10087785 0.000000: qQ21(9): 激发态 振动量子数=7 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 9 X态 9 e 1 67909.1083 1.662700 68066.2441 157.1358 3.532672 54784434 0.000000: pQ1(9): 激发态 a'态振动量子数=12 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 10 X态 9 e 1 67930.7480 2.564764 68087.8839 157.1358 5.449248 84587392 0.000000: rQ31(9): 激发态 振动量子数=7 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 11 X态 9 e 1 67948.7817 1.351617 68105.9175 157.1358 2.871726 44612632 0.000000: rQ31(9): 激发态 a'态振动量子数=12 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 1 X态 9 e 1 67556.2755 1.504583 67713.4114 157.1358 3.196725 44157712 0.000000: rR(9): 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 2 X态 9 e 1 67611.0318 .3844293 67768.1677 157.1358 .8167812 11310000 0.000000: qR1(9): 激发态 a3P振动带=13 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 3 X态 9 e 1 67657.9309 1.384126 67815.0667 157.1358 2.940796 40806105 0.000000: rR21(9): 激发态 a3P振动带=13 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 4 X态 9 e 1 67701.6988 .4662146 67858.8347 157.1358 .9905470 13771395 0.000000: sR31(9): 激发态 a3P振动带=13 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e

13C18O 激发态 10 e 5 X态 9 e 1 67745.7362 .7453082 67902.8720 157.1358 1.583526 22058461 0.000000 : qR1(9) : 激发态 ev=4 10 9 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 6 X态 9 e 1 67791.3447 .7318474 67948.4806 157.1358 1.554926 21703846 0.000000 : sR31(9) : 激发态 ev=4 10 11 F3e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 7 X态 9 e 1 67864.4848 .0076751 68021.6207 157.1358 .0163070 228353.2 0.000000 : qR1(9) : 激发态 dv=7 10 9 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 8 X态 9 e 1 67908.5818 .2077412 68065.7176 157.1358 .4413792 6192842 0.000000 : rR21(9) : 激发态 振动量子数=7 10 10 F2e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 9 X态 9 e 1 67947.5062 1.707175 68104.6420 157.1358 3.627165 50979089 0.000000 : rR21(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 10 F2e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 10 X态 9 e 1 67953.3831 1.489735 68110.5190 157.1358 3.165180 44497518 0.000000 : sR31(9) : 激发态 振动量子数=7 10 11 F3e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 e 1 X态 10 e 1 67493.0498 1.046073 67685.0936 192.0438 2.627600 40004254 0.000000: pP(10): 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 2 X态 10 e 1 67551.5018 .2294124 67743.5456 192.0438 .5762540 8796073 0.000000: oP1(10): 激发态 a3P振动带=13 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 3 X态 10 e 1 67597.0400 1.022258 67789.0838 192.0438 2.567779 39274483 0.000000: pP21(10): 激发态 a3P振动带=13 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 4 X态 10 e 1 67639.0855 .2786566 67831.1293 192.0438 .6999490 10725793 0.000000 : qP31(10) : 激发态 a3P振动带=13 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 5 X态 10 e 1 67691.0207 .5262528 67883.0645 192.0438 1.321879 20302736 0.000000 : oP1(10) : 激发态 振动量子数=4 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 6 X态 10 e 1 67732.3073 .5071577 67924.3511 192.0438 1.273914 19601874 0.000000 : qP31(10) : 激发态 振动量子数=4 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 7 X态 10 e 1 67809.0631 .0037643 68001.1070 192.0438 .0094554 145986.2 0.000000 : oP1(10) : 激发态 dv=7 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 8 X态 10 e 1 67852.0830 .1230010 68044.1268 192.0438 .3089624 4779308 0.000000 : pP21(10) : 激发态 dv=7 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 9 X态 10 e 1 67891.8660 1.167619 68083.9098 192.0438 2.932906 45448671 0.000000 : pP21(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 10 X 10 e 1 67895.8413 1.067453 68087.8851 192.0438 2.681302 41557089 0.000000: qP31(10): 激发态 振动量子数=7 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 1 X 10 e 1 67506.8499 .0019734 67698.8937 192.0438 .0049570 68322.55 0.000000: qQ(10): 激发态 振动量子数=3 10 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 2 X 10 e 1 67521.4105 2.436527 67713.4543 192.0438 6.120237 84410587 0.000000: qQ(10): 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 3 X态 10 e 1 67579.2640 .6253703 67771.3078 192.0438 1.570849 21720951 0.000000: pQ1(10): 激发态 a3P振动带=13 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 4 X态 10 e 1 67623.4799 2.226099 67815.5238 192.0438 5.591671 77470841 0.000000: qQ21(10): 激发态 a3P振动带=13 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 5 X态 10 e 1 67666.8084 .7567975 67858.8522 192.0438 1.900977 26388093 0.000000: rQ31(10): 激发态 a3P振动带=13 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 6 X态 10 e 1 67732.9190 2.376689 67924.9628 192.0438 5.969932 83113761 0.000000: qQ21(10): 激发态 振动量子数=4 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 7 X态 10 e 1 67829.5768 .0123825 68021.6207 192.0438 .0311033 434878.0 0.000000: pQ1(10): 激发态 振动量子数=7 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 8 X态 10 e 1 67873.6738 .3346376 68065.7176 192.0438 .8405660 11775518 0.000000: qQ21(10): 激发态 振动量子数=7 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 9 X态 10 e 1 67892.8660 1.542522 68084.9098 192.0438 3.874615 54325671 0.000000 : pQ1(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 10 X态 10 e 1 67918.4743 2.342473 68110.5181 192.0438 5.883988 82592320 0.000000 : rQ31(10) : 激发态 振动量子数=7 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 11 X态 10 e 1 67936.6699 1.278371 68128.7137 192.0438 3.211102 45109811 0.000000 : rQ31(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 1 X态 10 e 1 67552.5104 1.380627 67744.5542 192.0438 3.467954 43731407 0.000000 : rR(10) : 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 2 X态 10 e 1 67603.2490 .4037161 67795.2928 192.0438 1.014082 12816561 0.000000 : qR1(10) : 激发态 a3P振动带=13 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 3 X态 10 e 1 67651.6173 1.195378 67843.6612 192.0438 3.002634 38030551 0.000000 : rR21(10) : 激发态 a3P振动带=13 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 4 X态 10 e 1 67697.1828 .4922209 67889.2267 192.0438 1.236395 15691503 0.000000 : sR31(10) : 激发态 a3P振动带=13 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 5 X态 10 e 1 67732.8418 .6688594 67924.8856 192.0438 1.680088 21356271 0.000000 : qR1(10) : 激发态 振动量子数=4 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 6 X态 10 e 1 67782.7570 .6731548 67974.8008 192.0438 1.690877 21540974 0.000000 : sR31(10) : 激发态 振动量子数=4 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e态 7 X态 10 e态 1 67852.1679 .0095601 68044.2117 192.0438 .0240136 306863.2 0.000000 : qR1(10) : 激发态 振动量子数=7 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e态 8 X态 10 e态 1 67897.4177 .2192332 68089.4615 192.0438 .5506852 7051131 0.000000 : rR21(10) : 激发态 振动量子数=7 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e态 9 X态 10 e态 1 67935.3986 1.585564 68127.4424 192.0438 3.982729 51081635 0.000000 : rR21(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e态 10 X态 10 e态 1 67943.3393 1.333883 68135.3831 192.0438 3.350541 42988390 0.000000 : sR31(10) : 激发态 振动量子数=7 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 e态 1 X态 11 e态 1 67482.9734 .9623802 67713.4114 230.4379 2.906114 40012843 0.000000 : pP(11) : 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 2 X态 11 e态 1 67537.7298 .2458935 67768.1677 230.4379 .7425284 10248412 0.000000 : oP1(11) : 激发态 a3P振动带=13 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 3 X态 11 e态 1 67584.6288 .8853321 67815.0667 230.4379 2.673451 36976016 0.000000 : pP21(11) : 激发态 a3P振动带=13 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 4 X态 11 e态 1 67628.3968 .2982060 67858.8347 230.4379 .9004973 12478829 0.000000 : qP31(11) : 激发态 a3P振动带=13 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 5 X态 11 e态 1 67672.4341 .4767234 67902.8720 230.4379 1.439569 19988124 0.000000 : oP1(11) : 激发态 振动量子数=4 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 6 X态 11 e 1 67718.0426 .4681135 67948.4806 230.4379 1.413569 19666834 0.000000: qP31(11): 激发态 振动量子数=4 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 7 X态 11 e 1 67791.1827 .0049093 68021.6207 230.4379 .0148246 206921.8 0.000000: oP1(11): 激发态 振动量子数=7 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 8 X态 11 e 1 67835.2797 .1328780 68065.7176 230.4379 .4012538 5611645 0.000000: pP21(11): 激发态 振动量子数=7 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 9 X态 11 e态 1 67874.2041 1.091965 68104.6420 230.4379 3.297423 46194798 0.000000 : pP21(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 10 X态 11 e态 1 67880.0811 .9528833 68110.5190 230.4379 2.877436 40321521 0.000000 : qP31(11) : 激发态 振动量子数=7 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 F1f 1 X态 11 e态 1 67492.6711 .0004973 67723.1091 230.4379 .0015016 18884.54 0.000000 : qQ支(11) : 激发态 振动量子数=3 11 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 2 X态 11 e 1 67514.1534 2.210969 67744.5914 230.4379 6.676497 84048265 0.000000: qQ(11): 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 3 X态 11 e 1 67567.9259 .6394001 67798.3638 230.4379 1.930806 24364417 0.000000: pQ1(11): 激发态 a3P振动带=13 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 4 X态 11 e 1 67613.7277 1.905145 67844.1656 230.4379 5.752994 72743493 0.000000: qQ21(11): 激发态 a3P振动带=13 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 5 X态 11 e 1 67658.8113 .7845464 67889.2493 230.4379 2.369107 30016033 0.000000 : rQ31(11) : 激发态 a3P振动带=13 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 6 X态 11 e 1 67718.7090 2.134284 67949.1469 230.4379 6.444929 81872819 0.000000 : qQ21(11) : 激发态 振动量子数=4 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 7 X态 11 e 1 67813.7738 .0152241 68044.2117 230.4379 .0459724 586471.3 0.000000 : pQ1(11) : 激发态 d态振动量子数=7 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 8 X态 11 e 1 67859.0235 .3482919 68089.4615 230.4379 1.051742 13443977 0.000000 : qQ21(11) : 激发态 振动量子数=7 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 9 X态 11 e 1 67875.2057 1.396613 68105.6436 230.4379 4.217374 53947488 0.000000 : pQ1(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 10 X态 11 e 1 67904.9446 2.083464 68135.3825 230.4379 6.291468 80584551 0.000000 : rQ31(11) : 激发态 振动量子数=7 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 11 X态 11 e 1 67923.1404 1.175918 68153.5783 230.4379 3.550937 45518908 0.000000: rQ31(11): 激发态 a'态振动量子数=12 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 1 X态 11 e 1 67548.0821 1.235717 67778.5200 230.4379 3.731512 43282007 0.000000: rR支(11): 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 2 X态 11 e 1 67594.4893 .4080089 67824.9272 230.4379 1.232071 14320328 0.000000: qR1(11): 激发态 a3P振动带=13 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 3 X态 11 e 1 67644.4282 1.007648 67874.8661 230.4379 3.042811 35444962 0.000000: rR21(11): 激发态 a3P振动带=13 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 4 X态 11 e 1 67691.8457 .5074739 67922.2837 230.4379 1.532427 17888429 0.000000: sR31(11): 激发态 a3P振动带=13 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 5 X态 11 e 1 67718.6768 .5762005 67949.1147 230.4379 1.739961 20335198 0.000000: qR1(11): 激发态 振动量子数=4 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 6 X态 11 e 1 67772.8733 .6034644 68003.3112 230.4379 1.822290 21348567 0.000000: sR31(11): 激发态 振动量子数=4 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 7 X态 11 e 1 67838.4471 .0112185 68068.8850 230.4379 .0338765 398024.7 0.000000: qR1(11): 激发态 振动量子数=7 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 8 X态 11 e 1 67884.9191 .2219277 68115.3570 230.4379 .6701584 7890069 0.000000: rR21(11): 激发态 振动量子数=7 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 9 X态 11 e 1 67921.8719 1.434811 68152.3098 230.4379 4.332719 51094352 0.000000: rR21(11): 激发态 a'态振动量子数=12 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 10 X态 11 e 1 67932.0325 1.168600 68162.4704 230.4379 3.528840 41633140 0.000000: sR31(11): 激发态 振动量子数=7 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 e 1 X态 12 e 1 67472.2374 .8611755 67744.5542 272.3168 3.178958 39944385 0.000000: pP(12): 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 2 X态 12 e 1 67522.9760 .2518207 67795.2928 272.3168 .9295754 11706713 0.000000 : oP1(12) : 激发态 a3P振动带=13 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 3 X态 12 e 1 67571.3443 .7456255 67843.6612 272.3168 2.752415 34737390 0.000000 : pP21(12) : 激发态 a3P振动带=13 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 4 X态 12 e 1 67616.9098 .3070262 67889.2267 272.3168 1.133362 14332771 0.000000 : qP31(12) : 激发态 a3P振动带=13 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 5 X态 12 e 1 67652.5688 .4172057 67924.8856 272.3168 1.540080 19507062 0.000000 : oP1(12) : 激发态 ev=4 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 6 X态 12 e 1 67702.4840 .4198850 67974.8008 272.3168 1.549971 19675823 0.000000 : qP31(12) : 激发态 ev=4 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 7 X态 12 e 1 67771.8949 .0059632 68044.2117 272.3168 .0220125 280294.1 0.000000 : oP1(12) : 激发态 dv=7 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 8 X态 12 e 1 67817.1447 .1367482 68089.4615 272.3168 .5047947 6440639 0.000000: pP21(12): 激发态 振动量子数=7 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 9 X态 12 e 1 67855.1256 .9890064 68127.4424 272.3168 3.650835 46659043 0.000000: pP21(12): 激发态 a'态振动量子数=12 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 10 X态 12 e 1 67863.0663 .8320189 68135.3831 272.3168 3.071329 39266518 0.000000: qP31(12): 激发态 振动量子数=7 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 1 X态 12 e 1 67477.1932 .0001134 67749.5100 272.3168 .0004186 4840.348 0.000000: qQ(12): 激发态 振动量子数=3 12 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 2 X态 12 e 1 67506.2383 1.955585 67778.5552 272.3168 7.218880 83576650 0.000000: qQ(12): 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 3 X态 12 e 1 67555.6246 .6282485 67827.9414 272.3168 2.319127 26908692 0.000000: pQ1(12): 激发态 a3P振动带=13 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 4 X态 12 e 1 67603.0960 1.593499 67875.4128 272.3168 5.882271 68395605 0.000000 : qQ21(12) : 激发态 a3P振动带=13 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 5 X态 12 e 1 67650.0005 .7862336 67922.3173 272.3168 2.902316 33816728 0.000000 : rQ31(12) : 激发态 a3P振动带=13 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 6 X态 12 e 1 67703.2207 1.861239 67975.5375 272.3168 6.870609 80242904 0.000000 : qQ21(12) : 激发态振动量子数=4 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 7 X态 12 e 1 67796.5682 .0176221 68068.8850 272.3168 .0650507 762883.9 0.000000 : pQ1(12) : 激发态 振动量子数=7 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 8 X态 12 e 1 67843.0402 .3472822 68115.3570 272.3168 1.281964 15065205 0.000000 : qQ21(12) : 激发态 振动量子数=7 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 9 X态 12 e 1 67856.1279 1.235797 68128.4447 272.3168 4.561844 53640286 0.000000 : pQ1(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 10 X态 12 e 1 67890.1531 1.807674 68162.4699 272.3168 6.672878 78580893 0.000000: rQ31(12): 激发态 dv=7 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 11 X态 12 e 1 67908.1928 1.054149 68180.5096 272.3168 3.891302 45861147 0.000000: rQ31(12): 激发态 a'态振动量子数=12 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 1 X态 12 e 1 67542.9896 1.079506 67815.3064 272.3168 3.984909 42787696 0.000000: rR支(12): 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 2 X态 12 e态 1 67584.7589 .3986298 67857.0758 272.3168 1.471509 15829563 0.000000 : qR1(12) : 激发态 a3P振动带=13 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 3 X态 12 e态 1 67636.3630 .8303092 67908.6799 272.3168 3.065018 33047105 0.000000 : rR21(12) : 激发态 a3P振动带=13 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e

13C18O 激发态 13 e 4 X态 12 e 1 67685.6482 .5247111 67957.9650 272.3168 1.936928 20929691 0.000000 : sR31(12) : 激发态 a3P振动带=13 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 5 X态 12 e 1 67703.2719 .4617005 67975.5888 272.3168 1.704329 18430715 0.000000 : qR1(12) : 激发态 振动量子数=4 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 6 X态 12 e 1 67761.6946 .5276441 68034.0115 272.3168 1.947755 21117702 0.000000 : sR31(12) : 激发态 振动量子数=4 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 7 X态 12 e态 1 67823.3282 .0124953 68095.6450 272.3168 .0461255 501462.3 0.000000 : qR1(12) : 激发态 振动量子数=7 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 8 X态 12 e态 1 67871.0859 .2163570 68143.4027 272.3168 .7986639 8701179 0.000000 : rR21(12) : 激发态 振动量子数=7 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 9 X态 12 e态 1 67906.9259 1.267795 68179.2428 272.3168 4.679960 51067429 0.000000 : rR21(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 10 X态 12 e态 1 67919.4570 1.001820 68191.7738 272.3168 3.698137 40376181 0.000000：sR31(12)：激发态 振动量子数=7 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 e态 1 X态 13 e态 1 67460.8409 .7506667 67778.5200 317.6791 3.444473 39798020 0.000000：pP(13)：激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e态 2 X态 13 e态 1 67507.2481 .2478552 67824.9272 317.6791 1.137296 13167648 0.000000：oP1(13)：激发态 a3P振动带=13 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 3 X态 13 e 1 67557.1870 .6121210 67874.8661 317.6791 2.808749 32591998 0.000000 : pP21(13) : 激发态 a3P振动带=13 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 4 X态 13 e 1 67604.6046 .3082776 67922.2837 317.6791 1.414548 16448635 0.000000 : qP31(13) : 激发态 a3P振动带=13 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 5 X态 13 e 1 67631.4356 .3500273 67949.1147 317.6791 1.606118 18698498 0.000000 : oP1(13) : 激发态 振动量子数=4 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 6 X态 13 e 1 67685.6321 .3665894 68003.3112 317.6791 1.682114 19630366 0.000000 : qP31(13) : 激发态 振动量子数=4 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 7 X态 13 e 1 67751.2059 .0068149 68068.8850 317.6791 .0312706 365991.8 0.000000 : oP1(13) : 激发态 振动量子数=7 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 8 X态 13 e 1 67797.6780 .1348155 68115.3570 317.6791 .6186078 7255098 0.000000 : pP21(13) : 激发态 振动量子数=7 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 9 X态 13 e 1 67834.6307 .8716112 68152.3098 317.6791 3.999433 46982513 0.000000：pP21(13)：激发态 a'态振动量子数=12 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 10 X态 13 e 1 67844.7913 .7098951 68162.4704 317.6791 3.257390 38282718 0.000000：qP31(13)：激发态 振动量子数=7 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 2 X态 13 e 1 67497.6626 1.688130 67815.3417 317.6791 7.746072 83005603 0.000000：qQ(13)：激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 3 X态 13 e 1 67542.3692 .5957712 67860.0483 317.6791 2.733727 29352402 0.000000：pQ1(13)：激发态 a3P振动带=13 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 4 X态 13 e 1 67591.5841 1.305460 67909.2632 317.6791 5.990172 64458002 0.000000：qQ21(13)：激发态 a3P振动带=13 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 5 X态 13 e 1 67640.3576 .7674910 67958.0367 317.6791 3.521672 37977488 0.000000：rQ31(13)：激发态 a3P振动带=13 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 6 X态 13 e 1 67686.4636 1.573546 68004.1427 317.6791 7.220296 78022546 0.000000：qQ21(13)：激发态 振动量子数=4 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 7 X态 13 e 1 67777.9659 .0193504 68095.6450 317.6791 .0887905 963366.6 0.000000：pQ1(13)：激发态 振动量子数=7 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 8 X态 13 e 1 67825.7235 .3328774 68143.4026 317.6791 1.527425 16607449 0.000000：qQ21(13)：激发态 振动量子数=7 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 9 X态 13 e 1 67835.6329 1.070016 68153.3120 317.6791 4.909822 53407107 0.000000：pQ1(13)：激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 10 X态 13 e 1 67874.0943 1.531997 68191.7734 317.6791 7.029648 76595876 0.000000：rQ31(13)：激发态 振动量子数=7 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 11 X态 13 e 1 67891.8266 .9223592 68209.5057 317.6791 4.232293 46151717 0.000000：rQ31(13)：激发态 a'态振动量子数=12 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 1 X态 13 e 1 67537.2315 .9206267 67854.9105 317.6791 4.224343 42219624 0.000000 : rR(13) : 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 2 X态 13 e 1 67574.0632 .3780415 67891.7423 317.6791 1.734663 17365232 0.000000 : qR1(13) : 激发态 a3P振动带=13 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 3 X态 13 e 1 67627.4209 .6695327 67945.1000 317.6791 3.072185 30827712 0.000000 : rR21(13) : 激发态 a3P振动带=13 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 4 X态 13 e态 1 67678.4126 .6024906 67996.0917 317.6791 2.764559 27803650 0.000000 : sR31(13) : 激发态 a3P振动带=13 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 5 X态 13 e态 1 67686.7978 .2744106 68004.4768 317.6791 1.259147 12668168 0.000000 : qR1(13) : 激发态 振动量子数=4 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 6 X态 13 e态 1 67749.2225 .4500903 68066.9016 317.6791 2.065262 20835964 0.000000 : sR31(13) : 激发态 振动量子数=4 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 7 X态 13 e态 1 67806.8168 .0132893 68124.4959 317.6791 .0609787 616770.3 0.000000：qR1(13)：激发态 振动量子数=7 14 13 F1e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 8 X态 13 e态 1 67855.9178 .2037756 68173.5968 317.6791 .9350350 9477995 0.000000：rR21(13)：激发态 振动量子数=7 14 14 F2e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 9 X态 13 e态 1 67890.5606 1.095296 68208.2397 317.6791 5.025824 51022398 0.000000：rR21(13)：激发态 a'态振动量子数=12 14 14 F2e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 10 X态 13 e态 1 67905.6075 .8407888 68223.2866 317.6791 3.858003 39192674 0.000000 : sR31(13) : 激发态 振动量子数=7 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 e态 1 X态 14 e态 1 67448.7833 .6380044 67815.3064 366.5231 3.700273 39565416 0.000000 : pP(14) : 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e态 2 X态 14 e态 1 67490.5527 .2355962 67857.0758 366.5231 1.366401 14637499 0.000000 : oP1(14) : 激发态 a3P振动带=13 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e 3 X态 14 e 1 67542.1567 .4907251 67908.6799 366.5231 2.846088 30558552 0.000000：pP21(14)：激发态 a3P振动带=13 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e 4 X态 14 e 1 67591.4419 .3101121 67957.9650 366.5231 1.798576 19353677 0.000000：qP31(14)：激发态 a3P振动带=13 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e 5 X态 14 e 1 67609.0657 .2728719 67975.5888 366.5231 1.582592 17042893 0.000000：oP1(14)：激发态 振动量子数=4 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e态 6 X态 14 e态 1 67667.4884 .3118455 68034.0115 366.5231 1.808629 19527623 0.000000 : qP31(14) : 激发态 振动量子数=4 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e态 7 X态 14 e态 1 67729.1219 .0073849 68095.6450 366.5231 .0428308 463706.0 0.000000 : oP1(14) : 激发态 d态=7 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e态 8 X态 14 e态 1 67776.8796 .1278702 68143.4027 366.5231 .7416165 8046069 0.000000 : pP21(14) : 激发态 d态=7 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e 9 X态 14 e 1 67812.7197 .7492856 68179.2428 366.5231 4.345677 47222675 0.000000：pP21(14)：激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 13 e 10 X态 14 e 1 67825.2507 .5920907 68191.7738 366.5231 3.433984 37336376 0.000000：qP31(14)：激发态 振动量子数=7 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 2 X态 14 e 1 67488.4248 1.423249 67854.9479 366.5231 8.254503 82319791 0.000000：qQ(14)：激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 3 X态 14 e 1 67528.1678 .5472049 67894.6909 366.5231 3.173657 31705918 0.000000：pQ1(14)：激发态 a3P振动带=13 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 4 X态 14 e 1 67579.1907 1.049598 67945.7138 366.5231 6.087414 60953302 0.000000：qQ21(14)：激发态 a3P振动带=13 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 5 X态 14 e 1 67629.8580 .7364653 67996.3811 366.5231 4.271322 42865037 0.000000：rQ31(14)：激发态 a3P振动带=13 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 6 X态 14 e 1 67668.4550 1.283520 68034.9782 366.5231 7.444111 74833672 0.000000：qQ21(14)：激发态 ev=4 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 7 X态 14 e 1 67757.9728 .0202796 68124.4959 366.5231 .1176171 1187072 0.000000 : pQ1(14) : 激发态 振动量子数=7 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 8 X态 14 e 1 67807.0736 .3070716 68173.5967 366.5231 1.780942 18013583 0.000000 : qQ21(14) : 激发态 振动量子数=7 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 9 X态 14 e 1 67813.7210 .9080398 68180.2441 366.5231 5.266413 53283543 0.000000 : pQ1(14) : 激发态 a'态振动量子数=12 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 10 X态 14 e 1 67856.7631 1.269589 68223.2862 366.5231 7.363312 74641104 0.000000 : rQ31(14) : 激发态 振动量子数=7 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 f 11 X态 14 e 1 67874.0415 .7886586 68240.5646 366.5231 4.574031 46401891 0.000000 : rQ31(14) : 激发态 a'态振动量子数=12 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 1 X态 14 e 1 67530.8059 .7661624 67897.3290 366.5231 4.443558 41533489 0.000000：rR(14)：激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 2 X态 14 e 1 67562.4059 .3494087 67928.9290 366.5231 2.026487 18967967 0.000000：qR1(14)：激发态 a3P振动带=13 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 3 X态 14 e 1 67617.6002 .5286589 67984.1233 366.5231 3.066095 28769123 0.000000：rR21(14)：激发态 a3P振动带=13 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 4 X态 14 e 1 67667.1477 .7098679 68033.6708 366.5231 4.117064 38715330 0.000000：qR1(14)：激发态 振动量子数=4 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 5 X态 14 e 1 67672.2397 .0526100 68038.7628 366.5231 .3051255 2869934 0.000000：sR31(14)：激发态 a3P振动带=13 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 6 X态 14 e 1 67735.4591 .3744738 68101.9822 366.5231 2.171859 20485261 0.000000：sR31(14)：激发态 振动量子数=4 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 7 X态 14 e 1 67788.9186 .0135630 68155.4417 366.5231 .0786623 743711.5 0.000000：qR1(14)：激发态 振动量子数=7 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 8 X态 14 e 1 67839.4146 .1858887 68205.9378 366.5231 1.078110 10215768 0.000000：rR21(14)：激发态 振动量子数=7 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e 9 X态 14 e 1 67872.7757 .9260901 68239.2988 366.5231 5.371100 50969672 0.000000：rR21(14)：激发态 a'态振动量子数=12 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 15 e态 10 X态 14 e态 1 67890.4790 .6911675 68257.0021 366.5231 4.008606 38069896 0.000000：sR31(14)：激发态 振动量子数=7 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O 激发态 14 e态 1 X态 15 e态 1 67436.0633 .5289359 67854.9105 418.8472 3.942720 39228166 0.000000：pP(15)：激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e态 2 X态 15 e态 1 67472.8951 .2171995 67891.7423 418.8472 1.619019 16134864 0.000000：oP1(15)：激发态 a3P振动带=13 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e 3 X态 15 e 1 67526.2528 .3846726 67945.1000 418.8472 2.867373 28643596 0.000000：pP21(15)：激发态 a3P振动带=13 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e 4 X态 15 e 1 67577.2445 .3461543 67996.0917 418.8472 2.580255 25833874 0.000000：qP31(15)：激发态 a3P振动带=13 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e 5 X态 15 e 1 67585.6296 .1576596 68004.4768 418.8472 1.175204 11770686 0.000000：oP1(15)：激发态 振动量子数=4 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e态 6 X态 15 e态 1 67648.0544 .2585944 68066.9016 418.8472 1.927578 19359911 0.000000：qP31(15)：激发态 振动量子数=4 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e态 7 X态 15 e态 1 67705.6487 .0076352 68124.4959 418.8472 .0569134 573079.5 0.000000：oP1(15)：激发态 振动量子数=7 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e态 8 X态 15 e态 1 67754.7496 .1170770 68173.5968 418.8472 .8726993 8806621 0.000000：pP21(15)：激发态 振动量子数=7 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e 9 X态 15 e 1 67789.3924 .6292904 68208.2397 418.8472 4.690769 47408333 0.000000：pP21(15)：激发态 a'态振动量子数=12 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 14 e 10 X态 15 e 1 67804.4394 .4830659 68223.2866 418.8472 3.600803 36416579 0.000000：qP31(15)：激发态 振动量子数=7 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 2 X态 15 e 1 67478.5235 1.172313 67897.3707 418.8472 8.738493 81488250 0.000000：qQ(15)：激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 3 X态 15 e 1 67513.0276 .4882821 67931.8748 418.8472 3.639685 33992905 0.000000 : pQ1(15) : 激发态 a3P振动带=13 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 4 X态 15 e 1 67565.9136 .8297885 67984.7608 418.8472 6.185294 57903528 0.000000 : qQ21(15) : 激发态 a3P振动带=13 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 5 X态 15 e 1 67618.4594 .7042664 68037.3066 418.8472 5.249645 49259211 0.000000 : rQ31(15) : 激发态 a3P振动带=13 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 6 X态 15 e 1 67649.2312 .9977659 68068.0784 418.8472 7.437408 69883063 0.000000 : qQ21(15) : 激发态 振动量子数=4 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 7 X态 15 e 1 67736.5944 .0203871 68155.4416 418.8472 .1519667 1433443 0.000000 : pQ1(15) : 激发态 d态振动量子数=7 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 8 X态 15 e 1 67787.0901 .2703142 68205.9373 418.8472 2.014938 19048663 0.000000 : qQ21(15) : 激发态 d态振动量子数=7 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 9 X态 15 e 1 67790.3927 .7589333 68209.2399 418.8472 5.657135 53488784 0.000000 : pQ1(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 10 X态 15 e 1 67838.1546 1.029693 68257.0018 418.8472 7.675392 72725108 0.000000 : rQ31(15) : 激发态 振动量子数=7 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 15 f 11 X态 15 e 1 67854.8372 .6595969 68273.6844 418.8472 4.916675 46620367 0.000000 : rQ31(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 16 e 1 X态 15 e 1 67523.7099 .6212896 67942.5572 418.8472 4.631130 40650451 0.000000 : rR(15) : 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 16 e 2 X态 15 e 1 67549.7894 .3162486 67968.6367 418.8472 2.357336 20715864 0.000000 : qR1(15) : 激发态 a3P振动带=13 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 16 e 3 X态 15 e 1 67606.8987 .4087042 68025.7459 418.8472 3.046506 26840124 0.000000 : rR21(15) : 激发态 a3P振动带=13 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 16 e 4 X态 15 e 1 67648.5771 .4365768 68067.4243 418.8472 3.254270 28723613 0.000000：qR1(15)：激发态 振动量子数=4 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
13C18O 激发态 16 e 5 X态 15 e 1 67662.8699 .2130673 68081.7171 418.8472 1.588217 14027186 0.000000：sR31(15)：激发态 a3P振动带=13 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e

13C18O 激发态 16 e 6 X 15 e 1 67720.4079 .3035931 68139.2551
13C18O 激发态 16 e 7 X 15 e 1 67769.6387 .0133415 68188.4859
13C18O 激发态 16 e 8 X 15 e 1 67821.5765 .1645750 68240.4237
13C18O 激发态 16 e 9 X态 15 e 1 67853.5711 .7668732 68272.4183
13C18O 激发态 16 e 10 X态 15 e 1 67874.0668 .5567908 68292.9141
13C18O 激发态 15 e 1 X 16 e 1 67422.6794 .4276433 67897.3290
13C18O 激发态 15 e 2 X 16 e 1 67454.2794 .1950269 67928.9290
13C18O 激发态 15 e 3 X 16 e 1 67509.4737 .2950777 67984.1233
13C18O 激发态 15 e 4 X态 16 e 1 67559.0213 .3962218 68033.6708
13C18O 激发态 15 e 5 X态 16 e 1 67564.1132 .0293650 68038.7628
13C18O 激发态 15 e 6 X 16 e 1 67627.3326 .2090173 68101.9822
13C18O 激发态 15 e 7 X 16 e 1 67680.7921 .0075704 68155.4417
13C18O 激发态 15 e 8 X 16 e 1 67731.2882 .1037561 68205.9378
13C18O 激发态 15 e 9 X态 16 e 1 67764.6492 .5169089 68239.2988
13C18O 激发态 15 e 10 X态 16 e 1 67782.3525 .3857839 68257.0021
13C18O 激发态 16 f 2 X态 16 e 1 67467.9570 .9432934 67942.6066
13C18O 激发态 16 f 3 X态 16 e 1 67496.9548 .4245281 67971.6044
13C18O 激发态 16 f 4 X态 16 e 1 67551.7500 .6463837 68026.3995
13C18O 激发态 16 f 5 X态 16 e 1 67606.0675 .6881784 68080.7171
13C18O 激发态 16 f 6 X态 16 e 1 67628.8821 .7129834 68103.5316
13C18O 激发态 16 f 7 X态 16 e 1 67713.8363 .0197466 68188.4859
13C18O 激发态 16 f 8 X态 16 e 1 67765.6333 .3549437 68240.2828
13C18O 激发态 16 f 9 X态 16 e 1 67765.7879 .4980597 68240.4375
13C18O 激发态 16 f 10 X态 16 e 1 67818.2642 .8178821 68292.9137
13C18O 激发态 16 f 11 X态 16 e 1 67834.2134 .5400089 68308.8629
13C18O 激发态 17 e 1 X态 16 e 1 67515.9390 .4889252 67990.5885
13C18O 激发态 17 e 2 X态 16 e 1 67536.2151 .2823588 68010.8647
13C18O 激发态 17 e 3 X态 16 e 1 67595.3128 .3088524 68069.9624
13C18O 激发态 17 e 4 X态 16 e 1 67628.1266 .3232774 68102.7761
13C18O 激发态 17 e 5 X态 16 e 1 67653.2593 .2205316 68127.9089
13C18O 激发态 17 e态 6 X态 16 e态 1 67704.0748 .2393226 68178.7244
13C18O 激发态 17 e态 7 X态 16 e态 1 67748.9826 .0127007 68223.6322
13C18O 激发态 17 e态 8 X态 16 e态 1 67802.4031 .1416488 68277.0527
13C18O 激发态 17 e 9 X态 16 e 1 67832.9467 .6222829 68307.5963
13C18O 激发态 17 e 10 X态 16 e 1 67856.3667 .4397452 68331.0163
13C18O 激发态 16 e 1 X态 17 e 1 67408.6289 .3367203 67942.5572
13C18O 激发态 16 e 2 X态 17 e 1 67434.7084 .1713973 67968.6367
13C18O 激发态 16 e 3 X态 17 e 1 67491.8176 .2215054 68025.7459
13C18O 激发态 16 e 4 X态 17 e 1 67533.4960 .2366115 68067.4243
13C18O 激发态 16 e 5 X态 17 e 1 67547.7888 .1154761 68081.7171
13C18O 激发态 16 e 6 X态 17 e 1 67605.3268 .1645384 68139.2551
13C18O 激发态 16 e 7 X态 17 e 1 67654.5576 .0072307 68188.4859
13C18O 激发态 16 e 8 X态 17 e 1 67706.4954 .0891947 68240.4237
13C18O 激发态 16 e 9 X态 17 e 1 67738.4900 .4156223 68272.4183
13C18O 激发态 16 e 10 X态 17 e 1 67758.9858 .3017640 68292.9141
13C18O 激发态 17 f 2 X态 17 e 1 67456.7236 .7408527 67990.6518
13C18O 激发态 17 f 3 X态 17 e 1 67479.9549 .3608263 68013.8832
13C18O 激发态 17 f 4 X态 17 e 1 67536.6955 .4973260 68070.6238
13C18O 激发态 17 f 5 X态 17 e 1 67592.3900 .7210755 68126.3183
13C18O 激发态 17 f 6 X态 17 e 1 67607.6974 .4061711 68141.6257
13C18O 激发态 17 f 7 X态 17 e 1 67689.7039 .0185046 68223.6322
13C18O 激发态 17 f 8 X态 17 e 1 67739.4850 .4751861 68273.4133
13C18O 激发态 17 f 9 X态 17 e 1 67743.1251 .2168071 68277.0534
13C18O 激发态 17 f 10 X态 17 e 1 67797.0877 .6365786 68331.0160
13C18O 激发态 17 f 11 X态 17 e 1 67812.1698 .4330440 68346.0981
13C18O 激发态 18 e 1 X态 17 e 1 67507.4823 .3687470 68041.4106
13C18O 激发态 18 e 2 X态 17 e 1 67521.6854 .2526565 68055.6136
13C18O 激发态 18 e 3 X态 17 e 1 67582.8362 .2266751 68116.7645
13C18O 激发态 18 e 4 X态 17 e 1 67606.3488 .2491568 68140.2771
13C18O 激发态 18 e 5 X态 17 e 1 67642.8545 .2003492 68176.7828
13C18O 激发态 18 e 6 X态 17 e 1 67686.4700 .1826333 68220.3983
13C18O 激发态 18 e 7 X态 17 e 1 67726.9561 .0117515 68260.8844
13C18O 激发态 18 e 8 X态 17 e 1 67781.8947 .1186853 68315.8230
13C18O 激发态 18 e 9 X态 17 e 1 67810.9024 .4950480 68344.8306
13C18O 激发态 18 e 10 X态 17 e 1 67837.3746 .3406194 68371.3029
13C18O 激发态 17 e 1 X态 18 e 1 67393.9073 .2571853 67990.5885
13C18O 激发态 17 e 2 X态 18 e 1 67414.1834 .1485268 68010.8647
13C18O 激发态 17 e 3 X态 18 e 1 67473.2811 .1624630 68069.9624
13C18O 激发态 17 e 4 X态 18 e 1 67506.0949 .1700509 68102.7761
13C18O 激发态 17 e 5 X态 18 e 1 67531.2276 .1160044 68127.9089
13C18O 激发态 17 e 6 X态 18 e 1 67582.0431 .1258889 68178.7244
13C18O 激发态 17 e 7 X 18 e 1 67626.9510 .0066809 68223.6322
13C18O 激发态 17 e 8 X 18 e 1 67680.3715 .0745104 68277.0527
13C18O 激发态 17 e 9 X态 18 e 1 67710.9150 .3273343 68307.5963
13C18O 激发态 17 e 10 X态 18 e 1 67734.3350 .2313155 68331.0163
13C18O 激发态 18 f 2 X态 18 e 1 67444.8202 .5665017 68041.5015
13C18O 激发态 18 f 3 X态 18 e 1 67462.0328 .3013795 68058.7141
13C18O 激发态 18 f 4 X态 18 e 1 67520.7439 .3791249 68117.4251
13C18O 激发态 18 f 5 X态 18 e 1 67576.2495 .8083237 68172.9307
13C18O 激发态 18 f 6 X态 18 e 1 67586.8547 .0778302 68183.5359
13C18O 激发态 18 f 7 X态 18 e 1 67664.2031 .0168512 68260.8844
13C18O 激发态 18 f 8 X态 18 e 1 67711.9078 .3739517 68308.5890
13C18O 激发态 18 f 9 X态 18 e态 1 67719.1422 .1757747 68315.8234
13C18O 激发态 18 f 10 X态 18 e 1 67774.6214 .4857130 68371.3026
13C18O 激发态 18 f 11 X态 18 e 1 67788.7063 .3403352 68385.3875
13C18O 激发态 19 e 1 X态 18 e 1 67498.3030 .2510098 68094.9843
13C18O 激发态 19 e 2 X态 18 e 1 67506.2223 .2394519 68102.9036
13C18O 激发态 19 e 3 X态 18 e 1 67569.4510 .1568490 68166.1322
13C18O 激发态 19 e 4 X态 18 e 1 67583.3318 .1980064 68180.0131
13C18O 激发态 19 e 5 X态 18 e 1 67631.5745 .1742496 68228.2557
13C18O 激发态 19 e 6 X态 18 e 1 67667.6132 .1336384 68264.2945
13C18O 激发态 19 e 7 X态 18 e 1 67703.5655 .0106231 68300.2468

418.8472 2.263001 20037936 0.000000 : sR31(15) : 激发态 ev=4 16 17 F3e - X X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 .0994484 882495.8 0.000000 : qR1(15) : 激发态 d态v=7 16 15 F1e - X X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 1.226752 10911134 0.000000 : rR21(15) : 激发态 振动量子数=7 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 5.716319 50914806 0.000000 : rR21(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 4.150353 37000375 0.000000 : sR31(15) : 激发态 振动量子数=7 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
474.6496 4.165836 38750911 0.000000 : pP(16)支 : 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 1.899831 17697229 0.000000 : oP1(16) : 激发态 a3P振动带=13 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.874464 26841872 0.000000: pP21(16): 激发态 a3P振动带=13 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.859747 36121907 0.000000: oP1(16): 激发态 振动量子数=4 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .2860552 2677687 0.000000: qP31(16): 激发态 a3P振动带=13 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.036117 19113108 0.000000 : qP31(16) : 激发态 ev=4 15 16 F3e - X Xv=0 16 16 F1e
474.6496 .0737459 693898.5 0.000000 : oP1(16) : 激发态 dv=7 15 14 F1e - X Xv=0 16 16 F1e
474.6496 1.010728 9531561 0.000000: pP21(16): 激发态 振动量子数=7 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 5.035407 47556060 0.000000: pP21(16): 激发态 a'态振动量子数=12 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.758068 35520271 0.000000: qP31(16): 激发态 振动量子数=7 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 9.188980 80458042 0.000000: qQ支(16): 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.135489 36256755 0.000000: pQ1(16): 激发态 a3P振动带=13 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.296669 55338858 0.000000: qQ21(16): 激发态 a3P振动带=13 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.703807 59059265 0.000000: rQ31(16): 激发态 a3P振动带=13 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.945443 61249994 0.000000: qQ21(16): 激发态 振动量子数=4 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .1923591 1702764 0.000000: pQ1(16): 激发态 振动量子数=7 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.457641 30677356 0.000000: pQ1(16): 激发态 a'态振动量子数=12 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.851789 43047001 0.000000: qQ21(16): 激发态 振动量子数=7 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 7.967301 70853406 0.000000: rQ31(16): 激发态 振动量子数=7 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 5.260433 46814171 0.000000: rQ31(16): 激发态 a'态振动量子数=12 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.762807 39403726 0.000000 : rR(16)支 : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.750564 22776516 0.000000 : qR1(16) : 激发态 a3P振动带=13 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.008648 24979087 0.000000: rR21(16): 激发态 a3P振动带=13 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.149168 26183838 0.000000: qR1(16): 激发态 振动量子数=4 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.148282 17881868 0.000000: sR31(16): 激发态 a3P振动带=13 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.331333 19449303 0.000000: sR31(16): 激发态 振动量子数=4 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .1237228 1034221 0.000000: qR1(16): 激发态 振动量子数=7 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 1.379855 11561766 0.000000: rR21(16): 激发态 振动量子数=7 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.061894 50861105 0.000000: rR21(16): 激发态 a'态振动量子数=12 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.283725 35978973 0.000000: sR31(16): 激发态 振动量子数=7 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
533.9283 4.358711 38063965 0.000000: pP(17): 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.218669 19397804 0.000000: oP1(17): 激发态 a3P振动带=13 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.867299 25132513 0.000000: pP21(17): 激发态 a3P振动带=13 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 3.062842 26896256 0.000000: oP1(17): 激发态 振动量子数=4 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 1.494792 13134809 0.000000: qP31(17): 激发态 a3P振动带=13 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.129884 18763252 0.000000: qP31(17): 激发态 振动量子数=4 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 .0935985 826360.1 0.000000: oP1(17): 激发态 振动量子数=7 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 1.154590 10217116 0.000000: pP21(17): 激发态 振动量子数=7 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 5.380065 47676412 0.000000: pP21(17): 激发态 a'态振动量子数=12 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 3.906214 34647050 0.000000: qP31(17): 激发态 振动量子数=7 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 9.590043 79131914 0.000000: qQ(17): 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 4.670753 38580396 0.000000: pQ1(17): 激发态 a3P振动带=13 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 6.437687 53309506 0.000000: qQ21(17): 激发态 a3P振动带=13 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 9.334036 77485115 0.000000: rQ31(17): 激发态 a3P振动带=13 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 5.257724 43675874 0.000000: qQ21(17): 激发态 振动量子数=4 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 .2395345 1997061 0.000000 : pQ1(17) : 激发态 振动量子数=7 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 6.151095 51396491 0.000000 : pQ1(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.806481 23453800 0.000000 : qQ21(17) : 激发态 振动量子数=7 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 8.240257 69028630 0.000000 : rQ31(17): 激发态 振动量子数=7 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 5.605582 46989307 0.000000: rQ31(17): 激发态 a'态振动量子数=12 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 4.773283 37341745 0.000000 : rR(17) : 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 3.270537 25601808 0.000000 : qR1(17) : 激发态 a3P振动带=13 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.934219 23031570 0.000000 : rR21(17) : 激发态 a3P振动带=13 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 3.225236 25342276 0.000000 : qR1(17) : 激发态 振动量子数=4 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.593441 20410979 0.000000 : sR31(17) : 激发态 a3P振动带=13 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 2.364115 18642150 0.000000: sR31(17): 激发态 振动量子数=4 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 .1521185 1201679 0.000000: qR1(17): 激发态 振动量子数=7 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 1.536333 12166014 0.000000: rR21(17): 激发态 振动量子数=7 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 6.408199 50810828 0.000000 : rR21(17): 激发态 a'态振动量子数=12 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
533.9283 4.409183 35001521 0.000000 : sR31(17): 激发态 振动量子数=7 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
596.6812 4.498206 37013203 0.000000 : pP(18) : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.597755 21394759 0.000000 : oP1(18) : 激发态 a3P振动带=13 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.841501 23463820 0.000000 : pP21(18) : 激发态 a3P振动带=13 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.974214 24595554 0.000000: oP1(18): 激发态 振动量子数=4 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.028933 16797207 0.000000: qP31(18): 激发态 a3P振动带=13 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.201814 18269640 0.000000 : qP31(18) : 激发态 振动量子数=4 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 .1168493 971495.6 0.000000 : oP1(18) : 激发态 d态振动量子数=7 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 1.303197 10860593 0.000000 : pP21(18) : 激发态 d态振动量子数=7 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 5.725122 47776706 0.000000: pP21(18): 激发态 a'态振动量子数=12 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 4.045740 33797143 0.000000: qP31(18): 激发态 振动量子数=7 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 9.908194 77296886 0.000000 : qQ(18) : 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 5.271169 41153514 0.000000 : pQ1(18) : 激发态 a3P振动带=13 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 6.630947 51904968 0.000000 : qQ21(18) : 激发态 a3P振动带=13 18 18 F2f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 14.13770 1.1094e8 0.000000: rQ31(18): 激发态 a3P振动带=13 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 1.361262 10686860 0.000000: qQ21(18): 激发态 振动量子数=4 18 18 F2f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 .2947295 2321786 0.000000 : pQ1(18) : 激发态 振动量子数=7 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 6.540467 51632796 0.000000 : pQ1(18) : 激发态 a'态振动量子数=12 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 3.074324 24277595 0.000000 : qQ21(18) : 激发态 振动量子数=7 18 18 F2f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 8.495189 67250580 0.000000: rQ31(18): 激发态 振动量子数=7 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 5.952511 47151328 0.000000: rQ31(18): 激发态 a'态振动量子数=12 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 4.390196 32570265 0.000000: rR(18)支: 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 4.188048 31081492 0.000000: qR1(18): 激发态 a3P振动带=13 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.743311 20416676 0.000000: rR21(18)支: 激发态 a3P振动带=13 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 3.463159 25789923 0.000000: qR1(18): 激发态 振动量子数=4 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 3.047650 22744294 0.000000: sR31(18): 激发态 a3P振动带=13 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 2.337354 17471325 0.000000: sR31(18): 激发态 振动量子数=4 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 .1857996 1391035 0.000000 : qR1(18) : 激发态 振动量子数=7 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e

13C18O 激发态 19 e 8 X态 18 e 1 67760.0512 .0969169 68356.7324
13C18O 激发态 19 e 9 X态 18 e 1 67787.4379 .3862528 68384.1192
13C18O 激发态 19 e 10 X态 18 e 1 67817.0871 .2588377 68413.7683
13C18O 激发态 18 e 1 X态 19 e 1 67378.5043 .1881943 68041.4106
13C18O 激发态 18 e 2 X态 19 e 1 67392.7073 .1289461 68055.6136
13C18O 激发态 18 e 3 X态 19 e 1 67453.8582 .1156863 68116.7645
13C18O 激发态 18 e 4 X态 19 e 1 67477.3708 .1271601 68140.2771
13C18O 激发态 18 e 5 X态 19 e 1 67513.8765 .1022505 68176.7828
13C18O 激发态 18 e 6 X态 19 e 1 67557.4920 .0932090 68220.3983
13C18O 激发态 18 e 7 X态 19 e 1 67597.9781 .0059975 68260.8844
13C18O 激发态 18 e 8 X态 19 e 1 67652.9167 .0605724 68315.8230
13C18O 激发态 18 e 9 X态 19 e 1 67681.9243 .2526534 68344.8306
13C18O 激发态 18 e 10 X态 19 e 1 67708.3966 .1738391 68371.3029
13C18O 激发态 19 f 2 X态 19 e 1 67432.2419 .4180452 68095.1482
13C18O 激发态 19 f 3 X态 19 e 1 67443.1944 .2507221 68106.1007
13C18O 激发态 19 f 4 X态 19 e 1 67503.8849 .2876470 68166.7912
13C18O 激发态 19 f 5 X态 19 e 1 67555.3109 .6700099 68218.2172
13C18O 激发态 19 f 6 X态 19 e 1 67568.6928 .0101891 68231.5991
13C18O 激发态 19 f 7 X态 19 e 1 67637.3405 .0149942 68300.2468
13C18O 激发态 19 f 8 X态 19 e 1 67682.9144 .2872193 68345.8207
13C18O 激发态 19 f 9 X态 19 e 1 67693.8265 .1405811 68356.7328
13C18O 激发态 19 f 10 X态 19 e 1 67750.8617 .3634251 68413.7680
13C18O 激发态 19 f 11 X态 19 e 1 67763.8225 .2622607 68426.7288
13C18O 激发态 20 e 1 X态 19 e 1 67487.9125 .0375326 68150.8188
13C18O 激发态 20 e 2 X态 19 e 1 67490.2877 .3417081 68153.1940
13C18O 激发态 20 e 3 X态 19 e 1 67554.9933 .0678009 68217.8996
13C18O 激发态 20 e 4 X态 19 e 1 67559.2784 .1934064 68222.1847
13C18O 激发态 20 e 5 X态 19 e 1 67619.3549 .1492279 68282.2612
13C18O 激发态 20 e 6 X态 19 e 1 67647.5475 .0915863 68310.4538
13C18O 激发态 20 e 7 X态 19 e 1 67678.8196 .0094533 68341.7259
13C18O 激发态 20 e 8 X态 19 e 1 67736.8727 .0771981 68399.7790
13C18O 激发态 20 e态 9 X态 19 e态 1 67762.5533 .2956709 68425.4596
13C18O 激发态 20 e态 10 X态 19 e态 1 67795.5008 .1930090 68458.4071
13C18O 激发态 19 e态 1 X态 20 e态 1 67362.3831 .1242552 68094.9843
13C18O 激发态 19 e 2 X态 20 e 1 67370.3024 .1185338 68102.9036
13C18O 激发态 19 e 3 X态 20 e 1 67433.5311 .0776436 68166.1322
13C18O 激发态 19 e态 4 X态 20 e态 1 67447.4119 .0980173 68180.0131
13C18O 激发态 19 e态 5 X态 20 e态 1 67495.6546 .0862573 68228.2557
13C18O 激发态 19 e态 6 X态 20 e态 1 67531.6933 .0661538 68264.2945
13C18O 激发态 19 e 7 X 20 e 1 67567.6456 .0052587 68300.2468
13C18O 激发态 19 e 8 X 20 e 1 67624.1313 .0479759 68356.7324
13C18O 激发态 19 e 9 X态 20 e态 1 67651.5180 .1912033 68384.1192
13C18O 激发态 19 e 10 X态 20 e态 1 67681.1671 .1281301 68413.7683
13C18O 激发态 20 f 2 X态 20 e态 1 67418.9693 .2792958 68151.5704
13C18O 激发态 20 f 3 X态 20 e 1 67423.4576 .2246714 68156.0588
13C18O 激发态 20 f 4 X态 20 e 1 67486.1012 .2187315 68218.7024
13C18O 激发态 20 f 5 X 20 e 1 67530.7047 .4558734 68263.3059
13C18O 激发态 20 f 6 X 20 e 1 67552.0920 .0529038 68284.6932
13C18O 激发态 20 f 7 X 20 e 1 67609.1247 .0131452 68341.7259
13C18O 激发态 20 f 8 X态 20 e 1 67652.5052 .2162016 68385.1063
13C18O 激发态 20 f 9 X态 20 e 1 67667.1782 .1100283 68399.7794
13C18O 激发态 20 f 10 X态 20 e态 1 67725.8057 .2667174 68458.4069
13C18O 激发态 20 f 11 X态 20 e态 1 67737.5184 .1982459 68470.1195
13C18O 激发态 21 e态 1 X态 20 e态 1 67471.7850 .0672120 68204.3861
13C18O 激发态 21 e 2 X 20 e 1 67478.3580 .2198295 68210.9591
13C18O 激发态 21 e 3 X 20 e 1 67533.3597 .0616999 68265.9608
13C18O 激发态 21 e 4 X态 20 e 1 67540.3427 .1281603 68272.9438
13C18O 激发态 21 e 5 X态 20 e 1 67606.0647 .1290312 68338.6658
13C18O 激发态 21 e 6 X态 20 e 1 67626.3872 .0546707 68358.9884
13C18O 激发态 21 e 7 X态 20 e 1 67652.7323 .0083946 68385.3335
13C18O 激发态 21 e 8 X态 20 e 1 67712.3594 .0600208 68444.9606
13C18O 激发态 21 e 9 X 20 e 1 67736.2484 .2221210 68468.8496
13C18O 激发态 21 e 10 X 20 e 1 67772.6132 .1412515 68505.2143
13C18O 激发态 20 e 1 X 21 e 1 67345.0554 .0180165 68150.8188
13C18O 激发态 20 e 2 X态 21 e 1 67347.4307 .1640277 68153.1940
13C18O 激发态 20 e 3 X态 21 e 1 67412.1363 .0325460 68217.8996
13C18O 激发态 20 e 4 X态 21 e 1 67416.4213 .0928395 68222.1847
13C18O 激发态 20 e 5 X态 21 e 1 67476.4978 .0716328 68282.2612
13C18O 激发态 20 e 6 X态 21 e 1 67504.6904 .0439635 68310.4538
13C18O 激发态 20 e 7 X态 21 e 1 67535.9625 .0045378 68341.7259
13C18O 激发态 20 e 8 X态 21 e 1 67594.0156 .0370568 68399.7790
13C18O 激发态 20 e态 9 X态 21 e态 1 67619.6962 .1419288 68425.4596
13C18O 激发态 20 e态 10 X态 21 e态 1 67652.6438 .0926487 68458.4071
13C18O 激发态 21 f态 2 X态 21 e态 1 67402.6636 .0777400 68208.4270
13C18O 激发态 21 f 3 X态 21 e 1 67405.1567 .2933993 68210.9201
13C18O 激发态 21 f 4 X态 21 e 1 67467.3595 .1686923 68273.1228
13C18O 激发态 21 f 5 X 21 e 1 67504.1970 .3059312 68309.9604
13C18O 激发态 21 f 6 X 21 e 1 67535.3094 .0630504 68341.0728
13C18O 激发态 21 f 7 X 21 e 1 67579.5701 .0115359 68385.3335
13C18O 激发态 21 f 8 X态 21 e 1 67620.6804 .1596648 68426.4437
13C18O 激发态 21 f 9 X态 21 e 1 67639.1976 .0841792 68444.9610
13C18O 激发态 21 f 10 X态 21 e 1 67699.4507 .1920114 68505.2140
13C18O 激发态 21 f 11 X态 21 e 1 67709.7936 .1470668 68515.5570
13C18O 激发态 22 e 1 X态 21 e 1 67453.2433 .0727832 68259.0067
13C18O 激发态 22 e 2 X态 21 e 1 67467.0114 .1390851 68272.7747
13C18O 激发态 22 e 3 X态 21 e 1 67506.9737 .0578729 68312.7371
13C18O 激发态 22 e 4 X态 21 e 1 67524.1954 .0792320 68329.9588
13C18O 激发态 22 e 5 X态 21 e 1 67591.2757 .1161970 68397.0391
13C18O 激发态 22 e 6 X态 21 e 1 67604.5308 .0203874 68410.2941
13C18O 激发态 22 e 7 X态 21 e 1 67625.3362 .0076790 68431.0995
13C18O 激发态 22 e 8 X态 21 e 1 67686.5118 .0455680 68492.2752
13C18O 激发态 22 e 9 X态 21 e 1 67708.5232 .1638083 68514.2866

596.6812 1.695091 12722516 0.000000 : rR21(18) : 激发态 振动量子数=7 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 6.755616 50765826 0.000000 : rR21(18) : 激发态 a'态振动量子数=12 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
596.6812 4.527107 34064108 0.000000 : sR31(18) : 激发态 振动量子数=7 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
662.9063 4.522057 35174010 0.000000: pP(19): 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 3.098404 24115620 0.000000: oP1(19): 激发态 a3P振动带=13 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 2.779787 21694697 0.000000 : pP21(19) : 激发态 a3P振动带=13 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 3.055486 23871325 0.000000 : oP1(19) : 激发态 振动量子数=4 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 2.456944 19226317 0.000000 : qP31(19) : 激发态 a3P振动带=13 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 2.239688 17560216 0.000000: qP31(19): 激发态 振动量子数=4 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 .1441122 1131941 0.000000: oP1(19): 激发态 振动量子数=7 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 1.455474 11460028 0.000000: pP21(19): 激发态 振动量子数=7 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 6.070925 47862425 0.000000: pP21(19): 激发态 a'态振动量子数=12 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 4.177121 32970559 0.000000: qP31(19): 激发态 振动量子数=7 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 10.04507 74304400 0.000000: qQ(19): 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 6.024519 44585698 0.000000: pQ1(19): 激发态 a3P振动带=13 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 6.911774 51290228 0.000000: qQ21(19): 激发态 a3P振动带=13 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 16.09944 1.1974e8 0.000000: qQ21(19): 激发态 振动量子数=4 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 .2448311 1822057 0.000000: rQ31(19): 激发态 a3P振动带=13 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 .3602898 2689493 0.000000: pQ1(19): 激发态 振动量子数=7 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 6.901496 51622520 0.000000: pQ1(19): 激发态 a'态振动量子数=12 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 3.377977 25279162 0.000000: qQ21(19): 激发态 振动量子数=7 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 8.732622 65516086 0.000000: rQ31(19): 激发态 振动量子数=7 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 6.301775 47305913 0.000000: rQ31(19): 激发态 a'态振动量子数=12 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 .9018578 6361443 0.000000 : rR(19) : 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 8.210789 57922635 0.000000 : qR1(19) : 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 1.629166 11525962 0.000000 : rR21(19) : 激发态 a3P振动带=13 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 4.647298 32884791 0.000000 : qR1(19) : 激发态 振动量子数=4 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 3.585747 25440893 0.000000 : sR31(19) : 激发态 a3P振动带=13 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 2.200698 15633498 0.000000 : sR31(19) : 激发态 ev=4 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 .2271500 1615885 0.000000 : qR1(19) : 激发态 振动量子数=7 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 1.854966 13229732 0.000000 : rR21(19) : 激发态 振动量子数=7 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 7.104577 50727923 0.000000: rR21(19): 激发态 a'态振动量子数=12 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
662.9063 4.637749 33162667 0.000000: sR31(19): 激发态 振动量子数=7 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
732.6012 4.170686 30755208 0.000000: pP(20): 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 3.978645 29349421 0.000000: oP1(20): 激发态 a3P振动带=13 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 2.606145 19279030 0.000000: pP21(20): 激发态 a3P振动带=13 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 3.290001 24352902 0.000000: oP1(20): 激发态 振动量子数=4 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 2.895268 21477069 0.000000: qP31(20): 激发态 a3P振动带=13 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 2.220486 16497943 0.000000 : qP31(20) : 激发态 振动量子数=4 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 .1765096 1313541 0.000000 : oP1(20) : 激发态 振动量子数=7 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 1.610336 12013804 0.000000 : pP21(20) : 激发态 振动量子数=7 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 6.417835 47938014 0.000000: pP21(20): 激发态 a'态振动量子数=12 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 4.300752 32166718 0.000000: qP31(20): 激发态 振动量子数=7 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 9.374703 65923982 0.000000: qQ(20): 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 7.541207 53041223 0.000000: pQ1(20): 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 7.341830 51782965 0.000000: qQ21(20): 激发态 a3P振动带=13 20 20 F2f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 15.30162 1.0814e8 0.000000 : qQ21(20) : 激发态振动量子数=4 20 20 F2f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 1.775741 12561333 0.000000 : rQ31(20) : 激发态 a3P振动带=13 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 .4412257 3129078 0.000000: pQ1(20): 激发态 振动量子数=7 20 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 7.256913 51563592 0.000000: pQ1(20): 激发态 a'态振动量子数=12 20 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 3.693156 26258591 0.000000: qQ21(20): 激发态 振动量子数=7 20 20 F2f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 8.952502 63818494 0.000000 : rQ31(20) : 激发态 振动量子数=7 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 6.654221 47459662 0.000000 : rQ31(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 2.256004 15162175 0.000000: qR1(20): 激发态 a3P振动带=13 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 7.378685 49605231 0.000000: rR(20): 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 2.070989 13956865 0.000000: qR1(20): 激发态 振动量子数=4 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 4.301765 28999564 0.000000: rR21(20): 激发态 a3P振动带=13 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 4.330996 29281930 0.000000: sR31(20): 激发态 a3P振动带=13 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 1.835050 12417992 0.000000 : sR31(20) : 激发态 振动量子数=4 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 .2817682 1908987 0.000000 : qR1(20) : 激发态 振动量子数=7 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 2.014630 13685291 0.000000 : rR21(20) : 激发态 振动量子数=7 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 7.455601 50699194 0.000000: rR21(20): 激发态 a'态振动量子数=12 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
732.6012 4.741176 32292654 0.000000: sR31(20): 激发态 振动量子数=7 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
805.7634 .8589122 6020124 0.000000: pP(21): 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 7.819799 54814855 0.000000: oP1(21): 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 1.551586 10907615 0.000000: pP21(21): 激发态 a3P振动带=13 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 4.425998 31120593 0.000000: oP1(21): 激发态 振动量子数=4 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 3.414998 24076180 0.000000: qP31(21): 激发态 a3P振动带=13 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 2.095903 14794917 0.000000 : qP31(21): 激发态 ev=4 20 21 F3e - X态 Xv=0 21 21 F1e
805.7634 .2163333 1529214 0.000000 : oP1(21): 激发态 dv=7 20 19 F1e - X态 Xv=0 21 21 F1e
805.7634 1.766635 12520194 0.000000 : pP21(21): 激发态 dv=7 20 20 F2e - X态 Xv=0 21 21 F1e
805.7634 6.766264 48007395 0.000000 : pP21(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 4.416904 31384257 0.000000 : qP31(21) : 激发态 振动量子数=7 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 3.706152 24831866 0.000000 : pQ1(21) : 激发态 a3P振动带=13 21 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 13.98742 93728550 0.000000 : qQ(21) : 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 8.042180 54039324 0.000000 : qQ21(21) : 激发态 a3P振动带=13 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 14.58486 98163405 0.000000 : qQ21(21) : 激发态振动量子数=4 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 3.005841 20258799 0.000000 : rQ31(21) : 激发态a3P振动带=13 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 .5499608 3713924 0.000000: pQ1(21): 激发态 振动量子数=7 21 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 7.611805 51496918 0.000000: pQ1(21): 激发态 a'态振动量子数=12 21 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 4.013130 27172750 0.000000: qQ21(21): 激发态 振动量子数=7 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 9.153886 62146393 0.000000 : rQ31(21) : 激发态 振动量子数=7 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 7.011214 47621455 0.000000 : rQ31(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 3.469843 22265335 0.000000 : qR1(21) : 激发态 a3P振动带=13 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 6.630696 42574001 0.000000 : rR(21) : 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 2.759011 17746400 0.000000 : qR1(21) : 激发态 振动量子数=4 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 3.777279 24314661 0.000000: rR21(21): 激发态 a3P振动带=13 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 5.539534 35764827 0.000000: sR31(21): 激发态 a3P振动带=13 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 .9719428 6278834 0.000000: sR31(21): 激发态 振动量子数=4 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 .3660844 2367121 0.000000: qR1(21): 激发态 振动量子数=7 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 2.172392 14084956 0.000000: rR21(21): 激发态 振动量子数=7 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
805.7634 7.809343 50682197 0.000000: rR21(21): 激发态 a'态振动量子数=12 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e

13C18O 激发态 22 e态 10 X态 21 e态 1 67748.4218 .1014649 68554.1851 805.7634 4.837205 31448716 0.000000 : sR31(21) : 激发态 d态振动量子数=7 22 23 F3e - X X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 e态 1 X态 22 e态 1 67321.9957 .0312792 68204.3861 882.3904 2.153459 14376808 0.000000 : oP1(22) : 激发态 a3P振动带=13 21 20 F1e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e态 2 X态 22 e态 1 67328.5687 .1023046 68210.9591 882.3904 7.043290 47035820 0.000000 : pP(22) : 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 3 X态 22 e 1 67383.5704 .0287140 68265.9608 882.3904 1.976853 13234010 0.000000 : oP1(22) : 激发态 振动量子数=4 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 4 X态 22 e 1 67390.5534 .0596434 68272.9438 882.3904 4.106230 27497637 0.000000 : pP21(22) : 激发态 a3P振动带=13 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 5 X态 22 e 1 67456.2754 .0600487 68338.6658 882.3904 4.134132 27765558 0.000000 : qP31(22) : 激发态 a3P振动带=13 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 6 X态 22 e 1 67476.5979 .0254427 68358.9884 882.3904 1.751638 11774947 0.000000 : qP31(22) : 激发态 振动量子数=4 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 7 X态 22 e 1 67502.9430 .0039067 68385.3335 882.3904 .2689606 1810138 0.000000 : oP1(22) : 激发态 振动量子数=7 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 8 X态 22 e 1 67562.5702 .0279326 68444.9606 882.3904 1.923056 12976731 0.000000 : pP21(22) : 激发态 振动量子数=7 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 9 X态 22 e 1 67586.4591 .1033710 68468.8496 882.3904 7.116710 48074340 0.000000 : pP21(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 10 X态 22 e 1 67622.8239 .0657358 68505.2143 882.3904 4.525668 30620873 0.000000 : qP31(22) : 激发态 振动量子数=7 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 2 X态 22 e 1 67381.1303 .0911147 68263.5208 882.3904 6.272912 40123149 0.000000 : pQ1(22) : 激发态 a3P振动带=13 22 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 3 X态 22 e 1 67390.4764 .1755632 68272.8668 882.3904 12.08687 77342910 0.000000 : qQ(22) : 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 4 X态 22 e 1 67447.5871 .1348555 68329.9775 882.3904 9.284305 59560668 0.000000 : qQ21(22) : 激发态 a3P振动带=13 22 22 F2f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 5 X态 22 e 1 67476.3382 .1996277 68358.7287 882.3904 13.74363 88280927 0.000000 : qQ21(22) : 激发态 振动量子数=4 22 22 F2f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 6 X态 22 e 1 67517.8434 .0562870 68400.2338 882.3904 3.875152 24937640 0.000000 : rQ31(22) : 激发态 a3P振动带=13 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 7 X态 22 e 1 67548.7091 .0105380 68431.0995 882.3904 .7255018 4675204 0.000000 : pQ1(22) : 激发态 d态振动量子数=7 22 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 8 X态 22 e 1 67587.4402 .1157389 68469.8306 882.3904 7.968198 51436220 0.000000 : pQ1(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 9 X态 22 e 1 67609.8852 .0629482 68492.2756 882.3904 4.333749 28003043 0.000000 : qQ21(22) : 激发态 振动量子数=7 22 22 F2f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 10 X态 22 e 1 67671.7944 .1355818 68554.1848 882.3904 9.334308 60480602 0.000000 : rQ31(22) : 激发态 振动量子数=7 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 11 X态 22 e 1 67680.6480 .1071250 68563.0384 882.3904 7.375158 47805272 0.000000 : rQ31(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 1 X态 22 e 1 67433.4417 .0625313 68315.8322 882.3904 4.305049 26425890 0.000000: qR1(22): 激发态 a3P振动带=13 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 2 X态 22 e 1 67454.8458 .0872866 68337.2362 882.3904 6.009356 36922660 0.000000: rR(22): 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 3 X态 22 e 1 67479.6941 .0470949 68362.0846 882.3904 3.242312 19943423 0.000000: qR1(22): 激发态 振动量子数=4 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e态 4 X态 22 e态 1 67507.2161 .0540475 68389.6065 882.3904 3.720972 22915673 0.000000 : rR21(22) : 激发态 a3P振动带=13 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e态 5 X态 22 e态 1 67573.3538 .0980024 68455.7442 882.3904 6.747103 41674401 0.000000 : sR31(22) : 激发态 振动量子数=4 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e态 7 X态 22 e态 1 67596.7607 .0080694 68479.1512 882.3904 .5555471 3434979 0.000000 : qR1(22) : 激发态 d态振动量子数=7 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 8 X态 22 e 1 67659.3303 .0337828 68541.7207 882.3904 2.325821 14420654 0.000000 : rR21(22) : 激发态 振动量子数=7 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 9 X态 22 e 1 67679.3776 .1186214 68561.7680 882.3904 8.166642 50680184 0.000000 : rR21(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 10 X态 22 e 1 67722.9247 .0715405 68605.3152 882.3904 4.925298 30624229 0.000000 : sR31(22) : 激发态 振动量子数=7 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 e 1 X态 23 e 1 67296.5270 .0328330 68259.0067 962.4797 3.318980 21149179 0.000000: oP1(23): 激发态 a3P振动带=13 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 2 X态 23 e 1 67310.2951 .0627422 68272.7747 962.4797 6.342405 40439836 0.000000: pP(23): 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 3 X态 23 e 1 67350.2575 .0261068 68312.7371 962.4797 2.639054 16856871 0.000000: oP1(23): 激发态 振动量子数=4 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 4 X态 23 e 1 67367.4792 .0357421 68329.9588 962.4797 3.613049 23095943 0.000000: pP21(23): 激发态 a3P振动带=13 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 5 X态 23 e 1 67434.5595 .0524172 68397.0391 962.4797 5.298685 33972430 0.000000: qP31(23): 激发态 a3P振动带=13 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 6 X态 23 e 1 67447.8145 .0091969 68410.2941 962.4797 .9296844 5964171 0.000000: qP31(23): 激发态 振动量子数=4 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 7 X态 23 e 1 67468.6199 .0034640 68431.0995 962.4797 .3501677 2248498 0.000000 : oP1(23) : 激发态 振动量子数=7 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 8 X态 23 e 1 67529.7955 .0205560 68492.2752 962.4797 2.077940 13379203 0.000000 : pP21(23) : 激发态 振动量子数=7 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 9 X态 23 e 1 67551.8069 .0738951 68514.2866 962.4797 7.469806 48142780 0.000000 : pP21(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 10 X态 23 e 1 67591.7055 .0457715 68554.1851 962.4797 4.626891 29873110 0.000000 : qP31(23) : 激发态 d态振动量子数=7 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 2 X态 23 e 1 67358.6358 .0715027 68321.1155 962.4797 7.227966 44220283 0.000000 : pQ1(23) : 激发态 a3P振动带=13 23 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 3 X态 23 e 1 67375.1303 .1148074 68337.6100 962.4797 11.60550 71053961 0.000000 : qQ(23) : 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 4 X态 23 e 1 67426.5936 .1164052 68389.0733 962.4797 11.76702 72208046 0.000000: qQ21(23): 激发态 a3P振动带=13 23 23 F2f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 5 X态 23 e 1 67447.4643 .1189014 68409.9440 962.4797 12.01935 73825008 0.000000: qQ21(23): 激发态 振动量子数=4 23 23 F2f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 6 X态 23 e 1 67499.4421 .0428933 68461.9218 962.4797 4.335939 26693730 0.000000: rQ31(23): 激发态 a3P振动带=13 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 7 X态 23 e 1 67516.6661 .0114841 68479.1457 962.4797 1.160887 7152348 0.000000 : pQ1(23) : 激发态 振动量子数=7 23 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 8 X态 23 e 1 67552.7850 .0823717 68515.2647 962.4797 8.326676 51383895 0.000000 : pQ1(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 9 X态 23 e 1 67579.2416 .0460071 68541.7212 962.4797 4.650705 28733223 0.000000 : qQ21(23) : 激发态 振动量子数=7 23 23 F2f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 10 X态 23 e 1 67642.8351 .0938628 68605.3148 962.4797 9.488273 58786576 0.000000 : rQ31(23) : 激发态 dv=7 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 11 X态 23 e 1 67650.0814 .0766749 68612.5611 962.4797 7.750815 48037227 0.000000 : rQ31(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 1 X态 23 e 1 67412.2343 .0509455 68374.7139 962.4797 5.149907 30293043 0.000000 : qR1(23) : 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 2 X态 23 e 1 67440.9076 .0378965 68403.3873 962.4797 3.830830 22562667 0.000000: rR(23): 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 3 X态 23 e 1 67452.6850 .0509944 68415.1647 962.4797 5.154855 30376764 0.000000: qR1(23): 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 4 X态 23 e 1 67489.3227 .0375711 68451.8024 962.4797 3.797937 22417144 0.000000: rR21(23): 激发态 a3P振动带=13 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 5 X态 23 e 1 67550.5200 .0598207 68512.9996 962.4797 6.047075 35789758 0.000000: sR31(23): 激发态 振动量子数=4 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 6 X态 23 e 1 67563.2998 .0006354 68525.7795 962.4797 .0642274 380347.0 0.000000: sR31(23): 激发态 a3P振动带=13 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 7 X态 23 e 1 67568.7627 .0160060 68531.2424 962.4797 1.617993 9583892 0.000000: qR1(23): 激发态 振动量子数=7 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 8 X态 23 e 1 67630.8159 .0244432 68593.2956 962.4797 2.470885 14676206 0.000000 : rR21(23) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 9 X态 23 e 1 67648.8117 .0843688 68611.2914 962.4797 8.528557 50697139 0.000000 : rR21(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 10 X态 23 e 1 67696.1208 .0495060 68658.6005 962.4797 5.004395 29810572 0.000000 : sR31(23) : 激发态 振动量子数=7 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 e 1 X态 24 e 1 67269.8039 .0273390 68315.8322 1046.0283 4.125672 25140894 0.000000: oP1(24): 激发态 a3P振动带=13 23 22 F1e - X X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 2 X态 24 e 1 67291.2080 .0381621 68337.2362 1046.0283 5.758966 35127326 0.000000: pP(24): 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e - X X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 3 X态 24 e 1 67316.0563 .0205901 68362.0846 1046.0283 3.107216 18973742 0.000000: oP1(24): 激发态 振动量子数=4 23 22 F1e - X X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 4 X态 24 e 1 67343.5782 .0236298 68389.6065 1046.0283 3.565932 21801540 0.000000: pP21(24): 激发态 a3P振动带=13 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 5 X态 24 e 1 67409.7160 .0428471 68455.7442 1046.0283 6.465974 39648525 0.000000: qP31(24): 激发态 振动量子数=4 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 7 X态 24 e 1 67433.1229 .0035280 68479.1512 1046.0283 .5323993 3268006 0.000000: oP1(24): 激发态 振动量子数=7 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 8 X态 24 e 1 67495.6925 .0147700 68541.7207 1046.0283 2.228912 13719764 0.000000 : pP21(24) : 激发态 振动量子数=7 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 9 X态 24 e 1 67515.7397 .0518618 68561.7680 1046.0283 7.826366 48217068 0.000000 : pP21(24) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 10 X态 24 e 1 67559.2869 .0312778 68605.3152 1046.0283 4.720077 29135993 0.000000 : qP31(24) : 激发态 振动量子数=7 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 2 X态 24 e 1 67335.2219 .0532922 68381.2502 1046.0283 8.042228 47144458 0.000000: pQ1(24): 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 3 X态 24 e 1 67359.0321 .0722299 68405.0604 1046.0283 10.90008 63965306 0.000000: qQ(24): 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 4 X态 24 e 1 67403.7725 .1141176 68449.8008 1046.0283 17.22127 1.0126e8 0.000000: qQ21(24): 激发态 a3P振动带=13 24 24 F2f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 5 X态 24 e 1 67418.2650 .0515218 68464.2933 1046.0283 7.775063 45747147 0.000000: qQ21(24): 激发态 振动量子数=4 24 24 F2f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 6 X态 24 e 1 67478.5930 .0138756 68524.6213 1046.0283 2.093935 12353462 0.000000: rQ31(24): 激发态 a3P振动带=13 24 25 F3f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 7 X态 24 e 1 67484.9118 .0280965 68530.9400 1046.0283 4.239989 25021428 0.000000: pQ1(24): 激发态 d态振动量子数=7 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 8 X态 24 e 1 67516.7153 .0575450 68562.7436 1046.0283 8.684005 51319374 0.000000 : pQ1(24) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 9 X态 24 e 1 67547.2679 .0328521 68593.2962 1046.0283 4.957655 29337767 0.000000 : qQ21(24) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 10 X态 24 e 1 67612.5717 .0636338 68658.6000 1046.0283 9.602861 56991537 0.000000 : rQ31(24) : 激发态 振动量子数=7 24 25 F3f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 11 X态 24 e 1 67618.0937 .0540023 68664.1220 1046.0283 8.149390 48377254 0.000000 : rQ31(24) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 25 F3f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 1 X态 24 e 1 67389.2493 .0402626 68435.2776 1046.0283 6.075950 34303567 0.000000 : qR1(24) : 激发态 a3P振动带=13 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 2 X态 24 e 1 67419.2386 .0007528 68465.2669 1046.0283 .1136035 642238.5 0.000000 : qR1(24) : 激发态 振动量子数=4 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 3 X态 24 e 1 67432.2809 .0559221 68478.3092 1046.0283 8.439098 47736746 0.000000 : rR(24) : 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 4 X态 24 e 1 67470.4802 .0263985 68516.5085 1046.0283 3.983755 22572894 0.000000 : rR21(24) : 激发态 a3P振动带=13 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 5 X态 24 e 1 67524.6437 .0347277 68570.6720 1046.0283 5.240692 29766572 0.000000 : sR31(24) : 激发态 振动量子数=4 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e态 6 X态 24 e态 1 67534.1085 .0017492 68580.1367 1046.0283 .2639665 1499932 0.000000: qR1(24): 激发态 振动量子数=7 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e态 7 X态 24 e态 1 67549.3497 .0175446 68595.3780 1046.0283 2.647628 15054754 0.000000: sR31(24): 激发态 a3P振动带=13 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e态 8 X态 24 e态 1 67600.9703 .0172274 68646.9986 1046.0283 2.599752 14816441 0.000000: rR21(24): 激发态 振动量子数=7 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e态 9 X态 24 e态 1 67616.8258 .0589515 68662.8541 1046.0283 8.896258 50737022 0.000000 : rR21(24) : 激发态 a'态振动量子数=12 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e态 10 X态 24 e态 1 67668.0096 .0336140 68714.0379 1046.0283 5.072625 28995875 0.000000 : sR31(24) : 激发态 振动量子数=7 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 e态 1 X态 25 e态 1 67241.6805 .0215844 68374.7139 1133.0334 4.943911 28861151 0.000000 : oP1(25) : 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e态 2 X态 25 e态 1 67270.3539 .0160559 68403.3873 1133.0334 3.677597 21496244 0.000000: pP(25): 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e态 3 X态 25 e态 1 67282.1313 .0216051 68415.1647 1133.0334 4.948660 28941046 0.000000: oP1(25): 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e

13C18O 激发态 24 e 4 X态 25 e 1 67318.7690 .0159180 68451.8024 1133.0334 3.646019 21357716 0.000000：pP21(25)：激发态 a3P振动带=13 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 5 X态 25 e 1 67379.9662 .0253446 68512.9996 1133.0334 5.805192 34098579 0.000000：qP31(25)：激发态 振动量子数=4 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 6 X态 25 e 1 67392.7461 .0002692 68525.7795 1133.0334 .0616583 362374.9 0.000000：qP31(25)：激发态 a3P振动带=13 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e态 7 X态 25 e态 1 67398.2090 .0067814 68531.2424 1133.0334 1.553273 9131041 0.000000 : oP1(25) : 激发态 振动量子数=7 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e态 8 X态 25 e态 1 67460.2622 .0103560 68593.2956 1133.0334 2.372050 13982835 0.000000 : pP21(25) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e态 9 X态 25 e态 1 67478.2580 .0357451 68611.2914 1133.0334 8.187415 48302071 0.000000 : pP21(25) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e态 10 X态 25 e态 1 67525.5671 .0209745 68658.6005 1133.0334 4.804219 28402392 0.000000 : qP31(25) : 激发态 d态振动量子数=7 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 2 X态 25 e态 1 67310.8893 .0387247 68443.9227 1133.0334 8.869906 49903186 0.000000 : pQ1(25) : 激发态 a3P振动带=13 25 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 3 X态 25 e态 1 67342.0644 .0410139 68475.0978 1133.0334 9.394237 52926609 0.000000 : qQ(25) : 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 4 X态 25 e 1 67377.4995 .1112783 68510.5329 1133.0334 25.48831 1.4383e8 0.000000：qQ21(25)：激发态 振动量子数=4 25 25 F2f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 5 X态 25 e 1 67390.4863 .0067549 68523.5197 1133.0334 1.547203 8735674 0.000000：qQ21(25)：激发态 a3P振动带=13 25 25 F2f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 6 X态 25 e 1 67446.8410 .0001338 68579.8744 1133.0334 .0306578 173531.6 0.000000：pQ1(25)：激发态 振动量子数=7 25 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 7 X态 25 e 1 67461.8905 .0313133 68594.9239 1133.0334 7.172319 40624534 0.000000：rQ31(25)：激发态 a3P振动带=13 25 26 F3f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 8 X态 25 e 1 67479.2320 .0393323 68612.2654 1133.0334 9.009076 51067420 0.000000：pQ1(25)：激发态 a'态振动量子数=12 25 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 9 X态 25 e 1 67513.9660 .0228876 68646.9994 1133.0334 5.242414 29762226 0.000000：qQ21(25)：激发态 振动量子数=7 25 25 F2f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 10 X态 25 e 1 67581.0037 .0420857 68714.0371 1133.0334 9.639724 54889818 0.000000 : rQ31(25) : 激发态 dv=7 25 26 F3f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 11 X态 25 e 1 67584.6847 .0375724 68717.7181 1133.0334 8.605968 49011487 0.000000 : rQ31(25) : 激发态 a'态振动量子数=12 25 26 F3f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 1 X态 25 e 1 67363.8466 .0303019 68496.8800 1133.0334 6.940654 37664185 0.000000 : qR1(25) : 激发态 a3P振动带=13 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 3 X态 25 e 1 67417.2963 .0351661 68550.3297 1133.0334 8.054807 43814386 0.000000 : rR(25)支跃迁 : 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 4 X态 25 e 1 67450.6397 .0188471 68583.6731 1133.0334 4.316936 23516971 0.000000 : rR21(25) : 激发态 a3P振动带=13 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 5 X态 25 e 1 67496.8704 .0188316 68629.9038 1133.0334 4.313391 23546007 0.000000 : sR31(25) : 激发态 振动量子数=4 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 6 X态 25 e 1 67501.8146 .0040085 68634.8480 1133.0334 .9181459 5013091 0.000000：qR1(25)：激发态 振动量子数=7 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 7 X态 25 e 1 67531.5243 .0146118 68664.5577 1133.0334 3.346832 18297897 0.000000：sR31(25)：激发态 a3P振动带=13 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 8 X态 25 e 1 67569.7972 .0117609 68702.8305 1133.0334 2.693840 14752894 0.000000：rR21(25)：激发态 振动量子数=7 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e态 9 X态 25 e态 1 67583.4205 .0404722 68716.4539 1133.0334 9.270165 50799042 0.000000 : rR21(25) : 激发态 a'态振动量子数=12 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e态 10 X态 25 e态 1 67638.5918 .0223827 68771.6252 1133.0334 5.126769 28162747 0.000000 : sR31(25) : 激发态 d态振动量子数=7 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 e态 1 X态 26 e态 1 67211.7856 .0165287 68435.2776 1223.4920 5.842259 32724301 0.000000 : oP1(26) : 激发态 a3P振动带=13 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 2 X态 26 e 1 67241.7749 .0003090 68465.2669 1223.4920 .1092341 612673.3 0.000000：oP1(26)：激发态 振动量子数=4 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 3 X态 26 e 1 67254.8172 .0229573 68478.3092 1223.4920 8.114517 45539275 0.000000：pP(26)：激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 4 X态 26 e 1 67293.0165 .0108372 68516.5085 1223.4920 3.830533 21533890 0.000000：pP21(26)：激发态 a3P振动带=13 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 5 X态 26 e 1 67347.1800 .0142565 68570.6720 1223.4920 5.039127 28396631 0.000000 : qP31(26) : 激发态 振动量子数=4 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 6 X态 26 e 1 67356.6448 .0007181 68580.1367 1223.4920 .2538140 1430903 0.000000 : oP1(26) : 激发态 d态振动量子数=7 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 7 X态 26 e 1 67371.8861 .0072025 68595.3780 1223.4920 2.545796 14361934 0.000000 : qP31(26) : 激发态 a3P振动带=13 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 8 X态 26 e 1 67423.5066 .0070722 68646.9986 1223.4920 2.499761 14134673 0.000000 : pP21(26) : 激发态 振动量子数=7 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 9 X态 26 e 1 67439.3621 .0242010 68662.8541 1223.4920 8.554094 48402485 0.000000 : pP21(26) : 激发态 a'态振动量子数=12 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 10 X态 26 e 1 67490.5459 .0137993 68714.0379 1223.4920 4.877524 27661867 0.000000 : qP31(26) : 激发态 振动量子数=7 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 2 X态 26 e 1 67285.6334 .0276674 68509.1253 1223.4920 9.779359 52884082 0.000000：pQ1(26)：激发态 a3P振动带=13 26 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 3 X态 26 e 1 67323.8216 .0165860 68547.3136 1223.4920 5.862490 31756741 0.000000：qQ(26)：激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 4 X态 26 e 1 67347.3457 .0877366 68570.8376 1223.4920 31.01145 1.6816e8 0.000000：qQ21(26)：激发态 振动量子数=4 26 26 F2f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 6 X态 26 e 1 67410.9328 .0005797 68634.4248 1223.4920 .2049166 1114335 0.000000：pQ1(26)：激发态 振动量子数=7 26 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 7 X态 26 e 1 67440.2938 .0387086 68663.7857 1223.4920 13.68199 74499804 0.000000：pQ1(26)：激发态 a'态振动量子数=12 26 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 8 X态 26 e 1 67440.9115 .0101441 68664.4035 1223.4920 3.585554 19524239 0.000000：rQ31(26)：激发态 a3P振动带=13 26 27 F3f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 9 X态 26 e 1 67479.3398 .0154892 68702.8317 1223.4920 5.474834 29862834 0.000000：qQ21(26)：激发态 振动量子数=7 26 26 F2f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 10 X态 26 e 1 67548.1314 .0265694 68771.6234 1223.4920 9.391257 51382035 0.000000：rQ31(26)：激发态 振动量子数=7 26 27 F3f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 11 X态 26 e 1 67549.8551 .0263744 68773.3471 1223.4920 9.322310 51008714 0.000000：rQ31(26)：激发态 a'态振动量子数=12 26 27 F3f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 1 X态 26 e 1 67335.3497 .0209350 68558.8417 1223.4920 7.399706 38646000 0.000000：qR1(26)：激发态 振动量子数=4 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 2 X态 26 e 1 67364.1174 .0006905 68587.6093 1223.4920 .2440739 1276345 0.000000：qR1(26)：激发态 a3P振动带=13 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 3 X态 26 e 1 67402.4329 .0214302 68625.9249 1223.4920 7.574730 39678442 0.000000：rR(26)：激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 4 X态 26 e态 1 67429.7071 .0138713 68653.1991 1223.4920 4.902963 25714209 0.000000 : rR21(26) : 激发态 a3P振动带=13 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 5 X态 26 e态 1 67466.1991 .0032286 68689.6911 1223.4920 1.141180 5994784 0.000000 : qR1(26) : 激发态 d态振动量子数=7 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 6 X态 26 e态 1 67469.6665 .0108632 68693.1584 1223.4920 3.839731 20173780 0.000000 : sR31(26) : 激发态 e态振动量子数=4 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 7 X态 26 e 1 67513.1350 .0115022 68736.6269 1223.4920 4.065575 21401662 0.000000：sR31(26)：激发态 a3P振动带=13 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 8 X态 26 e 1 67537.3067 .0076189 68760.7987 1223.4920 2.692969 14191337 0.000000：rR21(26)：激发态 振动量子数=7 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 9 X态 26 e 1 67548.5973 .0272859 68772.0893 1223.4920 9.644494 50849795 0.000000：rR21(26)：激发态 a'态振动量子数=12 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 10 X态 26 e态 1 67607.8701 .0146020 68831.3620 1223.4920 5.161234 27283876 0.000000：sR31(26)：激发态 dv=7 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 e态 1 X态 27 e态 1 67179.4791 .0120523 68496.8800 1317.4009 6.683592 35972235 0.000000：oP1(27)：激发态 a3P振动带=13 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e态 3 X态 27 e态 1 67232.9288 .0139870 68550.3297 1317.4009 7.756481 41846429 0.000000：pP(27)：激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 4 X态 27 e 1 67266.2722 .0074963 68583.6731 1317.4009 4.157049 22460780 0.000000：pP21(27)：激发态 a3P振动带=13 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 5 X态 27 e 1 67312.5029 .0074901 68629.9038 1317.4009 4.153635 22488638 0.000000：qP31(27)：激发态 振动量子数=4 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 6 X态 27 e 1 67317.4471 .0015943 68634.8480 1317.4009 .8841405 4787974 0.000000：oP1(27)：激发态 振动量子数=7 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 7 X态 27 e 1 67347.1568 .0058117 68664.5577 1317.4009 3.222876 17476276 0.000000：qP31(27)：激发态 a3P振动带=13 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 8 X态 27 e 1 67385.4297 .0046778 68702.8305 1317.4009 2.594068 14090518 0.000000：pP21(27)：激发态 d态振动量子数=7 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 9 X态 27 e 1 67399.0530 .0160975 68716.4539 1317.4009 8.926825 48518346 0.000000：pP21(27)：激发态 a'态振动量子数=12 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e态 10 X态 27 e态 1 67454.2243 .0089025 68771.6252 1317.4009 4.936889 26898519 0.000000 : qP31(27) : 激发态 振动量子数=7 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 2 X态 27 e态 1 67259.4435 .0195526 68576.8444 1317.4009 10.84288 56437170 0.000000 : pQ1(27) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 3 X态 27 e态 1 67302.1995 .0001728 68619.6004 1317.4009 .0958071 499627.3 0.000000 : qQ(27) : 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 4 X态 27 e 1 67317.1076 .0656349 68634.5085 1317.4009 36.39772 1.8994e8 0.000000 : qQ21(27) : 激发态 振动量子数=4 27 27 F2f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 5 X态 27 e 1 67339.8820 .0012495 68657.2829 1317.4009 .6929178 3619591 0.000000 : qQ21(27) : 激发态 a3P振动带=13 27 27 F2f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 6 X态 27 e 1 67373.5880 .0004942 68690.9888 1317.4009 .2740371 1433637 0.000000 : pQ1(27) : 激发态 d态振动量子数=7 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 7 X态 27 e 1 67400.0250 .0184140 68717.4259 1317.4009 10.21146 53484592 0.000000 : pQ1(27) : 激发态 a'态振动量子数=12 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 8 X态 27 e 1 67419.1908 .0152489 68736.5917 1317.4009 8.456238 44329061 0.000000 : rQ31(27) : 激发态 a3P振动带=13 27 28 F3f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 9 X态 27 e 1 67443.3998 .0100083 68760.8007 1317.4009 5.550060 29125726 0.000000 : qQ21(27) : 激发态 振动量子数=7 27 27 F2f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 10 X态 27 e 1 67513.5902 .0107240 68830.9911 1317.4009 5.946965 31306153 0.000000：rQ31(27)：激发态 a'态振动量子数=12 27 28 F3f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 11 X态 27 e 1 67513.9719 .0238003 68831.3728 1317.4009 13.19841 69480575 0.000000：rQ31(27)：激发态 振动量子数=7 27 28 F3f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 1 X态 27 e 1 67303.6838 .0133308 68621.0847 1317.4009 7.392560 37201457 0.000000：qR1(27)：激发态 振动量子数=4 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 2 X态 27 e 1 67337.3499 .0014798 68654.7508 1317.4009 .8206154 4135769 0.000000 : qR1(27) : 激发态 a3P振动带=13 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 3 X态 27 e 1 67386.9785 .0123126 68704.3794 1317.4009 6.827904 34487677 0.000000 : rR(27) : 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 4 X态 27 e 1 67407.4606 .0107994 68724.8615 1317.4009 5.988790 30276912 0.000000 : rR21(27) : 激发态 a3P振动带=13 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 5 X态 27 e 1 67431.6230 .0004109 68749.0239 1317.4009 .2278394 1153103 0.000000：qR1(27)：激发态 振动量子数=7 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 6 X态 27 e 1 67439.1628 .0079650 68756.5637 1317.4009 4.416973 22361957 0.000000：sR31(27)：激发态 振动量子数=4 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 7 X态 27 e 1 67493.8871 .0096095 68811.2880 1317.4009 5.328950 27044785 0.000000：sR31(27)：激发态 a3P振动带=13 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 8 X态 27 e 1 67503.5638 .0039782 68820.9647 1317.4009 2.206116 11201006 0.000000 : rR21(27) : 激发态 振动量子数=7 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 9 X态 27 e 1 67512.3613 .0179564 68829.7621 1317.4009 9.957682 50577424 0.000000 : rR21(27) : 激发态 a'态振动量子数=12 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 10 X态 27 e 1 67575.8503 .0093155 68893.2512 1317.4009 5.165889 26312870 0.000000 : sR31(27) : 激发态 振动量子数=7 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 e 1 X态 28 e 1 67144.0849 .0080668 68558.8417 1414.7569 7.135430 36949129 0.000000 : oP1(28) : 激发态 振动量子数=4 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 2 X态 28 e 1 67172.8525 .0002661 68587.6093 1414.7569 .2353570 1220307 0.000000 : oP1(28) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 3 X态 28 e 1 67211.1680 .0082577 68625.9249 1414.7569 7.304204 37936560 0.000000 : pP(28) : 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 4 X态 28 e 1 67238.4422 .0053450 68653.1991 1414.7569 4.727857 24585441 0.000000 : pP21(28) : 激发态 a3P振动带=13 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 5 X态 28 e 1 67274.9342 .0012441 68689.6911 1414.7569 1.100423 5731660 0.000000 : oP1(28) : 激发态 d态振动量子数=7 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 6 X态 28 e 1 67278.4016 .0041859 68693.1584 1414.7569 3.702598 19288317 0.000000 : qP31(28) : 激发态 e态振动量子数=4 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 7 X态 28 e 1 67321.8701 .0044321 68736.6269 1414.7569 3.920375 20462416 0.000000 : qP31(28) : 激发态 a3P振动带=13 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 8 X态 28 e 1 67346.0418 .0029358 68760.7987 1414.7569 2.596792 13568569 0.000000 : pP21(28) : 激发态 振动量子数=7 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e

13C18O 激发态 27 e 9 X态 28 e 1 67357.3324 .0105140 68772.0893 1414.7569 9.300048 48618390 0.000000：pP21(28)：激发态 a'态振动量子数=12 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 10 X态 28 e 1 67416.6052 .0056266 68831.3620 1414.7569 4.976904 26086792 0.000000：qP31(28)：激发态 d态振动量子数=7 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 2 X态 28 e 1 67232.2985 .0137691 68647.0553 1414.7569 12.17929 61094821 0.000000：pQ1(28)：激发态 a3P振动带=13 28 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 3 X态 28 e 1 67272.0381 .0063375 68686.7950 1414.7569 5.605796 28170181 0.000000：qQ21(28)：激发态 振动量子数=4 28 28 F2f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 4 X态 28 e 1 67292.9542 .0339443 68707.7111 1414.7569 30.02502 1.5102e8 0.000000：qQ(28)：激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 5 X态 28 e 1 67314.0268 .0017307 68728.7837 1414.7569 1.530850 7707224 0.000000：qQ21(28)：激发态 a3P振动带=13 28 28 F2f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 6 X态 28 e 1 67335.2557 .0002441 68750.0126 1414.7569 .2159083 1088041 0.000000：pQ1(28)：激发态 振动量子数=7 28 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 7 X态 28 e 1 67358.3126 .0121571 68773.0695 1414.7569 10.75342 54246139 0.000000：pQ1(28)：激发态 a'态振动量子数=12 28 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 8 X态 28 e 1 67396.5985 .0118113 68811.3554 1414.7569 10.44758 52793215 0.000000：rQ31(28)：激发态 a3P振动带=13 28 29 F3f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 9 X态 28 e 1 67406.2137 .0053366 68820.9706 1414.7569 4.720385 23863040 0.000000：qQ21(28)：激发态 振动量子数=7 28 28 F2f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 10 X态 28 e 1 67475.9248 .0100583 68890.6816 1414.7569 8.896982 45116751 0.000000：rQ31(28)：激发态 a'态振动量子数=12 28 29 F3f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 11 X态 28 e 1 67478.4966 .0120115 68893.2535 1414.7569 10.62459 53883647 0.000000：rQ31(28)：激发态 振动量子数=7 28 29 F3f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 1 X态 28 e 1 67269.3875 .0081558 68684.1444 1414.7569 7.214132 35019338 0.000000：qR1(28)：激发态 振动量子数=4 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 2 X态 28 e 1 67310.9277 .0017155 68725.6846 1414.7569 1.517459 7379811 0.000000：qR1(28)：激发态 a3P振动带=13 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 3 X态 28 e 1 67370.6013 .0056583 68785.3582 1414.7569 5.004961 24405256 0.000000：rR(28)：激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 4 X态 28 e态 1 67383.2023 .0090234 68797.9592 1414.7569 7.981520 38941434 0.000000 : rR21(28) : 激发态 a3P振动带=13 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 5 X态 28 e态 1 67395.8910 .0008832 68810.6478 1414.7569 .7812264 3813718 0.000000 : qR1(28) : 激发态 d态振动量子数=7 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 6 X态 28 e态 1 67408.5256 .0042113 68823.2825 1414.7569 3.725054 18194850 0.000000 : sR31(28) : 激发态 e态振动量子数=4 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 7 X态 28 e态 1 67467.9757 .0057310 68882.7326 1414.7569 5.069270 24826179 0.000000 : rR21(28) : 激发态 振动量子数=7 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 8 X态 28 e态 1 67473.9579 .0121910 68888.7148 1414.7569 10.78335 52824312 0.000000 : sR31(28) : 激发态 a3P振动带=13 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 9 X态 28 e态 1 67475.0575 .0031676 68889.8144 1414.7569 2.801895 13726286 0.000000 : rR21(28) : 激发态 a'态振动量子数=12 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 10 X态 28 e态 1 67542.5451 .0057896 68957.3019 1414.7569 5.121110 25163313 0.000000：sR31(28)：激发态 dv=7 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 e态 1 X态 29 e态 1 67105.5282 .0049761 68621.0847 1515.5565 7.137644 35602326 0.000000：oP1(29)：激发态 ev=4 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 2 X态 29 e态 1 67139.1942 .0005524 68654.7508 1515.5565 .7923183 3958008 0.000000：oP1(29)：激发态 a3P振动带=13 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e 3 X态 29 e 1 67188.8228 .0045960 68704.3794 1515.5565 6.592459 33005562 0.000000 : pP(29) : 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e 4 X态 29 e 1 67209.3049 .0040312 68724.8615 1515.5565 5.782280 28975832 0.000000 : pP21(29) : 激发态 a3P振动带=13 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e 5 X态 29 e 1 67233.4674 .0001534 68749.0239 1515.5565 .2199829 1103555 0.000000 : oP1(29) : 激发态 振动量子数=7 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 6 X态 29 e态 1 67241.0071 .0029732 68756.5637 1515.5565 4.264663 21401093 0.000000：qP31(29)：激发态 振动量子数=4 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 7 X态 29 e态 1 67295.7315 .0035870 68811.2880 1515.5565 5.145193 25882892 0.000000：qP31(29)：激发态 a3P振动带=13 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 8 X态 29 e态 1 67305.4082 .0014850 68820.9647 1515.5565 2.130043 10719804 0.000000：pP21(29)：激发态 振动量子数=7 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 9 X态 29 e态 1 67314.2056 .0067027 68829.7621 1515.5565 9.614313 48404643 0.000000 : pP21(29) : 激发态 a'态振动量子数=12 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 10 X态 29 e态 1 67377.6946 .0034773 68893.2512 1515.5565 4.987755 25182691 0.000000 : qP31(29) : 激发态 振动量子数=7 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 2 X态 29 e态 1 67204.1511 .0097824 68719.7076 1515.5565 14.03167 67915527 0.000000 : pQ1(29) : 激发态 a3P振动带=13 29 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 3 X态 29 e 1 67236.3402 .0069684 68751.8967 1515.5565 9.995313 48448463 0.000000：qQ21(29)：激发态 ev=4 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 4 X态 29 e 1 67272.1964 .0165891 68787.7530 1515.5565 23.79518 1.1552e8 0.000000：qQ(29)：激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 5 X态 29 e 1 67285.5008 .0018033 68801.0574 1515.5565 2.586700 12565562 0.000000：qQ21(29)：激发态 a3P振动带=13 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 7 X态 29 e态 1 67315.2112 .0081454 68830.7678 1515.5565 11.68362 56831411 0.000000 : pQ1(29) : 激发态 a'态振动量子数=12 29 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 8 X态 29 e态 1 67367.1819 .0072118 68882.7385 1515.5565 10.34451 50434373 0.000000 : qQ21(29) : 激发态 d态振动量子数=7 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 9 X态 29 e态 1 67373.6495 .0042476 68889.2060 1515.5565 6.092629 29712990 0.000000 : rQ31(29) : 激发态 a3P振动带=13 29 30 F3f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 10 X态 29 e 1 67436.8296 .0066075 68952.3862 1515.5565 9.477706 46351744 0.000000：rQ31(29)：激发态 a'态振动量子数=12 29 30 F3f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 11 X态 29 e 1 67441.7475 .0071986 68957.3040 1515.5565 10.32550 50509038 0.000000：rQ31(29)：激发态 d态振动量子数=7 29 30 F3f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 1 X态 29 e 1 67233.0110 .0049203 68748.5675 1515.5565 7.057593 33082465 0.000000：qR1(29)：激发态 振动量子数=4 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 2 X态 29 e 1 67284.3287 .0015148 68799.8852 1515.5565 2.172751 10208109 0.000000 : qR1(29) : 激发态 a3P振动带=13 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 4 X态 29 e 1 67355.4123 .0044065 68870.9688 1515.5565 6.320610 29789972 0.000000 : rR(29) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 5 X态 29 e 1 67362.9643 .0061076 68878.5208 1515.5565 8.760708 41304406 0.000000 : rR21(29) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 6 X态 29 e 1 67378.2078 .0016436 68893.7644 1515.5565 2.357583 11122924 0.000000：sR31(29)：激发态 振动量子数=4 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 7 X态 29 e 1 67431.6803 .0025783 68947.2368 1515.5565 3.698344 17490124 0.000000：rR21(29)：激发态 振动量子数=7 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 8 X态 29 e 1 67435.6091 .0084726 68951.1656 1515.5565 12.15300 57483713 0.000000：rR21(29)：激发态 a'态振动量子数=12 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 9 X态 29 e 1 67453.2469 .0028939 68968.8034 1515.5565 4.150989 19649602 0.000000：sR31(29)：激发态 a3P振动带=13 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 10 X态 29 e 1 67507.9821 .0034753 69023.5387 1515.5565 4.984930 23654734 0.000000：sR31(29)：激发态 振动量子数=7 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 e 1 X态 30 e 1 67064.3480 .0029490 68684.1444 1619.7964 6.973661 33543423 0.000000：oP1(30)：激发态 振动量子数=4 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 2 X态 30 e 1 67105.8882 .0006203 68725.6846 1619.7964 1.466877 7068823 0.000000：oP1(30)：激发态 a3P振动带=13 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 3 X态 30 e 1 67165.5618 .0020460 68785.3582 1619.7964 4.838129 23377001 0.000000：pP(30)：激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 4 X态 30 e 1 67178.1628 .0032627 68797.9592 1619.7964 7.715469 37300797 0.000000：pP21(30)：激发态 a3P振动带=13 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 5 X态 30 e 1 67190.8515 .0003194 68810.6478 1619.7964 .7551855 3653049 0.000000 : oP1(30) : 激发态 d态振动量子数=7 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 6 X态 30 e 1 67203.4861 .0015227 68823.2825 1619.7964 3.600885 17428344 0.000000 : qP31(30) : 激发态 e态振动量子数=4 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 7 X态 30 e 1 67262.9362 .0020722 68882.7326 1619.7964 4.900294 23780504 0.000000 : pP21(30) : 激发态 d态振动量子数=7 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 8 X态 30 e 1 67268.9184 .0044081 68888.7148 1619.7964 10.42391 50599401 0.000000：qP31(30)：激发态 a3P振动带=13 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 9 X态 30 e 1 67270.0180 .0011454 68889.8144 1619.7964 2.708498 13148149 0.000000：pP21(30)：激发态 a'态振动量子数=12 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 10 X态 30 e 1 67337.5055 .0020934 68957.3019 1619.7964 4.950407 24103681 0.000000：qP31(30)：激发态 振动量子数=7 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 2 X态 30 e 1 67174.8790 .0071843 68794.6754 1619.7964 16.98885 79428843 0.000000 : pQ1(30) : 激发态 a3P振动带=13 30 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 3 X态 30 e 1 67198.5348 .0043917 68818.3311 1619.7964 10.38509 48605242 0.000000 : qQ21(30) : 激发态 振动量子数=4 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 5 X态 30 e 1 67251.9040 .0090526 68871.7004 1619.7964 21.40705 1.0043e8 0.000000 : qQ(30) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 6 X态 30 e 1 67265.6476 .0002502 68885.4440 1619.7964 .5917392 2777819 0.000000 : qQ21(30) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 7 X态 30 e 1 67270.8246 .0060716 68890.6210 1619.7964 14.35766 67415156 0.000000 : pQ1(30) : 激发态 a'态振动量子数=12 30 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 8 X态 30 e 1 67327.4496 .0036325 68947.2460 1619.7964 8.589966 40435382 0.000000 : qQ21(30) : 激发态 d态振动量子数=7 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 9 X态 30 e 1 67349.1655 .0039681 68968.9619 1619.7964 9.383508 44213562 0.000000：rQ31(30)：激发态 a3P振动带=13 30 31 F3f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 10 X态 30 e 1 67396.3126 .0041966 69016.1090 1619.7964 9.923710 46857172 0.000000：rQ31(30)：激发态 a'态振动量子数=12 30 31 F3f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 11 X态 30 e 1 67403.7451 .0042206 69023.5415 1619.7964 9.980616 47141459 0.000000：rQ31(30)：激发态 振动量子数=7 30 31 F3f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 1 X 30 e 1 67194.8908 .0029461 68814.6872 1619.7964 6.966627 31565610 0.000000 : qR1(30) : 激发态 振动量子数=4 31 30 F1e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 2 X 30 e 1 67257.2166 .0011686 68877.0130 1619.7964 2.763401 12555775 0.000000 : qR1(30) : 激发态 a3P振动带=13 31 30 F1e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 3 X 30 e 1 67314.4096 .0003937 68934.2060 1619.7964 .9310754 4241230 0.000000 : qR1(30) : 激发态 d态振动量子数=7 31 30 F1e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 4 X态 30 e 1 67328.2461 .0005767 68948.0425 1619.7964 1.363700 6215753 0.000000 : sR31(30) : 激发态 振动量子数=4 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 5 X态 30 e 1 67339.3907 .0058303 68959.1871 1619.7964 13.78720 62873315 0.000000 : rR(30) : 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 6 X态 30 e 1 67349.3961 .0004534 68969.1925 1619.7964 1.072281 4892070 0.000000 : rR21(30) : 激发态 a3P振动带=13 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 7 X 30 e 1 67393.8988 .0007260 69013.6952 1619.7964 1.716737 7847808 0.000000 : rR21(30) : 激发态 dv=7 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 8 X 30 e 1 67395.2069 .0062519 69015.0033 1619.7964 14.78402 67586876 0.000000 : rR21(30) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 9 X 30 e 1 67431.2998 .0022388 69051.0962 1619.7964 5.294177 24241861 0.000000 : sR31(30) : 激发态 a3P振动带=13 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e态 10 X态 30 e态 1 67472.2309 .0019681 69092.0273 1619.7964 4.654091 21349758 0.000000 : sR31(30) : 激发态 dv=7 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 e态 1 X态 31 e态 1 67021.0947 .0017233 68748.5675 1727.4728 6.829928 31713509 0.000000 : oP1(31) : 激发态 ev=4 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e态 2 X态 31 e态 1 67072.4124 .0005305 68799.8852 1727.4728 2.102662 9785767 0.000000 : oP1(31) : 激发态 a3P振动带=13 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 4 X态 31 e 1 67143.4960 .0015433 68870.9688 1727.4728 6.116719 28557752 0.000000：pP(31)：激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 5 X态 31 e 1 67151.0480 .0021392 68878.5208 1727.4728 8.478105 39595949 0.000000：pP21(31)：激发态 a3P振动带=13 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 6 X态 31 e 1 67166.2916 .0005757 68893.7644 1727.4728 2.281532 10662874 0.000000：qP31(31)：激发态 振动量子数=4 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e态 7 X态 31 e态 1 67219.7640 .0009031 68947.2368 1727.4728 3.579043 16766849 0.000000：pP21(31)：激发态 振动量子数=7 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e态 8 X态 31 e态 1 67223.6928 .0029675 68951.1656 1727.4728 11.76096 55106600 0.000000：pP21(31)：激发态 a'态振动量子数=12 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e态 9 X态 31 e态 1 67241.3306 .0010136 68968.8034 1727.4728 4.017086 18837083 0.000000：qP31(31)：激发态 a3P振动带=13 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e态 10 X态 31 e态 1 67296.0659 .0012172 69023.5387 1727.4728 4.824126 22676774 0.000000 : qP31(31) : 激发态 振动量子数=7 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 2 X态 31 e态 1 67144.0705 .0057010 68871.5433 1727.4728 22.59480 1.0214e8 0.000000 : pQ1(31) : 激发态 a3P振动带=13 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 3 X态 31 e态 1 67159.7064 .0017960 68887.1792 1727.4728 7.118003 32200855 0.000000 : qQ21(31) : 激发态 振动量子数=4 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 4 X态 31 e 1 67207.0598 .0001809 68934.5326 1727.4728 .7170919 3250891 0.000000：pQ1(31)：激发态 振动量子数=7 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 5 X态 31 e 1 67223.7141 .0005821 68951.1869 1727.4728 2.306898 10465954 0.000000：pQ1(31)：激发态 a'态振动量子数=12 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e

13C18O 激发态 31 f 6 X态 31 e 1 67231.8857 .0080157 68959.3585 1727.4728 31.76824 1.4418e8 0.000000: qQ(31): 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 7 X态 31 e 1 67236.9592 .0001964 68964.4320 1727.4728 .7783627 3533370 0.000000: qQ21(31): 激发态 a3P振动带=13 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 8 X态 31 e 1 67286.2835 .0022258 69013.7563 1727.4728 8.821300 40132396 0.000000: qQ21(31): 激发态 振动量子数=7 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 9 X态 31 e 1 67323.8267 .0028489 69051.2996 1727.4728 11.29114 51454950 0.000000 : rQ31(31) : 激发态 a3P振动带=13 31 32 F3f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 10 X态 31 e 1 67354.3746 .0026041 69081.8474 1727.4728 10.32084 47097246 0.000000 : rQ31(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 32 F3f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 11 X态 31 e 1 67364.5598 .0023423 69092.0326 1727.4728 9.283081 42380831 0.000000 : rQ31(31) : 激发态 d态振动量子数=7 31 32 F3f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 1 X 31 e 1 67155.2079 .0017497 68882.6807 1727.4728 6.934649 30400003 0.000000 : qR1(31) : 激发态 振动量子数=4 32 31 F1e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 2 X 31 e 1 67229.3865 .0008373 68956.8594 1727.4728 3.318328 14595092 0.000000 : qR1(31) : 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 3 X 31 e 1 67274.1489 .0001691 69001.6217 1727.4728 .6702509 2953875 0.000000 : qR1(31) : 激发态 d态=7 32 31 F1e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 4 X态 31 e 1 67295.1392 .0011516 69022.6120 1727.4728 4.564262 20134076 0.000000 : sR31(31) : 激发态 ev=4 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 5 X态 31 e 1 67319.5422 .0019666 69047.0151 1727.4728 7.794225 34419651 0.000000 : rR(31) : 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 6 X态 31 e 1 67322.6876 .0007629 69050.1604 1727.4728 3.023729 13354795 0.000000 : rR21(31) : 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 7 X 31 e 1 67353.2371 .0022134 69080.7099 1727.4728 8.772164 38796473 0.000000 : rR21(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 8 X 31 e 1 67355.1270 .0023667 69082.5998 1727.4728 9.379756 41487148 0.000000 : rR21(31) : 激发态 振动量子数=7 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 9 X 31 e 1 67408.1522 .0016955 69135.6250 1727.4728 6.719713 29791893 0.000000 : sR31(31) : 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e态 10 X态 31 e态 1 67435.5109 .0009646 69162.9837 1727.4728 3.822884 16969427 0.000000 : sR31(31) : 激发态 dv=7 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 e态 1 X态 32 e态 1 66976.1051 .0009994 68814.6872 1838.5820 6.748920 30281460 0.000000 : oP1(32) : 激发态 ev=4 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 2 X态 32 e态 1 67038.4309 .0003964 68877.0130 1838.5820 2.677045 12045091 0.000000 : oP1(32) : 激发态 a3P振动带=13 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 3 X态 32 e 1 67095.6239 .0001336 68934.2060 1838.5820 .9019793 4068760 0.000000: oP1(32): 激发态 振动量子数=7 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 4 X态 32 e 1 67109.4604 .0001956 68948.0425 1838.5820 1.321085 5963000 0.000000: qP31(32): 激发态 振动量子数=4 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 5 X态 32 e 1 67120.6051 .0019779 68959.1871 1838.5820 13.35635 60316775 0.000000: pP(32): 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 6 X态 32 e 1 67130.6104 .0001538 68969.1925 1838.5820 1.038772 4693157 0.000000: pP21(32): 激发态 a3P振动带=13 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 7 X态 32 e 1 67175.1132 .0002463 69013.6952 1838.5820 1.663089 7528762 0.000000: pP21(32): 激发态 d态振动量子数=7 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 8 X态 32 e 1 67176.4213 .0021209 69015.0033 1838.5820 14.32202 64839200 0.000000: pP21(32): 激发态 a'态振动量子数=12 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 9 X态 32 e态 1 67212.5142 .0007595 69051.0962 1838.5820 5.128734 23256455 0.000000 : qP31(32) : 激发态 a3P振动带=13 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 10 X态 32 e态 1 67253.4452 .0006677 69092.0273 1838.5820 4.508651 20482034 0.000000 : qP31(32) : 激发态 d态振动量子数=7 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f态 2 X态 32 e态 1 67110.0910 .0046108 68948.6730 1838.5820 31.13514 1.3621e8 0.000000 : pQ1(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 4 X态 32 e 1 67163.1357 .0001013 69001.7177 1838.5820 .6843133 3000944 0.000000: pQ1(32): 激发态 振动量子数=7 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 5 X态 32 e 1 67176.9535 .0012352 69015.5355 1838.5820 8.340675 36599251 0.000000: pQ1(32): 激发态 a'态振动量子数=12 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 6 X态 32 e 1 67208.0269 .0008439 69046.6090 1838.5820 5.698567 25040279 0.000000: qQ21(32): 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 7 X态 32 e 1 67209.8059 .0029254 69048.3880 1838.5820 19.75433 86810098 0.000000: qQ(32): 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 8 X态 32 e 1 67243.8956 .0014449 69082.4776 1838.5820 9.756851 42941613 0.000000: qQ21(32): 激发态 振动量子数=7 32 32 F2f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 9 X态 32 e 1 67297.2714 .0021029 69135.8535 1838.5820 14.20013 62646186 0.000000: rQ31(32): 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 10 X态 32 e 1 67311.0177 .0015676 69149.5997 1838.5820 10.58526 46727235 0.000000 : rQ31(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 11 X态 32 e 1 67324.4157 .0011239 69162.9977 1838.5820 7.589656 33523547 0.000000 : rQ31(32) : 激发态 振动量子数=7 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 1 X态 32 e 1 67114.0605 .0010288 68952.6425 1838.5820 6.947394 29492468 0.000000 : qR1(32) : 激发态 振动量子数=4 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 2 X态 32 e 1 67200.6606 .0005762 69039.2426 1838.5820 3.890917 16581403 0.000000: qR1(32): 激发态 a3P振动带=13 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 4 X态 32 e 1 67259.1811 .0008552 69097.7631 1838.5820 5.774647 24673390 0.000000: sR31(32): 激发态 振动量子数=4 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 5 X态 32 e 1 67294.0244 .0002352 69132.6065 1838.5820 1.588349 6797106 0.000000: rR21(32): 激发态 a3P振动带=13 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 6 X态 32 e 1 67300.6823 .0004217 69139.2644 1838.5820 2.847381 12188568 0.000000: rR(32): 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 7 X态 32 e 1 67310.5903 .0017688 69149.1723 1838.5820 11.94450 51152498 0.000000: rR21(32): 激发态 a'态振动量子数=12 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 8 X态 32 e 1 67315.5901 .0017928 69154.1722 1838.5820 12.10640 51857392 0.000000: rR21(32): 激发态 振动量子数=7 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 9 X态 32 e 1 67382.7737 .0014109 69221.3558 1838.5820 9.527190 40931732 0.000000 : sR31(32) : 激发态 a3P振动带=13 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 10 X态 32 e 1 67398.8332 .0002355 69237.4152 1838.5820 1.590360 6837563 0.000000 : sR31(32) : 激发态 d态振动量子数=7 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 e 1 X态 33 e 1 66929.5605 .0005749 68882.6807 1953.1202 6.724508 29182635 0.000000 : oP1(33) : 激发态 e态振动量子数=4 32 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 2 X态 33 e 1 67003.7391 .0002751 68956.8594 1953.1202 3.217773 14010787 0.000000: oP1(33): 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 4 X态 33 e 1 67069.4918 .0003784 69022.6120 1953.1202 4.425951 19328213 0.000000: qP31(33): 激发态 振动量子数=4 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 5 X态 33 e 1 67093.8948 .0006462 69047.0151 1953.1202 7.558036 33042131 0.000000: pP(33): 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 6 X态 33 e 1 67097.0402 .0002507 69050.1604 1953.1202 2.932100 12820324 0.000000: pP21(33): 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 7 X态 33 e 1 67127.5897 .0007273 69080.7099 1953.1202 8.506341 37243975 0.000000: pP21(33): 激发态 a'态振动量子数=12 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 8 X态 33 e 1 67129.4796 .0007777 69082.5998 1953.1202 9.095521 39826990 0.000000: pP21(33): 激发态 d态振动量子数=7 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e态 9 X态 33 e态 1 67182.5048 .0005571 69135.6250 1953.1202 6.516086 28599961 0.000000: qP31(33): 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e态 10 X态 33 e态 1 67209.8634 .0003169 69162.9837 1953.1202 3.707039 16290570 0.000000: qP31(33): 激发态 d态振动量子数=7 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 2 X态 33 e态 1 67070.6644 .0027050 69023.7846 1953.1202 31.63795 1.3405e8 0.000000: qQ21(33): 激发态 e态振动量子数=4 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 3 X 33 e 1 67086.5939 .0001810 69039.7142 1953.1202 2.117095 8976276 0.000000 : pQ1(33) : 激发态 a3P振动带=13 33 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 5 X 33 e 1 67128.2400 .0008112 69081.3603 1953.1202 9.488144 40303772 0.000000 : pQ1(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 6 X 33 e 1 67178.4412 .0002734 69131.5615 1953.1202 3.197939 13614715 0.000000 : qQ21(33) : 激发态 a3P振动带=13 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 7 X态 33 e 1 67187.0463 .0014392 69140.1665 1953.1202 16.83310 71691800 0.000000: qQ(33): 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 8 X态 33 e 1 67200.7746 .0011919 69153.8948 1953.1202 13.94045 59408466 0.000000: qQ21(33): 激发态 振动量子数=7 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 9 X态 33 e 1 67266.2238 .0011971 69219.3441 1953.1202 14.00169 59843953 0.000000: rQ31(33): 激发态 a'态振动量子数=12 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 10 X态 33 e 1 67268.4657 .0014455 69221.5859 1953.1202 16.90726 72269726 0.000000 : rQ31(33) : 激发态 a3P振动带=13 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 11 X态 33 e 1 67284.3548 .0002624 69237.4751 1953.1202 3.069627 13130355 0.000000 : rQ31(33) : 激发态 振动量子数=7 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 1 X态 33 e 1 67071.5040 .0005979 69024.6243 1953.1202 6.992856 28770212 0.000000 : qR1(33) : 激发态 振动量子数=4 34 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 2 X态 33 e 1 67170.6533 .0003905 69123.7736 1953.1202 4.567164 18873815 0.000000 : qR1(33) : 激发态 a3P振动带=13 34 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 4 X态 33 e 1 67221.3017 .0005456 69174.4220 1953.1202 6.381762 26432346 0.000000 : sR31(33) : 激发态 振动量子数=4 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 5 X态 33 e 1 67263.8143 .0008132 69216.9346 1953.1202 9.511418 39469723 0.000000 : rR21(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 34 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 8 X态 33 e 1 67285.0860 .0016211 69238.2062 1953.1202 18.96099 78757459 0.000000: rR(33): 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 9 X态 33 e 1 67350.8680 .0009879 69303.9882 1953.1202 11.55482 48135693 0.000000: sR31(33): 激发态 振动量子数=7 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 e 1 X态 34 e 1 66881.5591 .0003274 68952.6425 2071.0834 6.743059 28328577 0.000000: oP1(34): 激发态 振动量子数=4 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 2 X态 34 e 1 66968.1592 .0001834 69039.2426 2071.0834 3.776479 15927248 0.000000 : oP1(34) : 激发态 a3P振动带=13 33 32 F1e - X X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 4 X态 34 e 1 67026.6797 .0002722 69097.7631 2071.0834 5.604805 23700212 0.000000 : qP31(34) : 激发态 振动量子数=4 33 34 F3e - X X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 6 X态 34 e 1 67068.1810 .0001342 69139.2644 2071.0834 2.763635 11707896 0.000000 : pP(34) : 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e - X X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 7 X态 34 e 1 67078.0889 .0005629 69149.1723 2071.0834 11.59319 49135312 0.000000 : pP21(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 8 X态 34 e 1 67083.0887 .0005706 69154.1722 2071.0834 11.75033 49812447 0.000000 : pP21(34) : 激发态 振动量子数=7 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 9 X态 34 e 1 67150.2723 .0004490 69221.3558 2071.0834 9.246979 39318037 0.000000 : qP31(34) : 激发态 a3P振动带=13 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 2 X态 34 e 1 67027.6741 .0014376 69098.7575 2071.0834 29.60679 1.2157e8 0.000000 : qQ21(34) : 激发态 振动量子数=4 34 34 F2f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 3 X态 34 e 1 67052.3972 .0003207 69123.4807 2071.0834 6.604021 27147244 0.000000 : pQ1(34) : 激发态 a3P振动带=13 34 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 5 X态 34 e 1 67078.0983 .0004730 69149.1817 2071.0834 9.741191 40089313 0.000000 : pQ1(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 6 X态 34 e 1 67146.9245 .0002427 69218.0079 2071.0834 4.999009 20636528 0.000000: qQ21(34): 激发态 a3P振动带=13 34 34 F2f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 8 X态 34 e 1 67166.3243 .0013572 69237.4077 2071.0834 27.95002 1.1548e8 0.000000: qQ(34): 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 9 X态 34 e 1 67220.0532 .0006143 69291.1366 2071.0834 12.65186 52399261 0.000000: rQ31(34): 激发态 a'态振动量子数=12 34 35 F3f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 10 X态 34 e 1 67232.9949 .0011091 69304.0784 2071.0834 22.84168 94656354 0.000000 : rQ31(34) : 激发态 振动量子数=7 34 35 F3f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 1 X态 34 e 1 67027.5717 .0003429 69098.6551 2071.0834 7.062311 28182036 0.000000 : qR1(34) : 激发态 振动量子数=4 35 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 2 X态 34 e 1 67137.0763 .0002242 69208.1597 2071.0834 4.617071 18514794 0.000000 : qR1(34) : 激发态 a3P振动带=13 35 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 4 X态 34 e 1 67181.8286 .0003318 69252.9120 2071.0834 6.832094 27452024 0.000000: sR31(34): 激发态 振动量子数=4 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 5 X态 34 e 1 67218.2972 .0005117 69289.3806 2071.0834 10.53721 42408547 0.000000: rR21(34): 激发态 a'态振动量子数=12 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 6 X态 34 e 1 67227.4253 .0001342 69298.5087 2071.0834 2.762793 11123791 0.000000: rR21(34): 激发态 d态振动量子数=7 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 8 X态 34 e 1 67264.0243 .0007247 69335.1077 2071.0834 14.92419 60187254 0.000000: rR(34): 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 9 X态 34 e 1 67311.8189 .0005202 69382.9024 2071.0834 10.71226 43293255 0.000000: sR31(34): 激发态 振动量子数=7 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 e 1 X态 35 e 1 66832.1568 .0001843 69024.6243 2192.4675 6.793060 27650070 0.000000: oP1(35): 激发态 振动量子数=4 34 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e 2 X态 35 e 1 66931.3061 .0001204 69123.7736 2192.4675 4.436674 18139268 0.000000: oP1(35): 激发态 a3P振动带=13 34 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e 4 X态 35 e 1 66981.9545 .0001682 69174.4220 2192.4675 6.199426 25403835 0.000000: qP31(35): 激发态 振动量子数=4 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e

13C 激发态 34 e 5 X态 35 e 1 67024.4671 .0002507 69216.9346
13C 激发态 34 e 8 X态 35 e 1 67045.7387 .0004997 69238.2062
13C 激发态 34 e 9 X态 35 e 1 67111.5208 .0003045 69303.9882
13C18O 激发态 35 f 2 X态 35 e 1 66982.7329 .0007780 69175.2003
13C18O 激发态 35 f 3 X态 35 e 1 67015.3572 .0002598 69207.8247
13C18O 激发态 35 f 4 X态 35 e态 1 67025.2788 .0001904 69217.7463
13C18O 激发态 35 f 6 X态 35 e态 1 67105.9123 .0001977 69298.3798
13C18O 激发态 35 f 8 X态 35 e态 1 67142.1297 .0006275 69334.5972
13C18O 激发态 35 f 9 X态 35 e 1 67172.4976 .0003787 69364.9651
13C18O 激发态 35 f 10 X态 35 e 1 67190.4674 .0005773 69382.9348
13C18O 激发态 35 f 11 X态 35 e 1 67218.0413 .0001075 69410.5088
13C18O 激发态 36 e 1 X态 35 e 1 66982.2842 .0001940 69174.7517
13C18O 激发态 36 e 4 X态 35 e 1 67140.9034 .0001983 69333.3709
13C18O 激发态 36 e 5 X态 35 e 1 67170.7687 .0003033 69363.2362
13C18O 激发态 36 e 8 X态 35 e 1 67242.9566 .0003385 69435.4241
13C18O 激发态 36 e 9 X态 35 e 1 67270.0769 .0003099 69462.5444
13C18O 激发态 35 e 1 X态 36 e 1 66781.3869 .0001024 69098.6551
13C18O 激发态 35 e 5 X态 36 e 1 66972.1124 .0001528 69289.3806
13C18O 激发态 35 e 8 X态 36 e 1 67017.8395 .0002163 69335.1077
13C18O 激发态 35 e 9 X态 36 e 1 67065.6342 .0001553 69382.9024
13C18O 激发态 36 f 2 X态 36 e 1 66936.2565 .0004238 69253.5247
13C18O 激发态 36 f 3 X态 36 e 1 66969.6516 .0001022 69286.9198
13C18O 激发态 36 f 4 X态 36 e 1 66973.2115 .0001606 69290.4797
13C18O 激发态 36 f 6 X态 36 e 1 67058.7190 .0001125 69375.9872
13C18O 激发态 36 f 8 X态 36 e 1 67117.0591 .0001560 69434.3273
13C18O 激发态 36 f 9 X态 36 e 1 67124.1501 .0003479 69441.4183
13C18O 激发态 36 f 10 X态 36 e 1 67145.2986 .0003406 69462.5668
13C18O 激发态 37 e 1 X态 36 e 1 66935.6550 .0001081 69252.9232
13C18O 激发态 37 e 4 X态 36 e 1 67098.6131 .0001198 69415.8813
13C18O 激发态 37 e 5 X态 36 e 1 67121.7522 .0001729 69439.0204
13C18O 激发态 37 e态 9 X态 36 e态 1 67228.2648 .0002966 69545.5330
13C18O 激发态 37 f态 2 X态 37 e态 1 66888.3683 .0002300 69333.8496
13C18O 激发态 37 f态 3 X态 37 e态 1 66918.6252 .0001299 69364.1064
13C18O 激发态 37 f 10 X态 37 e态 1 67100.1015 .0003257 69545.5828
13C18O 激发态 38 e态 9 X态 37 e态 1 67200.9529 .0001538 69646.4342
13C18O 激发态 38 f 2 X态 38 e 1 66839.1163 .0001237 69416.2185
13C18O 激发态 38 f 10 X态 38 e 1 67069.3632 .0001642 69646.4654
1178条谱线高于O阈值，总强度 = 479.2413324369

2192.4675 9.239663 37934170 0.000000：pP21(35)：激发态 a'态振动量子数=12 34 34 F2e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 18.41924 75693689 0.000000：pP(35)：激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 11.22469 46263635 0.000000 : qP31(35) : 激发态 振动量子数=7 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 28.67870 1.1421e8 0.000000 : qQ21(35) : 激发态 振动量子数=4 35 35 F2f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 9.576183 38192716 0.000000 : pQ1(35) : 激发态 振动量子数=7 35 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 7.018812 28005579 0.000000：pQ1(35)：激发态 a3P振动带=13 35 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 7.287411 29182380 0.000000：qQ21(35)：激发态 d态振动量子数=7 35 35 F2f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 23.12933 92771254 0.000000：qQ(35)：激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 13.95820 56062049 0.000000：rQ31(35)：激发态 a'态振动量子数=12 35 36 F3f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 21.28081 85541381 0.000000：rQ31(35)：激发态 振动量子数=7 35 36 F3f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 3.962613 15947929 0.000000：rQ31(35)：激发态 a3P振动带=13 35 36 F3f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 7.149623 27692589 0.000000：qR1(35)：激发态 振动量子数=4 36 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 7.309154 28512103 0.000000 : sR31(35) : 激发态 ev=4 36 37 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 11.17831 43663425 0.000000 : rR21(35) : 激发态 a'态振动量子数=12 36 36 F2e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 12.47861 48899799 0.000000 : rR(35) : 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2192.4675 11.42270 44816227 0.000000 : sR31(35) : 激发态 振动量子数=7 36 37 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
2317.2682 6.866135 27098407 0.000000 : oP1(36) : 激发态 振动量子数=4 35 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 10.24451 40779173 0.000000：pP21(36)：激发态 a'态振动量子数=12 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 14.50963 57875240 0.000000：pP(36)：激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 10.41470 41630527 0.000000：qP31(36)：激发态 振动量子数=7 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 28.42543 1.0987e8 0.000000：qQ21(36)：激发态 振动量子数=4 36 36 F2f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 6.853421 26530296 0.000000：pQ1(36)：激发态 振动量子数=7 36 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 10.76856 41692845 0.000000 : pQ1(36) : 激发态 a'态振动量子数=12 36 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 7.542085 29312832 0.000000 : qQ21(36) : 激发态 振动量子数=7 36 36 F2f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 10.46567 40781780 0.000000 : qQ(36) : 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 23.33222 90947969 0.000000：rQ31(36)：激发态 a'态振动量子数=12 36 37 F3f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 22.84518 89133714 0.000000：rQ31(36)：激发态 振动量子数=7 36 37 F3f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 7.250469 27277264 0.000000：qR1(36)：激发态 振动量子数=4 37 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 8.035617 30452434 0.000000：sR31(36)：激发态 振动量子数=4 37 38 F3e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 11.59530 43987973 0.000000：rR21(36)：激发态 a'态振动量子数=12 37 37 F2e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2317.2682 19.89328 75827078 0.000000：sR31(36)：激发态 振动量子数=7 37 38 F3e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
2445.4813 28.52933 1.0710e8 0.000000：qQ21(37)：激发态 振动量子数=4 37 37 F2f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
2445.4813 16.11062 60564137 0.000000 : pQ1(37) : 激发态 a'态振动量子数=12 37 36 F1f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
2445.4813 40.40129 1.5312e8 0.000000 : rQ31(37) : 激发态 振动量子数=7 37 38 F3f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
2445.4813 19.07568 70735758 0.000000：rR(37)：激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
2577.1022 28.84764 1.0525e8 0.000000：qQ21(38)：激发态 振动量子数=4 38 38 F2f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e
2577.1022 38.29435 1.4117e8 0.000000 : qQ(38) : 激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e

PGOPHER 11.0.142 2021年4月1日 8:30 64位 Unicode（Delphi 33/33）
pgopher 44b8c50a90149a6ce53e669f4a0e44afc86f1abd
lutils 65f951dfa553c7f9bc501632d3360a85cd1a0165
utils ec0cac7863199e65355ae4c6ab78dbe3037fae3b
lforms d4dfa0031586b0cf5ffd76ff4d8f7aee2a9f8932
wutils 9bb7abdf4436dd4d7dfed61ce7fb7c6bc914386c
GraphicEx bfb0df9494191c3a10d6089c21fe439fcd763090
混合物：13C18O A态（振动量子数=2）能级的去微扰.pgo
单位 cm^{-1}
打印级别 谱线表
Precisio n 4
基组阶数 boDefault
量子数格式 总角动量量子数
拟合循环次数 1
拟合详情 否
自动重新绘图 是
允许复数 是
无线列表 否
显示估计不确定度 否
显示导数 否
奇异值分解限制 5
显示子基组 False
AllowZeroI False
缩放参数 True
固定跃迁相位 False
旧超精细顺序 False
旧颜色顺序 False
单残差图 否
上态颜色 否
奇异值分解阈值 1E-6 舍弃低于最大特征值此比例的奇异值分解特征值；<0 使用 QR 分解。
缩放变化 1 将拟合产生的缩放变化按此数值缩放——通常为 1
小量阈值 2E-18 小于此值的矩阵元将被舍弃
物种：一氧化碳
J最大值 63
浓度 1 物种的相对浓度
线性分子：13C18O
J对称性调整 是
分块矩阵 是
绝对E 否
对称 否
对称权重 1
非对称权重 1
R平方H False
显示 J True
显示 Ω False
显示 N True
显示 F 数 True
显示 ef True
丰度 1 该同位素的丰度；默认值为 1
假定原点 1E99 用于玻尔兹曼计算的能量原点；1e99 表示自动估算。当前为 0
线性流形：X态
初始 是
本征值搜索 是

极限搜索 True 自动 Q 收敛 True 使用布居参数 False 覆盖能量 True 线性：X态 X态振动量子数=0状态：活跃 Λ Σ + Ω 阶数：自动 => 常规 B 1.746408199 转动常数。D 5.0488146E-6 四次离心畸变。H 4.35471E-12 六次离心畸变。L -2.4821E-17 J^8 离心畸变。M 2.99E-23 J^10 离心畸变。PP -4.5E-28 J^12 离心畸变。（不用 P，以免混淆。）<J,Lambda=0,Omega=0|BJ,Lambda=0,Omega=0> = J*(J+1) 对称化：<J,Lambda=0,Omega=0|BJ,Lambda=0,Omega=0> = J*(J+1)

<J,Lambda=0,Ω=0|DJ,Lambda=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Lambda=0,Ω=0|DJ,Lambda=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Lambda=0,Ω=0|HJ,Lambda=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Lambda=0,Ω=0|HJ,Lambda=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

<J,Lambda=0,Ω=0|LJ,Lambda=0,Ω=0> = J^4*(J*(J*(J*(J+4)+6)+4)+1) 对称化：<J,Lambda=0,Ω=0|LJ,Lambda=0,Ω=0> = J^4*(J*(J*(J*(J+4)+6)+4)+1)

<J,Λ=0,Ω=0|MJ,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^5*(J*(J*(J*(J*(J+5)+10)+10)+5)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|MJ,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^5*(J*(J*(J*(J*(J+5)+10)+10)+5)+1)

<J,Λ=0,Ω=0|pP支J,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^6*(J*(J*(J*(J*(J*(J+6)+15)+20)+15)+6)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|pP支J,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^6*(J*(J*(J*(J*(J*(J+6)+15)+20)+15)+6)+1)

线性微扰：X态 < =0| ^14| =0> X态振动量子数N X态振动量子数 O（转动常数）数值 -2.2E-33 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|N^14|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^7*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1)

< =0| ^14| =0> X态振动量子数 N X态振动量子数 总角动量量子数,Λ,Ω=0|N^14|总角动量量子数,Λ ,Ω=0> = 总角动量量子数^7*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1)的对称化矩阵元

线性能级组：碳 初始 真 本征值搜索 真 极限搜索 假 自动 Q 收敛 真 使用布居参数 假 覆盖能量 真 E 0 e 1 91918.81461769

总角动量量子数=能量 0 e态 1 能级：碳 振动量子数振动量子数=0 0 0 F1e

E 1 e态 1 91922.3501979315 总角动量量子数=能量 1 e态 1 能级：碳 振动量子数振动量子数=0 1 1 F1e
E 2 e态 1 91929.41460931 总角动量量子数=能量 2 e态 1 能级：碳 振动量子数振动量子数=0 2 2 F1e
E 3 e态 1 91940.0087911758 总角动量量子数=E 3 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 3 3 F1e
E 4 e态 1 91954.1391754158 总角动量量子数=E 4 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 4 4 F1e
E 5 e态 1 91971.8047483651 总角动量量子数=E 5 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 5 5 F1e
E 6 e态 1 91992.9963415625 总角动量量子数=能量：总角动量量子数=e态1能级：碳 振动量子数=0 6 6 F1e
E 7 e态 1 92017.7210158785 J=E 7 e态 1 能级：C 振动量子数=0 7 7 F1e
E 8 e态 1 92045.9729147246 总角动量量子数=能级的能量：碳 振动量子数=0 8 8 F1e
E 9 e态 1 92077.7548931101 能量：总角动量量子数 J=E 9 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 9 9 F1e
E 10 e态 1 92113.0587701987 能量：总角动量量子数 J=E 10 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 10 10 F1e
E 11 e态 1 92151.8966952636 能量：总角动量量子数 J=E 11 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 11 11 F1e
E 12 e态 1 92194.2576663392 J=E 12 e 1 能级：C 碳=0 12 12 F1e
E 13 e态 1 92240.1328568783 总角动量量子数=能量E 13 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 13 13 F1e
E 14 e 1 92289.5374084555 总角动量量子数=能级能量 14 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 14 14 F1e
E 15 e态 1 92342.4615531966 总角动量量子数=E 15 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 15 15 F1e
E 16 e态 1 92398.9025159008 总角动量量子数=E 16 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 16 16 F1e
E 17 e态 1 92458.8587353746 总角动量量子数=E 17 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 17 17 F1e
E 18 e态 1 92522.3290731028 总角动量量子数=能量 18 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 18 18 F1e
E 19 e态 1 92589.3126987891 总角动量量子数=能量 19 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 19 19 F1e
E 20 e态 1 92659.8038563447 总角动量量子数=能量 20 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 20 20 F1e
E 21 e态 1 92733.8006230299 能量：总角动量量子数=E 21 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 21 21 F1e
E 22 e态 1 92811.3031429715 能量：总角动量量子数=E 22 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 22 22 F1e
E 23 e态 1 92892.3079897717 能量：总角动量量子数=E 23 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 23 23 F1e
E 24 e态 1 92976.822314948 总角动量量子数=E 24 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 24 24 F1e
E 25 e态 1 93064.8231465903 总角动量量子数=E 25 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 25 25 F1e
E 26 e态 1 93156.3176170672 总角动量量子数=E 26 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 26 26 F1e
E 27 e态 1 93251.2988822767 能量对应总角动量量子数=E 27 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 27 27 F1e
E 28 e态 1 93349.7667497678 能量对应总角动量量子数=E 28 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 28 28 F1e
E 29 e态 1 93451.7189577959 能量对应总角动量量子数=E 29 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 29 29 F1e
E 30 e态 1 93557.148271242 总角动量量子数=E 30 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 30 30 F1e
E 31 e态 1 93666.0549149757 总角动量量子数=E 31 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 31 31 F1e
E 32 e态 1 93778.4343213518 总角动量量子数=E 32 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 32 32 F1e
E 33 e态 1 93894.2815297818 总角动量量子数=E 33 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 33 33 F1e
E 34 e态 1 94013.591760117 能量对应总角动量量子数=E 34 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 34 34 F1e
E 35 e态 1 94136.3569127458 能量对应总角动量量子数=E 35 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 35 35 F1e
E 36 e态 1 94262.5809686937 J=E 36 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 36 36 F1e
E 37 e态 1 94392.253689726 J=E 37 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 37 37 F1e
E 38 e态 1 94525.3757684531 总角动量量子数 J=能量 38 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 38 38 F1e

E 39 e态 1 94661.9366784378 总角动量量子数=能量 39 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 39 39 F1e
E 40 e态 1 94801.9378743053 总角动量量子数=能量 40 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 40 40 F1e
E 41 e态 1 94945.3716418562 总角动量量子数=能量 41 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 41 41 F1e
E 42 e态 1 95092.2322481804 总角动量量子数=能量 42 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 42 42 F1e
E 43 e态 1 95242.507641775 总角动量量子数=能量 43 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 43 43 F1e
E 44 e态 1 95396.2059026634 总角动量量子数=能量 44 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 44 44 F1e
E 45 e态 1 95553.3147425169 J=E 45 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 45 45 F1e
E 46 e态 1 95713.8389547786 J=E 46 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 46 46 F1e
E 47 e态 1 95877.7430647896 J=E 47 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 47 47 F1e
E 48 e态 1 96045.0535799167 总角动量量子数=E 48 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 48 48 F1e
E 49 e态 1 96215.7478896832 总角动量量子数=E 49 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 49 49 F1e
E 50 e态 1 96389.8321659005 总角动量量子数=E 50 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 50 50 F1e
E 51 e态 1 96567.2766128028 J=E 51 e态 1 能级：C 振动量子数=0 51 51 F1e
E 52 e态 1 96748.0881671828 总角动量量子数=能量 52 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 52 52 F1e
e态 53 e态 1 96932.2837485302 总角动量量子数=能量 53 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 53 53 F1e
E 54 e态 1 97119.8371091712 总角动量量子数=能级 E 54 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 54 54 F1e
E 55 e态 1 97310.7208844101 总角动量量子数=能级 E 55 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 55 55 F1e
E 56 e态 1 97504.930642673 总角动量量子数=能级 E 56 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 56 56 F1e
E 57 e态 1 97702.5267856525 总角动量量子数=能量 57 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 57 57 F1e
E 58 e态 1 97903.4396484547 总角动量量子数=能量 58 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 58 58 F1e
E 59 e态 1 98107.6243997471 总角动量量子数=能量 59 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 59 59 F1e
E 60 e态 1 98315.1990419085 能量：总角动量量子数=E 60 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 60 60 F1e
E 61 e态 1 98526.0359657192 能量：总角动量量子数=E 61 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 61 61 F1e
E 62 e态 1 98740.1821395715 能量：总角动量量子数=E 62 e态 1 能级：碳 振动量子数=0 62 62 F1e
E 63 e态 1 98957.6207414145 J=E 63 e 1 能级的能量：C 振动量子数=0 63 63 F1e
E 64 e态 1 99178.3440172057 J=E 64 e 1 能级的能量
E 65 e态 1 99402.3440898222 J=E 65 e 1 能级的能量

线性：碳 振动量子数=0状态：活跃 Λ Σ + Ω 阶数：自动 => 常规原点 91918.79 S 态原点。估计最低能级 = 91918.79

B常数 1.76641191315359 转动常数。
D 5.12833508732762E-6 四次离心畸变。
<总角动量量子数,Λ-0,Ω-0B常数;总角动量量子数,L Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：<J,Lambda=0,Omega=0|B|J,L Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

线性流形：B 初始 True 本征值搜索 True 极限搜索 False 自动 Q 收敛 True 使用布居参数 False 覆盖能量 True E 0 e 1 86917.3573438145

总角动量量子数=E 0 e 1 能级：B Bv=0 0 0 F1e
E 1 e态 1 86920.8990798371 总角动量量子数=对应的能量E 1 e态 1 能级：B Bv=0 1 1 F1e
E 2 e态 1 86927.9802287834 总角动量量子数=对应的能量E 2 e态 1 能级：B Bv=0 2 2 F1e
E 3 e态 1 86938.5975955474 总角动量量子数=对应的能量E 3 e态 1 能级：B Bv=0 3 3 F1e
E 4 e态 1 86952.7535165513 总角动量量子数=的能量，E 4 e 1 能级：B常数 Bv=0 4 4 F1e
E 5 e态 1 86970.4485900942 总角动量量子数=的能量，E 5 e 1 能级：B常数 Bv=0 5 5 F1e
E 6 e态 1 86991.6808705965 总角动量量子数=的能量，E 6 e 1 能级：B常数 Bv=0 6 6 F1e
E 7 e态 1 87016.4501212347 总角动量量子数=能量 E 7 e态 1 能级：B Bv=0 7 7 F1e
E 8 e态 1 87044.7550139408 总角动量量子数=能量 E 8 e态 1 能级：B Bv=0 8 8 F1e
E 9 e态 1 87076.5945102899 总角动量量子数=能量 E 9 e态 1 能级：B Bv=0 9 9 F1e
E 10 e态 1 87111.9673665656 总角动量量子数=能量 E 10 e态 1 能级：B Bv=0 10 10 F1e
E 11 e态 1 87150.8722462898 总角动量量子数=能量 E 11 e态 1 能级：B Bv=0 11 11 F1e
E 12 e态 1 87193.3103335359 总角动量量子数=能量 E 12 e态 1 能级：B Bv=0 12 12 F1e
E 13 e态 1 87239.2738059414 总角动量量子数=能量 E 13 e态 1 能级：B Bv=0 13 13 F1e
E 14 e态 1 87288.7659451284 总角动量量子数=能量 E 14 e态 1 能级：B Bv=0 14 14 F1e
E 15 e态 1 87341.7838423505 总角动量量子数=能量 E 15 e态 1 能级：B Bv=0 15 15 F1e
E 16 e态 1 87398.3239892327 总角动量量子数=E 16 e态 1 能级：B常数 Bv=0 16 16 F1e
E 17 e态 1 87458.3457386672 总角动量量子数=E 17 e态 1 能级：B常数 Bv=0 17 17 F1e
E 18 e态 1 87521.9669176787 总角动量量子数=E 18 e态 1 能级：B常数 Bv=0 18 18 F1e
E 19 e态 1 87589.0729980635 总角动量量子数=能量 E 19 e态 1 能级：B Bv=0 19 19 F1e
E 20 e态 1 87659.6848539994 总角动量量子数=能量 E 20 e态 1 能级：B Bv=0 20 20 F1e
E 21 e态 1 87733.8093501407 总角动量量子数=能量 E 21 e态 1 能级：B Bv=0 21 21 F1e
E 22 e态 1 87811.4434750138 总角动量量子数=E 22 e态 1 能级：B常数 Bv=0 22 22 F1e
E 23 e态 1 87892.5833524621 总角动量量子数=E 23 e态 1 能级：B常数 Bv=0 23 23 F1e
E 24 e态 1 87977.2254359612 总角动量量子数=E 24 e态 1 能级：B常数 Bv=0 24 24 F1e
E 25 e态 1 88065.3655819688 能量对应总角动量量子数=E 25 e 1 能级：B常数 Bv=0 25 25 F1e
E 26 e态 1 88157.0074638094 能量对应总角动量量子数=E 26 e 1 能级：B常数 Bv=0 26 26 F1e
E 27 e态 1 88252.1428727514 能量对应总角动量量子数=E 27 e 1 能级：B常数 Bv=0 27 27 F1e
E 28 e态 1 88350.7622038786 总角动量量子数=E 28 e态 1 能级：B Bv=0 28 28 F1e
E 29 e态 1 88452.8714734024 总角动量量子数=E 29 e态 1 能级：B Bv=0 29 29 F1e
E 30 e态 1 88558.4573652084 总角动量量子数=E 30 e态 1 能级：B Bv=0 30 30 F1e
E 31 e态 1 88667.5170675484 总角动量量子数=对应的能量：E 31 e态 1 能级：B常数 Bv=0 31 31 F1e
E 32 e态 1 88780.0530157549 总角动量量子数=对应的能量：E 32 e态 1 能级：B常数 Bv=0 32 32 F1e
E 33 e态 1 88896.0732697678 总角动量量子数=对应的能量：E 33 e态 1 能级：B常数 Bv=0 33 33 F1e
E 34 e态 1 89015.5479117331 总角动量量子数=对应的能量 E 34 e态 1 能级：B Bv=0 34 34 F1e
E 35 e态 1 89138.5007753021 总角动量量子数=对应的能量 E 35 e态 1 能级：B Bv=0 35 35 F1e
E 36 e态 1 89264.8671434128 总角动量量子数=对应的能量 E 36 e态 1 能级：B Bv=0 36 36 F1e
E 37 e态 1 89394.712613204 总角动量量子数=对应的能量E 37 e态 1能级：B常数 Bv=0 37 37 F1e
E 38 e态 1 89528.0033885644 总角动量量子数=对应的能量E 38 e态 1能级：B常数 Bv=0 38 38 F1e
E 39 e态 1 89664.7427100465 总角动量量子数=对应的能量E 39 e态 1能级：B常数 Bv=0 39 39 F1e
E 40 e态 1 89804.8732821819 总角动量量子数=E 40 e态 1 能级：B常数 Bv=0 40 40 F1e
E 41 e态 1 89948.4826520769 总角动量量子数=E 41 e态 1 能级：B常数 Bv=0 41 41 F1e
E 42 e态 1 90095.4817872327 总角动量量子数=能量 42 e态 1 能级：B常数 Bv=0 42 42 F1e

E 43 e态 1 90245.9288501256 总角动量量子数=能量 43 e态 1 能级：B常数 Bv=0 43 43 F1e
E 44 e态 1 90399.7945833577 能量 对于 总角动量量子数=E 44 e态 1 能级：B常数 Bv=0 44 44 F1e
E 45 e态 1 90557.048472636 能量 对于 总角动量量子数=E 45 e态 1 能级：B常数 Bv=0 45 45 F1e
E 46 e态 1 90717.7471747185 总角动量量子数=E 46 e态 1 能级:B Bv=0 46 46 F1e 的能量
E 47 e态 1 90881.7572647896 总角动量量子数=E 47 e态 1 能级:B Bv=0 47 47 F1e 的能量
E 48 e态 1 91049.1774976252 总角动量量子数=E 48 e态 1 能级:B Bv=0 48 48 F1e 的能量
E 49 e态 1 91220.0533896832 总角动量量子数=的E 49 e态 1 能级：B常数 Bv=0 49 49 F1e
E 50 e态 1 91394.1969159005 总角动量量子数=的E 50 e态 1 能级：B常数 Bv=0 50 50 F1e
E 51 e态 1 91571.8211856604 总角动量量子数=的E 51 e态 1 能级：B常数 Bv=0 51 51 F1e
E 52 e态 1 91752.7615313151 总角动量量子数=E 52 e态 1 能级:B Bv=0 52 52 F1e 的能量
E 53 e态 1 91937.0582069911 总角动量量子数=E 53 e态 1 能级:B Bv=0 53 53 F1e 的能量
E 54 e态 1 92124.7041674308 总角动量量子数=E 54 e态 1 能级:B Bv=0 54 54 F1e 的能量
E 55 e态 1 92315.6922344469 能量：总角动量量子数 J=E 55 e态 1 能级：B常数 Bv=0 55 55 F1e
线性：B常数 Bv=0
状态：活跃
Λ Σ+
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 86917.360320496 态原点。估计最低能级 = 86917.360320496
B常数 1.76976443875216 转动常数。
D 5.53872463797865E-6 四次离心畸变。
矩阵元与碳 振动量子数=0相同
线性流形：激发态
初始：否
本征值搜索：是
极限搜索：是
自动 Q 收敛：是
使用布居参数：否
覆盖能量 True
线性：激发态 A态振动量子数=2
状态：活跃
Λ Π
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 67557.9263807482 浮点数，标准差 = 0.000878566892884828 态原点。估计最低能级 = 67557.9263807482
B 1.41770507032897 浮点数 ，标准差 = 3.51295994438537E-6 转动常数。
q -1.187706E-5 Λ倍增常数。
D 6.24399485577261E-6 浮点数，标准差 = 2.53609150054505E-9 四次离心畸变。
H -1.280902E-11 六次离心畸变。
<J,Λ=-1,Ω=-1|B|J,Λ=-1,Ω=-1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
< = 1, = 1| | =1 =1> = +1 2 总角动量量子数,Λ - Ω - q总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω q 总角动量量子数,Λ - Ω - (总角动量量子数*(总角动量量子数))/2 对称化： < =1 =1| | =1 =1> = +1 2 总角动量量子数,Λ ,Ω q 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|q|总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数))/

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|D态|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D态|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) 对称化：<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D态|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D态|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|H|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1) 对称化：<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1)

线性：激发态振动量子数=3
状态：活跃
颜色：紫红色
Lambda Sigma-
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 67579.2383904013 浮点数，标准差 = 0.0154787716797877 态原点。估计最低能级 = 67579.2383904013
B 1.09918701526773 浮点数 ，标准差 = 0.000226636002436598 转动常数。
D 5.77973239037241E-6 浮点数，标准差 = 4.04347248069572-7 四次离心畸变。
H 2.247197E-12 六次离心畸变。
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) 对称化：<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1) 对称化：<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^3*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+3)+1)

线性：激发态 振动量子数=4状态：活跃 颜色：紫红色 Λ Σ⁻ Ω 阶数：自动 => 常规原点 68544 2939028 = 68544 2939028 。态原点。估计最低能级。B 常数。转动常数。D 5.712347E-6 四次离心畸变。H 2.247197E-12 六次离心畸变。<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
1 0840499034

对称化：
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-I态振动量子数 数值 -0 0504224240425148. 浮点数，标准差 = 0.000477162968858135 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1))

对称化矩阵元: < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-I态 < =1 + =0 振动量子数 J,Lambda，Ω=1|J L-J,Lambda，Ω=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < =2| + | =4> A态振动量子数 J L-I态 0 06495 子数 J L-I态振动量子数。数值。微扰大小。<J,Lambda=-1,Ω=-1|J+L-J,Lambda=0,Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Ω=1|J+L-J,Lambda=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1))

对称化矩阵元: < =2| + | =4> A态振动量子数 J L-I态 < =1 + =0 振动量子数 J,Lambda，Ω=1|J L-J,Lambda，Ω=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性：激发态振动量子数=4
状态：活跃
颜色 酸橙色
S 1
Λ Σ⁻
Ω 阶数：自动 => 反转
原点 67802.7849165451 浮点数，标准差 = 0.00556026375325388 态原点。估计最低能级 = 67802.2187789372
B 1.09715336874161 浮点数 ，标准差 = 3.00716570600556E-5 转动常数。
LambdaSS 0.424603205929654 浮点数，标准差 = 0.0115162602834212 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。
D 5.34314012526997E-6 浮点数，标准差 = 2.51620227317152E-8 四次离心畸变。
H -1.498131E-12 六次离心畸变。
<J,Λ=0,Ω=-1|B|J,Λ=0,Ω=-1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
< =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=0|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω - LambdaSS 总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω =0> = 4 < =0 =0 =1> = 2 =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 对称化：
< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 J,Λ, Ω ΛSSJ,Λ, Ω / J,Λ, Ω < =0 =1| | 3 ΛSSJ,Λ, Ω - / J,Λ, Ω=0|ΛSSJ,Λ, Ω / < =0 =0 =0> = 2 3

<J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4 J,Λ, Ω DJ,Λ, Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ, Ω=0|D|J,Λ, Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) < =0 =0 =1> = 2 +1 +1 2 <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+3)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8 < =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2 J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|H|J,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<J,Λ=0,Ω=1|H|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Λ=0,Ω=1|H|J,Λ=0,Ω=1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =4> A态振动量子数 LS耦合振动量子数 数 13 1135785220975
值 - . 浮点数，标准差 = 0.00455861064639965 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS|J,Λ=0,Ω=-1> = -1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS|J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < =2| | =4> A态振动量子数 LS耦 < =1 =0
合振动量子数 总角动量量子数,Λ，Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ，Ω=1> = -1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1，Ω=1|LS耦合|总角动量量子数=0，Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 振动量子数=7
状态：活跃
颜色：蓝色
S 1
Λ 双重态
Ω 阶数：自动 => 反转
原点 67946.2486612564 浮点数，标准差 = 0.00364331290227751 态原点。估计最低能级 = 67913.089899836
B常数 1.07973878060191 浮点数 ，标准差 = 1.39032711556845E-5 转动常数。
A态 -16.9899246280871 浮点数，标准差 = 0.00331391148225554 自旋-轨道耦合常数。
LambdaSS 1.23163175363889 浮点数，标准差 = 0.00538387977440938 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。
伽马 -0.00290463321309688 浮点数，标准差 = 0.000257537521412191 自旋-转动耦合常数。
D 5.12786503880413E-6 浮点数，标准差 = 8.04194689239351E-9 四次离心畸变。
H -5.992526E-13 六次离心畸变。
AD -9.172647E-5 A的离心畸变。
<J、Λ=-2、Ω=-3|B|J、Λ=-2、Ω=-3> = J*（J+1）-4
<J,Λ=-2,Ω=-3|B常数|J,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))
<J,Λ=-2,Ω=-2|B常数|J,Λ=-2,Ω=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))
<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2
<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))
<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))
<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+4
<总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+4
<总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)+2
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))
<J,Λ=2,Ω=3|B|J,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))
<J,Λ=2,Ω=3|B|J,Λ=2,Ω=3> = J*(J+1)-4
对称化：
< =2 =3| | =2 =3> = +1 4 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量
< =2 =2 =3> = 2
量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))
< =2 =3| | =2 =2> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子
< =2 =2 =3> = 2
数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +1 +4 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子
< =2 =2 =2> = +1
数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | +4 B总角动量量子
< =2 =2 =1> = 2
数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))
< =2 =1| | =2 =2> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量
< =2 =2 =2> = 2
量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 2 J,Λ - Ω - A态J,Λ - Ω - J,Λ - Ω -
< = 2, = 1| | = 2, = 1> =
A 态 J,Λ - Ω - - 2 J,Λ ,Ω
< =2 =2 =1> =
=1| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω
< =2 =2
=3| | =3> = 2 A态J,Λ ,Ω 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = 2 J,Λ ,Ω A态J,Λ ,Ω J,Λ ,Ω
< =2 =2 =3> =
=3| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω
< =2 =2 =1> =
=1| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω=1|A态J,Λ ,Ω
< =2 =2 =1> = 2

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 2 3 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - / 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS.总角动量量子数,Λ - Ω - - / 3 总角动量
< = 2, = 2| | = 2, = 2> = 4 < = 2, = 1| | = 2, = 1> = 2
量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - / 3 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω
< =2 =2 =1> = 2 < =2 =2 =2> = 4
=2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 对称化：
< =2 =2 =3> = 2

< =2 =3| | =2 =3> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω
< =2 =2 =3> = 4 < =2 =2 =2> = 2
=2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω 3 LambdaSS总角动
< =2 =2 =2> = 2 < =2 =2 =1> = 4 < =2 =2 =1> = 2 3
量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|LambdaSS|总角动量量子数,Λ ,Ω /

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 1 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - J,Lambda -
< = 2, = 3| | = 2, = 2> =
Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(2 +1 6 2 *(J*(J)-))/
< = 2, = 2| | = 2, = 3> = 2 +1 6
J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(*(J*(J)-))/ 2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - -
< = 2, = 2| | = 2, = 2> =
2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(
< = 2, = 2| | = 2, = 1> =
2 +1 2 2 *(J*(J)-))/ J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda -
< = 2, = 1| | = 2, = 2> = 2 +1 2
Omega - sqrt(*(J*(J)-))/ 2 J,Lambda - Omega -
< = 2, = 1| | = 2, = 1> =
gammaJ,Lambda - Omega - - 3 J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =1> =
=1| | 3 gammaJ,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =2> =
=1| | 2 +1 2 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,
< =2 =2 =1> = 2 +1 2
Omega =2| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/
< =2 =2 =2> =
J,Lambda ,Omega =2| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =3> =
=2| | 2 +1 6 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,
< =2 =2 =2> = 2 +1 6
Omega =3| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/
< =2 =2
J,Lambda ,Omega =3| | =3> = 1 gammaJ,Lambda ,Omega 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = 1 J,Lambda ,Omega 伽马J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega =3| | 2 +1 6 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =3> = < =2 =2 =2> = 2 +1 6
=3| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =3| | =2 =3> = 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =2| | 2 +1 2 2 伽
< =2 =2 =2> = 马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega =2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega =2| | 3 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =2> = < =2 =2> = =2| | 3 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =2| | 2 +1 2 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =2| | 2 伽
< =2 =2 =2 =1> = 马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =2 =1> = 2 +1 2 =1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =1| | 2 +1 6 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =2> = < =2 =2 =1> = 2 +1 6
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega=1伽马J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =1> = 1

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = +2 5 6 4 J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - -J*(J*(J*(J)-)-
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 2 +1 +1 2
)- J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-3|D|J,Λ=-2,Ω=-1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <
J,Λ=-2,Ω=-2|D|J,Λ=-2,Ω=-3> = -2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))
< = 2, = 2| | = 2, = 2> = +2 +9 +8 +12 J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - -J*(J*(J*(J)))
< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 2 +1 +3 2
J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|D|J,Λ=-2,Ω=-3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=-
2,Ω=-1|D|J,Λ=-2,Ω=-2> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< = 2, = 1| | = 2, = 1> = +2 +11 +10 12 J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - -J*(J*(J*(J))
< =2 =2 =1> = +2 +11 +10
)- J,Λ ,Ω =1| | 12 D J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))-
< =2 =2 =2> = 2 +1 +3 2
J,Λ ,Ω=1|D|J,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=1|D|J,Λ=2,Ω=3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=2|
D|J,Λ=2,Ω=1> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +2 +9 +8 +12 J,Λ ,Ω D J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J))) J,Λ ,
< =2 =2 =3> = 2 +1 +1 2
Ω=2|D|J,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|D|J,Λ=2,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=3|D|
J,Λ=2,Ω=2> = -2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))
< =2 =3| | =2 =3> = +2 5 6 4 J,Λ ,Ω D J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)-)-)- 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = +2 5 6 4 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =3> = 2 +1 +1 2
J*(J*(J*(J)-)-)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|
D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -
2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =1> = +2 +9 +8 +12 总角
< =2 =2 =1> = 2 +1 +3 2
动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <总
角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角
动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +2 +11 +10 12 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =2> = +2 +11 +10
J*(J*(J*(J)))- 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 12
< =2 =2 =1> = 2 +1 +3 2
D总角动量量子数,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <总角
动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动
量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =1| | =2 =3> = +2 +9 +8 +12 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =2> = 2 +1 +1 2
J*(J*(J*(J))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|
D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -
2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)-5)-6)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J)-)-)-) J,Lambda - Omega - HJ,Lambda -
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 3 +2 1 +2 +4
Omega - (J*(J*(- *J*(J)-)))*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=-2,Omega=-3|HJ,Lambda=-2,Omega=-1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-2|HJ,Lambda=-2,Omega=-
3> = J*(J*(-3*J*(J+2)+1)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) < = 2, = 2| | = 2, = 2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,
< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 3 +2 23 20 2 +1
Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J)-))-)- J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-
72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=-2,Omega=-1|HJ,Lambda=-2,Omega=-3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-1|HJ,Lambda=-2,Omega=-2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
25)-22)-12)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 2, = 1| | = 2, = 1> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J*(J)))))
< =2 =2 =1> = +3 +21 +37 +74 +56
J,Lambda ,Omega =1| | +24 HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=1|HJ,Lambda ,O
< =2 =2 =2> = 3 +2 25 22 12 2
mega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=2,Omega=1|HJ,Lambda=2,Omega=3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,Omega=2|HJ,Lambda=2,Omega=1> =
J*(J*(-3*J*(J+2)-23)-20)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Lambda ,Omega=2|HJ,Lambda ,O
< =2 =2 =3> = 3 +2 +1 +4 2 +1
mega J*(J*(- *J*(J)))*sqrt(*(J*(J)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <J,Lambda=2,Omega=3|HJ,Lambda=2,Omega=1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,
Omega=3|HJ,Lambda=2,Omega=2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda ,Omega

HJ,Lambda ,Omega J *(J*(J*(J*(J)-)-)-) 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J *(J*(J*(J*(J)-)-)-) J,Λ, Ω=3|HJ,Λ, Ω (J*(J*(- *J*(J)-)))*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|
< =2 =2 =3> = 3 +2 1 +2 +4
HJ,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=3|HJ,Λ=2,Ω=2> = J*(J*(-3*J*(J+2)+1)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24))
< =2 =3| | =2 =1> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Λ, Ω=3|HJ,Λ, Ω J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J)-
< =2 =2 =1> = 3 +2 23 20 2 +1
2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|HJ,Λ=2,Ω=3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=2|HJ,Λ=2,Ω=3> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
25)-22)-12)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Λ, Ω
< =2 =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56
=2| | +24 HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Λ, Ω=2|HJ,Λ, Ω (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|
< =2 =2 =1> = 3 +2 25 22 12 2
HJ,Λ=2,Ω=1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=3> = J*(J*(-3*J*(J+2)-23)-20)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-
2)) < =2 =1| | =2 =3> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Λ, Ω=1|HJ,Λ, Ω J*(J*(- *J*(J)))*sqrt(*(J*(J)-
< =2 =2 =2> = 3 +2 +1 +4 2 +1
6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <
J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=1> = J^2*(J*(J*(J*(J+3)-3)-11)-6)+8

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3|AD|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-
4)

<J,Λ=-2,Ω=-3|AD|J,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-2|AD|J,Λ=-2,Ω=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-2|AD|J,Λ=-2,Ω=-1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|AD|J,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|AD|J,Λ=-2,Ω=-1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J,Λ=2,Ω=1|AD|J,Λ=2,Ω=1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J,Λ=2,Ω=1|AD|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|AD|J,Λ=2,Ω=1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|AD|J,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|AD|J,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|AD|J,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)-4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4)

线性微扰：激发态 < =2| | =7> A态振动量子数 LS振动量子数 数值 - . 9 51850056737858 浮点数，标准差 = 0.0104778117014898 微扰大小。< 总角动量量子数 ,Λ=-1,Ω=-1|LS 耦合 | 总角动量量子数 , Λ=-2,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)

< =2| | =7> A态振动量子数 LS振动量子数 总 < =1 =2 角动量量子数,Λ ,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ ,Ω=1> = 1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)的对称化矩阵元

线性：激发态 a'态振动量子数=12状态：活跃 颜色 红色 S 1 Λ Σ + Ω阶数：自动 => 反转原点

67991 2956897487 = 0 00589179423262914 = 67990 5318805452 . 浮点数，标准差 . 态 1 03759347733243 = 2 24926190351211 5 原点。估计最低能级 . B常数 . 浮点数，标准差 . E- 转动常数。LambdaSS -1.14571380522651 浮点数，标准差 = 0.00908941623482264 自旋-自旋耦合常数 (=1.5*ε)。伽马 -0.00527072942354211 浮点数，标准差 = 0.000311699571001926 自旋-转动耦合常数。D 5.18562812216526E-6 浮点数，标准差 = 1.22271031507727E-8 四次离心畸变。H -2.996263E-13 六次离心畸变。<总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = J*(J+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω J*(J) J,Λ ,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J+1)) <总 < =0 =0 =1> = 2 角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1) 对称化：<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω J*(J) < =0 =0 =0> = 2 J,Λ ,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 总角动量量子数,Λ,Ω - LambdaSS 总角动量量子数,Λ,Ω - / 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角 < =0 =0 =0> = 4 < =0 =0 =1> = 2 动量量子数,Λ,Ω - / 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 总角动量量子数,Λ,Ω LambdaSS总角动量 < =0 =0 =1> = 4 量子数,Λ,Ω / 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 3 < =0 =0 =0> = 2 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ,Ω - / 总角动量量子数,Λ,Ω=0|LambdaSS|总角动量量子数,Λ,Ω /

< =0 = 1| | =0 = 1> = 1 总角动量量子数,Λ,Ω - 伽马 总角动量量子数,Λ,Ω - - 总角动量量子数,Λ,Ω - 1| | 2 +1 2 伽马 总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角 < =0 =0 = 1> = 2 +1 < =0 =0 =0> = 动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 伽马总角 < =0 =0 =0> = < =0 =0 =1> = 动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω < =0 =0 =0> = 2 +1 =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 1 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 对称化： < =0 =0 =1> =

< =0 =1| | =0 =1> = 1 总角动量量子数,Λ ,Ω 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 =1| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 =1| | =0 =1> = 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 =0 =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω-0|伽马|总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(2*总角动量量子数 < =0 =0 =1> = *(总角动量量子数+1))/2

<J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4 < =0 =0 =1> = 2 +1 +1 2 J,Lambda ,Omega DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))- J,Lambda ,Omega=0|D|J,Lambda ,Omega *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Lambda=0,
Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|
J,Lambda=0,Omega=0> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*(J*(J+1)
+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|
J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega
=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8
< =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2
J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|H|J,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-
)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|
J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega
=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数
(总角动量量子数+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数
*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 2*总角动量量
子数*(总角动量量子数*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总
角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动
量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =12> A态振动量子数 LS耦合a'态振动量子
5 90222571840932
数 数值 - . 浮点数，标准差 = 0.0114841933161004 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|总角动量
量子数,Λ=0,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < =2| | =12> A态振动量子数
< =1 =0
LS耦合a'态振动量子数 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ ,Ω=1> = 1/s
qrt(3) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 Δv=3
状态：活跃
颜色：橙色
Λ 双重态
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 68377.9123376615 浮点数，标准差 = 0.0503654794741688 态原点。估计最低能级 = 68377.9123376615
B常数 1.08921971955507 浮点数 , 标准差 = 0.000187517727013344 转动常数。
D 5.85540454591073E-6 浮点数，标准差 = 7.96670714380823E-8 四次离心畸变。
H -2.247197E-13 六次离心畸变。
<J,Λ=-2,Ω=-2|B|J,Λ=-2,Ω=-2> = J*(J+1)
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)
对称化：
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)
<J,Λ=2,Ω=2|B常数|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)

<J,Λ=-2,Ω=-2|D|J,Λ=-2,Ω=-2> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J^2*(J*(J
+2)+1) 对称化：<J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J
^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=-2,Ω=-2|H|J,Λ=-2,Ω=-2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=2,Ω=2|H|J,Λ=2,Ω=2> = J^3
(J(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=2,Ω=2|H|J,Λ=2,Ω=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=2,Ω=2|H|J,Λ=2,
Ω=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 < =2| + | =3> A态振动量子
0 02597
数 J L-Δv 数值。微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-|J,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=1|
J+L-|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < =2| + | =3> A态振动量子数 J
< =1 + =2 =2> =
L-Δv J,Λ, Ω=1|J L-|J,Λ, Ω sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

线性：激发态 a3P振动带=13状态：活跃 颜色：银色 S 1 Λ Π Ω 阶数：自动 => 常规原点
67670 6782977856 = 0 00506807720509925 = 67632 5507030479 。浮点数，标准差。态
1 30813665955102 = 5 56682832240352 7
原点。估计最低能级。B常数。浮点数，标准差。E-转动常数。A态 38.1154482644111 浮点数，标准差 = 0.0129516607117093 自旋-轨道耦合常数。
LambdaSS -0.01821971 自旋-自旋耦合常数 (=1.5*ε)。o 0.6497647 自旋-自旋耦合常数，为 Ω = 0 态提供 Λ 倍增。伽马 0.003153713 自旋-转动耦合常数。
p 0.008831129 Λ倍增常数。q 2.786443E-5 Λ倍增常数。D 6.06110427245085E-6 浮点数，标准差 = 4.64500829284345E-9 四次离心畸变。AD -
0.0001940953 A的离心畸变。 < = 1, = 2| | = 1, = 2> = +1 2 J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω - J*(J)- J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω - -sqrt(
< = 1, = 2| | = 1, = 1> = 2
(J(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|B|J,Λ=-1,Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 1, = 1| | = 1, = 1> = +1 +2 J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω -
< = 1, = 1| | = 1, =0> = 2
J*(J) J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω -sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|B|J,Λ=-1,Ω=-1> = -sqrt(2*J*(J+1)) < = 1, =0| | = 1, =0> = +1 +2
< =1 =1 =0> = +1
J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω - J*(J) J,Λ,Ω =0| | +2 B J,Λ,Ω J*(J) J,Λ,Ω=0|B|J,Λ,Ω -sqrt(*J*(J+1))
< =1 =1 =1> = 2

<J,Λ=1,Ω=1|BJ,Λ=1,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))

< =1 =1| | =1 =1> = +1 +2 J,Λ,Ω BJ,Λ,Ω J*(J) J,Λ,Ω=1|

< =1 =1 =2> = 2

BJ,Λ,Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|BJ,Λ=1,Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Λ,Ω BJ,Λ,Ω J*(J)- 对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,

< =1 =1 =2> = 2

Omega J*(J)- J,Lambda ,Omega=2|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=2|B常数|

J,Lambda=1,Omega=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =1 =2| | =1 =1> = +1 +2

< =1 =1 =2> = 2

J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J+1))

<J,Lambda=1,Omega=1|B常数J,Lambda=1,Omega=2> = -sqrt(2*J*(J+1))

< =1 =1| | =1 =1> = +1 +2 J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> = +1

J*(J) J,Lambda ,Omega +2 B常数J,Lambda ,

< =1 =1 =0> = 2

Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|B常数|

J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =1 =0| | =1 =1> = +1 +2

< =1 =1 =1> = 2

J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=0|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-

2)) <J,Lambda=1,Omega=0|B常数J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=0|B常数|

J,Lambda=1,Omega=0> = J*(J+1)-2

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 1 J,Lambda - Ω - A J,Lambda - Ω - J,Lambda - Ω A J,Lambda - Ω -

< = 1, =0| | = 1, =0> = < =1 =1 =0> = < =1 =1

Ω - J,Lambda ,Ω =2| | =2> = 1 A J,Lambda ,Ω 对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = 1 J,Lambda ,Ω A J,Lambda ,Ω

< =1 =1 =2> =

J,Lambda ,Ω =2| | 1 A J,Lambda ,Ω -

< =1 =1 =0> =

J,Lambda ,Ω =0| | 1 A J,Lambda ,Ω -

< =1 =1 =0> = 1

J,Lambda ,Ω=0AJ,Lambda ,Ω

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 2 3 J,Lambda - Omega - LambdaSSJ,Lambda - Omega - / J,Lambda - Omega - LambdaSSJ,Lambda - Omega - - / 3 J,Lambda -

< = 1, = 1| | = 1, = 1> = 4 < = 1, =0| | = 1, =0> = 2

Omega LambdaSS J,Lambda - Omega / < =1 =1 =0> = 2 3 J,Lambda ,Omega =0| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Omega / J,Lambda ,Omega

=1| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Omega - / J,Lambda ,Omega =2| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Omega / 对称化：

< =1 =1 =2> = 2

< =1 =2| | =1 =2> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω

< =1 =1 =2> = 4 < =1 =1 =1> = 2

=1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角动

< =1 =1 =1> = 2 < =1 =1 =0> = 4 < =1 =1 =0> = 2 3

量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω=0LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω /

< = 1, =0| | =1 =0> = 1 J,Lambda - Omega oJ,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega o J,Lambda - Omega =0> = 1 对称化：

< =1 =0| | = 1,

< =1 =0| | =0> = 1 J,Λ,Ω oJ,Λ,Ω J,Λ,Ω=0|o|

< =1 =1 =0> = 1

J,Λ,Ω

<J,Lambda=-1,Omega=-2|伽马J,Lambda=-1,Omega=-1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2))/<J,Lambda=-1,Omega=-1|伽马J,Lambda=-1,Omega=-2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2))/ 2

< = 1, = 1| | = 1, = 1> = 2 J,Lambda - Omega - 伽马J,Lambda - Omega - - J,Lambda - Omega - 伽马J,Lambda - O 2

< = 1, = 1| | = 1, =0> =

mega sqrt(2 +1 2 *J*(J))/ J,Lambda - Omega 伽马 J,Lambda - Omega - sqrt(*J*(J))/

< = 1, =0| | = 1, = 1> = 2 +1

2 J,Lambda - Omega 伽马 J,Lambda - Omega -

< = 1, =0| | = 1, =0> =

2 J,Lambda ,Omega =0| | 2 伽马J,

< =1 =1 =0> = < =1 =1 =1> =

Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/

< =1 =1 =0> = 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/

J,Lambda ,Omega =1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> =

=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =2> =

=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> = 2 +1 2 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega

=2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ 对称化：

< =1 =2| | =1 =1> = 2 +1 2 2 J,Lambda ,Omega 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> = 2 +1 2 2

=2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =2> =

=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =2> =

=1| | 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> = 2 +1

=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> =

=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =0> =

=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =0> =

=1| | 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> = 2 +1

=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1> =

=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =0> =

=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega=0伽马J,Lambda ,

< =1 =1 =0> = 2 +1 2 2

Omega sqrt(*(J*(J)-))/

< = 1, = 1| | =1 =0> = 2 +1 2 J,Lambda - Omega - p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J))/ J,Lambda - Omega pJ,Lambda ,Omega =0> = 1 J,Lambda - Omega pJ,Lambda ,Omega (-sqrt(

< = 1, =0| | =1 < = 1, =0| | =1 =1> =

2 +1 2 *J*(J))/ J,Lambda ,Omega p J,Lambda - Omega - (-sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda ,Omega p J,Lambda - Omega =0> = 1 J,Lambda ,

< =1 =0| | = 1, = 1> = 2 +1 < < =1 =0| | = 1, =0> =

Omega p J,Lambda - Omega (-sqrt(2 +1 2 *J*(J))/ 对称化： < =1 =1| | =1 =0> = 2 +1 2 J,Lambda ,Omega p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega

< =1 =1 =1

=1| | =0> = 1 p J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega =0| | 2 +1 2 p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega =0| | 2 p J,Lambda ,Omega (-sqrt(

< =1 =1 =0> = < =1 =1 =0> = 2 +1 < =1 =1

J(J))/ J,Lambda ,Omega =0| | =1> = 1 p J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega=0|p|J,Lambda ,Omega (-sqrt(2*J*(J+1)))/2

< =1 =1 =1> =

<J,Λ=-1,Ω=-2|q|J,Λ=1,Ω=0> = sqrt(J*(J*(J+1)-2)*(J+1))/2

<J,Lambda=-1,Omega=-1|q|J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=-1,Omega=-1|D|J,Lambda=1,Omega=0> = sqrt(2*J*(J+1)) 对称化:

<J,Λ=1,Ω=2|q|J,Λ=1,Ω=0> = sqrt(J*(J*(J+1)-2)*(J+1))/2 <J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) <J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=1|D|J,Λ=-1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=1|D|J,Λ=-1,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=-1,Ω=1|D|J,Λ=-1,Ω=2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=2|D|J,Λ=-1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=2|D|J,Λ=-1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) 对称化:

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2)

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|LS耦合|振动量子数=3>

数值 -11.5278 微扰大小。

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =3> a态 P态v 振动量子数 LS耦合总角动量量子数,Λ, Ω=1 =0 =0> = <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ, Ω -1/sqrt(3)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a态 P态v 振动量子数 LS耦合数值 -。微扰大小。16 442 <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a态 P态v 振动量子数 LS耦合总角动量量子数,Λ, Ω=1 =0 =0> = <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ, Ω -1/sqrt(3)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a态 P态 LS耦合振动量子数数值。浮点数，标准差 = 0.0197211631393428。24 7288685468983 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = 1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a P态 L-S耦合振动量子数 J、Λ、Ω=1 =0 =1> = 1 |LS|J、Λ、Ω /sqrt(6) <J、Λ=1、Ω=1|LS|J、Λ=0、Ω=1> = 1/sqrt(6) <J、Λ=1、Ω=0|LS|J、Λ=0、Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =4> a P态 J L-振动量子数 数值 -。浮点数，标准差 = 0.000255625514810117 0 0598221863162786 微扰大小。<J、Λ=-1、Ω=-2|J+L-|J、Λ=0、Ω=-1> = -sqrt(J*(J+1)-2) <J、Λ=-1、Ω=-1|J+L-|J、Λ=0、Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=-1、Ω=0|J+L-|J、Λ=0、Ω=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=0|J+L-|J、Λ=0、Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=1|J+L-|J、Λ=0、Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=2|J+L-|J、Λ=0、Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =4> a P振动带 J L-ev J,Lambda , Ω=2|J L-|J,Lambda , Ω -sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=2|J+L-|J,Lambda=0, Ω=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=1|J+L-|J,Lambda=0, Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0|J+L-|J,Lambda=0, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0|J+L-|J,Lambda=0, Ω=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|LS耦合振动量子数=7>

数值 23.2188654276278 浮点数，标准差 = 0.0441226740988454 微扰大小。<总角动量量子数，Λ=-1，Ω=-2|LS耦合|总角动量量子数，Λ=-2，Ω=-2> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数，Λ=-1，Ω=-1|LS耦合|总角动量量子数，Λ=-2，Ω=-1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数，Λ=1，Ω=1|LS耦合|总角动量量子数，Λ=2，Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数，Λ=1，Ω=2|LS耦合|总角动量量子数，Λ=2，Ω=2> = -1/sqrt(6)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =7> a P v LS耦合振动量子数 总角动量量子数，Λ，Ω=2|LS耦合|总角动量量子数，Λ，Ω -1/sqrt(6) <总角动量量子数，Λ=1，Ω=2|LS耦合|总角动量量子数，Λ=2，Ω=2> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数，Λ=1，Ω=1|LS耦合|总角动量量子数，Λ=2，Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数，Λ=1，Ω=1|LS耦合|总角动量量子数，Λ=2，Ω=1> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =7> a Pv J L-dv 数值 - . 浮点数，标准差 = 0.000453447699962488 0 062795149954351 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-2|J+L-|J,Λ=-2,Ω=-3> = sqrt(J*(J+1)-6) <J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-|J,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=-1,Ω=0|J+L-|J,Λ=-2,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|J+L-|J,Λ=2,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=2|J+L-|J,Λ=2,Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-6)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =7> a P态 v 总角动量量子数 J L-dv 总角动量量子数 J,Lambda , Ω=2|J L-|J,Lambda , Ω sqrt(J*(J+1)-6) <J,Lambda=1, Ω=2|J+L-|J,Lambda=2, Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=1|J+L-|J,Lambda=2, Ω=2> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=1|J+L-|J,Lambda=2, Ω=2> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0|J+L-|J,Lambda=2, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=0|J+L-|J,Lambda=2, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =12> a Pv LS a'态振动量子数 数值。2 39113881014602 = 0 浮点数，标准差 .203999893082939 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6)

对称化矩阵元: < 3 =13| | =12> a Pv LS a'态振动量子数 总角动量量子数,Λ ,Ω=1 =0 =1> = 1 |LS耦合|总角动量量子数,Λ ,Ω - /sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =12> a Pv J L-a'态振动量子数 Value - . 浮点数，标准差 .00125606908675765 0 0112468031812311 = 0 微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-2|J+L-|J,Lambda=0,Omega=-1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=-1,Omega=-1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=-1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=2|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元: < 3 =13| + | =12> a Pv J L-a'态振动量子数 J,Lambda ,Omega=2|J L-|J,Lambda ,Omega sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1,Omega=2|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =3> a Pv LSΔv 数值 - 。微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-2|LS|J,Λ=-2,Ω=-2> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=2|LS|J,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(3)

22 8568

对称化矩阵元: < 3 =13| | =3> a Pv LSΔv J,Λ ,Ω=2|LS|J,Λ ,Ω /sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=2|LS|J,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(3)

跃迁矩: < | | > 激发态 μ X 球形跃迁矩：激发态 | | >< =2| 1 | =0> μ X A态振动量子数 T( ) X态振动量子数 秩 分量 自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。

1

A态振动量子数 T( ) X态振动量子数 J- Λ - Ω - T( ) J,Λ ,Ω =0> = 2 1 2 sqrt(*(J-))/ J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/ < 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 2 1 2 J,Λ - Ω - T( ) J,Λ ,Ω (*J)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|T(1)|J,Λ=0, Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - T( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω < +1 =1 1 =0 =0> = 2 +2 =1| | 2 T( )J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/ 线强度，来自 A态振动量子数 < 1 =2| | =0> T( ) X态振动量子数 S J- Λ - Ω - T( ) J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ < 1, = 1, = 1| 1 | < 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 1 S J- Λ ,Ω T( )J,Lambda ,Omega (J-)/ 2 S J,Λ - Ω - T( ) J,Lambda ,Omega (*J)/ < = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +1 2 S J,Λ ,Ω =1| | 2 T( ) < =1 1 =0 =0> = 2 1 < +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = +2 J,Lambda ,Omega (- *J-)/- S J ,Λ - Ω - T( ) J,Lambda ,Omega (J)/ 2 S J ,Λ ,Ω < +1 =1 1 =0 =0> = +2 =1| | 2 T( ) J,Lambda ,Omega (J)/ 对称化约化矩阵元，来自 A态振动量子数 < 1 =2| | =0> T( ) X态振动量子数 J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=1,Ω=1 - |T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = < 1, =1 =1 + | 1 | =0 =0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=1,Ω=1 + |T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 对称化线强度，来自 < =2| 1 | =0> A态振动量子数 < 1, =1 =1 + | 1 | =0 T( )X 态振动量子数 S J- Λ ,Ω T( )J,Λ ,Ω =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω - < =1 =1 1 =0 =0> = 2 | | 1 1 T( )J,Λ ,Ω (- *J-)/- S J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J < +1 =1 =1 + | 1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | >< 3 =13| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。

1

< 3 =13| 1,1 | =0> a态 Pv fT( )X态振动量子数 J- Λ - Ω - fT( ) J,Λ , Ω =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/ < 1, = 1, = 1| 1,1 | =0 < 1, =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 J,Λ - Ω - fT( )J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = < = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - fT( )J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J)))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω sqrt(< +1 =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 *(J))/ 2 来自 a态 Pv fT( ) X态振动量子数的线强度 < 3 =13| 1,1 | =0> S J- Λ - Ω - fT( )J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( )J,Λ , < 1, = 1, = 1| 1,1 | < 1, =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 Ω (J-)/ 2 S J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- < = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- < =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ < +1 = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ < +1 =1 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 a态 Pv fT( ) X态振动量子数的对称化约化矩阵元 < 3 =13| 1,1 | =0> J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=1,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=1,Ω =1 - |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 < 3 =13| 1,1 | =0> a态 Pv fT( ) X态振动量子数的对称化线强度 S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ , < 1, =1 =1 | 1,1 | =0 Ω =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J- < =1 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2 1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω J < +1 =1 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | >< =7| 1,1 | =0> 激发态 μ X 振动量子数 fT( )X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——注意，相对强度与该数值的平方成正比。

1

< =7| 1,1 | =0> 振动量子数 fT( )X态振动量子数 总角动量量子数- Λ - Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω < 1, = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(总角动量量子数-)))/ 总角动量量子数- Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数-))/ < 1, =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 总角动量量子数,Λ - Ω - fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/sqrt(*(2*总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|fT(1,1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*(2*总角动量量子数+1)) < +1 = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 总角动量量子数 ,Λ - Ω - fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数)))/ 总角动量量子数 , < +1 =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 Λ ,Ω fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数))/ 2 来自振动量子数 fT( ) X态振动量子数的线强度 < =7| 1,1 | =0> S 总角动量量子数- Λ - Ω - fT( )总角动量量子数,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (总 < 1, = 2, = 1| 1,1 | < 1, =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 角动量量子数-)/ S 总角动量量子数- Λ ,Ω fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数-)/ 2 S 总角动量量子数, < = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 Λ - Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/- 2 S 总角动量量子数,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数, < =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/- 2 S 总角动量量子数 ,Λ - Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/ < +1 = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/ < +1 =2 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 振动量子数 fT( )X态振动量子数的对称化约化矩阵元 < =7| 1,1 | =0>

<总角动量量子数-1,Λ=2,Ω=1 - |fT(1,1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(总角动量量子数-1) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1 + |fT(1,1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*总角动量量子数+1) <总角动量量子数+1,Λ=2,Ω=1 - |fT(1,1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(总角动量量子数+2) 来自 < =7| 1,1 | =0> 振动量子数 fT( )X态振动量子数的对称化线强度 S 总角动量量子数- Λ ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω =0> = 1 总角动量量子数- S 总角动量量子数,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数- 1 1)/- S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数

禁戒跃迁矩：<激发态 |mu| fT

秩1分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与该数值的平方成正比。 < =12| 1,1 | =0> a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数 =0> = 2 1 2 S 总角动量量子数- Λ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ,Ω (总角动量量子数-)/ S 总角动量量子数- Λ,Ω fT( )总角动量量子数,Λ,Ω (总角动量量子数-)/ 2 J,Lambda ,Omega - fT( ) J,Lambda , Omega (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|fT(1,1)|J,Lambda=0,Omega=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1))

< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/

< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 来自a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数 =0> S 总角动量量子数- Λ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ

< =12| 1,1 | < 1, =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 1 2 ,Ω (总角动量量子数-)/ S 总角动量量子数- Λ,Ω fT( )总角动量量子数, Λ,Ω (总角动量量子数-)/ 2 S 总角动量量子数,Λ,Ω - fT( )总角动量量子数,Λ,Ω (- *总角动量量子数-)/-

< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S 总角动量量子数,Λ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ,Ω (- *总角动量量子数-)/-

< =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω - fT( )总角动量量子数,Λ,Ω (总角动量量子数)/

< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ,Ω (总角动量量子数)/

< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 对称化约化矩阵元：a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数

< =12| 1,1 | =0> 总角动量量子数- Λ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(J-1) <J,Lambda=0,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Lambda=0,Ω=0> =

< 1, =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=1 - |fT(1,1)|J,Lambda=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 对称化线强度来自 < =12| 1,1 | =0> a'态振动量子数 fT( ) X态

< 1, =0 =1 | 1,1 | =0 振动量子数 S 总角动量量子数- Λ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ,Ω =0> = 1 J- S 总角动量量子数,Λ,Ω fT( ) 总角动量量子数,

< =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2 Λ,Ω (- *J- 1 1)/- S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω - fT( ) 总角动量量子数 ,Λ ,Ω J

< +1 =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩： < | | > < =4| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 振动量子数 fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =4| 1,1 | =0> 振动量子数 fT( ) X态振动量子数 总角动量量子数- Λ ,Ω - fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω

< 1, =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2 sqrt(*(总角动量量子数-))/ 总角动量量子数- Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数-))/

< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1 2 总角动量量子数,Λ ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/sqrt(*(2*总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|fT(1,1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*(2*总角动量量子数+1))

< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 总角动量量子数 ,Λ ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数 ,Λ ,

< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 Ω fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数))/ 2 振动量子数 fT( )X态振动量子数的线强度

< =4| 1,1 | =0> S 总角动量量子数- Λ ,Ω - fT( ) 总角动量量子数,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (总角动量

< 1, =0 = 1| 1,1 | < 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 1 量子数-)/ S 总角动量量子数- Λ ,Ω fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数-)/ 2 S 总角动量量子数,Λ ,Ω -

< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1 fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/ 2 S 总角动量量子数,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角

< =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 动量量子数-)/- 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω - fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/

< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/

< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 2 振动量子数 fT( ) X态振动量子数的对称化约化矩阵元

< =4| 1,1 | =0> 总角动量量子数- Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(总角动量量子数-1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1 - |fT(1,1)|总

< 1, =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*总角动量量子数+1) <总角动量量子数+1,Λ=0,Ω=1 + |fT(1,1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(总角动量量子数+2)

< =4| 1,1 | =0> 振动量子数 fT( )X态振动量子数的对称化线强度 S 总角动量量子数- Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω

< 1, =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 1 总角动量量子数- S 总角动量量子数,Λ ,Ω - fT( )总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-

< =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = 2 1 1)/- S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω fT( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数

< +1 =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩： < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态 μ X 振动量子数 fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。禁戒跃迁矩： < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态 μ X Δv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。跃迁矩：

< | | > B常数 μ X 球形跃迁矩：B | | > < =0| 1 | =0> μ X Bv T( ) Xv 秩 分量自动

< => 0 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =0| 1 | =0>

< 1, =0 =0| 1 | =0 Bv T( ) Xv J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω 的约化矩阵元：-sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1) 来自 < =0| 1 | =0> Bv T( )

< 1, =0 =0| 1 | Xv S J- Λ,Ω T( )J,Λ=0,Ω=0> = J S < +1 =0 =0| 1 | =0 =0> = +1 J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J 的线强度。Bv

< 1 =0| | =0> T( ) Xv J- Λ,Ω T( ) J,Λ ,Ω 的对称化约化矩阵元：-sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/

< 1, =0 =0| 1 | =0 =0> = sqrt(J+1) 来自 < =0| 1 | =0> Bv T( )Xv S J- Λ,Ω T( )J,Λ ,Ω=0> = J S<J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = J+1 的对称化线

< 1, =0 =0| 1 | =0 强度

跃迁矩: <B|mu|激发态>

球形跃迁矩: <B|mu|激发态> <Bv=0|T(1)|Av=2>

Rank 1

分量自动 => 1

强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜 - 请注意，相对强度与此数值的平方成正比。

<Bv=0|T(1)|Av=2>的约化矩阵元

<总角动量量子数-1,Λ=0,Ω=0|T(1)|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = sqrt(2*(总角动量量子数+1))/2

<J-1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=1,Ω=1> = sqrt(2*(J+1))/2

<J,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=-1,Ω=-1> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1))

<J,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/sqrt(2*(2*J+1))

<J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=-1,Ω=-1> = sqrt(2*J)/2

<J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=1,Ω=1> = sqrt(2*J)/2

来自 <B常数v=0|T(1)|A态振动量子数v=2> 的线强度

S<总角动量量子数-1,Λ=0,Ω=0|T(1)|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = (总角动量量子数+1)/2

S<总角动量量子数-1,Λ=0,Ω=0|T(1)|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = (总角动量量子数+1)/2

S<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|T(1)|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = (-2*总角动量量子数-1)/-2

S<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|T(1)|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = (2*总角动量量子数+1)/2

<总角动量量子数 ,Λ=0 ,Omega=0|T(1)|J,Λ=-1 ,Omeg$^{a=-1>}$ = 总角动量量子数/2

S < +1 =0 =0| 1 | =1 =1> = 2 J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J/ Bv =0| | =2>

< 1 < 1, =0 =0| 1 | + =1 =1> =

T( ) Av J- Λ,Ω T( ) J,Λ ,Ω 的对称化约化矩阵元: sqrt(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)| - J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)| + J,Λ=1,Ω=1> = sqrt(J) 来自

< =0| 1 | =2> Bv T( )Av S J- Λ,Ω T( ) J,Λ ,Ω =1> = +1 J S

< 1, =0 =0| 1 | + =1 < =0 =0| 1 | =1 =1> = 2

J,Λ ,Ω T( ) - J,Λ ,Ω *J +1 S J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J 的对称化线强度。跃迁矩:

< +1 =0 =0| 1 | + =1 =1> =

< | | > 碳 μ X 球形跃迁矩: C | | >< =0| 1 | =0> μ X Cv T( ) Xv 秩 分量自动

< 1

=> 0 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。矩阵元同

< | | >< =0| 1 | =0> B常数 μ X Bv T( ) Xv。跃迁矩: C | | > μ 激发态 球形跃迁矩: C

< <

| | >< =0| 1 | =2> μ 激发态 Cv T( ) Av 秩 分量自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——

1

请注意，相对强度与此数值的平方成正比。矩阵元同 < | | >< =0| 1 | =2> B常数 μ 激发态 Bv T( ) Av。模拟：模拟 强

度因子：0.333333333333333（1 来自 Spol）强度单位 任意 寿命模型 lmNone 绘图单位 cm⁻¹ 荧光 否 nDF 50000 宽度倍数 6 自动最小值 是 自动最大值 是 显示总和 否 显示分量 是 显示Fortrat图 是 使用上态 否 显示对称性 否 显示ΔJ 是 缩放刻度标记大小 是 使用对称性 否 使用态编号 否 Fortrat量子数 J 保持面积 否 分离刻度 否 对数刻度 否 显示二维图 否 自动二维Y轴 是 最小频率 19713.4264274956 绘图范围左边界。最大频率 19725.7352925044 绘图范围右边界。Y轴最大值 7.90431110974814E-183 绘图范围顶部；启用自动最大值时会自动更新。温度 300 转动温度（开尔文）。高斯 0.08 高斯线宽贡献（半峰全宽）。如果同时设置此值和洛伦兹线宽（如下），则

设置结果为两者的卷积，即一种 Voigt

线型。洛伦兹 0.02 洛伦兹线宽贡献（半峰全宽）。此项和高斯宽度也可以在

主窗口中设置。

谱边余量 -1 在所需光谱两端额外计算的点数。O阈值 0.0001 忽略小于最大峰强度此比例的峰。振动温度 -1 振动温度（开尔文）；设为 -1（默认值）时，所有玻尔兹曼因子均使用转动温度。最小强度 1E-15 Fortrat图中要绘制的最弱跃迁，以最强跃迁的比例表示。自旋温度 -1 自旋温度；设为 -1（默认值）时，不同自旋态达到热平衡。强度缩放因子 1 应用于所有谱线强度的缩放因子。绘图分割 0.5 分离绘图时用于模拟的绘图区域比例（-1..1）。CODATA 2018 基本常数：h=6.62607015E-34 k=1.380649E-23 NA=6.02214076E23 e=1.602176634E-19 me=9.109383701

5E-31

PGOPHER 11.0.142 2021年4月1日 8:30 64 位 Unicode（Delphi 33/33）

pgopher 44b8c50a90149a6ce53e669f4a0e44afc86f1abd lutils

65f951dfa553c7f9bc501632d3360a85cd1a0165 utils

ec0cac7863199e65355ae4c6ab78dbe3037fae3b lforms

d4dfa0031586b0cf5ffd76ff4d8f7aee2a9f8932 wutils

9bb7abdf4436dd4d7dfed61ce7fb7c6bc914386c GraphicEx

bfb0df9494191c3a10d6089c21fe439fcd763090 混合物：13C18O A（v=2）能级的去微扰.pgo 单位 cm⁻¹ 打印级别 谱线表 精度 4

基组阶数 boDefault 量子数格式 总角动量量子数 拟合循环次数 1 拟合详情 否 自动重新绘图 是 允许复数 是 无线列表 否 显示估计不确定度 否 显示导数 否 奇异值分解限制 5 显示子基组 否 允许零核自旋 否 缩放参数 是 固定跃迁相位 否 旧超精细顺序 否 旧颜色顺序 否 单残差图 否 上态颜色 否 奇异值分解阈值 1E-6

丢弃低于最大特征值此比例的奇异值分解特征值；<0 使用 QR分解。

缩放变化 1　　拟合产生的缩放变化量，由此数值缩放——通常为 1

小量阈值 2E-18　　小于此值的矩阵元将被丢弃

物种：一氧化碳 总角动量量子数最大值 63 浓度 1　　物种的相对浓度

线性分子：13C18O J对称性调整 True 分块矩阵 True 绝对E False 对称 False 对称权重 1 非对称权重 1 R平方 H False 显示 J True 显示 Ω False 显示 N True 显示 F 数 True 显示 ef True 丰度 1

该同位素的丰度；默认值为 1

假定原点 1E99　　用于玻尔兹曼计算的能量原点；1e99 表示自动估算。目前为 0

线性能级组：X态

初始 真
本征值搜索 真
极限搜索 真
自动 Q 收敛 真
使用布居参数 假
覆盖能量 真
线性：X态 X态振动量子数=0
状态：活跃
Λ Σ+
Ω 阶数：自动 => 常规
B常数 1.746408199 转动常数。
D 5.0488146E-6 四次离心畸变。
H 4.35471E-12 六次离心畸变。
L -2.4821E-17　　总角动量量子数^8 离心畸变。
M 2.99E-23 J　　^10 离心 ifugal di畸变ion.
PP -4.5E-28 J^12 离心畸变。（为避免与 p 混淆，不使用 P。）
<J、Λ=0、Ω=0|BJ、Λ=0、Ω=0> = J*(J+1)
对称 ized:
<J、Λ=0、Ω=0|BJ、Λ=0、Ω=0> = J*(J+1)

<J、Λ=0、Ω=0|DJ、Λ=0、Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|DJ、Λ=0、Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J、Λ=0、Ω=0|HJ、Λ=0、Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|HJ、Λ=0、Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

<J，Λ=0，Ω=0|LJ，Λ=0，Ω=0> = 总角动量量子数^4*(J*(J*(J*(J+4)+6)+4)+1) 对称化：<J，Λ=0，Ω=0|LJ，Λ=0，Ω=0> = 总角动量量子数^4*(J*(J*(J*(J+4)+6)+4)+1)

<J，Λ=0，Ω=0|MJ，Λ=0，Ω=0> = 总角动量量子数^5*(J*(J*(J*(J*(J+5)+10)+10)+5)+1) 对称化：<J，Λ=0，Ω=0|MJ，Λ=0，Ω=0> = 总角动量量子数^5*(J*(J*(J*(J*(J+5)+10)+10)+5)+1)

<J，Λ=0，Ω=0|PPJ，Λ=0，Ω=0> = 总角动量量子数^6*(J*(J*(J*(J*(J*(J+6)+15)+20)+15)+6)+1) 对称化：<J，Λ=0，Ω=0|PPJ，Λ=0，Ω=0> = 总角动量量子数^6*(J*(J*(J*(J*(J*(J+6)+15)+20)+15)+6)+1)

线性微扰：X态　　<　=0|　^14|　=0> X态振动量子数N X态振动量子数 O（转动常数）数值 -2.2E-33 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|N^14|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^7*(J*(J*(J*(J*(J*(J*(J+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1)

X态振动量子数=0|N^14|X态振动量子数=0>的<对称化矩阵元
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|N^14|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数^7*(J*(J*(J*(J*(J*(J*(J+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1)

线性流形：碳 初始 真
本征值搜索 真

极限搜索 False
自动 Q 收敛 True
使用布居参数 False
覆盖能量 True
E 0 e 1 91918.81461769 能量 for J=E 0 e 1 能级:碳 振动量子数 Cv=0 0 0 F1e
E 1 e 1 91922.3501979315 能量 for J=E 1 e 1 能级:碳 振动量子数 Cv=0 1 1 F1e
E 2 e 1 91929.41460931 J=E 2 e 1 能级：碳 振动量子数=0 2 2 F1e 的能量
E 3 e 1 91940.0087911758 J=E 3 e 1 能级：碳 振动量子数=0 3 3 F1e 的能量
E 4 e 1 91954.1391754158 J=E 4 e 1 能级：碳 振动量子数=0 4 4 F1e 的能量
E 5 e 1 91971.8047483651 J=E 5 e 1 能级：碳 振动量子数=0 5 5 F1e 的能量
E 6 e 1 91992.9963415625 J=E 6 e 1 能级：碳 振动量子数=0 6 6 F1e 的能量
E 7 e 1 92017.7210158785 J=E 7 e 1 能级：碳 振动量子数=0 7 7 F1e 的能量
E 8 e态 1 92045.9729147246 能量，对应总角动量量子数 J= 的 E 8 e态 1 能级：碳 振动量子数 =0 8 8 F1e
E 9 e态 1 92077.7548931101 能量，对应总角动量量子数 J= 的 E 9 e态 1 能级：碳 振动量子数 =0 9 9 F1e
E 10 e态 1 92113.0587701987 能量，对应总角动量量子数 J= 的 E 10 e态 1 能级：碳 振动量子数 =0 10 10 F1e
E 11 e态 1 92151.8966952636 能量，对应总角动量量子数 J= 的 E 11 e态 1 能级：碳 振动量子数 =0 11 11 F1e
E 12 e态 1 92194.2576663392 能量，对应总角动量量子数 J= 的 E 12 e态 1 能级：碳 振动量子数 =0 12 12 F1e
E 13 e态 1 92240.1328568783 能量，对应总角动量量子数 J= 的 E 13 e态 1 能级：碳 振动量子数 =0 13 13 F1e
E 14 e 1 92289.5374084555 能量（总角动量量子数=E 14 e 1 能级：碳 振动量子数=0 14 14 F1e）
E 15 e 1 92342.4615531966 能量（总角动量量子数=E 15 e 1 能级：碳 振动量子数=0 15 15 F1e）
E 16 e 1 92398.9025159008 能量（总角动量量子数=E 16 e 1 能级：碳 振动量子数=0 16 16 F1e）
E 17 e 1 92458.8587353746 能量（总角动量量子数=E 17 e 1 能级：碳 振动量子数=0 17 17 F1e）
E 18 e 1 92522.3290731028 能量（总角动量量子数=E 18 e 1 能级：碳 振动量子数=0 18 18 F1e）
E 19 e 1 92589.3126987891 能量（总角动量量子数=E 19 e 1 能级：碳 振动量子数=0 19 19 F1e）
E 20 e 1 92659.8038563447 能量对应于总角动量量子数 J=E 20 e 1 能级：碳 振动量子数=0 20 20 F1e
E 21 e 1 92733.8006230299 能量对应于总角动量量子数 J=E 21 e 1 能级：碳 振动量子数=0 21 21 F1e
E 22 e 1 92811.3031429715 能量对应于总角动量量子数 J=E 22 e 1 能级：碳 振动量子数=0 22 22 F1e
E 23 e 1 92892.3079897717 能量对应于总角动量量子数 J=E 23 e 1 能级：碳 振动量子数=0 23 23 F1e
E 24 e 1 92976.822314948 能量对应于总角动量量子数 J=E 24 e 1 能级：碳 振动量子数=0 24 24 F1e
E 25 e 1 93064.8231465903 能量对应于总角动量量子数 J=E 25 e 1 能级：碳 振动量子数=0 25 25 F1e
E 26 e 1 93156.3176170672 能量：总角动量量子数 J=E 26 e 1 能级：碳 Cv=0 26 26 F1e
E 27 e 1 93251.2988822767 能量：总角动量量子数 J=E 27 e 1 能级：碳 Cv=0 27 27 F1e
E 28 e 1 93349.7667497678 能量：总角动量量子数 J=E 28 e 1 能级：碳 Cv=0 28 28 F1e
E 29 e 1 93451.7189577959 能量：总角动量量子数 J=E 29 e 1 能级：碳 Cv=0 29 29 F1e
E 30 e 1 93557.148271242 能量：总角动量量子数 J=E 30 e 1 能级：碳 Cv=0 30 30 F1e
E 31 e 1 93666.0549149757 能量：总角动量量子数 J=E 31 e 1 能级：碳 Cv=0 31 31 F1e
E 32 e 1 93778.4343213518 J=E 32 e 1 能级：碳 振动量子数=0 32 32 F1e 的能量
E 33 e 1 93894.2815297818 J=E 33 e 1 能级：碳 振动量子数=0 33 33 F1e 的能量
E 34 e 1 94013.591760117 J=E 34 e 1 能级：碳 振动量子数=0 34 34 F1e 的能量
E 35 e 1 94136.3569127458 J=E 35 e 1 能级：碳 振动量子数=0 35 35 F1e 的能量
E 36 e 1 94262.5809686937 J=E 36 e 1 能级：碳 振动量子数=0 36 36 F1e 的能量
E 37 e 1 94392.253689726 J=E 37 e 1 能级：碳 振动量子数=0 37 37 F1e 的能量
E 38 e态 1 94525.3757684531 为总角动量量子数 J=E 38 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 38 38 F1e 的能量
E 39 e态 1 94661.9366784378 为总角动量量子数 J=E 39 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 39 39 F1e 的能量
E 40 e态 1 94801.9378743053 为总角动量量子数 J=E 40 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 40 40 F1e 的能量
E 41 e态 1 94945.3716418562 为总角动量量子数 J=E 41 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 41 41 F1e 的能量
E 42 e态 1 95092.2322481804 为总角动量量子数 J=E 42 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 42 42 F1e 的能量
E 43 e态 1 95242.507641775 为总角动量量子数 J=E 43 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 43 43 F1e 的能量
E 44 e 1 95396.2059026634 能量对应总角动量量子数J=E 44 e 1 能级：C 振动量子数Cv=0 44 44 F1e
E 45 e 1 95553.3147425169 能量对应总角动量量子数J=E 45 e 1 能级：C 振动量子数Cv=0 45 45 F1e
E 46 e 1 95713.8389547786 能量对应总角动量量子数J=E 46 e 1 能级：C 振动量子数Cv=0 46 46 F1e
E 47 e 1 95877.7430647896 能量对应总角动量量子数J=E 47 e 1 能级：C 振动量子数Cv=0 47 47 F1e
E 48 e 1 96045.0535799167 能量对应总角动量量子数J=E 48 e 1 能级：C 振动量子数Cv=0 48 48 F1e
E 49 e 1 96215.7478896832 能量对应总角动量量子数J=E 49 e 1 能级：C 振动量子数Cv=0 49 49 F1e
E 50 e 1 96389.8321659005 总角动量量子数J=E 50 e 1 能级：碳 振动量子数Cv=0 50 50 F1e
E 51 e 1 96567.2766128028 总角动量量子数J=E 51 e 1 能级：碳 振动量子数Cv=0 51 51 F1e
E 52 e 1 96748.0881671828 总角动量量子数J=E 52 e 1 能级：碳 振动量子数Cv=0 52 52 F1e
E 53 e 1 96932.2837485302 总角动量量子数J=E 53 e 1 能级：碳 振动量子数Cv=0 53 53 F1e
E 54 e 1 97119.8371091712 总角动量量子数J=E 54 e 1 能级：碳 振动量子数Cv=0 54 54 F1e
E 55 e 1 97310.7208844101 总角动量量子数J=E 55 e 1 能级：碳 振动量子数Cv=0 55 55 F1e
E 56 e态 1 97504.930642673 能量，对应总角动量量子数 J=E 56 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 56 56 F1e
E 57 e态 1 97702.5267856525 能量，对应总角动量量子数 J=E 57 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 57 57 F1e
E 58 e态 1 97903.4396484547 能量，对应总角动量量子数 J=E 58 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 58 58 F1e
E 59 e态 1 98107.6243997471 能量，对应总角动量量子数 J=E 59 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 59 59 F1e
E 60 e态 1 98315.1990419085 能量，对应总角动量量子数 J=E 60 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 60 60 F1e
E 61 e态 1 98526.0359657192 能量，对应总角动量量子数 J=E 61 e态 1 能级：碳 振动量子数 Cv=0 61 61 F1e
E 62 e 1 98740.1821395715 J= 的能量 E 62 e 1 能级：碳 振动量子数=0 62 62 F1e
E 63 e 1 98957.6207414145 J= 的能量 E 63 e 1 能级：碳 振动量子数=0 63 63 F1e
E 64 e 1 99178.3440172057 J= 的能量 E 64 e 1 能级
E 65 e 1 99402.3440898222 J= 的能量 E 65 e 1 能级
线性：碳 振动量子数=0
状态：活跃
Λ Σ+
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 91918.79 态原点。估计最低能级 = 91918.79
B常数 1.76641191315359 转动常数。
D 5.12833508732762E-6 四次离心畸变。
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

线性流形：B常数 初始 真
本征值搜索 真 极限搜索 假 自动 Q 收敛 真 使用布居参数 假 覆盖能量 真

E 0 e态 1 86917.3573438145
E 1 e态 1 86920.8990798371
E 2 e态 1 86927.9802287834
E 3 e态 1 86938.5975955474
E 4 e态 1 86952.7535165513
E 5 e态 1 86970.4485900942
E 6 e态 1 86991.6808705965
E 7 e态 1 87016.4501212347
E 8 e态 1 87044.7550139408
E 9 e态 1 87076.5945102899
E 10 e态 1 87111.9673665656
E 11 e态 1 87150.8722462898
E 12 e态 1 87193.3103335359
能量 13 e态 1 87239.2738059414
能量 14 e态 1 87288.7659451284
能量 15 e态 1 87341.7838423505
E 16 e态 1 87398.3239892327
E 17 e态 1 87458.3457386672
E 18 e态 1 87521.9669176787
E 19 e态 1 87589.0729980635
E 20 e态 1 87659.6848539994
E 21 e态 1 87733.8093501407
E 22 e态 1 87811.4434750138
E 23 e态 1 87892.5833524621
E 24 e态 1 87977.2254359612
E 25 e态 1 88065.3655819688
E 26 e态 1 88157.0074638094
E 27 e态 1 88252.1428727514
E 28 e态 1 88350.7622038786
E 29 e态 1 88452.8714734024
E 30 e态 1 88558.4573652084
E 31 e态 1 88667.5170675484
E 32 e态 1 88780.0530157549
E 33 e态 1 88896.0732697678
E 34 e态 1 89015.5479117331
E 35 e态 1 89138.5007753021
E 36 e态 1 89264.8671434128
E 37 e态 1 89394.712613204
E 38 e态 1 89528.0033885644
E 39 e态 1 89664.7427100465
E 40 e态 1 89804.8732821819
E 41 e态 1 89948.4826520769
E 42 e态 1 90095.4817872327
E 43 e态 1 90245.9288501256
E 44 e态 1 90399.7945833577
E 45 e态 1 90557.048472636
E 46 e态 1 90717.7471747185
E 47 e态 1 90881.7572647896
E 48 e态 1 91049.1774976252
E 49 e态 1 91220.0533896832
E 50 e态 1 91394.1969159005
E 51 e态 1 91571.8211856604
E 52 e态 1 91752.7615313151
E 53 e态 1 91937.0582069911
E 54 e态 1 92124.7041674308
E 55 e 1 92315.6922344469
线性：B Bv=0状态：活跃 Λ Σ + Ω 阶数：自动

总角动量量子数=E 0 e态 1 能级：B常数 Bv=0 0 0 F1e
总角动量量子数=E 1 e态 1 能级：B常数 Bv=0 1 1 F1e
总角动量量子数=E 2 e态 1 能级：B常数 Bv=0 2 2 F1e
总角动量量子数=能量 3 e态 1 能级：B常数 Bv=0 3 3 F1e
总角动量量子数=能量 4 e态 1 能级：B常数 Bv=0 4 4 F1e
总角动量量子数=能量 5 e态 1 能级：B常数 Bv=0 5 5 F1e
总角动量量子数=能量 E 6 e态 1 能级：B常数 B振动量子数=0 6 6 F1e
总角动量量子数=能量 E 7 e态 1 能级：B常数 B振动量子数=0 7 7 F1e
总角动量量子数=能量 E 8 e态 1 能级：B常数 B振动量子数=0 8 8 F1e
总角动量量子数=的能量E 9 e态 1 能级：B常数 Bv=0 9 9 F1e
总角动量量子数=的能量E 10 e态 1 能级：B常数 Bv=0 10 10 F1e
总角动量量子数=的能量E 11 e态 1 能级：B常数 Bv=0 11 11 F1e
总角动量量子数=能量 12 e态 1 能级：B常数 Bv=0 12 12 F1e
总角动量量子数=能量 13 e态 1 能级：B常数 Bv=0 13 13 F1e
总角动量量子数=能量 14 e态 1 能级：B常数 Bv=0 14 14 F1e
总角动量量子数=E 15 e态 1 能级：B常数 Bv=0 15 15 F1e
总角动量量子数=E 16 e态 1 能级：B常数 Bv=0 16 16 F1e
总角动量量子数=E 17 e态 1 能级：B常数 Bv=0 17 17 F1e
总角动量量子数=E 18 e态 1 能级：B常数 Bv=0 18 18 F1e
总角动量量子数=E 19 e态 1 能级：B常数 Bv=0 19 19 F1e
总角动量量子数=E 20 e态 1 能级：B常数 Bv=0 20 20 F1e
总角动量量子数=E 21 e态 1 能级：B常数 Bv=0 21 21 F1e
总角动量量子数=E 22 e态 1 能级：B常数 Bv=0 22 22 F1e
总角动量量子数=E 23 e态 1 能级：B常数 Bv=0 23 23 F1e
总角动量量子数=能量 24 e态 1 能级：B常数 Bv=0 24 24 F1e
总角动量量子数=能量 25 e态 1 能级：B常数 Bv=0 25 25 F1e
总角动量量子数=能量 26 e态 1 能级：B常数 Bv=0 26 26 F1e
总角动量量子数=能量 27 e态 1 能级：B常数 Bv=0 27 27 F1e
总角动量量子数=能量 28 e态 1 能级：B常数 Bv=0 28 28 F1e
总角动量量子数=能量 29 e态 1 能级：B常数 Bv=0 29 29 F1e
能量：总角动量量子数=E 30 e态 1 能级：B常数 Bv=0 30 30 F1e
能量：总角动量量子数=E 31 e态 1 能级：B常数 Bv=0 31 31 F1e
能量：总角动量量子数=E 32 e态 1 能级：B常数 Bv=0 32 32 F1e
J=E 33 e态 1 能级：B常数 Bv=0 33 33 F1e
总角动量量子数为=的能量E 34 e态 1 能级：B常数 Bv=0 34 34 F1e
总角动量量子数为=的能量E 35 e态 1 能级：B常数 Bv=0 35 35 F1e
总角动量量子数=能量 E 36 e态 1 能级：B常数 B振动量子数=0 36 36 F1e
总角动量量子数为J=E 37 e态 1 能级：B常数 Bv=0 37 37 F1e
能量对应于 J=E 38 e态 1 能级：B常数 Bv=0 38 38 F1e
总角动量量子数=E 39 e态 1 能级：B常数 Bv=0 39 39 F1e
总角动量量子数=E 40 e态 1 能级：B常数 Bv=0 40 40 F1e
总角动量量子数=E 41 e态 1 能级：B常数 Bv=0 41 41 F1e
总角动量量子数=能量 E 42 e态 1 能级：B常数 Bv=0 42 42 F1e
总角动量量子数=能量 E 43 e态 1 能级：B常数 Bv=0 43 43 F1e
总角动量量子数=能量 E 44 e态 1 能级：B常数 Bv=0 44 44 F1e
总角动量量子数=E 45 e态 1 能级：B常数 Bv=0 45 45 F1e
总角动量量子数=E 46 e态 1 能级：B常数 Bv=0 46 46 F1e
总角动量量子数=E 47 e态 1 能级：B常数 Bv=0 47 47 F1e
总角动量量子数=能量 48 e 1 能级：B常数 Bv=0 48 48 F1e
总角动量量子数=能量 49 e 1 能级：B常数 Bv=0 49 49 F1e
总角动量量子数=能量 50 e 1 能级：B常数 Bv=0 50 50 F1e
总角动量量子数=能级 E 51 e态 1 能级：B常数 Bv=0 51 51 F1e
总角动量量子数=能级 E 52 e态 1 能级：B常数 Bv=0 52 52 F1e
总角动量量子数=能级 E 53 e态 1 能级：B常数 Bv=0 53 53 F1e
J=E 54 e 1 能级：B Bv=0 54 54 F1e 的能量
J=E 55 e 1 能级：B Bv=0 55 55 F1e 的能量

=> 常规原点 86917.360320496

态原点。估计最低能级 = 86917.360320496

B 1.76976443875216
D 5.53872463797865E-6
转动常数。
四次离心畸变。

矩阵元同 C 振动量子数=0线性流形：激发态 初始：否 本征值搜索 是 极限搜索 是 自动 Q 收敛 是 使用布居参数 否 覆盖能量 是 线性：激发态 A态振动量子数=2状态：活跃 Λ Π Ω 阶数：自动 => 常规原点 67557.9263807482

浮点态原点。估计最低能级 = 67557.9263807482

B 1.41770507032897
q -1.187706E-5 L
D 6.24399485577261E-6
H -1.280902E-11
浮点数 转动常数。
ambda 倍分裂常数。
浮点数 四次离心畸变。
六次离心畸变。

<J,Λ=-1,Ω=-1|B|J,L
<J,Lambda=1,Ω=1|B|J,La
对称化：<J,Λ=1,Ω=1|B|J,La
ambda=-1,Ω=-1> = J*(J+1)
mbda=1,Ω=1> = J*(J+1)
mbda=1,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B|总角动量量子数,La
<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|q|总角动量量子数,
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|q|总角动量量子数,L
对称化：<J,Λ=1,Ω=1|q|J,L
<J,Λ=1,Ω=1|q|J,L
mbda=1,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
Λ=1,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数+1))/2
Λ=-1,Ω=-1> = (J*(J+1))/2
Λ=1,Ω=1> = (J*(J+1))/2
Λ=1,Ω=1> = (J*(J+1))/2

<J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=-1,Ω=-1|H|J,Λ=-1,Ω=-1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性：激发态 振动量子数=3
状态：活跃
颜色：紫红色
Lambda Sigma-
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 67579.2383904013 浮点态原点。估计最低能级 = 67579.2383904013
B 1.09918701526773 浮点转动常数。
D 5.77973239037241E-6 浮点四次离心畸变。
H 2.247197E-12 六次离心畸变。
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=0|B常数|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性：激发态 振动量子数=4
状态：活跃
颜色：紫红色
Lambda Sigma-
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 68544.2939028 态原点。估计最低能级 = 68544.2939028
B常数 1.0840499034 转动常数。
D 5.712347E-6 四次离心畸变。
H 2.247197E-12 六次离心畸变。
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J、Λ=0、Ω=0|H|J、Λ=0、Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|H|J、Λ=0、Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 <=2| + |=3> A态振动量子数 J L-I态振动量子数 数值 - . 浮点数 微扰大小。<J、Λ=-1、Ω=-1|J+L-|J、Λ=0、Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=1|J+L-|J、Λ=0、Ω=0> = sqrt(J*(J+1))
0 0504224240425148

A态振动量子数 J L-I态振动量子数 J、Λ, Ω=1|J L-|J、Λ, Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) 的对称化矩阵元

线性微扰：激发态 <=2| + |=4> A态振动量子数 总角动量量子数 L-I态振动量子数 数值。微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1))
0 06495

对称化矩阵元 <=2| + |=4> A态振动量子数 J L-Iv
< =1 + =0
J,Lambda ,Omega=1|J L-|J,Lambda ,Omega=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性：激发态 振动量子数=4
状态：活跃
颜色 酸橙色
S 1
Λ Lambda Σ⁻
Ω 阶数：自动 => 反转
原点 67802.7849165451 浮点态原点。估计最低能级 = 67802.2187789372
B常数 1.09715336874161 浮点数 转动常数。
LambdaSS 0.424603205929654 浮点数 自旋-自旋耦合常数 (=1.5*ε)。
D 5.34314012526997E-6 浮点数四次离心畸变。
H -1.498131E-12 六次离心畸变】【。
<J,Λ=0,Ω=-1|B常数|J,Λ=0,Ω=-1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1)
<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1))
<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))

< =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 J,Λ,Ω B_J,Λ,Ω J*(J) J,Λ,Ω=0|
< =0 =0 =0> = 2
B|J,Λ,Ω -sqrt(*J*(J+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 J,Λ,Ω - LambdaSS J,Λ,Ω - / J,Λ,Ω =0| | 3 LambdaSSJ,Λ,Ω - / J,Λ,Ω
< =0 =0 =0> = 4 < =0 =0 =1> = 2
=1| | 3 LambdaSSJ,Λ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 J,Λ,Ω LambdaSSJ,Λ,Ω / J,Λ,Ω
< =0 =0 =1> = 4
=1| | 3 LambdaSSJ,Λ,Ω - / J,Λ,Ω=0|
< =0 =0 =0> = 2 3
LambdaSSJ,Λ,Ω /

<J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4 J,
< =0 =0 =1> = 2 +1 +1 2
Λ,Ω DJ,Λ,Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ,Ω=0|D|J,Λ,Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+3)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8
< =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2
J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|H|J,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 2*总角动量量子数*(总角动量量子数*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =4> A态 LSev 数
13 1135785220975
值 -。浮点微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-1|LS|J,Lambda=0,Omega=-1> = -1/sqrt(3) <J,Lambda=1,Omega=1|LS|J,Lambda=0,Omega=1> = -1/sqrt(3)

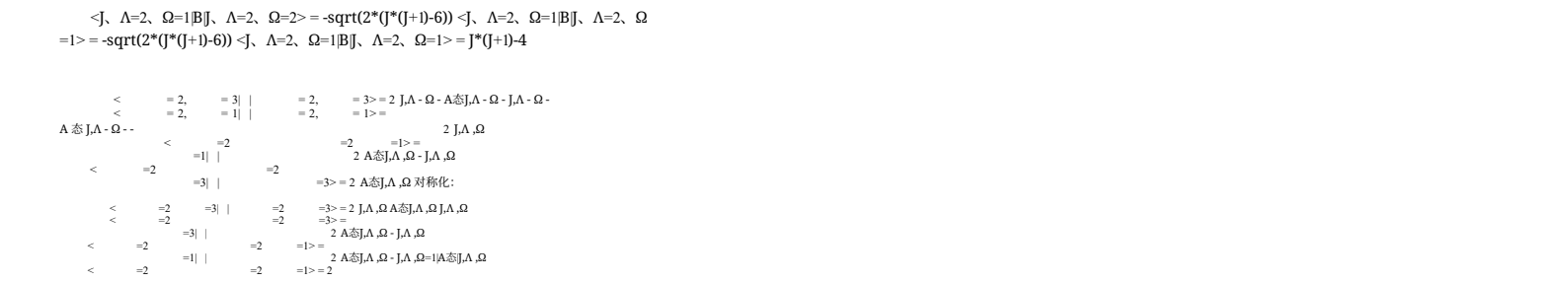
< =2| | =4> A态 LSev J,Lambda ,Omega=1|
< =1 =0
LS|J,Lambda ,Omega=1> = -1/sqrt(3) <J,Lambda=1,Omega=1|LS|J,Lambda=0,Omega
=1> = -1/sqrt(3) 的对称化矩阵元

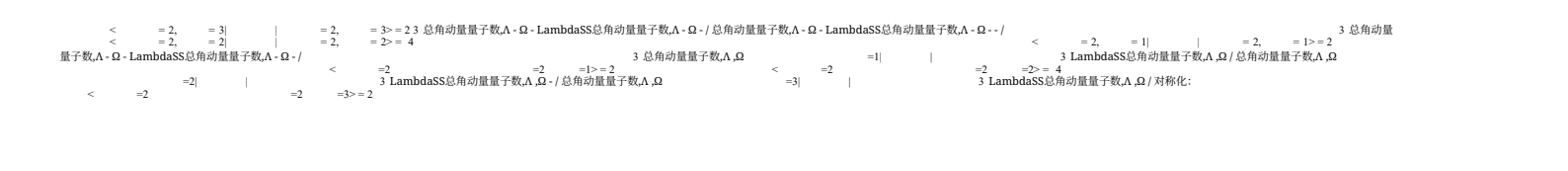
线性：激发态 dv=7状态：活跃 颜色：蓝色 S 1 Λ 双重态 Ω 阶数：自动 => 反转原点
67946 2486612564 = 67913 089899836 。浮点态原点。
1 07973878060191
估计最低能级。B。浮点转动常数。A -16.9899246280871 浮点自旋-轨道耦合常数。LambdaSS 1.23163175363889 浮点自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。伽马 -0.00290463321309688 浮点自旋-转动耦合常数。D 5.12786503880413E-6 浮点四次离心畸变。H -5.992526E-13 六次离心畸变。AD -9.172647E-5 A的离心畸变。
< = 2, = 3| | = 2, = 3> = +1 4 J,Lambda - Omega - BJ,Lambda - Omega -
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 2
J*(J)- J,Lambda - Omega - BJ,Lambda - Omega - -sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=-2,Omega=-2|B|J,Lambda=-2,Omega=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < = 2, = 2| | = 2, = 2> = +1 +2
< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 2
J,Lambda - Omega - BJ,Lambda - Omega - J*(J) J,Lambda - Omega - BJ,Lambda - Omega - -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=-2,Omega=-1|B|J,Lambda=-2,Omega=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< = 2, = 1| | = 2, = 1> = +1 +4 J,Lambda - Omega - BJ,Lambda - O
< =2 =2 =1> = +1
mega - J*(J) J,Lambda ,Omega =1| | +4 B J,Lambda ,
< =2 =2 =2> = 2
Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B|J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=2,Omega=2|B|J,Lambda=2,Omega=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =2 =2| | =2 =2> = +1 +2
< =2 =2 =3> = 2
J,Lambda ,Omega B J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=2|B|J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=2,Omega=3|B|J,Lambda=2,Omega=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))
< =2 =3| | =2 =3> = +1 4 J,Lambda ,Omega B J,Lambda ,Omega J*(J)-

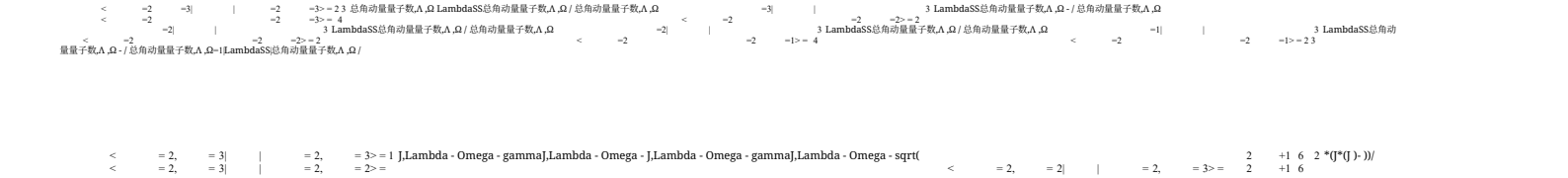
对称化：

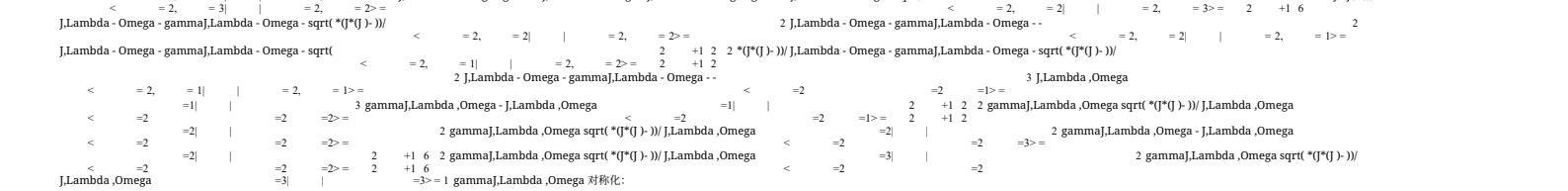
< =2 =3| | =2 =3> = +1 4 J、Λ、Ω B_J、Λ、Ω J*(J)- J、
< =2 =2 =3> = 2
Λ、Ω=3|B|J、Λ、Ω -sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J、Λ=2、Ω=3|B|J、Λ=2、Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))
< =2 =3| | =2 =2> = +1 +2 J、Λ、Ω B_J、Λ、Ω J*(J) J、Λ、
< =2 =2 =3> = 2
Ω=2|B|J、Λ、Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J、Λ=2、Ω=2|B|J、Λ=2、Ω=3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +1 +4 J、Λ、Ω B_J、Λ、Ω J*(J) J、Λ、
< =2 =2 =2> = +1
Ω =2| | +4 B_J、Λ、Ω J*(J) J、Λ、Ω=2|B|J、
< =2 =2 =1> = 2
Λ、Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J、Λ=2、Ω=2|B|J、Λ=2、Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J、Λ=2、Ω=1|B|J、Λ=2、Ω=2> = J*(J+1)+2

<J、Λ=2、Ω=1|B|J、Λ=2、Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J、Λ=2、Ω=1|B|J、Λ=2、Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J、Λ=2、Ω=1|B|J、Λ=2、Ω=1> = J*(J+1)-4

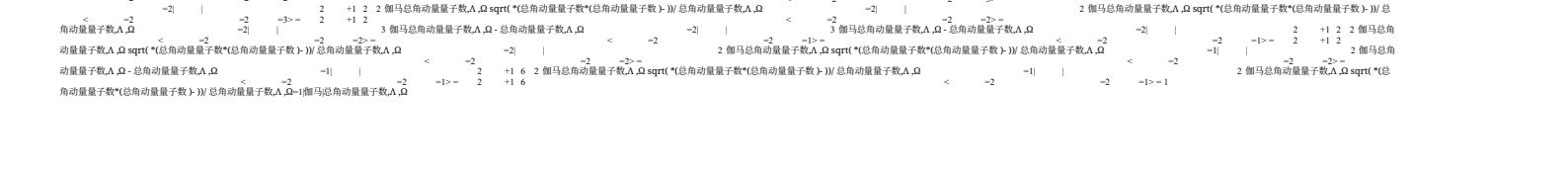


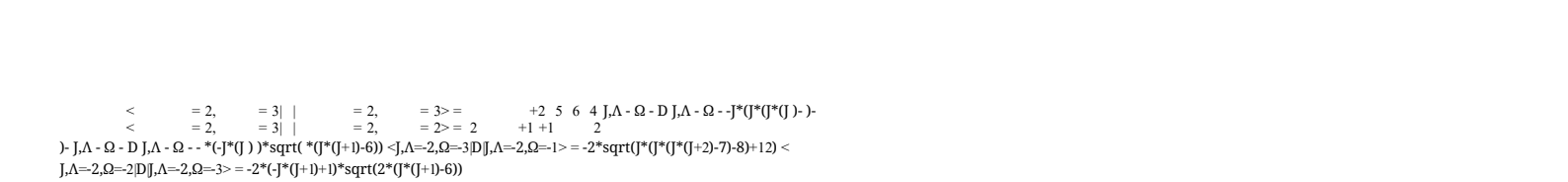


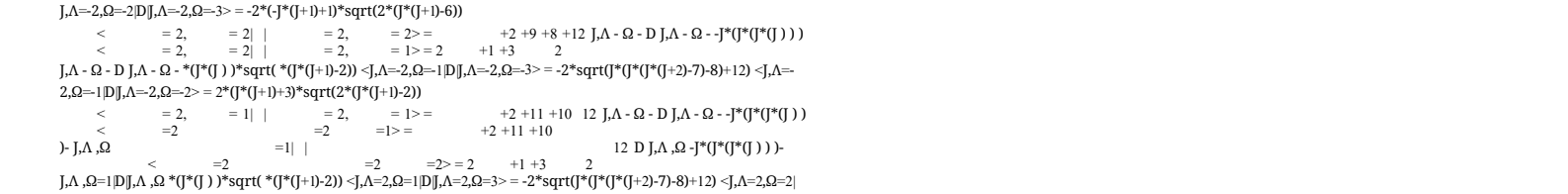


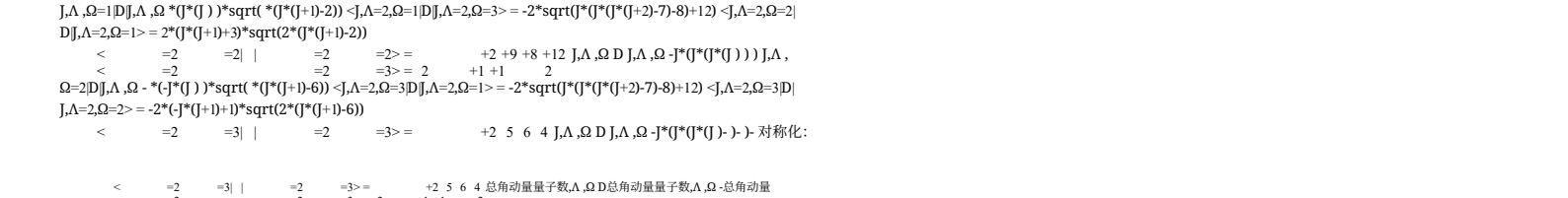


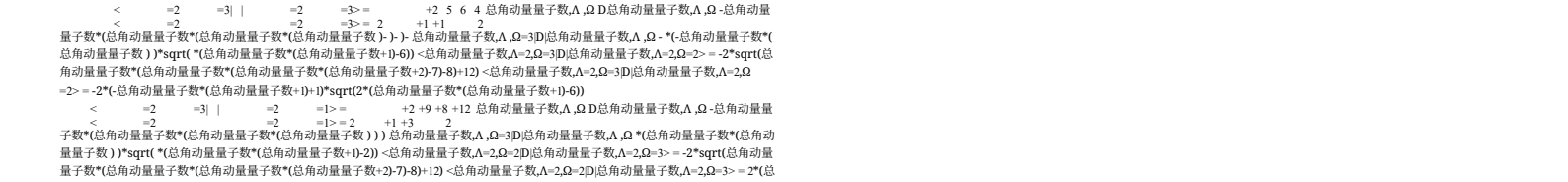


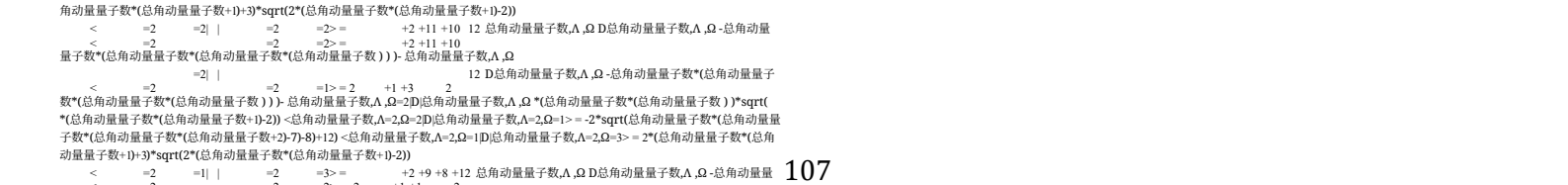












<总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)-5)-6)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J)-)-)-) J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - (J*(J*(- *J*(J)-)))*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=-2,Omega=-3|H|J,Lambda=-2,Omega=-1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-2|H|J,Lambda=-2,Omega=-3> = J*(J*(-3*J*(J+2)+1)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) < = 2, = 2| | = 2, = 2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,

< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 3 +2 23 20 2 +1

Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=-2,Omega=-1|H|J,Lambda=-2,Omega=-3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-1|H|J,Lambda=-2,Omega=-2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-25)-22)-12)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 2, = 1| | = 2, = 1> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J*(J)))))

< =2 =2 =1> = +3 +21 +37 +74 +56

J,Lambda ,Omega =1| | +24 HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=1|HJ,Lambda ,O

< =2 =2 =2> = 3 +2 25 22 12 2

mega (J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=2,Omega=1|HJ,Lambda=2,Omega=3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,Omega=2|HJ,Lambda=2,Omega=1> = J*(J*(-3*J*(J+2)-23)-20)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2))

< =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))-)-)- J,Lambda ,Omega=2|HJ,Lambda ,O

< =2 =2 =3> = 3 +2 +1 +4 2 +1

mega J*(J*(- *J*(J)))*sqrt(*(J*(J)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <J,Lambda=2,Omega=3|HJ,Lambda=2,Omega=1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,Omega=3|HJ,Lambda=2,Omega=2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda ,Omega

HJ,Lambda ,Omega J *(J*(J*(J*(J)-)-)-) 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数 *(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-)-)) 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|H|总

< =2 =2 =3> = 3 +2 1 +2 +4

角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)-)))*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)+4)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-7)-19)+18)+28)-24)) < =2 =3| | =2 =1> = +3 +21 +37 2 20 24 总角动量量子数,

< =2 =2 =1> = 3 +2 23 20 2 +1

Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数)))-)-) 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|H|总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)-))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-2))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-25)-22)-12)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) < =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,

< =2 =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56

Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))))) 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | +24 H总角动量量子数,Λ ,Ω 总

< =2 =2 =1> = 3 +2 25 22 12 2

角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)-)-))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-23)-20)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) < =2 =1| | =2 =3> = +3 +21 +37 2 20 24 总角动量量子数,Λ ,Ω H总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数

< =2 =2 =2> = 3 +2 +1 +4 2 +1

数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数))))-)-) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数*(- *总角动量量子数*(总角动量量子数)))*sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-6))-2*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2)*sqrt(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)-3)-11)-6)+8

<J, Λ=-2, Ω=-3|AD|J, Λ=-2, Ω=-3> = 2*(J*(J+1)-4) <J, Λ=-2, Ω=-3|AD|J, Λ=-2, Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=-2, Ω=-2|AD|J, Λ=-2, Ω=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=-2, Ω=-2|AD|J, Λ=-2, Ω=-1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=-2, Ω=-1|AD|J, Λ=-2, Ω=-2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=-2, Ω=-1|AD|J, Λ=-2, Ω=-1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J, Λ=2, Ω=1|AD|J, Λ=2, Ω=1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J, Λ=2, Ω=1|AD|J, Λ=2, Ω=2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=2, Ω=2|AD|J, Λ=2, Ω=1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J, Λ=2, Ω=2|AD|J, Λ=2, Ω=3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=2, Ω=3|AD|J, Λ=2, Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J, Λ=2, Ω=3| AD|J, Λ=2, Ω=3> = 2*(J*(J+1)-4) 对称化:

<总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4)

线性微扰：激发态 < =2| | =7> A态振动量子数 LS振动量子数 数值 - 。浮点数 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS|J,Λ=-2,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)

9 51850056737858

对称化矩阵元 < =2| | =7> A态振动量子数 LS振动量子数 J,Λ ,Ω=1|LS|J,Λ ,Ω=1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)

< =1 =2

线性：激发态 a'态振动量子数=12状态：活跃 颜色 红色 S 1 Λ Σ + Ω 阶数：自动 => 反转原点 67991 2956897487 = 67990 5318805452 。浮点态原点。估计最低能级 . B常数 . 浮点转动常数。LambdaSS -1.14571380522651 浮点自旋-自旋耦合常数 (=1.5*ε)。伽马 -0.00527072942354211 浮点自旋-转动耦合常数。D 5.18562812216526E-6 浮点四次离心畸变。H -2.996263E-13 六次离心畸变。<总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))

1 03759347733243

< =0 =0| | =0 =0> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B常数总
< =0 =0 =1> = 2
角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=0|B常数|总角动量量子数,
Λ ,Ω -sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,
Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量
量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) 对称化：

<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1)) <
J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))

< =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 J,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω
< =0 =0 =0> = 2
J*(J) J,Λ ,Ω=0|B|J,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 J,Λ ,Ω - ΛSS J,Λ ,
< =0 =0> = 4
Ω - / J,Λ ,Ω
=0| | 3 ΛSSJ,Λ ,Ω - /
< =0 =0 =1> = 2
J,Λ ,Ω
=1| | 3 ΛSSJ,Λ ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 J,Λ,Ω ΛSSJ,Λ,Ω / J,Λ,Ω
< =0 =1> = 4
=1| | 3 ΛSSJ,Λ,Ω - / J,Λ,Ω=0|ΛSSJ,Λ,Ω /
< =0 =0 =0> = 2 3

< =0 = 1| | =0 = 1> = 1 J,Λ,Ω - 伽马 J,Λ,Ω - - J,Λ,Ω - 1| | 2 +1 2 伽马 J,Λ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω
< =0 = =0 =0> = < =0 =0 = 1> = 2 +1
=0| | 2 伽马J,Λ,Ω - sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω =0| | 2 伽马J,Λ,Ω - J,Λ,Ω 2 +1 2 伽马J,
< =0 =0 =0> = < =0 =0 =1> = < =0 =0 =0> = 2 +1
Λ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω =1| | 2 伽马J,Λ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Λ,Ω =1| | 1 伽马J,Λ,Ω - 对称化：
< =0 =0 =1> =

< =0 =1| | =0 =1> = 1 J,Lambda ,Omega 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,
< =0 =0 =1> =
Omega
=1| | 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/
< =0 =0 =0> = 2 +1
J,Lambda ,Omega
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(
< =0 =0 =1> =
J(J))/ J,Lambda ,Omega
=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,
< =0 =0 =0> =
Omega=0|伽马J,Lambda ,Omega sqrt(2*J*(J+1))/2

<J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Lambda=0,
Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|D|
J,Lambda=0,Omega=1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*(J*(J+1)
+1)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4
< =0 =0 =1> = 2 +1 +1 2
J,Lambda ,Omega DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))- J,Lambda ,Omega=0|D|J,Lambda ,O
mega *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -2*J*(J+1) <
J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,
Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子
数+2)+3)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量
量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <
总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角
动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总
角动量量子数+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|
J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega
=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8
< =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2
J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|H|J,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-
)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|
J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega
=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数
(总角动量量子数+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数
*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 2*总角动量量
子数*(总角动量量子数*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总
角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动
量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =12> A态
5 90222571840932
振动量子数 LS耦合a'态振动量子数 数值 - . 浮点数 微扰大小。 <J,Λ=-1,Ω=-1|
LS耦合J,Λ=0,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

< =2| | =12> A态振动量子数 LS耦合a'态振动
< =1 =0
量子数 =1J,Λ ,Ω|LS耦合=1> = 1J,Λ ,Ω</sqrt(3) =1J,Λ=1¡Ω|LS耦合=0J,Λ=1> = ,Ω-1/sqrt(3)的
对称化矩阵元

线性：激发态 Dsv=3状态：活跃 颜色：橙色 Λ 双重态 Ω 阶数：自动 => 常规原点
68377 9123376615 = 68377 9123376615 。浮点态原点。
1 08921917955507
估计最低能级。B。浮点转动常数。D 5.85540454591073E-6 浮点四次离心畸变。H -2.247197E-13 六次离心畸
变。<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|B|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量
量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) 对称化：<总角动量量子数,
Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动
量量子数,Λ=2,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)

<J,Λ=-2,Ω=-2|D|J,Λ=-2,Ω=-2> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J^2*(J*(J
+2)+1) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -总角动量量子数^2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+1)

<J,Lambda=-2,Omega=-2|H|J,Lambda=-2,Omega=-2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Lambda=2,Omega=2|H|J,Lambda=2,Omega=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Lambda=2,Omega=2|H|J,Lambda=2,Omega=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Lambda=2,Omega=2|H|J,Lambda=2,Omega=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-Δv 数值。微扰大小。0 02597 <J,Lambda=-1,Omega=-1|J+L-J|,Lambda=-2,Omega=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-J|,Lambda=2,Omega=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-Δv J,Λ ,Ω=1|J L-J,Λ ,Ω < =1 + =2 =2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

线性：激发态 a3P振动带=13

状态：活跃

颜色：银色

S 1

Λ Π

Ω 阶数：自动 => 常规

原点 67670.6782977856 浮点态原点。估计最低能级 = 67632.5507030479

B常数 1.30813665955102 浮点转动常数。

A态 38.1154482644111 浮点自旋-轨道耦合常数。

LambdaSS -0.01821971 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。

o 0.6497647 为Ω = 0 态产生Λ倍增的自旋-自旋耦合常数。

伽马 0.003153713 自旋-转动耦合常数。

p 0.008831129 Λ倍增常数。

q 2.786443E-5 Λ倍增常数。

D 6.06110427245085E-6 浮点四次离心畸变。

AD -0.0001940953 A的离心畸变。

<J，Λ=-1，Ω=-2|B|J，Λ=-1，Ω=-2> = J*（J+1）-2

<J，Λ=-1，Ω=-2|B|J，Λ=-1，Ω=-1> = -sqrt(2*（J*（J+1）-2））

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|B常数|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2

对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J、Λ、Ω B J、Λ、Ω < =1 =1 =2> = 2 J*(J)- J、Λ、Ω=2|B|J、Λ、Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J、Λ=1、Ω=2|B|J、Λ=1、Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =1 =2| | =1 =1> = +1 +2 J、Λ、 < =1 =1 =2> = 2 Ω B J、Λ、Ω J*(J) J、Λ、Ω=1|B|J、Λ、Ω -sqrt(*J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=1|B|J、Λ=1、Ω=2> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =1 =1| | =1 =1> = +1 +2 J、Λ、Ω B < =1 =1 =1> = +1 J、Λ、Ω J*(J) J、Λ、Ω =1| | +2 B J、 < =1 =1 =0> = 2 Λ、Ω J*(J) J、Λ、Ω=1|B|J、Λ、Ω -sqrt(*J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=1|B|J、Λ=1、Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =1 =0| | =1 =1> = +1 +2 J、Λ、Ω B < =1 =1 =1> = 2 J、Λ、Ω J*(J) J、Λ、Ω=0|B|J、Λ、Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J、Λ=1、Ω=0|B|J、Λ=1、Ω=0> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J、Λ=1、Ω=0|B|J、Λ=1、Ω=0> = J*(J+1)-2

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 1 J,Lambda - Ω - A J,Lambda - Ω - J,Lambda - Ω A J,Lambda - Ω - < = 1, =0| | = 1, =0> = 1 J,Lambda ,Ω =0| | 1 A J,Lambda , Ω - J,Lambda ,Ω =2| | =2> = 1 < =1 =1 =0> = < =1 =1 A J,Lambda ,Ω 对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = 1 J,Lambda ,Ω A J,Lambda ,Ω < =1 =1 =2> = J,Lambda ,Ω =2| | 1 A J,Lambda ,Ω - < =1 =1 =0> = J,Lambda ,Ω =0| | 1 A J,Lambda ,Ω - < =1 =1 =0> = 1 J,Lambda ,Ω=0|AJ,Lambda ,Ω

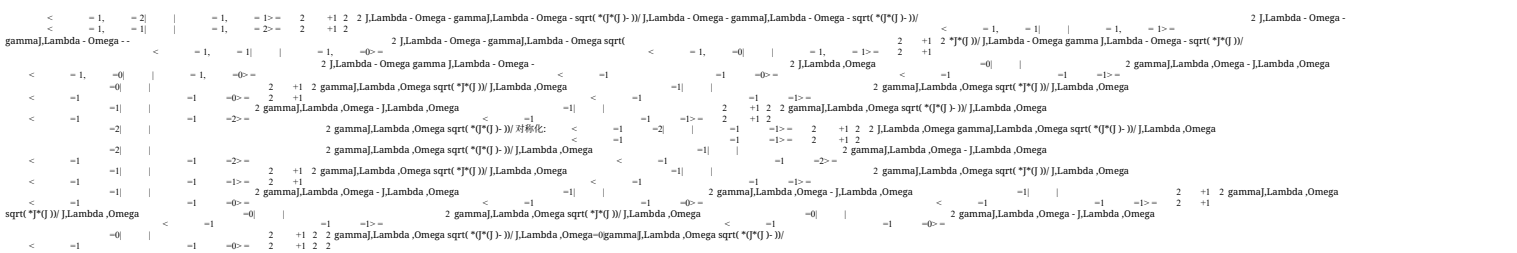
< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 2 3 J,Λ - Ω - LambdaSSJ,Λ - Ω - / J,Λ - Ω - LambdaSSJ,Λ - Ω - - / 3 J,Λ - Ω LambdaSS J,Λ - Ω / < = 1, = 1| | = 1, = 1> = 4 < = 1, =0| | = 1, =0> = 2 3 J,Λ ,Ω =0| | 3 LambdaSSJ,Λ ,Ω / J,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSSJ,Λ ,Ω - / J,Λ ,Ω < =1 =1 =0> = 2 < =1 =1 =1> = 4 < =1 =1 =2> = 2 =2| | 3 LambdaSSJ,Λ ,Ω / 对称化：

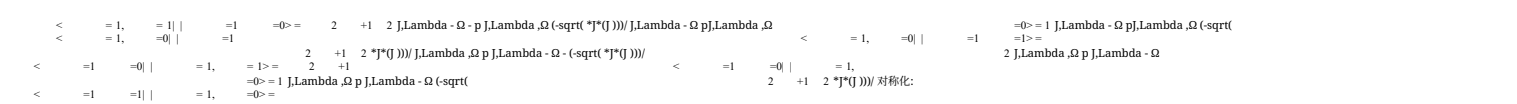
< =1 =2| | =1 =2> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | =1 =1> = 2 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω < =1 =1 =2> = 4 < =1 =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω=0LambdaSS|总角动量量子数,Λ ,Ω /

< = 1, =0| | =1 =0> = 1 J,Λ - Ω oJ,Λ , < =1 =0| | = 1, Ω J,Λ ,Ω o J,Λ - Ω =0> = 1

对称化： <J,Λ=1,Ω=0|oJ|,Λ=1,Ω=0> = 1

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|o|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = 1







<J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1))

< =1 =1| | =1 =1> = +2 +7 +6 4 J,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =1 =1 =1> = +2 +7 +6
J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω =1| | 4
< =1 =1 =0> = 2 +1 +2 2
DJ,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω=1|D|J,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=0> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2)

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = +1 2 J,Lambda - Ω - AD J,Lambda - Ω - J*(J)- J,Lambda - Ω - AD J,Lambda - Ω - (-sqrt(*(J*(J +1 2 2)-))/ J,Lambda - Ω - AD
< = 1, = 2| | = 1, = 1> = 2 +1 2
J,Lambda - Ω - (-sqrt(*(J*(J)-))/ 2 J,Lambda - Ω - AD J,Lambda - Ω sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda - Ω ADJ,Lambda - Ω -
< = 1, = 1| | = 1, =0> = 2 +1 < = 1, =0| | = 1, = 1> = 2 +1
sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda - Ω ADJ,Lambda - Ω -J*(J)- 2 J,Lambda ,Ω
< = 1, =0| | = 1, =0> = +1 < =1 =1 =0> = +1
=0| | 2 AD J,Lambda ,Ω -J*(J)- J,Lambda ,Ω =0| | +1 2 AD J,Lambda ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Ω
< =1 =1 =1> = 2 < =1 =1 =0> = 2 +1
=1| | 2 AD J,Lambda ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Ω =1| | 2 2 AD J,Lambda ,Ω (-sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Ω
< =1 =1 =2> = 2 +1 < =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 AD J,Lambda ,Ω (-sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Ω =2| | 2 AD J,Lambda ,Ω J*(J)- 对称化:
< =1 =1 =2> = +1

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Λ,Ω ADJ,Λ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ,Ω =2| | +1 2 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =2> = 2 < =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =2| | 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = 2 +1 < =1 =1 =2> = 2 +1
=1| | 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 ADJ,Λ,Ω -总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =2> = +1 < =1 =1 =0> = +1
=1| | 2 ADJ,Λ,Ω -总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | +1 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =0> = 2 < =1 =1 =1> = 2 +1
=0| | 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = 2 +1 < =1 =1 =0> = 2 +1 2
=0| | 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))/ 总角动量量子数,Λ,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数)-
< =1 =1 =0> = +1 2

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =3> a Pv
11 5278
LSIv 数值 - 。微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega=0> = -1/sqrt(3) <J,Lambda=1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega=0> = -1/sqrt(3)

< 3 =13| | =3> a Pv LSIv J,Lambda ,
< =1 =0 =0> =
Omega=0|LS|J,Lambda ,Omega -1/sqrt(3) 的对称化矩阵元

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a Pv
16 442
LSIv 数值 - 。微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega=0> = -1/sqrt(3) <J,Lambda=1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega=0> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a Pv LSIv
< =1 =0 =0> =
J,Lambda ,Omega=0|LS|J,Lambda ,Omega -1/sqrt(3)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a
24 7288685468983
Pv LSev 数值。浮点数微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-1|LS|J,Lambda=0, Omega=-1> = 1/sqrt(6) <J,Lambda=-1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega =0> = 1/sqrt(6) <J,Lambda=1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega=0> = -1/sqrt(6) <J,Lambda=1,Omega=1|LS|J,Lambda=0,Omega=1> = -1/sqrt(6)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a Pv LSev
< =1 =0 =1> = 1
J,Lambda ,Omega=1|LS|J,Lambda ,Omega /sqrt(6) <J,Lambda=1,Omega=1|LS|J, Lambda=0,Omega=1> = 1/sqrt(6) <J,Lambda=1,Omega=0|LS|J,Lambda=0,Omega=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|J+L-|振动量子数=4>
数值 -0.0598221863162786 浮点数 微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-2|J+L-| J,Lambda=0,Omega=-1> = -sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=-1,Omega=-1|J+L-|J,Lambda=0, Omega=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=-1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=-1> = sqrt(J*(J+1)) < J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=0,Omega=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=2|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =4> a Pv J L-ev
< =1 + =0 =1> =
J,Lambda ,Omega=2|J L-|J,Lambda ,Omega -sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1,Omega=2|J+ L-|J,Lambda=0,Omega=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|J+L-|J,Lambda=0, Omega=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=0|J+L-|J,Lambda=0,Omega=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =7> a Pv LS振
23 2188654276278
动量子数 Value . 浮点数 微扰大小。 <J,Lambda=-1,Omega=-2|LS|J,Lambda=-2,Omega=-2> = -1/sqrt(6) <J,Lambda=-1,Omega=1|LS|J,Lambda=-2,Omega=-1> = -1/sqrt(6) <J,Lambda=1,Omega=1|LS|J,Lambda=2,Omega=1> = -1/sqrt(6) < J,Lambda=1,Omega=2|LS|J,Lambda=2,Omega=2> = -1/sqrt(6)

a3P振动带<a3P振动带=13|LS|振动量子数=7>的对称化矩阵元

<J,Λ=1,Ω=2|LS耦合|J,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=2|LS耦合|J,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|总角动量量子数+L-振动量子数=7>

数值 -0.062795149954351 浮点数 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-2|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = sqrt(J*(J+1)-6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|总角动量量子数+L-|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-6)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =7> a P态 v 总角动量量子数 J L-dv 总角动量量子数 J,Lambda , Ω=2|J L-|J,Lambda , Ω sqrt(J*(J+1)-6) <J,Lambda=1, Ω=2|J+L-|J,Lambda=2, Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=1|J+L-|J,Lambda=2, Ω=2> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=1|J+L-|J,Lambda=2, Ω=2> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0|J+L-|J,Lambda=2, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=0|J+L-|J,Lambda=2, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =12> a Pv LSa'态振动量子数 数值。浮点数微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6)

2 39113881014602

对称化矩阵元 < 3 =13| | =12> a Pv LSa'态振动量子数 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ ,Ω - /sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =12> a态 P态 J态 L-a'态振动量子数 数值 - 。浮点数 微扰大小。<J，总角动量量子数Λ=-1，Ω=-2|J+L-|J，总角动量量子数Λ=0，Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J，总角动量量子数Λ=-1，Ω=-1|J+L-|J，总角动量量子数Λ=0，Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J，总角动量量子数Λ=-1，Ω=0|J+L-|J，总角动量量子数Λ=0，Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J，总角动量量子数Λ=1，Ω=0|J+L-|J，总角动量量子数Λ=0，Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J，总角动量量子数Λ=1，Ω=1|J+L-|J，总角动量量子数Λ=0，Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J，总角动量量子数Λ=1，Ω=2|J+L-|J，总角动量量子数Λ=0，Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

0 0112468031812311

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =12> a态 Pv J L-a'态振动量子数 J,Lambda , Omega=2|J L-|J,Lambda , Omega sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Omega=2|J+L-|J,Lambda=0, Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=1|J+L-|J,Lambda=0, Omega=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=0|J+L-|J,Lambda=0, Omega=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Omega=0|J+L-|J,Lambda=0, Omega=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =3> a态 Pv LSΔv 数值 - 。微扰大小。<J,Lambda=-1,Omega=-2|LS|J,Lambda=-2,Omega=-2> = 1/sqrt(3) <J,Lambda=1,Omega=2|LS|J,Lambda=2,Omega=2> = -1/sqrt(3)

22 8568

对称化矩阵元 < 3 =13| | =3> a态 P_v LSΔv J、Λ、Ω=2|LS|J、Λ、Ω /sqrt(3) <J、Λ=1、Ω=2|LS|J、Λ=2、Ω=2> = -1/sqrt(3)

跃迁矩: < | | > 激发态 μ X 球形跃迁矩：激发态 | | > < =2| 1 | =0> μ X A态振动量子数 T( ) X态振动量子数 秩 分量 自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =2| 1 | =0> A态振动量子数 T( ) X态振动量子数 总角动量量子数- Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数-))/ 总角动量量子数- Λ , Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数-))/ 总角动量量子数,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/sqrt(*(2*总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*(2*总角动量量子数+1))

< 1, = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +1 2 总角动量量子数,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/sqrt(*(2*总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*(2*总角动量量子数+1))

< +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +2 2 总角动量量子数 ,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数 ,Λ ,Ω

< +1 =1 1 =0 =0> = 2 +2 =1| | 2 T( )总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*(总角动量量子数))/ 线强度来自 A态振动量子数

< 1 =2| | =0> T( ) X态振动量子数 S 总角动量量子数- Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (总角动量量子数-)/ S 总角动量量子数- Λ ,Ω T( )总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数-)/ 2 S 总角动量量子数,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (*总角动量量子数)/ 2 S 总角动量量子数,Λ ,Ω

< 1, = 1, = 1| 1 | < 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 1 < =1 1 =0 =0> = 2 1 =1| | 2 T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/- S 总角动量量子数 ,Λ - Ω - T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (总角动量量子数)/ < +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = +2 2 S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω =1| | 2 T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω (< +1 =1 1 =0 =0> = +2 < 1 总角动量量子数)/ 对称化约化矩阵元来自 A态振动量子数 =2| | =0> T( ) X态振动量子数 总角动量量子数- Λ ,Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(总角动量量子数-1) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1 - |T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = (-2*总角动量量子数-1)/sqrt(2*总角动量量子数+1) <总角动量量子数+1,Λ=1,Ω=1 + |T(1)|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = sqrt(总角动量量子数+2) 对称化线强度来自 < =2| 1 | =0> A态振动量子数 T( )X态振动量子数 S 总角动量量子数- Λ ,Ω T( )总角动量量子数,Λ ,Ω < 1, =1 =1 + | 1 | =0 =0> = 1 总角动量量子数- S 总角动量量子数,Λ ,Ω - | | 1 1 < =1 =1 1 =0 =0> = 2 < +1 =1 =1 + | 1 | =0 =0> = +2 T( )总角动量量子数,Λ ,Ω (- *总角动量量子数-)/- S 总角动量量子数 ,Λ ,Ω T( ) 总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数

禁戒跃迁矩: < | | > < 3 =13| 1,1 | =0> 激发态μ X态 a态 P_v fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与该数值的平方成正比。

1

禁戒跃迁矩: 激发态 μ X态 dv fΓ( )Xv 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 dv fΓ( )Xv J- Λ - Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fΓ( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/ J,Λ - Ω - fΓ( )J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=2,Ω=1|fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) <J+1,Λ=2,Ω=1 + |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 dv fΓ( )Xv 的对称化约化矩阵元 J- Λ ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=2,Ω=1 + |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=2,Ω=1 - |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 对称化线强度 S J- Λ ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω J- S J,Λ ,Ω fΓ( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- S J ,Λ ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω J

禁戒跃迁矩: 激发态 μ X态 a'态振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——注：相对强度与该数值的平方成正比。 a'态振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数 J- Λ,Ω 的约化矩阵元 - fΓ( )J,Λ,Ω (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J-))/ J,Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) <J+1,Λ=0,Ω=1 - |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 a'态振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数的对称化约化矩阵元 J- Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=0,Ω=1 + |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=1 - |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 a'态振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数的对称化线强度 S J- Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω J- S J,Λ ,Ω fΓ( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- S J,Λ ,Ω fΓ( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/- S J ,Λ ,Ω - fΓ( ) J,Λ ,Ω (J)/ S J ,Λ ,Ω fΓ( ) J,Λ ,Ω (J)/

禁戒跃迁矩: 激发态 μ X态 振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 振动量子数 fΓ( ) X态振动量子数 J- Λ,Ω - fΓ( )J,Λ,Ω (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ,Ω fΓ( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J-))/ J,Λ,Ω - fΓ( ) J,Λ,Ω (*J)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) <J+1,Λ=0,Ω=1 - |fΓ(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 振动量子数 fΓ( )X态振动量子数 sqrt(*(J))/ 2 线强度（来自 振动量子数 fΓ( )X态振动量子数）

S < 1, =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 1 2 J- Λ,Ω - fT( ) J,Λ,Ω (J-)/ S J- Λ,Ω fT( )J,Λ,Ω (J-)/
< 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 1
2 S J,Λ,Ω - fT( )J,Λ,Ω (*J)/
< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1
2 S J,Λ,Ω fT( ) J,Λ,Ω (- *J-)/-
< =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J ,Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω (J)/
< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Lambda ,Omega (J)/
< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 对称化约化矩阵元（来自 振动量子数 fT( ) X态振动量
< =4| 1,1 |
子数） =0> J- Λ,Ω fT( ) J,Λ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=0,Ω=1 - |fT(1,1)|J,Λ
< 1, =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> =
=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 对称化线强度（来自
< =4| 1,1 | =0> 振动量子数 fT( )X态振动量子数）S J- Λ,Ω fT( ) J,Λ,Ω
< 1, =0 =1 + | 1,1 | =0
=0> = 1 J- S J,Λ,Ω - fT( )J,Λ,Ω (- *J-
< =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = 2
1 1)/- S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω J
< +1 =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩： < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态μ X态 Iv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁
1
（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。禁戒跃迁矩： < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发
1
态μ X态 Dsv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。跃迁矩：<B常数|μ|X态>

球形跃迁矩：<B常数|μ|X态> <B常数v=0|T(1)|X态振动量子数=0>
秩1分量自动 => 0 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。

< =0| 1 | =0> B常数v T( ) X态振动量子数 J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω=0> = -sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1)
< 1, =0 =0| 1 | =0
线强度，来自 < =0| 1 | =0> B 常数 v T( )X 态振动量子数 S J- Λ ,Ω T( )J,Λ=0,Ω=0> = J S
< 1, =0 =0| 1 |
< +1 =0 =0| 1 | =0 =0> = +1 J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J 对称化约化矩阵元：B常数v
< 1
=0| | =0> T( ) X态振动量子数 J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω -sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1)
< 1, =0 =0| 1 | =0 =0> =
对称化线强度，来自 < =0| 1 | =0> B常数v T( )X态振动量子数 S J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω=0> = J S<J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,
< 1, =0 =0| 1 | =0
Ω=0> = J+1跃迁矩： < | | > B常数 μ 激发态 球形跃迁矩：B常数
<
| | > < =0| 1 | =2> μ 激发态 B常数v T( ) A态振动量子数 秩 分量自动 => 1 强度1 跃迁
1
（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =0| 1 | =2> B常数v T( ) A态振动量子数 J- Λ ,Ω T( )
< 1, =0 =0| 1 | = 1,
J,Λ - Ω = 1> = 2 +1 2 - sqrt(*(J))/ J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/
< 1, =0 =0| 1 | =1 =1> = 2 +1
2 J,Λ ,Ω T( )J,Λ - Ω - (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/
< =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 1 2
sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 2 J ,Λ ,Ω T( )J,Λ - Ω - sqrt(*J))/ J ,Λ ,Ω
< +1 =0 1 =1 =1> = 2
=0| | 2 T( )J,Λ ,Ω sqrt(*J))/ 线强度，来自 B常数v =0| | =2>
< 1 < 1, =0 =0| 1 |
T( )A态振动量子数 S J- Λ ,Ω T( ) J,Λ = 1, = 1> = +1 2 - Ω - (J)/ S J- Λ ,Ω T( )J,Λ ,Ω (J)/
< 1, =0 =0| 1 | =1 =1> = +1
2 S J,Λ ,Ω T( ) J,Λ - Ω - (- *J-)/-
< =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 1
2 S J,Λ ,Ω =0| | 2 T( ) J,Λ ,
< =0 1 =1 =1> = 2 +1 < +1 =0 =0| 1 | = 1, = 1> =
Ω (*J)/ S J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ - Ω - J/ 2 S J ,Λ ,Ω
< +1 =0 1 =1 =1> =
=0| | 2 T( ) J,Λ ,Ω J/ 对称化约化矩阵元：B常数v
< 1
=0| | =2> T( ) A态振动量子数 J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω sqrt(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)| - J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/
< 1, =0 =0| 1 | + =1 =1> =
sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)| + J,Λ=1,Ω=1> = sqrt(J) 对称化线强度，来自 < =0| 1 | =2> B常数v T( )A态振动量子
< 1, =0 =0| 1 | + =1
数 S J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω =1> = +1 J S J,Λ ,Ω T( ) - J,Λ ,Ω *J
< =0 =0| 1 | =1 =1> = 2
+1 S J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J 跃迁矩： < | | > 碳 μ X态 球形跃迁矩：碳
< +1 =0 =0| 1 | + =1 =1> = <
| | > < =0| 1 | =0> μ X态 碳振动量子数 T( ) X态振动量子数 秩 分量自动 => 0 强度1 跃迁
1
（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。矩阵元同 < | | > < =0| 1 | =0> B常数 μ X态 B常数v T( )
<
X态振动量子数跃迁矩：碳 | | > μ 激发态 球形跃迁矩：碳
<
| | > < =0| 1 | =2> μ 激发态 碳振动量子数 T( ) A态振动量子数 秩 分量自动 => 1 强度
1
1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。矩阵元同<B常数μ|激发态> <B常数v=0|T(1)|A态振动量子数=2>

Si模拟：模拟
I强度因子：0.333333333333333（来自 Spol 的 1）
I强度单位 任意
L寿命模型 lmNone
P绘图单位 cm^{-1}
F荧光 否
nDF 50000
WidthMult 6
AutoMin 真

自动最大值 True
显示总和 False
显示分量 True
显示Fortrat图 True
使用上态 False
显示对称性 False
显示ΔJ True
缩放刻度标记大小 True
使用对称性 False
使用态编号 False
Fortrat量子数 总角动量量子数
Pr_{eserve} Area False
分离刻度 False
对数刻度 False
显示二维图 False
自动二维Y轴 True
最小频率 19713.4264274956 绘图范围左边界。
最大频率 19725.7352925044 绘图范围右边界。
Y轴最大值 7.90431110974814E-183 绘图范围顶部；若设置了自动最大值，则会自动更新。
温度 300 转动温度（开尔文）。
高斯 0.08 高斯线型对线宽的贡献（半峰全宽）。如果同时设置此项和洛伦兹线宽（如下），结果将是两者的卷积，即 Voigt 线型。
洛伦兹 0.02 洛伦兹线型对线宽的贡献（半峰全宽）。此项和高斯宽度也可以在主窗口中设置。
谱边余量 -1 在所需光谱两端各额外计算的点数。
O阈值 0.0001 忽略小于最大峰强度此比例的峰。
振动温度 -1 振动温度（开尔文）；设为 -1（默认值）时，所有玻尔兹曼因子均使用转动温度。
最小强度 1E-15 Fortrat图中要绘制的最弱跃迁强度，占最强跃迁强度的比例。
自旋温度 -1 自旋温度；设为 -1（默认值）时，不同自旋态达到热平衡
强度缩放因子 1 应用于所有谱线强度的缩放因子
绘图分割 0.5 绘图分离时用于模拟的绘图区域比例（-1..1）
CODATA 2018 基本常数：h=6.62607015E-34 k=l.380649E-23 NA=6.02214076E23 e=l.602176634E-19 me=9.1093837015E-31

13C18O 拟合前的残差

观测值 计算值 观测值与计算值之差 标准不确定度


```
 J'S "#  J'S "# O   0  1    1  1  19356 9364  19356 9290   0 0074  010400 0 0000   1   =0  0  0  1    =2  1  1  1   1 <
 1  1    2  1  19354 8102  19354 8018   0 0084  008800 0 0000   2   =0  1  1  1    =2  2  2  1   2 <
Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表                                                                  > B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
                                                                                                                > B e 激发态 e . . - . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
```

2	1	3	1	19353 3740	19353 3800	0 0060 008200 0 0000	3	=0 2 2 1	=2 3 3 1	3 <	> B e 激发态 e . . - . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
3	1	4	1	19352 6739	19352 6608	0 0131 005000 0 0000	4	=0 3 3 1	=2 4 4 1	4 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
4	1	5	1	19352 6421	19352 6473	0 0052 004600 0 0000	5	=0 4 4 1	=2 5 5 1	5 <	> B e 激发态 e . . - . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
5	1	6	1	19353 3482	19353 3409	0 0073 004800 0 0000	6	=0 5 5 1	=2 6 6 1	6 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
6	1	7	1	19354 7444	19354 7406	0 0038 004700 0 0000	7	=0 6 6 1	=2 7 7 1	7 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
7	1	8	1	19356 8501	19356 8475	0 0026 004500 0 0000	8	=0 7 7 1	=2 8 8 1	8 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
8	1	9	1	19359 6624	19359 6614	0 0010 004200 0 0000	9	=0 8 8 1	=2 9 9 1	9 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
9	1	10	1	19363 1843	19363 1832	0 0011 004100 0 0000	10	=0 9 9 1	=2 10 10 1	10 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
10	1	11	1	19367 4148	19367 4132	0 0016 004400 0 0000	11	=0 10 10 1	=2 11 11 1	11 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
11	1	12	1	19372 3592	19372 3522	0 0070 004300 0 0000	12	=0 11 11 1	=2 12 12 1	12 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
12	1	13	1	19378 0054	19378 0039	0 0015 004300 0 0000	13	=0 12 12 1	=2 13 13 1	13 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
13	1	14	1	19384 3636	19384 3633	0 0003 004300 0 0000	14	=0 13 13 1	=2 14 14 1	14 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
14	1	15	1	19391 4392	19391 4370	0 0022 004400 0 0000	15	=0 14 14 1	=2 15 15 1	15 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
15	1	16	1	19399 2271	19399 2267	0 0004 004300 0 0000	16	=0 15 15 1	=2 16 16 1	16 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
16	1	17	1	19407 7396	19407 7355	0 0041 004300 0 0000	17	=0 16 16 1	=2 17 17 1	17 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
17	1	18	1	19416 9437	19416 9351	0 0086 004400 0 0000	18	=0 17 17 1	=2 18 18 1	18 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
18	1	19	1	19426 9802	19426 9826	0 0024 004400 0 0000	19	=0 18 18 1	=2 19 19 1	19 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
19	1	20	1	19438 2394	19438 2542	0 0148 004200 0 0000	20	=0 19 19 1	=2 20 20 1	20 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
20	1	21	2	19448 7305	19448 7257	0 0048 004400 0 0000	21	=0 20 20 1	=2 21 21 1	21 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
21	1	22	2	19461 0398	19461 0346	0 0052 004200 0 0000	22	=0 21 21 1	=2 22 22 1	22 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
22	1	23	2	19474 2101	19474 2072	0 0029 004200 0 0000	23	=0 22 22 1	=2 23 23 1	23 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
23	1	24	2	19489 1916	19489 1960	0 0044 004300 0 0000	24	=0 23 23 1	=2 24 24 1	24 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
24	1	25	3	19498 9255	19498 9162	0 0093 004900 0 0000	25	=0 24 24 1	=2 25 25 1	25 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
25	1	26	3	19515 0461	19515 0358	0 0103 004200 0 0000	26	=0 25 25 1	=2 26 26 1	26 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
26	1	27	3	19531 0940	19531 0825	0 0115 004300 0 0000	27	=0 26 26 1	=2 27 27 1	27 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
27	1	28	3	19547 7725	19547 7635	0 0090 004900 0 0000	28	=0 27 27 1	=2 28 28 1	28 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
28	1	29	3	19565 4193	19565 4040	0 0153 004400 0 0000	29	=0 28 28 1	=2 29 29 1	29 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
29	1	30	4	19581 8845	19581 9027	0 0182 007200 0 0000	30	=0 29 29 1	=2 30 30 1	30 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
30	1	31	5	19599 2533	19599 2703	0 0170 004700 0 0000	31	=0 30 30 1	=2 31 31 1	31 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
31	1	32	5	19620 5380	19620 5020	0 0360 005100 0 0000	32	=0 31 31 1	=2 32 32 1	32 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
32	1	33	6	19640 7943	19640 7886	0 0057 007100 0 0000	33	=0 32 32 1	=2 33 33 1	33 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
33	1	34	8	19657 8684	19657 8671	0 0013 007600 0 0000	34	=0 33 33 1	=2 34 34 1	34 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
34	1	35	8	19680 4164	19680 4402	0 0238 005100 0 0000	35	=0 34 34 1	=2 35 35 1	35 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
35	1	36	8	19703 0470	19703 0767	0 0297 005600 0 0000	36	=0 35 35 1	=2 36 36 1	36 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
36	1	37	8	19727 8522	19727 8463	0 0059 007300 0 0000	37	=0 36 36 1	=2 37 37 1	37 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
37	1	38	9	19748 2986	19748 2785	0 0201 006100 0 0000	38	=0 37 37 1	=2 38 38 1	38 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
38	1	39	9	19772 9425	19772 9449	0 0024 006600 0 0000	39	=0 38 38 1	=2 39 39 1	39 <	> B e 激发态 e . - . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
39	1	40	9	19798 0262	19798 0520	0 0258 006700 0 0000	40	=0 39 39 1	=2 40 40 1	40 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
40	1	41	9	19823 7713	19823 7639	0 0074 008200 0 0000	41	=0 40 40 1	=2 41 41 1	41 <	> B e 激发态 e . . . . . : pP( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F e : : 谱线表
41	1	42	9	19850 2203	19850 2169	0 0034 015900 0 0000	42	=0 41 41 1	=2 42 42 1	42 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
1	1	1	1	19360 4765	19360 4712	0 0053 006900 0 0000	1	=0 1 1 1	=2 1 1 1	51 <	> B e 激发态 f . - . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
2	1	2	1	19361 8747	19361 8845	0 0098 004300 0 0000	2	=0 2 2 1	=2 2 2 1	52 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
3	1	3	1	19364 0018	19364 0008	0 0010 004200 0 0000	3	=0 3 3 1	=2 3 3 1	53 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
4	1	4	1	19366 8254	19366 8236	0 0018 004200 0 0000	4	=0 4 4 1	=2 4 4 1	54 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
5	1	5	1	19370 3568	19370 3558	0 0010 004100 0 0000	5	=0 5 5 1	=2 5 5 1	55 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
6	1	6	1	19374 6037	19374 6027	0 0010 004100 0 0000	6	=0 6 6 1	=2 6 6 1	56 <	> B e 激发态 f . - . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
7	1	7	1	19379 6160	19379 6167	0 0007 004100 0 0000	7	=0 7 7 1	=2 7 7 1	57 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
8	1	8	2	19385 0128	19385 0115	0 0013 004100 0 0000	8	=0 8 8 1	=2 8 8 1	58 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
9	1	9	2	19391 4421	19391 4420	0 0001 004200 0 0000	9	=0 9 9 1	=2 9 9 1	59 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
10	1	10	2	19398 5151	19398 5131	0 0020 004100 0 0000	10	=0 10 10 1	=2 10 10 1	60 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
11	1	11	2	19406 2832	19406 2809	0 0023 004100 0 0000	11	=0 11 11 1	=2 11 11 1	61 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
12	1	12	2	19414 7569	19414 7552	0 0017 004100 0 0000	12	=0 12 12 1	=2 12 12 1	62 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
13	1	13	2	19423 9331	19423 9321	0 0010 004100 0 0000	13	=0 13 13 1	=2 13 13 1	63 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
14	1	14	2	19433 8190	19433 8180	0 0010 004100 0 0000	14	=0 14 14 1	=2 14 14 1	64 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表
15	1	15	2	19444 4144	19444 4131	0 0013 004100 0 0000	15	=0 15 15 1	=2 15 15 1	65 <	> B e 激发态 f . . . . . : qQ( ) : B Bv F e - 激发态 A态振动量子数 F f : : 谱线表

B 16 e 1 激发态 16 f 2 19455.7195 19455.7174 0.0021 .004100 0.0000 : qQ(16) : B B振动量子数=0 16 16 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1f : 66:<谱线表>
B 17 e 1 激发态 17 f 2 19467.6954 19467.6939 0.0015 .004100 0.0000 : qQ(17) : B B振动量子数=0 17 17 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1f : 67:<谱线表>
B 18 e 1 激发态 18 f 2 19480.4670 19480.4655 0.0015 .004100 0.0000 : qQ(18) : B B振动量子数=0 18 18 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1f : 68:<谱线表>
B 19 e 1 激发态 19 f 2 19493.9260 19493.9248 0.0012 .004100 0.0000: qQ(19): B B常数v=0 19 19 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1f: 69:<谱线表>
B 20 e 1 激发态 20 f 2 19508.1115 19508.1144 -0.0029 .004100 0.0000: qQ(20): B B常数v=0 20 20 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1f: 70:<谱线表>
B 21 e 1 激发态 21 f 3 19522.8673 19522.8893 -0.0220 .004200 0.0000: qQ(21): B B常数v=0 21 21 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1f: 71:<谱线表>
B 22 e 1 激发态 22 f 3 19538.5774 19538.5766 0.0008 .004100 0.0000 : qQ(22) : B B振动量子数=0 22 22 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1f : 72:<谱线表>
B 23 e 1 激发态 23 f 3 19554.9752 19554.9734 0.0018 .004100 0.0000 : qQ(23) : B B振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1f : 73:<谱线表>
B 24 e 1 激发态 24 f 3 19572.1678 19572.1651 0.0027 .004100 0.0000 : qQ(24) : B B振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1f : 74:<谱线表>
B 25 e 1 激发态 25 f 3 19590.2714 19590.2678 0.0036 .004100 0.0000 : qQ(25) : B B常数振动量子数=0 25 25 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1f : 75:<谱线表>
B 26 e 1 激发态 26 f 3 19609.6974 19609.6939 0.0035 .004300 0.0000 : qQ(26) : B B常数振动量子数=0 26 26 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1f : 76:<谱线表>
B 27 e 1 激发态 27 f 3 19632.5452 19632.5425 0.0027 .004200 0.0000 : qQ(27) : B B常数振动量子数=0 27 27 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1f : 77:<谱线表>
B 28 e 1 激发态 28 f 4 19643.0506 19643.0511 -0.0005 .004200 0.0000 : qQ(28) : B B振动量子数=0 28 28 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1f : 78:<谱线表>
B 29 e 1 激发态 29 f 4 19665.1158 19665.1185 -0.0027 .004200 0.0000 : qQ(29) : B B振动量子数=0 29 29 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1f : 79:<谱线表>
B 30 e 1 激发态 30 f 5 19686.7378 19686.7570 -0.0192 .004200 0.0000 : qQ(30) : B B振动量子数=0 30 30 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1f : 80:<谱线表>
B 31 e 1 激发态 31 f 6 19708.1635 19708.1585 0.0050 .004200 0.0000 : qQ(31)支 : B B振动量子数=0 31 31 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1f : 81:<谱线表>
B 32 e 1 激发态 32 f 7 19731.6545 19731.6650 -0.0105 .004300 0.0000 : qQ(32)支 : B B振动量子数=0 32 32 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1f : 82:<谱线表>
B 33 e 1 激发态 33 f 7 19755.9326 19755.9068 0.0258 .004300 0.0000 : qQ(33)支 : B B振动量子数=0 33 33 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1f : 83:<谱线表>
B 34 e 1 激发态 34 f 8 19778.1407 19778.1402 0.0005 .004400 0.0000 : qQ(34) : B B振动量子数=0 34 34 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1f : 84:<谱线表>
B 35 e 1 激发态 35 f 8 19803.8946 19803.9036 -0.0090 .004500 0.0000 : qQ(35) : B B振动量子数=0 35 35 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1f : 85:<谱线表>
B 36 e 1 激发态 36 f 8 19830.5464 19830.5398 0.0066 .004700 0.0000 : qQ(36) : B B振动量子数=0 36 36 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1f : 86:<谱线表>
B 37 e 1 激发态 37 f 9 19857.5698 19857.5834 -0.0136 .007600 0.0000 : qQ(37) : B Bv=0 37 37 F1e - 激发态 Av=2 37 37 F1f : 87:<谱线表>
B 38 e 1 激发态 38 f 10 19881.5635 19881.5380 0.0255 .004900 0.0000 : qQ(38) : B Bv=0 38 38 F1e - 激发态 Av=2 38 38 F1f : 88:<谱线表>
B 39 e 1 激发态 39 f 10 19909.6670 19909.6770 -0.0100 .007500 0.0000 : qQ(39) : B Bv=0 39 39 F1e - 激发态 Av=2 39 39 F1f : 89:<谱线表>
B 40 e态 1 激发态 40 f 10 19938.2037 19938.1835 0.0202 .005800 0.0000 : qQ支(40) : B Bv=0 40 40 F1e - 激发态 Av=2 40 40 F1f : 90:<谱线表>
B常数 41 e态 1 激发态 41 f态 10 19967.3972 19967.3783 0.0189 .029500 0.0000 : qQ支(41) : B常数 B常数v=0 41 41 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 41 41 F1f : 91:<谱线表>
B常数 42 e态 1 激发态 42 f态 10 19997.2535 19997.2241 0.0294 .026200 0.0000 : qQ支(42) : B常数 B常数振动量子数=0 42 42 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 42 42 F1f : 92:<谱线表>
B 43 e 1 激发态 43 f 10 20027.8299 20027.8017 0.0282 .033900 0.0000 : qQ支(43) : B B常数v=0 43 43 F1e - 激发态 A态振动量子数v=2 43 43 F1f : 93:<谱线表>
B 44 e 1 激发态 44 f 10 20059.0969 20059.0957 0.0012 .039200 0.0000 : qQ支(44) : B B常数v=0 44 44 F1e - 激发态 A态振动量子数v=2 44 44 F1f : 94:<谱线表>
B 45 e 1 激发态 45 f 10 20091.1567 20091.0867 0.0700 .040800 0.0000 : qQ支(45) : B B常数v=0 45 45 F1e - 激发态 A态振动量子数v=2 45 45 F1f : 95:<谱线表>
B 2 e 1 激发态 1 e 1 19367.5524 19367.5519 0.0005 .018800 0.0000 : rR(1) : B B振动量子数=0 2 2 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e : 101:<谱线表>
B 3 e 1 激发态 2 e 1 19372.5035 19372.5004 0.0031 .011000 0.0000 : rR(2) : B B振动量子数=0 3 3 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e : 102:<谱线表>
B 4 e 1 激发态 3 e 1 19378.1584 19378.1533 0.0051 .006900 0.0000 : rR(3) : B B振动量子数=0 4 4 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e : 103:<谱线表>
B 5 e 1 激发态 4 e 1 19384.5121 19384.5118 0.0003 .006000 0.0000 : rR(4) : B B振动量子数=0 5 5 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e : 104:<谱线表>
B 6 e 1 激发态 5 e 1 19391.5775 19391.5747 0.0028 .005300 0.0000 : rR(5) : B B振动量子数=0 6 6 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e : 105:<谱线表>
B 7 e 1 激发态 6 e 1 19399.3426 19399.3424 0.0002 .005100 0.0000 : rR(6) : B B振动量子数=0 7 7 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e : 106:<谱线表>
B 8 e 1 激发态 7 e 1 19407.8211 19407.8148 0.0063 .004900 0.0000 : rR(7) : B B常数振动量子数=0 8 8 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e : 107:<谱线表>
B 9 e 1 激发态 8 e 1 19417.0053 19416.9918 0.0135 .005100 0.0000 : rR(8) : B B常数振动量子数=0 9 9 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e : 108:<谱线表>
B 10 e 1 激发态 9 e 1 19426.8748 19426.8738 0.0010 .004600 0.0000 : rR(9) : B B常数振动量子数=0 10 10 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e : 109:<谱线表>
B 11 e 1 激发态 10 e 1 19437.4625 19437.4609 0.0016 .004500 0.0000 : rR(10) : B B常数振动量子数=0 11 11 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e : 110:<谱线表>
B 12 e 1 激发态 11 e 1 19448.7620 19448.7561 0.0059 .004400 0.0000 : rR(11) : B B常数振动量子数=0 12 12 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e : 111:<谱线表>
B 13 e 1 激发态 12 e 1 19460.7552 19460.7538 0.0014 .004200 0.0000 : rR(12) : B B常数振动量子数=0 13 13 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e : 112:<谱线表>
B态 14 e态 1 激发态 13 e态 1 19473.4610 19473.4595 0.0015 .004200 0.0000 : rR(13) : B态 B态振动量子数=0 14 14 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e : 113:<谱线表>
B态 15 e态 1 激发态 14 e态 1 19486.8753 19486.8733 0.0020 .004200 0.0000 : rR(14) : B态 B态振动量子数=0 15 15 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e : 114:<谱线表>
B态 16 e态 1 激发态 15 e态 1 19500.9974 19500.9950 0.0024 .004200 0.0000 : rR(15) : B态 B态振动量子数=0 16 16 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e : 115:<谱线表>
B 17 e 1 激发态 16 e 1 19515.7901 19515.7886 0.0015 .004200 0.0000: rR(16)支: B B振动量子数=0 17 17 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e: 116:<谱线表>
B 18 e 1 激发态 17 e 1 19531.3806 19531.3784 0.0022 .004200 0.0000: rR(17): B B振动量子数=0 18 18 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e: 117:<谱线表>
B 19 e 1 激发态 18 e 1 19547.6628 19547.6624 0.0004 .004500 0.0000: rR(18)支: B B振动量子数=0 19 19 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e: 118:<谱线表>
B态 20 e态 1 激发态 19 e态 1 19564.6997 19564.7006 -0.0009 .004200 0.0000: rR(19): B态 B态振动量子数=0 20 20 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e: 119:<谱线表>
B态 21 e态 1 激发态 20 e态 1 19582.9777 19582.9906 -0.0129 .004300 0.0000: rR(20): B态 B态振动量子数=0 21 21 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e: 120:<谱线表>
B态 22 e态 1 激发态 21 e态 2 19600.4930 19600.4843 0.0087 .004200 0.0000: rR(21): B态 B态振动量子数=0 22 22 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e: 121:<谱线表>
B 23 e 1 激发态 22 e 2 19619.8141 19619.8086 0.0055 .004200 0.0000 : rR(22) : B B振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e : 122:<谱线表>
B 24 e 1 激发态 23 e 2 19639.9923 19639.9892 0.0031 .004800 0.0000 : rR(23) : B B振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e : 123:<谱线表>
B 25 e 1 激发态 24 e 2 19661.9741 19661.9783 -0.0042 .004400 0.0000 : rR(24) : B B振动量子数=0 25 25 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e : 124:<谱线表>
B态 26 e态 1 激发态 25 e态 3 19678.7118 19678.6982 0.0136 .005200 0.0000 : rR(25)支跃迁 : B态 B态振动量子数=0 26 26 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e : 125:<谱线表>
B态 27 e态 1 激发态 26 e态 3 19701.8223 19701.8131 0.0092 .004400 0.0000 : rR(26) : B态 B态振动量子数=0 27 27 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e : 126:<谱线表>
B态 28 e态 1 激发态 27 e态 3 19724.8468 19724.8373 0.0095 .004400 0.0000 : rR(27) : B态 B态振动量子数=0 28 28 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e : 127:<谱线表>
B 29 e 1 激发态 28 e 3 19748.5004 19748.4921 0.0083 .004400 0.0000 : rR(28) : B B常数振动量子数=0 29 29 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e : 128:<谱线表>
B 30 e 1 激发态 29 e 3 19773.1118 19773.0992 0.0126 .004600 0.0000 : rR(29) : B B常数振动量子数=0 30 30 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e : 129:<谱线表>
B 31 e 1 激发态 30 e 4 19796.5213 19796.5483 -0.0270 .011600 0.0000 : rR(30) : B B常数振动量子数=0 31 31 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e : 130:<谱线表>
B 32 e 1 激发态 31 e 5 19820.8478 19820.8659 -0.0181 .005100 0.0000 : rR(31) : B Bv=0 32 32 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e : 131:<谱线表>
B 33 e 1 激发态 32 e 5 19849.0850 19849.0582 0.0268 .012100 0.0000 : rR(32) : B Bv=0 33 33 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e : 132:<谱线表>
B 34 e 1 激发态 33 e 6 19876.2837 19876.2835 0.0002 .009900 0.0000 : rR(33) : B Bv=0 34 34 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e : 133:<谱线表>
B常数 35 e态 1 激发态 34 e态 8 19900.3002 19900.2946 0.0056 .006000 0.0000: rR(34): B B常数振动量子数=0 35 35 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e: 134: <谱线表>
B常数 36 e态 1 激发态 35 e态 8 19929.7457 19929.7595 -0.0138 .009500 0.0000: rR(35): B B常数振动量子数=0 36 36 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e: 135: <谱线表>
B常数 37 e态 1 激发态 36 e态 8 19959.2632 19959.2885 -0.0253 .006100 0.0000: rR(36): B B常数振动量子数=0 37 37 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1e: 136: <谱线表>
B 38 e 1 激发态 37 e 8 19990.9782 19990.9825 -0.0043 .016400 0.0000 : rR(37) : B B振动量子数=0 38 38 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 37 37 F1e : 137:<谱线表>
B 39 e 1 激发态 38 e 9 20018.3165 20018.3086 0.0079 .006700 0.0000 : rR(38) : B B振动量子数=0 39 39 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1e : 138:<谱线表>
B 40 e 1 激发态 39 e 9 20049.8304 20049.8148 0.0156 .018400 0.0000 : rR(39) : B B振动量子数=0 40 40 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 39 39 F1e : 139:<谱线表>
B 41 e 1 激发态 40 e 9 20081.8108 20081.7920 0.0188 .058500 0.0000 : rR(40) : B B态振动量子数=0 41 41 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 40 40 F1e : 140:<谱线表>
B 42 e 1 激发态 41 e 9 20114.3826 20114.3724 0.0102 .103900 0.0000 : rR(41) : B Bv=0 42 42 F1e - 激发态 Av=2 41 41 F1e : 141:<谱线表>
B常数 7 e态 1 激发态 7 f态 2 19376.8735 19376.8777 -0.0042 .023800 4.0000 : qQ(7) : B常数 B常数振动量子数=0 7 7 F1e - 激发态 振动量子数=3 7 7 F1f : 151:<谱线表>
B常数 8 e 1 激发态 8 f 1 19387.8133 19387.8017 0.0116 .022600 4.0000 : qQ(8) : B B常数v=0 8 8 F1e - 激发态 振动量子数=3 8 8 F1f : 152:<谱线表>
B常数 19 e 1 激发态 20 e 2 19435.8867 19435.8790 0.0077 .004900 3.0000 : qP$_1$(20) : B B常数v=0 19 19 F1e - 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e : 153:<谱线表>
B常数 21 e 1 激发态 20 e 2 19580.6212 19580.6153 0.0059 .005400 3.0000 : sR1(20) : B B常数v=0 21 21 F1e - 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e : 154:<谱线表>
B 33 e 1 激发态 32 e 6 19845.8934 19845.9129 -0.0195 .012700 3.0000 : rR12(32) : B B振动量子数=0 33 33 F1e - 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2e : 155:<谱线表>
B 23 e 1 激发态 24 e 3 19477.4238 19477.4187 0.0051 .008600 2.0000 : qP$_1$支(24) : B B振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e : 156:<谱线表>
B 24 e 1 激发态 25 e 2 19511.9306 19511.9585 -0.0279 .014200 2.0000 : qP$_1$支(25) : B B振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 振动量子数=4 25 24 F1e : 157:<谱线表>
B 25 e 1 激发态 24 e 3 19650.2118 19650.2009 0.0109 .013000 2.0000 : sR1(24) : B B常数=0 25 25 F1e - 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e : 158:<谱线表>
B 26 e 1 激发态 25 e 2 19691.7106 19691.7405 -0.0299 .022200 2.0000 : sR1(25) : B B常数=0 26 26 F1e - 激发态 振动量子数=4 25 24 F1e : 159:<谱线表>
B 26 e 1 激发态 26 f 4 19586.2022 19586.1698 0.0324 .012600 2.0000 : qQ12(26) : B B常数=0 26 26 F1e - 激发态 振动量子数=4 26 26 F2f : 160:<谱线表>
B 27 e态 1 激发态 27 f态 4 19617.6400 19617.6344 0.0056 .005300 2.0000: qQ12(27): B Bv=0 27 27 F1e - 激发态 ev=4 27 27 F2f: 161: <谱线表>
B 28 e态 1 激发态 28 f态 3 19663.9614 19663.9672 -0.0058 .011100 2.0000: qQ12(28): B Bv=0 28 28 F1e - 激发态 ev=4 28 28 F2f: 162: <谱线表>
B 30 e态 1 激发态 30 f态 4 19689.9707 19689.9792 -0.0085 .009500 1.0000: rQ1(30): B Bv=0 30 30 F1e - 激发态 dv=7 30 29 F1f: 163: <谱线表>
B常数 37 e态 1 激发态 38 e态 8 19769.2016 19769.2150 -0.0134 .015100 1.0000 : oP13(38) : B常数Bv=0 37 37 F1e - 激发态振动量子数=7 38 39 F3e : 164:<谱线表>
碳 2 e态 1 激发态 3 e态 1 24354.8311 24354.8144 0.0167 .042100 0.0000 : pP(3) : 碳 振动量子数=0 2 2 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e : 169:<谱线表>
碳 3 e态 1 激发态 4 e态 1 24354.0840 24354.0720 0.0120 .018700 0.0000 : pP(4) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e : 170:<谱线表>
碳 4 e态 1 激发态 5 e态 1 24353.9976 24354.0330 -0.0354 .025800 0.0000 : pP(5) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e : 171:<谱线表>
碳 5 e态 1 激发态 6 e态 1 24354.6935 24354.6971 -0.0036 .022200 0.0000 : pP(6) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e : 172:<谱线表>
碳 6 e态 1 激发态 7 e态 1 24356.0403 24356.0561 -0.0158 .016300 0.0000 : pP(7) : 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e : 173:<谱线表>
碳 7 e态 1 激发态 8 e态 1 24358.1104 24358.1183 -0.0079 .012600 0.0000 : pP(8) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e : 174:<谱线表>
碳 8 e态 1 激发态 9 e态 1 24360.9032 24360.8793 0.0239 .010100 0.0000 : pP(9) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e : 175:<谱线表>

碳 9 e 1 激发态 10 e 1 24364.3392 24364.3435 -0.0043 .007200 0.0000 : pP(10) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e : 176:<谱线表>
碳 10 e 1 激发态 11 e 1 24368.5041 24368.5046 -0.0005 .007100 0.0000 : pP(11) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e : 177:<谱线表>
碳 11 e 1 激发态 12 e 1 24373.3699 24373.3767 -0.0068 .011400 0.0000 : pP(12) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e : 178:<谱线表>
碳 12 e态 1 激发态 13 e态 1 24378.9452 24378.9512 -0.0060 .006600 0.0000 : pP(13) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e : 179:<谱线表>
碳 13 e态 1 激发态 14 e态 1 24385.2201 24385.2223 -0.0022 .006300 0.0000 : pP(14) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e : 180:<谱线表>
碳 14 e态 1 激发态 15 e态 1 24392.2089 24392.2084 0.0005 .006600 0.0000 : pP(15) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e : 181:<谱线表>
碳 15 e 1 激发态 16 e 1 24399.8980 24399.9044 -0.0064 .011400 0.0000 : pP(16)支 : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e : 182:<谱线表>
碳 16 e 1 激发态 17 e 1 24408.3124 24408.3140 -0.0016 .010700 0.0000 : pP(17) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e : 183:<谱线表>
碳 17 e 1 激发态 18 e 1 24417.4487 24417.4481 0.0006 .012700 0.0000 : pP(18) : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e : 184:<谱线表>
碳 18 e态 1 激发态 19 e态 1 24427.3343 24427.3448 -0.0105 .007100 0.0000 : pP(19) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e : 185:<谱线表>
碳 19 e态 1 激发态 20 e态 1 24438.5042 24438.4939 0.0103 .011300 0.0000 : pP(20) : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e : 186:<谱线表>
碳 20 e态 1 激发态 21 e态 2 24448.8413 24448.8447 -0.0034 .013200 0.0000 : pP(21) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e : 187:<谱线表>
碳 21 e态 1 激发态 22 e态 2 24461.0288 24461.0259 0.0029 .015300 0.0000: pP(22): 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e: 188: <谱线表>
碳 22 e态 1 激发态 23 e态 2 24474.0657 24474.0669 -0.0012 .015200 0.0000: pP(23): 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e: 189: <谱线表>
碳 23 e态 1 激发态 24 e态 2 24488.9330 24488.9207 0.0123 .014600 0.0000: pP(24): 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e: 190: <谱线表>
碳 24 e 1 激发态 25 e 3 24498.5130 24498.5131 -0.0001 .016600 0.0000 : pP(25) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e : 191:<谱线表>
碳 25 e 1 激发态 26 e 3 24514.4732 24514.4934 -0.0202 .017300 0.0000 : pP(26) : 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e : 192:<谱线表>
碳 26 e 1 激发态 27 e 3 24530.3903 24530.3927 -0.0024 .024100 0.0000 : pP(27) : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e : 193:<谱线表>
碳 27 e 1 激发态 28 e 3 24546.9699 24546.9195 0.0504 .031800 0.0000 : pP(28) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e : 194:<谱线表>
碳 28 e态 1 激发态 29 e态 3 24564.4189 24564.4086 0.0103 .019200 0.0000 : pP支(29) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e : 195:<谱线表>
碳 29 e 1 激发态 30 e 4 24580.7313 24580.7502 -0.0189 .030600 0.0000 : pP(30) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e : 196:<谱线表>
碳 30 e态 1 激发态 31 e态 5 24597.9158 24597.9612 -0.0454 .036300 0.0000: pP(31): 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e: 197:<谱线表>
碳 31 e态 1 激发态 32 e态 5 24619.0661 24619.0399 0.0262 .051700 0.0000: pP(32): 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e: 198:<谱线表>
碳 32 e态 1 激发态 33 e态 6 24639.1615 24639.1699 -0.0084 .052300 0.0000: pP(33): 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e: 199:<谱线表>
碳 33 e态 1 激发态 34 e态 8 24656.0518 24656.0753 -0.0235 .061300 0.0000 : pP(34) : 碳 振动量子数=0 33 33 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e : 200:<谱线表>
碳 34 e态 1 激发态 35 e态 8 24678.4432 24678.4841 -0.0409 .067800 0.0000 : pP(35) : 碳 振动量子数=0 34 34 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e : 201:<谱线表>
碳 35 e态 1 激发态 36 e态 8 24700.8798 24700.9328 -0.0530 .046500 0.0000 : pP(36) : 碳 振动量子数=0 35 35 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1e : 202:<谱线表>
碳 1 e 1 激发态 1 f 1 24361.9678 24361.9224 0.0454 .072300 0.0000 : qQ(1) : 碳 振动量子数=0 1 1 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1f : 208:<谱线表>
碳 2 e 1 激发态 2 f 1 24363.3207 24363.3189 0.0018 .029700 0.0000 : qQ(2) : 碳 振动量子数=0 2 2 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1f : 209:<谱线表>
碳 3 e 1 激发态 3 f 1 24365.4217 24365.4120 0.0097 .029000 0.0000 : qQ(3) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1f : 210:<谱线表>
碳 4 e态 1 激发态 4 f态 1 24368.2151 24368.2092 0.0059 .013700 0.0000: qQ(4): 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1f: 211:<谱线表>
碳 5 e态 1 激发态 5 f态 1 24371.7092 24371.7120 -0.0028 .008000 0.0000: qQ(5): 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1f: 212:<谱线表>
碳 6 e态 1 激发态 6 f态 1 24375.9216 24375.9182 0.0034 .006500 0.0000: qQ(6): 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1f: 213:<谱线表>
碳 7 e态 1 激发态 7 f态 1 24380.8890 24380.8876 0.0014 .009900 0.0000 : qQ(7) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1f : 214:<谱线表>
碳 8 e态 1 激发态 8 f态 2 24386.2273 24386.2294 -0.0021 .006100 0.0000 : qQ(8) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1f : 215:<谱线表>
碳 9 e态 1 激发态 9 f态 2 24392.6039 24392.6024 0.0015 .008100 0.0000 : qQ(9) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1f : 216:<谱线表>
碳 10 e态 1 激发态 10 f 2 24399.6030 24399.6045 -0.0015 .007000 0.0000 : qQ(10) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1f : 217:<谱线表>
碳 11 e态 1 激发态 11 f 2 24407.3028 24407.3053 -0.0025 .005500 0.0000 : qQ(11) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1f : 218:<谱线表>
碳 12 e态 1 激发态 12 f 2 24415.7027 24415.7025 0.0002 .007900 0.0000 : qQ(12) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1f : 219:<谱线表>
碳 13 e态 1 激发态 13 f态 2 24424.7920 24424.7911 0.0009 .007500 0.0000 : qQ(13) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1f : 220:<谱线表>
碳 14 e态 1 激发态 14 f态 2 24434.5887 24434.5895 -0.0008 .005200 0.0000 : qQ(14) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1f : 221:<谱线表>
碳 15 e态 1 激发态 15 f态 2 24445.0872 24445.0909 -0.0037 .007300 0.0000 : qQ(15) : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1f : 222:<谱线表>
碳 16 e态 1 激发态 16 f 2 24456.2918 24456.2959 -0.0041 .005100 0.0000 : qQ(16) : 碳 Cv=0 16 16 F1e - 激发态 Av=2 16 16 F1f : 223:<谱线表>
碳 17 e态 1 激发态 17 f 2 24468.2014 24468.2069 -0.0055 .005300 0.0000 : qQ(17) : 碳 Cv=0 17 17 F1e - 激发态 Av=2 17 17 F1f : 224:<谱线表>
碳 18 e态 1 激发态 18 f 2 24480.8249 24480.8276 -0.0027 .005300 0.0000 : qQ(18) : 碳 Cv=0 18 18 F1e - 激发态 Av=2 18 18 F1f : 225:<谱线表>
碳 19 e态 1 激发态 19 f态 2 24494.1579 24494.1645 -0.0066 .005500 0.0000 : qQ(19) : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1f : 226:<谱线表>
碳 20 e态 1 激发态 20 f态 2 24508.2408 24508.2334 0.0074 .010200 0.0000 : qQ(20) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1f : 227:<谱线表>
碳 21 e态 1 激发态 21 f态 3 24522.8544 24522.8805 -0.0261 .006500 0.0000 : qQ(21) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1f : 228:<谱线表>
碳 22 e态 1 激发态 22 f态 3 24538.4372 24538.4363 0.0009 .006100 0.0000 : qQ(22) : 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1f : 229:<谱线表>
碳 23 e态 1 激发态 23 f态 3 24554.6975 24554.6980 -0.0005 .011100 0.0000 : qQ(23) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1f : 230:<谱线表>
碳 24 e态 1 激发态 24 f态 3 24571.7492 24571.7619 -0.0127 .006900 0.0000 : qQ(24) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1f : 231:<谱线表>
碳 25 e态 1 激发态 25 f态 3 24589.7160 24589.7253 -0.0093 .007300 0.0000: qQ(25): 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1f: 232:<谱线表>
碳 26 e态 1 激发态 26 f态 3 24608.9912 24609.0041 -0.0129 .008600 0.0000: qQ(26): 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1f: 233:<谱线表>
碳 27 e态 1 激发态 27 f态 3 24631.6970 24631.6985 -0.0015 .015200 0.0000: qQ(27): 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1f: 234:<谱线表>
碳 28 e 1 激发态 28 f 4 24642.0465 24642.0557 -0.0092 .022800 0.0000 : qQ(28) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1f : 235:<谱线表>
碳 29 e 1 激发态 29 f 4 24663.9563 24663.9660 -0.0097 .010500 0.0000 : qQ(29) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1f : 236:<谱线表>
碳 30 e 1 激发态 30 f 5 24685.4160 24685.4479 -0.0319 .017200 0.0000 : qQ(30) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1f : 237:<谱线表>
碳 31 e态 1 激发态 31 f态 6 24706.6836 24706.6964 -0.0128 .032500 0.0000: qQ(31): 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1f: 238:<谱线表>
碳 32 e态 1 激发态 32 f态 7 24730.0243 24730.0463 -0.0220 .014000 0.0000: qQ(32): 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1f: 239:<谱线表>
碳 33 e态 1 激发态 33 f态 7 24754.1507 24754.1150 0.0357 .056300 0.0000: qQ(33): 碳 振动量子数=0 33 33 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1f: 240:<谱线表>
碳 34 e 1 激发态 34 f 8 24776.1762 24776.1840 -0.0078 .041000 0.0000 : qQ(34) : 碳 振动量子数=0 34 34 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1f : 241:<谱线表>
碳 35 e 1 激发态 35 f 8 24801.7820 24801.7597 0.0223 .067400 0.0000 : qQ(35) : 碳 振动量子数=0 35 35 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1f : 242:<谱线表>
碳 36 e 1 激发态 36 f 8 24828.2163 24828.2537 -0.0374 .038000 0.0000 : qQ(36) : 碳 振动量子数=0 36 36 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1f : 243:<谱线表>
碳 3 e 1 激发态 2 e 1 24373.8897 24373.9116 -0.0219 .038600 0.0000 : rR(2) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e : 250:<谱线表>
碳 4 e 1 激发态 3 e 1 24379.5061 24379.5390 -0.0329 .044900 0.0000 : rR(3) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e : 251:<谱线表>
碳 5 e 1 激发态 4 e 1 24385.8550 24385.8680 -0.0130 .031800 0.0000 : rR(4) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e : 252:<谱线表>
碳 6 e 1 激发态 5 e 1 24392.8915 24392.8902 0.0013 .012900 0.0000: rR(5): 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e: 253: <谱线表>
碳 7 e 1 激发态 6 e 1 24400.5933 24400.6133 -0.0200 .041400 0.0000: rR(6): 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e: 254: <谱线表>
碳 8 e 1 激发态 7 e 1 24409.0340 24409.0327 0.0013 .015900 0.0000: rR(7): 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e: 255: <谱线表>
碳 9 e 1 激发态 8 e 1 24418.1499 24418.1522 -0.0023 .009300 0.0000 : rR(8) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e : 256:<谱线表>
碳 10 e 1 激发态 9 e 1 24427.9582 24427.9652 -0.0070 .017000 0.0000 : rR(9) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e : 257:<谱线表>
碳 11 e 1 激发态 10 e 1 24438.4566 24438.4853 -0.0287 .018600 0.0000 : rR(10) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e : 258:<谱线表>
碳 12 e 1 激发态 11 e 1 24449.6990 24449.7035 -0.0045 .018000 0.0000 : rR(11) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e : 259:<谱线表>
碳 13 e 1 激发态 12 e 1 24461.6142 24461.6128 0.0014 .008600 0.0000 : rR(12) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e : 260:<谱线表>
碳 14 e 1 激发态 13 e 1 24474.2315 24474.2310 0.0005 .014000 0.0000 : rR(13) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e : 261:<谱线表>
碳 15 e态 1 激发态 14 e态 1 24487.5500 24487.5510 -0.0010 .014200 0.0000 : rR(14) : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e : 262:<谱线表>
碳 16 e态 1 激发态 15 e态 1 24501.5606 24501.5736 -0.0130 .008400 0.0000 : rR(15) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e : 263:<谱线表>
碳 17 e态 1 激发态 16 e态 1 24516.3027 24516.3016 0.0011 .014900 0.0000 : rR(16) : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e : 264:<谱线表>
碳 18 e态 1 激发态 17 e态 1 24531.7453 24531.7405 0.0048 .019000 0.0000: rR(17): 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e: 265:<谱线表>
碳 19 e态 1 激发态 18 e态 1 24547.9100 24547.9021 0.0079 .019300 0.0000: rR(18)支: 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e: 266:<谱线表>
碳 20 e态 1 激发态 19 e态 1 24564.8237 24564.8196 0.0041 .020200 0.0000: rR(19): 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e: 267:<谱线表>
碳 21 e 1 激发态 20 e 1 24582.9508 24582.9819 -0.0311 .027600 0.0000 : rR(20) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e : 268:<谱线表>
碳 22 e 1 激发态 21 e 2 24600.3543 24600.3440 0.0103 .010900 0.0000 : rR(21) : 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e : 269:<谱线表>
碳 23 e 1 激发态 22 e 2 24619.5151 24619.5333 -0.0182 .032800 0.0000 : rR(22) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e : 270:<谱线表>
碳 24 e 1 激发态 23 e 2 24639.5830 24639.5861 -0.0031 .014500 0.0000 : rR(23) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e : 271:<谱线表>
碳 25 e 1 激发态 24 e 2 24661.4271 24661.4358 -0.0087 .026100 0.0000 : rR(24) : 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e : 272:<谱线表>
碳 26 e 1 激发态 25 e 3 24678.0000 24678.0084 -0.0084 .036200 0.0000 : rR(25)支跃迁 : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e : 273:<谱线表>
碳 27 e态 1 激发态 26 e态 3 24700.9698 24700.9691 0.0007 .082500 0.0000 : rR(26) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e : 274:<谱线表>
碳 28 e态 1 激发态 27 e态 3 24723.7925 24723.8418 -0.0493 .035400 0.0000 : rR(27) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e : 275:<谱线表>
碳 29 e态 1 激发态 28 e态 3 24747.3426 24747.3396 0.0030 .035000 0.0000 : rR(28) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e : 276:<谱线表>
碳 30 e态 1 激发态 29 e态 3 24771.8045 24771.7901 0.0144 .058100 0.0000: rR(29): 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e: 277:<谱线表>
碳 19 e态 1 激发态 20 e态 2 24436.0932 24436.1187 -0.0255 .021800 0.0000: $qP_1(20)$: 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e: 289:<谱线表>

碳 21 e 1 激发态 20 e 2 24580.6333 24580.6066 0.0267 .032200 0.0000 : sR1(20) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e : 290:<谱线表>
碳 23 e 1 激发态 24 e 3 24477.1546 24477.1433 0.0113 .025700 0.0000 : qP$_1$支(24) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e : 291:<谱线表>
碳 24 e 1 激发态 25 e 2 24511.5045 24511.5554 -0.0509 .028200 0.0000 : qP$_1$支(25) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - 激发态 振动量子数=4 25 24 F1e : 292:<谱线表>
碳 27 e 1 激发态 27 f 4 24616.7806 24616.7904 -0.0098 .015900 0.0000: qQ12(27): 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - 激发态 振动量子数=4 27 27 F2f: 293:<谱线表>
激发态 1 e 1 X态 2 e 1 67549.9502 67549.9500 0.0002 .010100 0.0000: pP(2): 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e: 294:<谱线表>
激发态 2 e 1 X态 3 e 1 67545.1455 67545.1411 0.0044 .010100 0.0000: pP(3): 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e: 295:<谱线表>
激发态 3 e 1 X态 4 e 1 67539.6797 67539.6741 0.0056 .010100 0.0000 : pP(4) : 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e : 296:<谱线表>
激发态 4 e 1 X态 5 e 1 67533.5561 67533.5491 0.0070 .010100 0.0000 : pP(5) : 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e : 297:<谱线表>
激发态 5 e 1 X态 6 e 1 67526.7715 67526.7660 0.0055 .010100 0.0000 : pP(6) : 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e : 298:<谱线表>
激发态 6 e 1 X态 7 e 1 67519.3292 67519.3247 0.0045 .010100 0.0000 : pP(7) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e : 299:<谱线表>
激发态 7 e 1 X态 8 e 1 67511.2293 67511.2250 0.0043 .010100 0.0000 : pP(8) : 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e : 300:<谱线表>
激发态 8 e 1 X态 9 e 1 67502.4707 67502.4668 0.0039 .010100 0.0000 : pP(9) : 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e : 301:<谱线表>
激发态 9 e 1 X态 10 e 1 67493.0543 67493.0498 0.0045 .010100 0.0000 : pP(10) : 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e : 302:<谱线表>
激发态 10 e 1 X态 11 e 1 67482.9777 67482.9734 0.0043 .010100 0.0000 : pP(11) : 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e - X X态振动量子数=0 11 11 F1e : 303:<谱线表>
激发态 11 e 1 X态 12 e 1 67472.2405 67472.2374 0.0031 .010100 0.0000 : pP(12) : 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e - X X态振动量子数=0 12 12 F1e : 304:<谱线表>
激发态 12 e 1 X态 13 e 1 67460.8434 67460.8409 0.0025 .010100 0.0000 : pP(13) : 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e : 305:<谱线表>
激发态 13 e 1 X态 14 e 1 67448.7861 67448.7833 0.0028 .010100 0.0000 : pP(14) : 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e - X X态振动量子数=0 14 14 F1e : 306:<谱线表>
激发态 14 e 1 X态 15 e 1 67436.0669 67436.0633 0.0036 .010100 0.0000 : pP(15) : 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e - X X态振动量子数=0 15 15 F1e : 307:<谱线表>
激发态 15 e 1 X态 16 e 1 67422.6827 67422.6794 0.0033 .010100 0.0000 : pP(16)支 : 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e : 308:<谱线表>
激发态 16 e 1 X态 17 e 1 67408.6317 67408.6289 0.0028 .010100 0.0000 : pP(17) : 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e : 309:<谱线表>
激发态 17 e 1 X态 18 e 1 67393.9116 67393.9073 0.0043 .010100 0.0000 : pP(18) : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e : 310:<谱线表>
激发态 18 e 1 X态 19 e 1 67378.5076 67378.5043 0.0033 .010100 0.0000 : pP(19) : 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e : 311:<谱线表>
激发态 19 e 1 X态 20 e 1 67362.3915 67362.3831 0.0084 .010200 0.0000 : pP(20) : 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e - X X态振动量子数=0 20 20 F1e : 312:<谱线表>
激发态 20 e 1 X态 21 e 1 67345.0774 67345.0554 0.0220 .010500 0.0000 : pP(21) : 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e - X X态振动量子数=0 21 21 F1e : 313:<谱线表>
激发态 21 e 2 X态 22 e 1 67328.5654 67328.5687 -0.0033 .010600 0.0000: pP(22): 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e: 314: <谱线表>
激发态 22 e 2 X态 23 e 1 67310.2943 67310.2951 -0.0008 .011100 0.0000: pP(23): 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e: 315: <谱线表>
激发态 23 e 2 X态 24 e 1 67291.2127 67291.2080 0.0047 .012500 0.0000: pP(24): 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e: 316: <谱线表>
激发态 24 e 2 X态 25 e 1 67270.3661 67270.3539 0.0122 .016000 0.0000 : pP(25) : 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e : 317:<谱线表>
激发态 25 e 3 X态 26 e 1 67254.8180 67254.8172 0.0008 .017900 0.0000 : pP(26) : 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e : 318:<谱线表>
激发态 26 e 3 X态 27 e 1 67232.9269 67232.9288 -0.0019 .059700 0.0000 : pP(27) : 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e : 319:<谱线表>
激发态 27 e 3 X态 28 e 1 67211.1808 67211.1680 0.0128 .048200 0.0000: pP(28): 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e: 320: <谱线表>
激发态 28 e 3 X态 29 e 1 67188.8238 67188.8228 0.0010 .193300 0.0000: pP(29): 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e: 321: <谱线表>
激发态 29 e 3 X态 30 e 1 67165.6131 67165.5618 0.0513 .048200 0.0000: pP(30): 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e: 322: <谱线表>
激发态 30 e 4 X态 31 e 1 67143.4840 67143.4960 -0.0120 .031500 0.0000 : pP(31) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e : 323:<谱线表>
激发态 31 e 5 X态 32 e 1 67120.6390 67120.6051 0.0339 .030200 0.0000 : pP(32) : 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e : 324:<谱线表>
激发态 32 e 5 X态 33 e 1 67093.9326 67093.8948 0.0378 .027500 0.0000 : pP(33) : 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e : 325:<谱线表>
激发态 33 e 6 X态 34 e 1 67068.2158 67068.1810 0.0348 .027600 0.0000 : pP(34) : 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e : 326:<谱线表>
激发态 34 e 8 X态 35 e 1 67045.7573 67045.7387 0.0186 .025600 0.0000 : pP(35) : 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e : 327:<谱线表>
激发态 35 e 8 X态 36 e 1 67017.8793 67017.8395 0.0398 .025500 0.0000 : pP(36) : 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e : 328:<谱线表>
激发态 36 e 8 X态 37 e 1 66989.9894 66989.9428 0.0466 .025600 0.0000 : pP支(37) : 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e : 329:<谱线表>
激发态 37 e 8 X态 38 e 1 66959.9316 66959.9187 0.0129 .026500 0.0000 : pP支(38) : 激发态 A态振动量子数=2 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e : 330:<谱线表>
激发态 38 e 9 X态 39 e 1 66934.3375 66934.3078 0.0297 .038800 0.0000 : pP支(39) : 激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e : 331:<谱线表>
激发态 39 e 9 X态 40 e 1 66904.5166 66904.5093 0.0073 .036700 0.0000 : pP(40) : 激发态 A态振动量子数=2 39 39 F1e - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e : 332:<谱线表>
激发态 40 e 9 X态 41 e 1 66874.3333 66874.3249 0.0084 .051400 0.0000 : pP(41) : 激发态 A态振动量子数=2 40 40 F1e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e : 333:<谱线表>
激发态 1 f 1 X态 1 e 1 67556.9399 67556.9350 0.0049 .010100 0.0000 : qQ(1) : 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e : 349:<谱线表>
激发态 2 f 1 X态 2 e 1 67555.6207 67555.6174 0.0033 .010100 0.0000 : qQ(2) : 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e : 350:<谱线表>
激发态 3 f 1 X态 3 e 1 67553.6473 67553.6406 0.0067 .010100 0.0000 : qQ(3) : 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e : 351:<谱线表>
激发态 4 f 1 X态 4 e 1 67551.0122 67551.0038 0.0084 .010100 0.0000 : qQ(4) : 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e : 352:<谱线表>
激发态 5 f 1 X态 5 e 1 67547.7061 67547.7051 0.0010 .010100 0.0000 : qQ(5) : 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e : 353:<谱线表>
激发态 6 f 1 X态 6 e 1 67543.7463 67543.7379 0.0084 .010100 0.0000 : qQ(6) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e : 354:<谱线表>
激发态 7 f 1 X态 7 e 1 67539.0589 67539.0504 0.0085 .010100 0.0000 : qQ(7) : 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e : 355:<谱线表>
激发态 8 f 2 X态 8 e 1 67534.0337 67534.0283 0.0054 .010100 0.0000 : qQ(8): 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e: 356: <谱线表>
激发态 9 f 2 X态 9 e 1 67528.0212 67528.0167 0.0045 .010100 0.0000 : qQ(9): 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e: 357: <谱线表>
激发态 10 f 2 X态 10 e 1 67521.4185 67521.4105 0.0080 .010100 0.0000 : qQ(10): 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e: 358: <谱线表>
激发态 11 f 2 X态 11 e 1 67514.1596 67514.1534 0.0062 .010100 0.0000 : qQ(11) : 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e : 359:<谱线表>
激发态 12 f 2 X态 12 e 1 67506.2432 67506.2383 0.0049 .010100 0.0000 : qQ(12) : 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e : 360:<谱线表>
激发态 13 f 2 X态 13 e 1 67497.6691 67497.6626 0.0065 .010100 0.0000 : qQ(13) : 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e : 361:<谱线表>
激发态 14 f 2 X态 14 e 1 67488.4325 67488.4248 0.0077 .010100 0.0000 : qQ(14) : 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e : 362:<谱线表>
激发态 15 f 2 X态 15 e 1 67478.5322 67478.5235 0.0087 .010100 0.0000 : qQ(15) : 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e : 363:<谱线表>
激发态 16 f 2 X态 16 e 1 67467.9609 67467.9570 0.0039 .010100 0.0000 : qQ(16) : 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e : 364:<谱线表>
激发态 17 f 2 X态 17 e 1 67456.7272 67456.7236 0.0036 .010100 0.0000 : qQ(17) : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e : 365:<谱线表>
激发态 18 f 2 X态 18 e 1 67444.8243 67444.8202 0.0041 .010100 0.0000 : qQ(18) : 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e : 366:<谱线表>
激发态 19 f 2 X态 19 e 1 67432.2464 67432.2419 0.0045 .010100 0.0000 : qQ(19) : 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e : 367:<谱线表>
激发态 20 f 2 X 20 e 1 67418.9794 67418.9693 0.0101 .010100 0.0000 : qQ支(20) : 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e : 368:<谱线表>
激发态 21 f 3 X 21 e 1 67405.1852 67405.1567 0.0285 .010100 0.0000 : qQ支(21) : 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e : 369:<谱线表>
激发态 22 f 3 X 22 e 1 67390.4821 67390.4764 0.0057 .010100 0.0000 : qQ支(22) : 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e : 370:<谱线表>
激发态 23 f 3 X态 23 e 1 67375.1345 67375.1303 0.0042 .010200 0.0000: qQ(23): 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e: 371:<谱线表>
激发态 24 f 3 X态 24 e 1 67359.0361 67359.0321 0.0040 .010500 0.0000: qQ(24): 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e: 372:<谱线表>
激发态 25 f 3 X态 25 e 1 67342.0646 67342.0644 0.0002 .011100 0.0000: qQ(25): 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e: 373:<谱线表>
激发态 26 f 3 X态 26 e 1 67323.8176 67323.8216 -0.0040 .012200 0.0000 : qQ(26) : 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e : 374:<谱线表>
激发态 27 f 3 X态 27 e 1 67302.1959 67302.1995 -0.0036 .031900 0.0000 : qQ(27) : 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e : 375:<谱线表>
激发态 28 f 4 X态 28 e 1 67292.9786 67292.9542 0.0244 .036400 0.0000 : qQ(28) : 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e : 376:<谱线表>
激发态 29 f 4 X态 29 e 1 67272.1787 67272.1964 -0.0177 .049900 0.0000 : qQ(29) : 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e : 377:<谱线表>
激发态 30 f 5 X态 30 e 1 67251.9261 67251.9040 0.0221 .083300 0.0000 : qQ(30) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e : 378:<谱线表>
激发态 34 f 8 X态 34 e 1 67166.4366 67166.3243 0.1123 .028200 0.0000 : qQ(34) : 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e : 382:<谱线表>
激发态 35 f 8 X态 35 e 1 67142.1663 67142.1297 0.0366 .028100 0.0000: qQ支(35): 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e: 383:<谱线表>
激发态 36 f 8 X态 36 e 1 67117.0783 67117.0591 0.0192 .025600 0.0000: qQ支(36): 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e: 384:<谱线表>
激发态 37 f 9 X态 37 e 1 67091.6594 67091.6480 0.0114 .027200 0.0000: qQ支(37): 激发态 A态振动量子数=2 37 37 F1f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e: 385:<谱线表>
激发态 38 f 10 X态 38 e 1 67069.3438 67069.3632 -0.0194 .027600 0.0000 : qQ支(38) : 激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e : 386:<谱线表>
激发态 39 f 10 X态 39 e 1 67042.9465 67042.9393 0.0072 .025800 0.0000 : qQ支(39) : 激发态 A态振动量子数=2 39 39 F1f - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e : 387:<谱线表>
激发态 40 f 10 X态 40 e 1 67016.1445 67016.1406 0.0039 .032300 0.0000 : qQ支(40) : 激发态 A态振动量子数=2 40 40 F1f - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e : 388:<谱线表>
激发态 41 f 10 X态 41 e 1 66988.7653 66988.7386 0.0267 .040700 0.0000: qQ支(41): 激发态 A态振动量子数=2 41 41 F1f - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e: 389:<谱线表>
激发态 42 f 10 X态 42 e 1 66960.7067 66960.6864 0.0203 .039500 0.0000: qQ支(42): 激发态 A态振动量子数=2 42 42 F1f - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e: 390:<谱线表>
激发态 1 e 1 X态 0 e 1 67560.4306 67560.4283 0.0023 .010100 0.0000: rR(0): 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e: 405:<谱线表>
激发态 2 e 1 X态 1 e 1 67562.6070 67562.6044 0.0026 .010100 0.0000 : rR(1) : 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e : 406:<谱线表>
激发态 3 e 1 X态 2 e 1 67564.1235 67564.1219 0.0016 .010100 0.0000 : rR(2) : 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e : 407:<谱线表>
激发态 4 e 1 X态 3 e 1 67564.9682 67564.9806 -0.0124 .010100 0.0000 : rR(3) : 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e : 408:<谱线表>
激发态 5 e 1 X态 4 e 1 67565.1911 67565.1800 0.0111 .010100 0.0000 : rR(4) : 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e : 409:<谱线表>
激发态 6 e 1 X 5 e 1 67564.7158 67564.7200 -0.0042 .010100 0.0000 : rR(5) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e : 410:<谱线表>
激发态 7 e 1 X 6 e 1 67563.6074 67563.6000 0.0074 .010100 0.0000 : rR(6) : 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e : 411:<谱线表>
激发态 8 e 1 X态 7 e 1 67561.8234 67561.8196 0.0038 .010100 0.0000 : rR(7) : 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e : 412:<谱线表>
激发态 9 e 1 X态 8 e 1 67559.3812 67559.3783 0.0029 .010100 0.0000 : rR(8) : 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e : 413:<谱线表>

激发态 10 e 1 X态 9 e 1 67556.2814 67556.2755 0.0059 .010100 0.0000 : rR(9) : 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e : 414:<谱线表>
激发态 11 e 1 X态 10 e 1 67552.5123 67552.5104 0.0019 .010100 0.0000 : rR(10) : 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e : 415:<谱线表>
激发态 12 e 1 X态 11 e 1 67548.0899 67548.0821 0.0078 .010100 0.0000 : rR(11) : 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e - X X态振动量子数=0 11 11 F1e : 416:<谱线表>
激发态 13 e 1 X态 12 e 1 67542.9953 67542.9896 0.0057 .010100 0.0000 : rR(12) : 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e - X X态振动量子数=0 12 12 F1e : 417:<谱线表>
激发态 14 e 1 X态 13 e 1 67537.2370 67537.2315 0.0055 .010100 0.0000 : rR(13) : 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e : 418:<谱线表>
激发态 15 e 1 X态 14 e 1 67530.8100 67530.8059 0.0041 .010100 0.0000 : rR(14) : 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e - X X态振动量子数=0 14 14 F1e : 419:<谱线表>
激发态 16 e 1 X态 15 e 1 67523.7148 67523.7099 0.0049 .010100 0.0000 : rR(15)支 : 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e : 420:<谱线表>
激发态 17 e 1 X态 16 e 1 67515.9440 67515.9390 0.0050 .010100 0.0000 : rR(16)支 : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e : 421:<谱线表>
激发态 18 e 1 X态 17 e 1 67507.4864 67507.4823 0.0041 .010100 0.0000 : rR(17) : 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e : 422:<谱线表>
激发态 19 e态 1 X态 18 e态 1 67498.3111 67498.3030 0.0081 .010100 0.0000: rR(18)支: 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e: 423:<谱线表>
激发态 20 e态 1 X态 19 e态 1 67487.9331 67487.9125 0.0206 .010100 0.0000: rR(19)支: 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e: 424:<谱线表>
激发态 21 e态 2 X态 20 e态 1 67478.3814 67478.3580 0.0234 .010400 0.0000: rR(20)支: 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e: 425:<谱线表>
激发态 22 e 2 X态 21 e 1 67467.0147 67467.0114 0.0033 .010200 0.0000 : rR(21) : 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e : 426:<谱线表>
激发态 23 e 2 X态 22 e 1 67454.8501 67454.8458 0.0043 .010400 0.0000 : rR(22) : 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e : 427:<谱线表>
激发态 24 e 2 X态 23 e 1 67440.9173 67440.9076 0.0097 .011100 0.0000 : rR(23) : 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e : 428:<谱线表>
激发态 25 e 3 X态 24 e 1 67432.2626 67432.2809 -0.0183 .199000 0.0000: rR(24): 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e: 429: <谱线表>
激发态 26 e 3 X态 25 e 1 67417.3064 67417.2963 0.0101 .013800 0.0000: rR(25)支跃迁: 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e: 430: <谱线表>
激发态 27 e 3 X态 26 e 1 67402.4283 67402.4329 -0.0046 .017900 0.0000: rR(26): 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e: 431: <谱线表>
激发态 28 e 3 X态 27 e 1 67386.9732 67386.9785 -0.0053 .025700 0.0000 : rR(27) : 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e : 432:<谱线表>
激发态 33 e 6 X态 32 e 1 67300.7496 67300.6823 0.0673 .032600 0.0000 : rR(32) : 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e : 437:<谱线表>
激发态 34 e 8 X态 33 e 1 67285.1008 67285.0860 0.0148 .032900 0.0000 : rR(33) : 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e : 438:<谱线表>
激发态 35 e 8 X态 34 e 1 67264.0692 67264.0243 0.0449 .032500 0.0000 : rR(34) : 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e : 439:<谱线表>
激发态 36 e 8 X态 35 e 1 67242.9971 67242.9566 0.0405 .028700 0.0000 : rR(35) : 激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e : 440:<谱线表>
激发态 37 e 8 X态 36 e 1 67219.7656 67219.7527 0.0129 .025800 0.0000 : rR(36) : 激发态 A态振动量子数=2 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e : 441:<谱线表>
激发态 38 e 9 X态 37 e 1 67200.9484 67200.9529 -0.0045 .027600 0.0000 : rR(37) : 激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e : 442:<谱线表>
激发态 39 e 9 X态 38 e 1 67177.9730 67177.9563 0.0167 .025900 0.0000 : rR(38) : 激发态 A态振动量子数=2 39 39 F1e - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e : 443:<谱线表>
激发态 40 e 9 X态 39 e 1 67154.5301 67154.5643 -0.0342 .027500 0.0000 : rR(39) : 激发态 A态振动量子数=2 40 40 F1e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e : 444:<谱线表>
激发态 41 e 9 X态 40 e 1 67130.6206 67130.5602 0.0604 .025600 0.0000 : rR支(40) : 激发态 A态振动量子数=2 41 41 F1e - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e : 445:<谱线表>
激发态 42 e 9 X态 41 e 1 67105.9732 67105.9000 0.0732 .050500 0.0000 : rR支(41) : 激发态 A态振动量子数=2 42 42 F1e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e : 446:<谱线表>
激发态 43 e 9 X态 42 e 1 67080.5860 67080.5674 0.0186 .027100 0.0000 : rR支(42) : 激发态 A态振动量子数=2 43 43 F1e - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e : 447:<谱线表>
激发态 44 e态 9 X态 43 e态 1 67054.5617 67054.5541 0.0076 .173500 0.0000 : rR支(43) : 激发态 A态振动量子数=2 44 44 F1e - X态 X态振动量子数=0 43 43 F1e : 448:<谱线表>
激发态 7 f 2 X 7 e 1 67541.7886 67541.7893 -0.0007 .010300 0.0000 : qQ(7) : 激发态 振动量子数=3 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e : 467:<谱线表>
激发态 8 f 1 X态 8 e 1 67531.2419 67531.2381 0.0038 .010200 0.0000 : qQ(8) : 激发态 振动量子数=3 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e : 468:<谱线表>
激发态 9 f 1 X态 9 e 1 67519.7125 67519.7238 -0.0113 .024600 0.0000 : qQ(9) : 激发态 振动量子数=3 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e : 469:<谱线表>
激发态 18 f 1 X态 18 e 1 67357.0554 67357.0529 0.0025 .047300 0.0000 : qQ(18) : 激发态 振动量子数=3 18 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e : 478:<谱线表>
激发态 19 f 1 X态 19 e 1 67332.4832 67332.4812 0.0020 .031000 0.0000 : qQ(19) : 激发态 振动量子数=3 19 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e : 479:<谱线表>
激发态 20 f 1 X态 20 e 1 67306.6099 67306.6090 0.0009 .026700 0.0000: qQ(20): 激发态 振动量子数=3 20 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e: 480: <谱线表>
激发态 21 f 1 X态 21 e 1 67279.4347 67279.4362 -0.0015 .027100 0.0000: qQ(21): 激发态 振动量子数=3 21 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e: 481: <谱线表>
激发态 22 f 1 X态 22 e 1 67250.9609 67250.9624 -0.0015 .037400 0.0000: qQ(22): 激发态 振动量子数=3 22 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e: 482: <谱线表>
激发态 23 f 1 X态 23 e 1 67221.1832 67221.1874 -0.0042 .041500 0.0000 : qQ(23) : 激发态 振动量子数=3 23 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e : 483:<谱线表>
激发态 24 f 1 X态 24 e 1 67190.1202 67190.1108 0.0094 .069000 0.0000 : qQ(24) : 激发态 振动量子数=3 24 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e : 484:<谱线表>
激发态 25 f 1 X态 25 e 1 67157.7332 67157.7325 0.0007 .057300 0.0000 : qQ(25) : 激发态 振动量子数=3 25 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e : 485:<谱线表>
激发态 20 e 2 X态 21 e 1 67347.4163 67347.4307 -0.0144 .012700 0.0000 : oP1(21) : 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e : 529:<谱线表>
激发态 22 e 1 X态 23 e 1 67296.4746 67296.5270 -0.0524 .030400 0.0000 : oP1(23) : 激发态 a3P振动带=13 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e : 531:<谱线表>
激发态 27 e 2 X态 28 e 1 67172.8684 67172.8525 0.0159 .027800 0.0000 : oP1(28) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e : 536:<谱线表>
激发态 28 e 2 X态 29 e 1 67139.1336 67139.1942 -0.0606 .026900 0.0000 : oP1(29) : 激发态 a3P振动带=13 28 27 F1e - X X态振动量子数=0 29 29 F1e : 537:<谱线表>
激发态 29 e 2 X态 30 e 1 67105.8214 67105.8882 -0.0668 .082900 0.0000 : oP1(30) : 激发态 a3P振动带=13 29 28 F1e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e : 538:<谱线表>
激发态 30 e 5 X态 31 e 1 67151.0494 67151.0480 0.0014 .025600 0.0000 : pP21(31) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e : 588:<谱线表>
激发态 24 f 2 X态 24 e 1 67335.1471 67335.2219 -0.0748 .040700 0.0000 : pQ1(24) : 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e : 630:<谱线表>
激发态 27 f 2 X态 27 e 1 67259.4462 67259.4435 0.0027 .067100 0.0000 : pQ1(27) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e : 633:<谱线表>
激发态 32 f 2 X态 32 e 1 67110.1790 67110.0910 0.0880 .033500 0.0000 : pQ1(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e : 638:<谱线表>
激发态 43 e 10 X态 44 e 1 66803.8107 66803.7247 0.0860 .034300 0.0000 : qP31(44) : 激发态 a3P振动带=13 43 44 F3e - X态 X态振动量子数=0 44 44 F1e : 700:<谱线表>
激发态 30 f 6 X态 30 e 1 67265.7665 67265.6476 0.1189 .029900 0.0000 : qQ21(30) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e : 736:<谱线表>
激发态 32 f 6 X态 32 e 1 67208.1338 67208.0269 0.1069 .025700 0.0000 : qQ21(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e : 738:<谱线表>
激发态 33 f 6 X态 33 e 1 67178.4641 67178.4412 0.0229 .029500 0.0000 : qQ21(33) : 激发态 a3P振动带=13 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e : 739:<谱线表>
激发态 20 e 2 X态 19 e 1 67490.2850 67490.2877 -0.0027 .010600 0.0000 : qR1(19) : 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e : 775:<谱线表>
激发态 28 e 2 X态 27 e 1 67337.3041 67337.3499 -0.0458 .035900 0.0000 : qR1(27) : 激发态 a3P振动带=13 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e : 783:<谱线表>
激发态 33 e 2 X态 32 e 1 67200.5854 67200.6606 -0.0752 .027300 0.0000: qR1(32): 激发态 a3P振动带=13 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e: 788: <谱线表>
激发态 44 e 6 X态 43 e 1 66834.2048 66834.3029 -0.0981 .029000 0.0000: qR1(43): 激发态 a3P振动带=13 44 43 F1e - X态 X态振动量子数=0 43 43 F1e: 799: <谱线表>
激发态 47 e 7 X态 46 e 1 66716.1535 66716.0761 0.0774 .025600 0.0000: qR1(46): 激发态 a3P振动带=13 47 46 F1e - X态 X态振动量子数=0 46 46 F1e: 802: <谱线表>
激发态 32 f 9 X态 32 e 1 67297.1544 67297.2714 -0.1170 .028800 0.0000 : rQ31(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e : 837:<谱线表>
激发态 33 f 10 X态 33 e 1 67268.4728 67268.4657 0.0071 .130700 0.0000 : rQ31(33) : 激发态 a3P振动带=13 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e : 838:<谱线表>
激发态 34 f 11 X态 34 e 1 67248.8191 67248.7434 0.0757 .028700 0.0000 : rQ31(34) : 激发态 a3P振动带=13 34 35 F3f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e : 839:<谱线表>
激发态 47 f 10 X态 47 e 1 66803.9009 66803.9660 -0.0651 .054400 0.0000 : rQ31(47) : 激发态 a3P振动带=13 47 48 F3f - X态 X态振动量子数=0 47 47 F1e : 852:<谱线表>
激发态 1 e 4 X态 2 e 1 67793.3796 67793.3836 -0.0040 .025800 0.0000 : oP1(2) : 激发态 振动量子数=4 1 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e : 956:<谱线表>
激发态 3 e 5 X态 4 e 1 67775.5119 67775.5114 0.0005 .029200 0.0000 : oP1(4) : 激发态 振动量子数=4 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e : 958:<谱线表>
激发态 4 e 5 X态 5 e 1 67764.6884 67764.6530 0.0354 .028800 0.0000 : oP1(5) : 激发态 振动量子数=4 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e : 959:<谱线表>
激发态 5 e 5 X态 6 e 1 67752.4543 67752.5052 -0.0509 .030300 0.0000 : oP1(6) : 激发态 振动量子数=4 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e : 960:<谱线表>
激发态 6 e 5 X态 7 e 1 67739.1087 67739.0672 0.0415 .028400 0.0000 : oP1(7) : 激发态 振动量子数=4 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e : 961:<谱线表>
激发态 7 e态 5 X态 8 e态 1 67724.3658 67724.3397 0.0261 .028600 0.0000 : oP1(8) : 激发态 振动量子数=4 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e : 962:<谱线表>
激发态 8 e态 5 X态 9 e态 1 67708.2480 67708.3235 -0.0755 .069500 0.0000 : oP1(9) : 激发态 振动量子数=4 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e : 963:<谱线表>
激发态 9 e态 5 X态 10 e态 1 67691.0526 67691.0207 0.0319 .028700 0.0000 : oP1(10) : 激发态 振动量子数=4 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e : 964:<谱线表>
激发态 10 e 5 X态 11 e 1 67672.4648 67672.4341 0.0307 .028700 0.0000 : oP1(11) : 激发态 振动量子数=4 10 9 F1e - X X态振动量子数=0 11 11 F1e : 965:<谱线表>
激发态 12 e 5 X态 13 e 1 67631.4701 67631.4356 0.0345 .042800 0.0000 : oP1(13) : 激发态 振动量子数=4 12 11 F1e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e : 967:<谱线表>
激发态 22 e 3 X态 23 e 1 67350.2608 67350.2575 0.0033 .038700 0.0000 : oP1(23) : 激发态 振动量子数=4 22 21 F1e - X X态振动量子数=0 23 23 F1e : 977:<谱线表>
激发态 23 e 3 X 24 e 1 67316.0698 67316.0563 0.0135 .039400 0.0000 : oP1(24) : 激发态 振动量子数=4 23 22 F1e - X X态振动量子数=0 24 24 F1e : 978:<谱线表>
激发态 24 e 3 X 25 e 1 67282.1903 67282.1313 0.0590 .094300 0.0000 : oP1(25) : 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e : 979:<谱线表>
激发态 1 e 5 X 2 e 1 67799.7022 67799.7347 -0.0325 .030500 0.0000 : qP31(2) : 激发态 振动量子数=4 1 2 F3e - X X态振动量子数=0 2 2 F1e :1006:<谱线表>
激发态 2 e 6 X态 3 e 1 67795.8558 67795.8685 -0.0127 .032100 0.0000 : qP31(3) : 激发态 振动量子数=4 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1007:<谱线表>
激发态 8 e 6 X态 9 e 1 67745.2384 67745.2772 -0.0388 .029500 0.0000 : qP31(9) : 激发态 振动量子数=4 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1013:<谱线表>
激发态 9 e 6 X态 10 e 1 67732.3303 67732.3073 0.0230 .029600 0.0000 : qP31(10) : 激发态 振动量子数=4 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1014:<谱线表>
激发态 10 e 6 X态 11 e 1 67718.0372 67718.0426 -0.0054 .030100 0.0000 : qP31(11) : 激发态 振动量子数=4 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1015:<谱线表>
激发态 11 e 6 X态 12 e 1 67702.5258 67702.4840 0.0418 .029300 0.0000 : qP31(12) : 激发态 振动量子数=4 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1016:<谱线表>
激发态 12 e 6 X态 13 e 1 67685.6022 67685.6321 -0.0299 .035200 0.0000 : qP31(13) : 激发态 振动量子数=4 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1017:<谱线表>
激发态 14 e 6 X态 15 e 1 67648.0898 67648.0544 0.0354 .030000 0.0000 : qP31(15) : 激发态 振动量子数=4 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1019:<谱线表>
激发态 27 e 6 X态 28 e 1 67278.3922 67278.4016 -0.0094 .026200 0.0000 : qP31(28) : 激发态 振动量子数=4 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e :1032:<谱线表>
激发态 28 e 6 X态 29 e 1 67241.0392 67241.0071 0.0321 .029800 0.0000 : qP31(29) : 激发态 振动量子数=4 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :1033:<谱线表>
激发态 29 e态 6 X态 30 e态 1 67203.5134 67203.4861 0.0273 .028200 0.0000 : qP31(30) : 激发态 振动量子数=4 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e :1034:<谱线表>
激发态 30 e态 6 X态 31 e态 1 67166.2030 67166.2916 -0.0886 .028400 0.0000 : qP31(31) : 激发态 振动量子数=4 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :1035:<谱线表>
激发态 31 e态 4 X态 32 e态 1 67109.4561 67109.4604 -0.0043 .025600 0.0000 : qP31(32) : 激发态 振动量子数=4 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :1036:<谱线表>
激发态 32 e 4 X态 33 e 1 67069.5048 67069.4918 0.0130 .034600 0.0000 : qP31(33) : 激发态 振动量子数=4 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :1037:<谱线表>
激发态 33 e 4 X态 34 e 1 67026.6408 67026.6797 -0.0389 .061500 0.0000 : qP31(34) : 激发态 振动量子数=4 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :1038:<谱线表>

激发态 36 e 4 X态 37 e 1 66887.9332 66887.8896 0.0436 .026900 0.0000 : qP31(37) : 激发态 振动量子数=4 36 37 F3e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e :1041:<谱线表>
激发态 38 e 4 X态 39 e 1 66788.4476 66788.4944 -0.0468 .052200 0.0000 : qP31(39) : 激发态 振动量子数=4 38 39 F3e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e :1043:<谱线表>
激发态 29 f 3 X态 29 e 1 67236.3390 67236.3402 -0.0012 .028600 0.0000 : qQ21(29) : 激发态 振动量子数=4 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :1083:<谱线表>
激发态 30 f 3 X态 30 e 1 67198.5748 67198.5348 0.0400 .025700 0.0000: qQ21(30): 激发态 振动量子数=4 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e: 1084: <谱线表>
激发态 31 f 3 X态 31 e 1 67159.7505 67159.7064 0.0441 .026000 0.0000: qQ21(31): 激发态 振动量子数=4 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e: 1085: <谱线表>
激发态 33 f 2 X态 33 e 1 67070.6794 67070.6644 0.0150 .036000 0.0000: qQ21(33): 激发态 振动量子数=4 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e: 1087: <谱线表>
激发态 39 f 2 X态 39 e 1 66788.5333 66788.5227 0.0106 .046100 0.0000: qQ21(39): 激发态 振动量子数=4 39 39 F2f - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e: 1093: <谱线表>
激发态 1 e 4 X态 0 e 1 67803.8885 67803.8618 0.0267 .028800 0.0000: qR1(0): 激发态 振动量子数=4 1 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e: 1105: <谱线表>
激发态 2 e 5 X态 1 e 1 67802.5691 67802.5469 0.0222 .029300 0.0000: qR1(1): 激发态 振动量子数=4 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e: 1106: <谱线表>
激发态 3 e态 5 X态 2 e态 1 67799.9569 67799.9593 -0.0024 .029200 0.0000 : qR1(2) : 激发态 振动量子数=4 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1107:<谱线表>
激发态 4 e态 5 X态 3 e态 1 67796.0929 67796.0846 0.0083 .029100 0.0000 : qR1(3) : 激发态 振动量子数=4 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1108:<谱线表>
激发态 24 e态 3 X态 23 e态 1 67452.6898 67452.6850 0.0048 .020400 0.0000 : qR1(23) : 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :1128:<谱线表>
激发态 27 e 1 X态 26 e 1 67335.3384 67335.3497 -0.0113 .080000 0.0000 : qR1(26) : 激发态 振动量子数=4 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e :1131:<谱线表>
激发态 28 e 1 X态 27 e 1 67303.5804 67303.6838 -0.1034 .045500 0.0000 : qR1(27) : 激发态 振动量子数=4 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e :1132:<谱线表>
激发态 1 e 5 X态 0 e 1 67810.2137 67810.2130 0.0007 .031900 0.0000 : sR31(0) : 激发态 振动量子数=4 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e :1155:<谱线表>
激发态 2 e 6 X态 1 e 1 67813.3323 67813.3319 0.0004 .028400 0.0000 : sR31(1) : 激发态 振动量子数=4 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :1156:<谱线表>
激发态 6 e 6 X态 5 e 1 67812.7037 67812.7260 -0.0223 .031500 0.0000 : sR31(5) : 激发态 振动量子数=4 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1160:<谱线表>
激发态 7 e 6 X态 6 e 1 67809.3828 67809.3268 0.0560 .029000 0.0000 : sR31(6) : 激发态 振动量子数=4 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1161:<谱线表>
激发态 8 e态 6 X态 7 e态 1 67804.6707 67804.6300 0.0407 .029900 0.0000 : sR31(7) : 激发态 振动量子数=4 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1162:<谱线表>
激发态 9 e态 6 X态 8 e态 1 67798.6351 67798.6359 -0.0008 .029900 0.0000 : sR31(8) : 激发态 振动量子数=4 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1163:<谱线表>
激发态 11 e态 6 X态 10 e态 1 67782.8266 67782.7570 0.0696 .029500 0.0000 : sR31(10) : 激发态 振动量子数=4 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1165:<谱线表>
激发态 12 e态 6 X态 11 e态 1 67772.8358 67772.8733 -0.0375 .030300 0.0000 : sR31(11) : 激发态 振动量子数=4 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1166:<谱线表>
激发态 13 e态 6 X态 12 e态 1 67761.7169 67761.6946 0.0223 .029700 0.0000 : sR31(12) : 激发态 振动量子数=4 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1167:<谱线表>
激发态 14 e态 6 X态 13 e态 1 67749.2996 67749.2225 0.0771 .029800 0.0000 : sR31(13) : 激发态 振动量子数=4 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1168:<谱线表>
激发态 15 e 6 X态 14 e 1 67735.4627 67735.4591 0.0036 .029200 0.0000 : sR31(14) : 激发态 振动量子数=4 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1169:<谱线表>
激发态 16 e 6 X态 15 e 1 67720.4165 67720.4079 0.0086 .029400 0.0000 : sR31(15) : 激发态 振动量子数=4 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1170:<谱线表>
激发态 17 e 6 X态 16 e 1 67704.1169 67704.0748 0.0421 .032600 0.0000 : sR31(16) : 激发态 振动量子数=4 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1171:<谱线表>
激发态 20 e态 6 X态 19 e态 1 67647.5571 67647.5475 0.0096 .029100 0.0000: sR31(19): 激发态 振动量子数=4 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e: 1174: <谱线表>
激发态 32 e态 4 X态 31 e态 1 67295.1332 67295.1392 -0.0060 .029500 0.0000: sR31(31): 激发态 振动量子数=4 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e: 1186: <谱线表>
激发态 33 e态 4 X态 32 e态 1 67259.1487 67259.1811 -0.0324 .036000 0.0000: sR31(32): 激发态 振动量子数=4 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e: 1187: <谱线表>
激发态 34 e 4 X态 33 e 1 67221.2759 67221.3017 -0.0258 .079800 0.0000 : sR31(33) : 激发态 振动量子数=4 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :1188:<谱线表>
激发态 35 e 4 X态 34 e 1 67181.8056 67181.8286 -0.0230 .028100 0.0000 : sR31(34) : 激发态 振动量子数=4 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :1189:<谱线表>
激发态 8 e 7 X态 9 e 1 67825.6194 67825.5297 0.0897 .058700 0.0000 : oP1(9) : 激发态 d态振动量子数=7 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1210:<谱线表>
激发态 9 e 7 X态 10 e 1 67809.1018 67809.0631 0.0387 .062600 0.0000 : oP1(10) : 激发态 振动量子数=7 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1211:<谱线表>
激发态 11 e 7 X态 12 e 1 67771.9188 67771.8949 0.0239 .042600 0.0000 : oP1(12) : 激发态 振动量子数=7 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1213:<谱线表>
激发态 12 e 7 X态 13 e 1 67751.2473 67751.2059 0.0414 .049500 0.0000 : oP1(13) : 激发态 振动量子数=7 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1214:<谱线表>
激发态 13 e 7 X态 14 e 1 67729.1337 67729.1219 0.0118 .036100 0.0000 : oP1(14) : 激发态 振动量子数=7 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1215:<谱线表>
激发态 14 e 7 X态 15 e 1 67705.6540 67705.6487 0.0053 .060400 0.0000 : oP1(15) : 激发态 振动量子数=7 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1216:<谱线表>
激发态 15 e 7 X态 16 e 1 67680.7586 67680.7921 -0.0335 .046800 0.0000 : oP1(16) : 激发态 振动量子数=7 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1217:<谱线表>
激发态 16 e 7 X态 17 e 1 67654.5721 67654.5576 0.0145 .051500 0.0000 : oP1(17) : 激发态 振动量子数=7 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1218:<谱线表>
激发态 27 e 5 X态 28 e 1 67274.9507 67274.9342 0.0165 .034900 0.0000 : oP1(28) : 激发态 振动量子数=7 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e :1229:<谱线表>
激发态 30 e 3 X态 31 e 1 67138.4857 67138.4698 0.0159 .029200 0.0000 : oP1(31) : 激发态 振动量子数=7 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :1232:<谱线表>
激发态 31 e 3 X态 32 e 1 67095.5596 67095.6239 -0.0643 .032200 0.0000 : oP1(32) : 激发态 振动量子数=7 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :1233:<谱线表>
激发态 2 e 7 X态 3 e 1 67932.4665 67932.4278 0.0387 .075100 0.0000 : pP21(3) : 激发态 振动量子数=7 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1252:<谱线表>
激发态 3 e 8 X态 4 e 1 67924.9449 67924.9430 0.0019 .056200 0.0000 : pP21(4) : 激发态 振动量子数=7 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1253:<谱线表>
激发态 4 e 8 X 5 e 1 67916.1301 67916.1275 0.0026 .037200 0.0000 : pP21(5) : 激发态 振动量子数dv=7 4 4 F2e - X态 X态振动量子数Xv=0 5 5 F1e :1254:<谱线表>
激发态 5 e 8 X 6 e 1 67906.0098 67905.9811 0.0287 .034800 0.0000 : pP21(6) : 激发态 振动量子数dv=7 5 5 F2e - X态 X态振动量子数Xv=0 6 6 F1e :1255:<谱线表>
激发态 6 e 8 X 7 e 1 67894.5083 67894.5036 0.0047 .026200 0.0000 : pP21(7) : 激发态 振动量子数dv=7 6 6 F2e - X态 X态振动量子数Xv=0 7 7 F1e :1256:<谱线表>
激发态 7 e 8 X态 8 e 1 67881.7113 67881.6949 0.0164 .030500 0.0000 : pP21(8) : 激发态 振动量子数=7 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1257:<谱线表>
激发态 8 e 8 X态 9 e 1 67867.5636 67867.5547 0.0089 .028200 0.0000 : pP21(9) : 激发态 振动量子数=7 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1258:<谱线表>
激发态 9 e 8 X态 10 e 1 67852.0771 67852.0830 -0.0059 .028900 0.0000 : pP21(10) : 激发态 振动量子数=7 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1259:<谱线表>
激发态 10 e 8 X态 11 e 1 67835.2880 67835.2797 0.0083 .028200 0.0000: pP21(11): 激发态 振动量子数=7 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e: 1260: <谱线表>
激发态 11 e 8 X态 12 e 1 67817.1833 67817.1447 0.0386 .029800 0.0000: pP21(12): 激发态 振动量子数=7 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e: 1261: <谱线表>
激发态 12 e 8 X态 13 e 1 67797.7085 67797.6780 0.0305 .028800 0.0000: pP21(13): 激发态 振动量子数=7 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e: 1262: <谱线表>
激发态 14 e态 8 X态 15 e态 1 67754.7654 67754.7496 0.0158 .028400 0.0000 : pP21(15) : 激发态 振动量子数=7 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1264:<谱线表>
激发态 15 e态 8 X态 16 e态 1 67731.2950 67731.2882 0.0068 .028100 0.0000 : pP21(16) : 激发态 振动量子数=7 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1265:<谱线表>
激发态 16 e态 8 X态 17 e态 1 67706.5009 67706.4954 0.0055 .025800 0.0000 : pP21(17) : 激发态 振动量子数=7 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1266:<谱线表>
激发态 17 e态 8 X态 18 e态 1 67680.3165 67680.3715 -0.0550 .029100 0.0000 : pP21(18) : 激发态 振动量子数=7 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1267:<谱线表>
激发态 28 e态 8 X态 29 e态 1 67305.3504 67305.4082 -0.0578 .084700 0.0000 : pP21(29) : 激发态 振动量子数=7 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :1278:<谱线表>
激发态 29 e态 7 X态 30 e态 1 67262.8285 67262.9362 -0.1077 .028900 0.0000 : pP21(30) : 激发态 振动量子数=7 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e :1279:<谱线表>
激发态 30 e 7 X态 31 e 1 67219.8074 67219.7640 0.0434 .029600 0.0000 : pP21(31) : 激发态 振动量子数=7 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :1280:<谱线表>
激发态 31 e 7 X态 32 e 1 67175.1240 67175.1132 0.0108 .042000 0.0000 : pP21(32) : 激发态 振动量子数=7 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :1281:<谱线表>
激发态 34 e 7 X态 35 e 1 67033.3721 67033.4208 -0.0487 .027100 0.0000 : pP21(35) : 激发态 振动量子数=7 34 34 F2e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e :1284:<谱线表>
激发态 35 e态 6 X态 36 e态 1 66981.1925 66981.2405 -0.0480 .026700 0.0000: pP21(36): 激发态 dv=7 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e: 1285: <谱线表>
激发态 6 f态 7 X态 6 e态 1 67878.6718 67878.6384 0.0334 .232600 0.0000: pQ1(6): 激发态 dv=7 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e: 1303: <谱线表>
激发态 7 f态 7 X态 7 e态 1 67868.5212 67868.5082 0.0130 .073500 0.0000: pQ1(7): 激发态 dv=7 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e: 1304: <谱线表>
激发态 8 f 7 X 8 e 1 67856.8879 67856.9503 -0.0624 .030000 0.0000 : pQ1(8) : 激发态 振动量子数=7 8 7 F1f - X X态振动量子数=0 8 8 F1e :1305:<谱线表>
激发态 9 f 7 X 9 e 1 67844.0010 67843.9711 0.0299 .086800 0.0000 : pQ1(9) : 激发态 振动量子数=7 9 8 F1f - X X态振动量子数=0 9 9 F1e :1306:<谱线表>
激发态 10 f 7 X 10 e 1 67829.6184 67829.5768 0.0416 .070000 0.0000 : pQ1(10) : 激发态 振动量子数=7 10 9 F1f - X X态振动量子数=0 10 10 F1e :1307:<谱线表>
激发态 11 f 7 X态 11 e 1 67813.7915 67813.7738 0.0177 .039700 0.0000 : pQ1(11) : 激发态 振动量子数=7 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1308:<谱线表>
激发态 12 f 7 X态 12 e 1 67796.6398 67796.5682 0.0716 .029400 0.0000 : pQ1(12) : 激发态 振动量子数=7 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1309:<谱线表>
激发态 13 f 7 X态 13 e 1 67777.9809 67777.9659 0.0150 .036300 0.0000 : pQ1(13) : 激发态 振动量子数=7 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1310:<谱线表>
激发态 15 f 7 X态 15 e 1 67736.5992 67736.5944 0.0048 .034200 0.0000: pQ1(15): 激发态 振动量子数=7 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e: 1312: <谱线表>
激发态 16 f 7 X态 16 e 1 67713.8154 67713.8363 -0.0209 .034600 0.0000: pQ1(16): 激发态 振动量子数=7 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e: 1313: <谱线表>
激发态 17 f 7 X态 17 e 1 67689.7018 67689.7039 -0.0021 .028000 0.0000: pQ1(17): 激发态 振动量子数=7 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e: 1314: <谱线表>
激发态 18 f 7 X态 18 e 1 67664.1939 67664.2031 -0.0092 .034800 0.0000 : pQ1(18) : 激发态 振动量子数=7 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1315:<谱线表>
激发态 19 f 7 X态 19 e 1 67637.4103 67637.3405 0.0698 .031500 0.0000 : pQ1(19) : 激发态 振动量子数=7 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1316:<谱线表>
激发态 29 f 6 X态 29 e 1 67297.5066 67297.5614 -0.0548 .032900 0.0000 : pQ1(29) : 激发态 振动量子数=7 29 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :1326:<谱线表>
激发态 30 f 4 X态 30 e 1 67248.7013 67248.6818 0.0195 .041200 0.0000: pQ1(30): 激发态 振动量子数=7 30 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e: 1327: <谱线表>
激发态 35 f 3 X态 35 e 1 67015.3768 67015.3572 0.0196 .025600 0.0000: pQ1(35): 激发态 振动量子数=7 35 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e: 1332: <谱线表>
激发态 1 e 6 X态 2 e 1 67977.4448 67977.4179 0.0269 .029000 0.0000: qP31(2): 激发态 振动量子数=7 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e: 1348: <谱线表>
激发态 2 e 8 X态 3 e 1 67971.4639 67971.5005 -0.0366 .029600 0.0000 : qP31(3) : 激发态 振动量子数=7 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1349:<谱线表>
激发态 3 e 9 X态 4 e 1 67964.3989 67964.3682 0.0307 .029500 0.0000 : qP31(4) : 激发态 振动量子数=7 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1350:<谱线表>
激发态 4 e 9 X态 5 e 1 67956.0797 67956.0178 0.0619 .029300 0.0000 : qP31(5) : 激发态 振动量子数=7 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1351:<谱线表>
激发态 5 e 9 X态 6 e 1 67946.5016 67946.4449 0.0567 .029800 0.0000 : qP31(6) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1352:<谱线表>
激发态 6 e 9 X态 7 e 1 67935.7413 67935.6416 0.0997 .028900 0.0000 : qP31(7) : 激发态 振动量子数=7 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1353:<谱线表>
激发态 7 e 10 X态 8 e 1 67923.5632 67923.6264 -0.0632 .029700 0.0000 : qP31(8) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1354:<谱线表>
激发态 8 e 10 X态 9 e 1 67910.3798 67910.3532 0.0266 .029400 0.0000 : qP31(9) : 激发态 dv=7 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1355:<谱线表>
激发态 9 e 10 X态 10 e 1 67895.8638 67895.8413 0.0225 .029100 0.0000 : qP31(10) : 激发态 dv=7 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1356:<谱线表>
激发态 10 e 10 X态 11 e 1 67880.1415 67880.0811 0.0604 .029500 0.0000 : qP31(11) : 激发态 dv=7 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1357:<谱线表>
激发态 11 e 10 X态 12 e 1 67863.1001 67863.0663 0.0338 .029800 0.0000: qP31(12): 激发态 dv=7 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e: 1358: <谱线表>
激发态 12 e 10 X态 13 e 1 67844.8157 67844.7913 0.0244 .028400 0.0000: qP31(13): 激发态 dv=7 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e: 1359: <谱线表>

激发态 13 e 10 X态 14 e 1 67825.2462 67825.2507 -0.0045 .028800 0.0000 : qP31(14) : 激发态 振动量子数=7 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1360:<谱线表>
激发态 14 e 10 X态 15 e 1 67804.4537 67804.4394 0.0143 .030400 0.0000 : qP31(15) : 激发态 振动量子数=7 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1361:<谱线表>
激发态 15 e 10 X态 16 e 1 67782.3184 67782.3525 -0.0341 .028800 0.0000 : qP31(16) : 激发态 振动量子数=7 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1362:<谱线表>
激发态 16 e态 10 X态 17 e态 1 67759.0029 67758.9858 0.0171 .025900 0.0000 : qP31(17): 激发态 振动量子数=7 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e: 1363: <谱线表>
激发态 17 e态 10 X态 18 e态 1 67734.3483 67734.3350 0.0133 .028100 0.0000 : qP31(18): 激发态 振动量子数=7 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e: 1364: <谱线表>
激发态 18 e态 10 X态 19 e态 1 67708.3820 67708.3966 -0.0146 .039000 0.0000 : qP31(19): 激发态 振动量子数=7 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e: 1365: <谱线表>
激发态 19 e 10 X态 20 e 1 67681.1843 67681.1671 0.0172 .036500 0.0000 : qP31(20) : 激发态 振动量子数=7 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1366:<谱线表>
激发态 31 e 10 X态 32 e 1 67253.3859 67253.4452 -0.0593 .055000 0.0000 : qP31(32) : 激发态 振动量子数=7 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :1378:<谱线表>
激发态 40 e 7 X态 41 e 1 66803.2851 66803.1846 0.1005 .043800 0.0000 : qP31(41) : 激发态 振动量子数=7 40 41 F3e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e :1387:<谱线表>
激发态 41 e 7 X态 42 e 1 66748.7177 66748.7416 -0.0239 .025600 0.0000 : qP31(42) : 激发态振动量子数=7 41 42 F3e - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e :1388:<谱线表>
激发态 48 e 6 X态 49 e 1 66318.5261 66318.5580 -0.0319 .030800 0.0000 : qP31(49) : 激发态振动量子数=7 48 49 F3e - X态 X态振动量子数=0 49 49 F1e :1395:<谱线表>
激发态 2 f 7 X态 2 e 1 67942.9100 67942.9057 0.0043 .057900 0.0000 : qQ21(2) : 激发态振动量子数=7 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1397:<谱线表>
激发态 3 f 8 X态 3 e 1 67938.9185 67938.9130 0.0055 .027900 0.0000: qQ21(3): 激发态 振动量子数=7 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e: 1398: <谱线表>
激发态 4 f 8 X态 4 e 1 67933.5956 67933.5891 0.0065 .029900 0.0000: qQ21(4): 激发态 振动量子数=7 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e: 1399: <谱线表>
激发态 5 f 8 X态 5 e 1 67926.9923 67926.9336 0.0587 .031300 0.0000: qQ21(5): 激发态 振动量子数=7 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e: 1400: <谱线表>
激发态 6 f 8 X态 6 e 1 67918.9579 67918.9464 0.0115 .028500 0.0000: qQ21(6): 激发态 振动量子数=7 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e: 1401: <谱线表>
激发态 7 f 8 X态 7 e 1 67909.6306 67909.6270 0.0036 .028300 0.0000: qQ21(7): 激发态 振动量子数=7 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e: 1402: <谱线表>
激发态 8 f 8 X态 8 e 1 67898.9833 67898.9753 0.0080 .028400 0.0000: qQ21(8): 激发态 振动量子数=7 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e: 1403: <谱线表>
激发态 9 f 8 X态 9 e 1 67886.9965 67886.9910 0.0055 .028300 0.0000: qQ21(9): 激发态 振动量子数=7 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e: 1404: <谱线表>
激发态 10 f 8 X态 10 e 1 67873.6283 67873.6738 -0.0455 .028300 0.0000: qQ21(10): 激发态 振动量子数=7 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e: 1405: <谱线表>
激发态 11 f 8 X态 11 e 1 67859.0326 67859.0235 0.0091 .028400 0.0000: qQ21(11): 激发态 振动量子数=7 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e: 1406: <谱线表>
激发态 12 f 8 X态 12 e 1 67843.0498 67843.0402 0.0096 .025900 0.0000 : qQ21(12) : 激发态 振动量子数=7 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1407:<谱线表>
激发态 13 f 8 X态 13 e 1 67825.7535 67825.7235 0.0300 .028600 0.0000 : qQ21(13) : 激发态 振动量子数=7 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1408:<谱线表>
激发态 14 f 8 X态 14 e 1 67807.1071 67807.0736 0.0335 .028300 0.0000 : qQ21(14) : 激发态 振动量子数=7 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1409:<谱线表>
激发态 15 f 8 X态 15 e态 1 67787.0993 67787.0901 0.0092 .028200 0.0000 : qQ21(15) : 激发态 振动量子数=7 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1410:<谱线表>
激发态 16 f 9 X态 16 e态 1 67765.8231 67765.7879 0.0352 .028300 0.0000 : qQ21(16) : 激发态 振动量子数=7 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1411:<谱线表>
激发态 17 f 9 X态 17 e态 1 67743.1287 67743.1251 0.0036 .025800 0.0000 : qQ21(17) : 激发态 振动量子数=7 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1412:<谱线表>
激发态 19 f 9 X态 19 e 1 67693.8230 67693.8265 -0.0035 .028200 0.0000 : qQ21(19) : 激发态 振动量子数=7 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1414:<谱线表>
激发态 21 f 9 X态 21 e 1 67639.2035 67639.1976 0.0059 .030100 0.0000 : qQ21(21) : 激发态 振动量子数=7 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :1416:<谱线表>
激发态 29 f 8 X态 29 e 1 67367.0860 67367.1819 -0.0959 .052500 0.0000 : qQ21(29) : 激发态 振动量子数=7 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :1424:<谱线表>
激发态 36 f 6 X态 36 e 1 67058.8239 67058.7190 0.1049 .034900 0.0000 : qQ21(36) : 激发态 振动量子数=7 36 36 F2f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e :1431:<谱线表>
激发态 38 f 6 X态 38 e 1 66959.3872 66959.4267 -0.0395 .046100 0.0000 : qQ21(38) : 激发态 振动量子数=7 38 38 F2f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e :1433:<谱线表>
激发态 4 e 7 X态 3 e 1 67908.5861 67908.5618 0.0243 .030500 0.0000 : qR1(3) : 激发态 振动量子数=7 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1447:<谱线表>
激发态 5 e 7 X态 4 e 1 67904.8006 67904.7964 0.0042 .043600 0.0000 : qR1(4) : 激发态 振动量子数=7 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1448:<谱线表>
激发态 6 e 7 X态 5 e 1 67899.5901 67899.5909 -0.0008 .041800 0.0000 : qR1(5) : 激发态 振动量子数=7 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1449:<谱线表>
激发态 7 e 7 X态 6 e 1 67892.9017 67892.9510 -0.0493 .055500 0.0000 : qR1(6) : 激发态 振动量子数=7 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1450:<谱线表>
激发态 8 e 7 X态 7 e 1 67884.8118 67884.8825 -0.0707 .054600 0.0000 : qR1(7) : 激发态 振动量子数=7 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1451:<谱线表>
激发态 9 e 7 X态 8 e 1 67875.4055 67875.3917 0.0138 .087700 0.0000 : qR1(8) : 激发态 振动量子数=7 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1452:<谱线表>
激发态 10 e 7 X态 9 e 1 67864.5139 67864.4848 0.0291 .036500 0.0000 : qR1(9) : 激发态 振动量子数=7 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1453:<谱线表>
激发态 11 e态 7 X态 10 e态 1 67852.1994 67852.1679 0.0315 .060200 0.0000 : qR1(10) : 激发态 振动量子数=7 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1454:<谱线表>
激发态 12 e态 7 X态 11 e态 1 67838.5323 67838.4471 0.0852 .056700 0.0000 : qR1(11) : 激发态 振动量子数=7 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1455:<谱线表>
激发态 13 e态 7 X态 12 e态 1 67823.3475 67823.3282 0.0193 .031700 0.0000 : qR1(12) : 激发态 振动量子数=7 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1456:<谱线表>
激发态 14 e 7 X态 13 e 1 67806.8753 67806.8168 0.0585 .042100 0.0000: qR1(13): 激发态 振动量子数=7 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e: 1457: <谱线表>
激发态 15 e 7 X态 14 e 1 67788.9325 67788.9186 0.0139 .045300 0.0000: qR1(14): 激发态 振动量子数=7 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e: 1458: <谱线表>
激发态 16 e 7 X态 15 e 1 67769.6464 67769.6387 0.0077 .038400 0.0000: qR1(15): 激发态 振动量子数=7 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e: 1459: <谱线表>
激发态 17 e 7 X态 16 e 1 67748.9646 67748.9826 -0.0180 .044500 0.0000 : qR1(16) : 激发态 振动量子数=7 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1460:<谱线表>
激发态 18 e 7 X态 17 e 1 67726.8697 67726.9561 -0.0864 .026000 0.0000 : qR1(17) : 激发态 振动量子数=7 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1461:<谱线表>
激发态 20 e 7 X态 19 e 1 67678.8724 67678.8196 0.0528 .029400 0.0000 : qR1(19) : 激发态 振动量子数=7 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1463:<谱线表>
激发态 31 e态 3 X态 30 e态 1 67314.3848 67314.4096 -0.0248 .028500 0.0000: qR1(30): 激发态 振动量子数=7 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e: 1474:<谱线表>
激发态 36 e态 2 X态 35 e态 1 67094.5189 67094.5508 -0.0319 .049200 0.0000: qR1(35): 激发态 振动量子数=7 36 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e: 1479:<谱线表>
激发态 41 e态 2 X态 40 e态 1 66843.6069 66843.6448 -0.0379 .033700 0.0000: qR1(40): 激发态 振动量子数=7 41 40 F1e - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e: 1484:<谱线表>
激发态 43 e 2 X 42 e 1 66733.2659 66733.3481 -0.0822 .053000 0.0000 : qR1(42) : 激发态 振动量子数=7 43 42 F1e - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e :1486:<谱线表>
激发态 46 e 2 X 45 e 1 66557.7520 66557.7694 -0.0174 .025100 0.0000 : qR1(45) : 激发态 振动量子数=7 46 45 F1e - X态 X态振动量子数=0 45 45 F1e :1489:<谱线表>
激发态 1 f 6 X 1 e 1 67984.4590 67984.4030 0.0560 .029600 0.0000 : rQ31(1) : 激发态 振动量子数=7 1 2 F3f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :1494:<谱线表>
激发态 2 f 8 X态 2 e 1 67981.9350 67981.9756 -0.0406 .043100 0.0000 : rQ31(2) : 激发态 振动量子数=7 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1495:<谱线表>
激发态 3 f 10 X态 3 e 1 67978.4029 67978.3417 0.0612 .042400 0.0000 : rQ31(3) : 激发态 振动量子数=7 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1496:<谱线表>
激发态 4 f 10 X态 4 e 1 67973.5394 67973.4818 0.0576 .033300 0.0000 : rQ31(4) : 激发态 振动量子数=7 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1497:<谱线表>
激发态 5 f 10 X态 5 e态 1 67967.3855 67967.4005 -0.0150 .034700 0.0000 : rQ31(5) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1498:<谱线表>
激发态 6 f 10 X态 6 e态 1 67960.1257 67960.0920 0.0337 .031400 0.0000 : rQ31(6) : 激发态 振动量子数=7 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1499:<谱线表>
激发态 7 f 10 X态 7 e态 1 67951.5173 67951.5510 -0.0337 .034300 0.0000 : rQ31(7) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1500:<谱线表>
激发态 8 f 10 X态 8 e 1 67941.8235 67941.7716 0.0519 .039200 0.0000 : rQ31(8) : 激发态 振动量子数=7 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1501:<谱线表>
激发态 9 f 10 X态 9 e 1 67930.7299 67930.7480 -0.0181 .038900 0.0000 : rQ31(9) : 激发态 振动量子数=7 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1502:<谱线表>
激发态 10 f 10 X态 10 e 1 67918.4727 67918.4743 -0.0016 .037800 0.0000 : rQ31(10) : 激发态 振动量子数=7 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1503:<谱线表>
激发态 11 f 10 X态 11 e 1 67904.9422 67904.9446 -0.0024 .032200 0.0000 : rQ31(11) : 激发态 dv=7 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1504:<谱线表>
激发态 13 f 10 X态 13 e 1 67874.1690 67874.0943 0.0747 .038100 0.0000 : rQ31(13) : 激发态 dv=7 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1506:<谱线表>
激发态 14 f 10 X态 14 e 1 67856.8314 67856.7631 0.0683 .035200 0.0000 : rQ31(14) : 激发态 dv=7 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1507:<谱线表>
激发态 15 f 10 X态 15 e 1 67838.0615 67838.1546 -0.0931 .029700 0.0000 : rQ31(15) : 激发态 振动量子数=7 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1508:<谱线表>
激发态 16 f 10 X态 16 e 1 67818.3199 67818.2642 0.0557 .029900 0.0000 : rQ31(16) : 激发态 振动量子数=7 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1509:<谱线表>
激发态 17 f 10 X态 17 e 1 67797.1151 67797.0877 0.0274 .034100 0.0000 : rQ31(17) : 激发态 振动量子数=7 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1510:<谱线表>
激发态 18 f 10 X态 18 e 1 67774.6192 67774.6214 -0.0022 .029100 0.0000: rQ31(18): 激发态 振动量子数=7 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e: 1511: <谱线表>
激发态 19 f 10 X态 19 e 1 67750.8395 67750.8617 -0.0222 .028700 0.0000: rQ31(19): 激发态 振动量子数=7 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e: 1512: <谱线表>
激发态 20 f 10 X态 20 e 1 67725.8035 67725.8057 -0.0022 .028500 0.0000: rQ31(20): 激发态 振动量子数=7 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e: 1513: <谱线表>
激发态 21 f 10 X态 21 e 1 67699.4416 67699.4507 -0.0091 .028200 0.0000 : rQ31(21) : 激发态 dv=7 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :1514:<谱线表>
激发态 22 f 10 X态 22 e 1 67671.7875 67671.7944 -0.0069 .028400 0.0000 : rQ31(22) : 激发态 dv=7 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :1515:<谱线表>
激发态 23 f 10 X态 23 e 1 67642.7977 67642.8351 -0.0374 .030500 0.0000 : rQ31(23) : 激发态 dv=7 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :1516:<谱线表>
激发态 42 f 8 X态 42 e 1 66840.2515 66840.1421 0.1094 .028300 0.0000 : rQ31(42) : 激发态 振动量子数=7 42 43 F3f - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e :1535:<谱线表>
激发态 43 f 8 X态 43 e 1 66784.8024 66784.8363 -0.0339 .028800 0.0000 : rQ31(43) : 激发态 振动量子数=7 43 44 F3f - X态 X态振动量子数=0 43 43 F1e :1536:<谱线表>
激发态 2 e 7 X态 1 e 1 67949.9051 67949.8912 0.0139 .095400 0.0000 : rR21(1) : 激发态 振动量子数=7 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :1544:<谱线表>
激发态 3 e 8 X态 2 e 1 67949.3726 67949.3909 -0.0183 .056600 0.0000 : rR21(2) : 激发态 振动量子数=7 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1545:<谱线表>
激发态 4 e 8 X态 3 e 1 67947.5836 67947.5591 0.0245 .034800 0.0000 : rR21(3) : 激发态 振动量子数=7 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1546:<谱线表>
激发态 5 e 8 X态 4 e 1 67944.3977 67944.3952 0.0025 .029500 0.0000 : rR21(4) : 激发态 振动量子数=7 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1547:<谱线表>
激发态 6 e态 8 X态 5 e态 1 67939.9065 67939.8989 0.0076 .026100 0.0000: rR21(5): 激发态 dv=7 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e: 1548: <谱线表>
激发态 7 e态 8 X态 6 e态 1 67934.0749 67934.0698 0.0051 .028400 0.0000: rR21(6): 激发态 dv=7 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e: 1549: <谱线表>
激发态 8 e态 8 X态 7 e态 1 67926.8791 67926.9075 -0.0284 .029000 0.0000: rR21(7): 激发态 dv=7 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e: 1550: <谱线表>
激发态 9 e 8 X态 8 e 1 67918.3549 67918.4116 -0.0567 .029600 0.0000 : rR21(8) : 激发态 振动量子数=7 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1551:<谱线表>
激发态 10 e 8 X态 9 e 1 67908.5290 67908.5818 -0.0528 .030500 0.0000 : rR21(9) : 激发态 振动量子数=7 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1552:<谱线表>
激发态 11 e 8 X态 10 e 1 67897.4250 67897.4177 0.0073 .025900 0.0000 : rR21(10) : 激发态 振动量子数=7 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1553:<谱线表>
激发态 12 e态 8 X态 11 e态 1 67884.9248 67884.9191 0.0057 .030100 0.0000 : rR21(11) : 激发态 振动量子数=7 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1554:<谱线表>
激发态 13 e态 8 X态 12 e态 1 67871.0957 67871.0859 0.0098 .028000 0.0000 : rR21(12) : 激发态 振动量子数=7 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1555:<谱线表>
激发态 14 e态 8 X态 13 e态 1 67855.9047 67855.9178 -0.0131 .028900 0.0000 : rR21(13) : 激发态 振动量子数=7 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1556:<谱线表>
激发态 15 e 8 X态 14 e 1 67839.4217 67839.4146 0.0071 .028200 0.0000: rR21(14): 激发态 振动量子数=7 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e: 1557: <谱线表>
激发态 16 e 8 X态 15 e 1 67821.5702 67821.5765 -0.0063 .028600 0.0000: rR21(15): 激发态 振动量子数=7 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e: 1558: <谱线表>

激发态 17 e 8 X态 16 e 1 67802.3498 67802.4031 -0.0533 .030000 0.0000 : rR21(16) : 激发态 振动量子数=7 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1559:<谱线表>
激发态 18 e 8 X态 17 e 1 67781.8912 67781.8947 -0.0035 .028000 0.0000 : rR21(17) : 激发态 振动量子数=7 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1560:<谱线表>
激发态 19 e 8 X态 18 e 1 67760.0463 67760.0512 -0.0049 .025900 0.0000 : rR21(18) : 激发态 振动量子数=7 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1561:<谱线表>
激发态 20 e态 8 X态 19 e态 1 67736.8650 67736.8727 -0.0077 .028000 0.0000 : rR21(19) : 激发态 振动量子数=7 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1562:<谱线表>
激发态 21 e态 8 X态 20 e态 1 67712.3382 67712.3594 -0.0212 .028500 0.0000 : rR21(20) : 激发态 振动量子数=7 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1563:<谱线表>
激发态 23 e态 8 X态 22 e态 1 67659.3201 67659.3303 -0.0102 .029200 0.0000 : rR21(22) : 激发态 振动量子数=7 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :1565:<谱线表>
激发态 24 e态 8 X态 23 e态 1 67630.7490 67630.8159 -0.0669 .055300 0.0000 : rR21(23) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :1566:<谱线表>
激发态 1 e态 6 X态 0 e态 1 67987.9000 67987.8961 0.0039 .030300 0.0000 : sR31(0) : 激发态 振动量子数=7 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e :1593:<谱线表>
激发态 2 e态 8 X态 1 e态 1 67988.9224 67988.9639 -0.0415 .033200 0.0000 : sR31(1) : 激发态 振动量子数=7 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :1594:<谱线表>
激发态 3 e 9 X态 2 e 1 67988.7290 67988.8161 -0.0871 .031300 0.0000 : sR31(2) : 激发态 振动量子数=7 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1595:<谱线表>
激发态 4 e 9 X态 3 e 1 67987.3545 67987.4493 -0.0948 .033100 0.0000 : sR31(3) : 激发态 振动量子数=7 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1596:<谱线表>
激发态 5 e 9 X态 4 e 1 67984.8978 67984.8590 0.0388 .036600 0.0000 : sR31(4) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1597:<谱线表>
激发态 6 e态 9 X态 5 e态 1 67980.9838 67981.0370 -0.0532 .037300 0.0000 : sR31(5) : 激发态 振动量子数=7 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1598:<谱线表>
激发态 7 e态 10 X态 6 e态 1 67976.0239 67976.0013 0.0226 .033900 0.0000 : sR31(6) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1599:<谱线表>
激发态 8 e态 10 X态 7 e态 1 67969.7192 67969.7061 0.0131 .034600 0.0000 : sR31(7) : 激发态 振动量子数=7 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1600:<谱线表>
激发态 9 e 10 X态 8 e 1 67962.2366 67962.1699 0.0667 .033700 0.0000 : sR31(8) : 激发态 振动量子数=7 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1601:<谱线表>
激发态 10 e 10 X态 9 e 1 67953.4055 67953.3831 0.0224 .033900 0.0000 : sR31(9) : 激发态 振动量子数=7 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1602:<谱线表>
激发态 11 e 10 X态 10 e 1 67943.3567 67943.3393 0.0174 .032200 0.0000 : sR31(10) : 激发态 振动量子数=7 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1603:<谱线表>
激发态 12 e态 10 X态 11 e态 1 67932.0327 67932.0325 0.0002 .033200 0.0000 : sR31(11) : 激发态 振动量子数=7 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1604:<谱线表>
激发态 13 e态 10 X态 12 e态 1 67919.4637 67919.4570 0.0067 .030700 0.0000 : sR31(12) : 激发态 振动量子数=7 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1605:<谱线表>
激发态 14 e态 10 X态 13 e态 1 67905.6725 67905.6075 0.0650 .030200 0.0000 : sR31(13) : 激发态 振动量子数=7 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1606:<谱线表>
激发态 16 e态 10 X态 15 e态 1 67874.0440 67874.0668 -0.0228 .034800 0.0000 : sR31(15) : 激发态 振动量子数=7 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1608:<谱线表>
激发态 17 e态 10 X态 16 e态 1 67856.3627 67856.3667 -0.0040 .029200 0.0000 : sR31(16) : 激发态 振动量子数=7 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1609:<谱线表>
激发态 18 e态 10 X态 17 e态 1 67837.3834 67837.3746 0.0088 .028400 0.0000 : sR31(17) : 激发态 振动量子数=7 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1610:<谱线表>
激发态 19 e态 10 X态 18 e态 1 67817.0428 67817.0871 -0.0443 .030200 0.0000 : sR31(18) : 激发态 振动量子数=7 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1611:<谱线表>
激发态 20 e态 10 X态 19 e态 1 67795.5304 67795.5008 0.0296 .035500 0.0000 : sR31(19) : 激发态 振动量子数=7 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1612:<谱线表>
激发态 21 e态 10 X态 20 e态 1 67772.5972 67772.6132 -0.0160 .028900 0.0000 : sR31(20) : 激发态 振动量子数=7 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1613:<谱线表>
激发态 22 e 10 X态 21 e 1 67748.4032 67748.4218 -0.0186 .025800 0.0000 : sR31(21) : 激发态 振动量子数=7 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :1614:<谱线表>
激发态 23 e 10 X态 22 e 1 67722.8916 67722.9247 -0.0331 .028300 0.0000 : sR31(22) : 激发态 振动量子数=7 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :1615:<谱线表>
激发态 24 e 10 X态 23 e 1 67696.0801 67696.1208 -0.0407 .029100 0.0000 : sR31(23) : 激发态 振动量子数=7 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :1616:<谱线表>
激发态 25 e 10 X态 24 e 1 67667.9651 67668.0096 -0.0445 .030000 0.0000 : sR31(24) : 激发态 振动量子数=7 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e :1617:<谱线表>
激发态 26 e 10 X态 25 e 1 67638.5177 67638.5918 -0.0741 .027600 0.0000 : sR31(25) : 激发态 振动量子数=7 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e :1618:<谱线表>
激发态 1 e 7 X态 2 e 1 67982.1694 67982.1651 0.0043 .042500 3.0000 : pP21(2) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 1 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1643:<谱线表>
激发态 2 e 9 X态 3 e 1 67975.8705 67975.8376 0.0329 .033100 3.0000 : pP21(3) : 激发态 a'态振动量子数=12 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1644:<谱线表>
激发态 3 e 10 X态 4 e 1 67968.0673 67968.0930 -0.0257 .073600 3.0000 : pP21(4) : 激发态 a'态振动量子数=12 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1645:<谱线表>
激发态 4 e 10 X态 5 e 1 67958.9253 67958.9315 -0.0062 .049300 3.0000 : pP21(5) : 激发态 a'态振动量子数=12 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1646:<谱线表>
激发态 5 e 10 X态 6 e 1 67948.3636 67948.3535 0.0101 .037900 3.0000 : pP21(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1647:<谱线表>
激发态 6 e 10 X态 7 e 1 67936.3819 67936.3624 0.0195 .043600 3.0000 : pP21(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1648:<谱线表>
激发态 8 e 9 X态 9 e 1 67908.1249 67908.1108 0.0141 .051200 3.0000 : pP21(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1650:<谱线表>
激发态 9 e 9 X态 10 e 1 67891.8791 67891.8660 0.0131 .046100 3.0000 : pP21(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1651:<谱线表>
激发态 10 e 9 X态 11 e 1 67874.2747 67874.2041 0.0706 .033000 3.0000 : pP21(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1652:<谱线表>
激发态 11 e 9 X态 12 e 1 67855.1179 67855.1256 -0.0077 .051900 3.0000 : pP21(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1653:<谱线表>
激发态 12 e 9 X态 13 e 1 67834.6176 67834.6307 -0.0131 .046200 3.0000 : pP21(13) : 激发态 a'态振动量子数=12 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1654:<谱线表>
激发态 13 e 9 X态 14 e 1 67812.7158 67812.7197 -0.0039 .030100 3.0000 : pP21(14) : 激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1655:<谱线表>
激发态 14 e 9 X态 15 e 1 67789.4157 67789.3924 0.0233 .070300 3.0000 : pP21(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1656:<谱线表>
激发态 15 e 9 X态 16 e 1 67764.5850 67764.6492 -0.0642 .049300 3.0000 : pP21(16) : 激发态 a'态振动量子数=12 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1657:<谱线表>
激发态 16 e 9 X态 17 e 1 67738.5042 67738.4900 0.0142 .048100 3.0000 : pP21(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1658:<谱线表>
激发态 17 e 9 X态 18 e 1 67710.9121 67710.9150 -0.0029 .033600 3.0000 : pP21(18) : 激发态 a'态振动量子数=12 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1659:<谱线表>
激发态 19 e 9 X态 20 e 1 67651.5326 67651.5180 0.0146 .026500 3.0000 : pP21(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1661:<谱线表>
激发态 30 e 8 X态 31 e 1 67223.6258 67223.6928 -0.0670 .032200 3.0000 : pP21(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :1672:<谱线表>
激发态 31 e 8 X态 32 e 1 67176.4155 67176.4213 -0.0058 .055500 3.0000 : pP21(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :1673:<谱线表>
激发态 32 e 7 X态 33 e 1 67127.6464 67127.5897 0.0567 .028400 3.0000 : pP21(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :1674:<谱线表>
激发态 33 e 7 X态 34 e 1 67078.0818 67078.0889 -0.0071 .040000 3.0000 : pP21(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :1675:<谱线表>
激发态 37 e 5 X态 38 e 1 66861.8870 66861.9182 -0.0312 .032400 3.0000 : pP21(38) : 激发态 a'态振动量子数=12 37 37 F2e - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e :1679:<谱线表>
激发态 2 f 9 X态 2 e 1 67982.9331 67982.9521 -0.0190 .038700 3.0000: pQ1(2): 激发态 a'态振动量子数=12 2 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e: 1693: <谱线表>
激发态 3 f 9 X态 3 e 1 67976.6773 67976.7064 -0.0291 .060300 3.0000: pQ1(3): 激发态 a'态振动量子数=12 3 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e: 1694: <谱线表>
激发态 4 f 9 X态 4 e 1 67968.9997 67969.0113 -0.0116 .060800 3.0000: pQ1(4): 激发态 a'态振动量子数=12 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e: 1695: <谱线表>
激发态 5 f 9 X态 5 e 1 67959.8716 67959.8791 -0.0075 .049300 3.0000 : pQ1(5) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1696:<谱线表>
激发态 6 f 9 X态 6 e 1 67949.2949 67949.3192 -0.0243 .053700 3.0000 : pQ1(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1697:<谱线表>
激发态 7 f 9 X态 7 e 1 67937.3159 67937.3361 -0.0202 .029200 3.0000 : pQ1(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1698:<谱线表>
激发态 8 f 9 X态 8 e 1 67923.8983 67923.9320 -0.0337 .040100 3.0000 : pQ1(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1699:<谱线表>
激发态 9 f 9 X态 9 e 1 67909.1056 67909.1083 -0.0027 .035500 3.0000 : pQ1(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1700:<谱线表>
激发态 10 f 9 X态 10 e 1 67892.8213 67892.8660 -0.0447 .040300 3.0000 : pQ1(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1701:<谱线表>
激发态 11 f 9 X态 11 e 1 67875.1597 67875.2057 -0.0460 .032400 3.0000 : pQ1(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1702:<谱线表>
激发态 12 f 9 X 12 e 1 67856.1317 67856.1279 0.0038 .043300 3.0000 : pQ1(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1703:<谱线表>
激发态 13 f 9 X态 13 e 1 67835.6079 67835.6329 -0.0250 .033100 3.0000 : pQ1(13) : 激发态 a'态振动量子数=12 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1704:<谱线表>
激发态 14 f 9 X态 14 e 1 67813.6744 67813.7210 -0.0466 .034900 3.0000 : pQ1(14) : 激发态 a'态振动量子数=12 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1705:<谱线表>
激发态 16 f 8 X态 16 e 1 67765.6319 67765.6333 -0.0014 .035600 3.0000 : pQ1(16) : 激发态 a'态振动量子数=12 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1707:<谱线表>
激发态 17 f 8 X态 17 e 1 67739.4645 67739.4850 -0.0205 .032700 3.0000 : pQ1(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1708:<谱线表>
激发态 18 f 8 X态 18 e 1 67711.8956 67711.9078 -0.0122 .034800 3.0000 : pQ1(18) : 激发态 a'态振动量子数=12 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1709:<谱线表>
激发态 19 f 8 X态 19 e 1 67682.9447 67682.9144 0.0303 .033800 3.0000 : pQ1(19) : 激发态 a'态振动量子数=12 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1710:<谱线表>
激发态 31 f 5 X态 31 e 1 67223.7987 67223.7141 0.0846 .027900 3.0000 : pQ1(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :1722:<谱线表>
激发态 32 f 5 X态 32 e 1 67176.9914 67176.9535 0.0379 .028600 3.0000 : pQ1(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :1723:<谱线表>
激发态 33 f 5 X态 33 e 1 67128.2350 67128.2400 -0.0050 .071300 3.0000 : pQ1(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :1724:<谱线表>
激发态 34 f 5 X态 34 e 1 67078.1739 67078.0983 0.0756 .031800 3.0000 : pQ1(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :1725:<谱线表>
激发态 36 f 4 X态 36 e 1 66973.2180 66973.2115 0.0065 .027400 3.0000 : pQ1(36) : 激发态 a'态振动量子数=12 36 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e :1727:<谱线表>
激发态 37 f 3 X态 37 e 1 66918.5280 66918.6252 -0.0972 .025500 3.0000 : pQ1(37) : 激发态 a'态振动量子数=12 37 36 F1f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e :1728:<谱线表>
激发态 38 f 3 X态 38 e 1 66862.7941 66862.8704 -0.0763 .057900 3.0000 : pQ1(38) : 激发态 a'态振动量子数=12 38 37 F1f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e :1729:<谱线表>
激发态 1 f 8 X态 1 e 1 67994.9301 67994.9809 -0.0508 .258700 3.0000 : rQ31(1) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 2 F3f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :1742:<谱线表>
激发态 2 f 10 X态 2 e 1 67993.9811 67994.0273 -0.0462 .050800 3.0000 : rQ31(2) : 激发态 a'态振动量子数=12 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1743:<谱线表>
激发态 3 f 11 X态 3 e 1 67991.7072 67991.7609 -0.0537 .077500 3.0000 : rQ31(3) : 激发态 a'态振动量子数=12 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1744:<谱线表>
激发态 4 f 11 X态 4 e 1 67988.1083 67988.1161 -0.0078 .056600 3.0000 : rQ31(4) : 激发态 a'态振动量子数=12 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1745:<谱线表>
激发态 5 f 11 X态 5 e 1 67983.0217 67983.0719 -0.0502 .069700 3.0000 : rQ31(5) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1746:<谱线表>
激发态 6 f 11 X态 6 e 1 67976.5289 67976.6198 -0.0909 .070900 3.0000 : rQ31(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1747:<谱线表>
激发态 7 f 11 X态 7 e 1 67968.7380 67968.7555 -0.0175 .056500 3.0000 : rQ31(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1748:<谱线表>
激发态 8 f 11 X态 8 e 1 67959.4586 67959.4766 -0.0180 .062900 3.0000 : rQ31(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1749:<谱线表>
激发态 9 f 11 X态 9 e 1 67948.7756 67948.7817 -0.0061 .056600 3.0000 : rQ31(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1750:<谱线表>
激发态 10 f 11 X态 10 e 1 67936.6039 67936.6699 -0.0660 .090600 3.0000 : rQ31(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1751:<谱线表>
激发态 11 f 11 X态 11 e 1 67923.1082 67923.1404 -0.0322 .079900 3.0000 : rQ31(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1752:<谱线表>
激发态 12 f 11 X态 12 e 1 67908.1648 67908.1928 -0.0280 .039900 3.0000 : rQ31(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1753:<谱线表>
激发态 13 f 11 X态 13 e 1 67891.7958 67891.8266 -0.0308 .045700 3.0000 : rQ31(13) : 激发态 a'态振动量子数=12 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1754:<谱线表>
激发态 14 f 11 X态 14 e 1 67873.9383 67874.0415 -0.1032 .035200 3.0000 : rQ31(14) : 激发态 a'态振动量子数=12 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1755:<谱线表>

激发态 15 f 11 X态 15 e 1 67854.8377 67854.8372 0.0005 .049200 3.0000 : rQ31(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1756:<谱线表>
激发态 16 f 11 X态 16 e 1 67834.2353 67834.2134 0.0219 .052200 3.0000 : rQ31(16) : 激发态 a'态振动量子数=12 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1757:<谱线表>
激发态 17 f 11 X态 17 e 1 67812.1456 67812.1698 -0.0242 .068000 3.0000 : rQ31(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1758:<谱线表>
激发态 18 f 11 X态 18 e 1 67788.7282 67788.7063 0.0219 .083400 3.0000 : rQ31(18) : 激发态 a'态振动量子数=12 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1759:<谱线表>
激发态 19 f 11 X态 19 e 1 67763.8562 67763.8225 0.0337 .025200 3.0000 : rQ31(19) : 激发态 a'态振动量子数=12 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1760:<谱线表>
激发态 20 f 11 X态 20 e 1 67737.5371 67737.5184 0.0187 .044100 3.0000 : rQ31(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1761:<谱线表>
激发态 21 f 11 X态 21 e 1 67709.8122 67709.7936 0.0186 .077000 3.0000 : rQ31(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :1762:<谱线表>
激发态 23 f 11 X态 23 e 1 67650.0979 67650.0814 0.0165 .055800 3.0000 : rQ31(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :1764:<谱线表>
激发态 37 f 8 X态 37 e 1 67072.5414 67072.4983 0.0431 .033300 3.0000 : rQ31(37) : 激发态 a'态振动量子数=12 37 38 F3f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e :1778:<谱线表>
激发态 49 f 6 X态 49 e 1 66355.6510 66355.6287 0.0223 .027200 3.0000 : rQ31(49) : 激发态 a'态振动量子数=12 49 50 F3f - X态 X态振动量子数=0 49 49 F1e :1790:<谱线表>
激发态 1 e 7 X态 0 e 1 67992.5873 67992.6434 -0.0561 .045700 3.0000 : rR21(0) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 1 F2e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e :1792:<谱线表>
激发态 2 e 9 X态 1 e 1 67993.2788 67993.3010 -0.0222 .035500 3.0000 : rR21(1) : 激发态 a'态振动量子数=12 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :1793:<谱线表>
激发态 3 e 10 X态 2 e 1 67992.4807 67992.5409 -0.0602 .045800 3.0000: rR21(2): 激发态 a'态振动量子数=12 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e: 1794:<谱线表>
激发态 4 e 10 X态 3 e 1 67990.3521 67990.3630 -0.0109 .029600 3.0000: rR21(3): 激发态 a'态振动量子数=12 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e: 1795:<谱线表>
激发态 5 e 10 X态 4 e 1 67986.7584 67986.7676 -0.0092 .035300 3.0000: rR21(4): 激发态 a'态振动量子数=12 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e: 1796:<谱线表>
激发态 6 e 10 X态 5 e 1 67981.8196 67981.7577 0.0619 .040200 3.0000 : rR21(5) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1797:<谱线表>
激发态 7 e 9 X态 6 e 1 67975.2097 67975.3097 -0.1000 .099100 3.0000 : rR21(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1798:<谱线表>
激发态 8 e 9 X态 7 e 1 67967.4802 67967.4636 0.0166 .065400 3.0000 : rR21(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1799:<谱线表>
激发态 9 e 9 X态 8 e 1 67958.1909 67958.1946 -0.0037 .039600 3.0000 : rR21(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1800:<谱线表>
激发态 10 e 9 X态 9 e 1 67947.4825 67947.5062 -0.0237 .038800 3.0000 : rR21(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1801:<谱线表>
激发态 11 e 9 X态 10 e 1 67935.3138 67935.3986 -0.0848 .042300 3.0000 : rR21(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1802:<谱线表>
激发态 12 e 9 X态 11 e 1 67921.8689 67921.8719 -0.0030 .028400 3.0000 : rR21(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1803:<谱线表>
激发态 13 e 9 X态 12 e 1 67906.9223 67906.9259 -0.0036 .036800 3.0000 : rR21(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1804:<谱线表>
激发态 15 e 9 X态 14 e 1 67872.7752 67872.7757 -0.0005 .028300 3.0000 : rR21(14) : 激发态 a'态振动量子数=12 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1806:<谱线表>
激发态 16 e 9 X态 15 e 1 67853.5736 67853.5711 0.0025 .027800 3.0000 : rR21(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1807:<谱线表>
激发态 17 e 9 X态 16 e 1 67832.9537 67832.9467 0.0070 .027800 3.0000 : rR21(16) : 激发态 a'态振动量子数=12 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1808:<谱线表>
激发态 18 e 9 X态 17 e 1 67810.9080 67810.9024 0.0056 .028800 3.0000 : rR21(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1809:<谱线表>
激发态 19 e 9 X态 18 e 1 67787.4608 67787.4379 0.0229 .037700 3.0000 : rR21(18) : 激发态 a'态振动量子数=12 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1810:<谱线表>
激发态 20 e 9 X态 19 e 1 67762.5699 67762.5533 0.0166 .040200 3.0000 : rR21(19) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1811:<谱线表>
激发态 21 e 9 X态 20 e 1 67736.2996 67736.2484 0.0512 .052400 3.0000 : rR21(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1812:<谱线表>
激发态 22 e 9 X态 21 e 1 67708.4881 67708.5232 -0.0351 .031300 3.0000 : rR21(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :1813:<谱线表>
激发态 23 e 9 X态 22 e 1 67679.3933 67679.3776 0.0157 .053900 3.0000 : rR21(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :1814:<谱线表>
激发态 40 e 4 X态 39 e 1 66965.9428 66966.0274 -0.0846 .025500 3.0000 : rR21(39) : 激发态 a'态振动量子数=12 40 40 F2e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e :1831:<谱线表>
激发态 42 e 3 X态 41 e 1 66855.1260 66855.0911 0.0349 .027100 3.0000: rR21(41): 激发态 a'态振动量子数=12 42 42 F2e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e: 1833: <谱线表>
激发态 10 e 11 X态 11 e 1 68267.5062 68267.4868 0.0194 .309900 2.0000: pP(11): 激发态 Δv=3 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e: 1850: <谱线表>
激发态 11 e 11 X态 12 e 1 68249.5354 68249.5417 -0.0063 .238400 2.0000: pP(12): 激发态 Δv=3 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e: 1851: <谱线表>
激发态 12 e 11 X态 13 e 1 68230.3075 68230.2825 0.0250 .145000 2.0000 : pP(13) : 激发态 Δv=3 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1852:<谱线表>
激发态 13 e 11 X态 14 e 1 68209.7105 68209.7093 0.0012 .333700 2.0000 : pP(14) : 激发态 Δv=3 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1853:<谱线表>
激发态 15 e 11 X态 16 e 1 68164.6139 68164.6200 -0.0061 .047900 2.0000 : pP(16) : 激发态 Δv=3 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1855:<谱线表>
激发态 16 e 11 X 17 e 1 68140.0845 68140.1038 -0.0193 .030300 2.0000 : pP(17) : 激发态 Δv=3 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1856:<谱线表>
激发态 17 e 11 X 18 e 1 68114.2695 68114.2728 -0.0033 .036800 2.0000 : pP(18) : 激发态 Δv=3 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1857:<谱线表>
激发态 19 e 11 X 20 e 1 68058.7388 68058.6661 0.0727 .106300 2.0000 : pP(20) : 激发态 Δv=3 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1859:<谱线表>
激发态 20 e态 11 X态 21 e态 1 68028.9701 68028.8900 0.0801 .035400 2.0000: pP(21): 激发态 Δv=3 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e: 1860: <谱线表>
激发态 21 e态 11 X态 22 e态 1 67997.7147 67997.7983 -0.0836 .150000 2.0000: pP(22): 激发态 Δv=3 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e: 1861: <谱线表>
激发态 45 e态 11 X态 46 e态 1 66856.2466 66856.2469 -0.0003 .044000 2.0000: pP(46): 激发态 Δv=3 45 45 F1e - X态 X态振动量子数=0 46 46 F1e: 1885: <谱线表>
激发态 5 f 12 X态 5 e 1 68358.4864 68358.4578 0.0286 .261500 2.0000 : qQ(5) : 激发态 Δv=3 5 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1893:<谱线表>
激发态 6 f 12 X态 6 e 1 68350.6657 68350.5719 0.0938 .436300 2.0000 : qQ(6) : 激发态 Δv=3 6 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1894:<谱线表>
激发态 7 f 12 X态 7 e 1 68341.3933 68341.3714 0.0219 .139600 2.0000 : qQ(7) : 激发态 Δv=3 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1895:<谱线表>
激发态 8 f 12 X态 8 e 1 68330.8919 68330.8562 0.0357 .239300 2.0000 : qQ(8) : 激发态 Δv=3 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1896:<谱线表>
激发态 9 f 12 X态 9 e 1 68319.0432 68319.0261 0.0171 .170600 2.0000 : qQ(9) : 激发态 Δv=3 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1897:<谱线表>
激发态 10 f 12 X态 10 e 1 68305.8946 68305.8809 0.0137 .136700 2.0000 : qQ(10) : 激发态 Δv=3 10 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1898:<谱线表>
激发态 11 f 12 X态 11 e 1 68291.4270 68291.4206 0.0064 .132100 2.0000 : qQ(11) : 激发态 Δv=3 11 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1899:<谱线表>
激发态 12 f 12 X态 12 e 1 68275.6267 68275.6448 -0.0181 .175600 2.0000 : qQ(12) : 激发态 Δv=3 12 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1900:<谱线表>
激发态 13 f 12 X态 13 e 1 68258.5289 68258.5533 -0.0244 .063300 2.0000 : qQ(13) : 激发态 Δv=3 13 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1901:<谱线表>
激发态 14 f 12 X态 14 e 1 68240.1413 68240.1459 -0.0046 .118400 2.0000 : qQ(14) : 激发态 Δv=3 14 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1902:<谱线表>
激发态 15 f 12 X态 15 e 1 68220.4159 68220.4224 -0.0065 .146800 2.0000 : qQ(15) : 激发态 Δv=3 15 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1903:<谱线表>
激发态 16 f 12 X态 16 e 1 68199.3676 68199.3825 -0.0149 .136400 2.0000 : qQ(16) : 激发态 Δv=3 16 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1904:<谱线表>
激发态 17 f 12 X态 17 e 1 68177.0687 68177.0258 0.0429 .088900 2.0000 : qQ(17) : 激发态 Δv=3 17 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1905:<谱线表>
激发态 18 f 12 X态 18 e 1 68153.2796 68153.3521 -0.0725 .082700 2.0000 : qQ(18) : 激发态 Δv=3 18 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1906:<谱线表>
激发态 19 f 12 X态 19 e 1 68128.3268 68128.3610 -0.0342 .166000 2.0000 : qQ(19) : 激发态 Δv=3 19 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1907:<谱线表>
激发态 20 f 12 X态 20 e 1 68102.0195 68102.0522 -0.0327 .126400 2.0000 : qQ支(20) : 激发态 Δv=3 20 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1908:<谱线表>
激发态 21 f 12 X态 21 e 1 68074.3660 68074.4253 -0.0593 .245800 2.0000 : qQ支(21) : 激发态 Δv=3 21 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :1909:<谱线表>
激发态 22 f 12 X态 22 e 1 68045.4641 68045.4800 -0.0159 .219300 2.0000 : qQ支(22) : 激发态 Δv=3 22 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :1910:<谱线表>
激发态 23 f 12 X态 23 e 1 68015.1547 68015.2158 -0.0611 .298400 2.0000 : qQ(23) : 激发态 Δv=3 23 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :1911:<谱线表>
激发态 50 f 11 X态 50 e 1 66700.7564 66700.7503 0.0061 .183400 2.0000 : qQ(50) : 激发态 Δv=3 50 50 F1f - X态 X态振动量子数=0 50 50 F1e :1938:<谱线表>
激发态 9 e 11 X态 8 e 1 68350.4962 68350.4467 0.0495 .197700 2.0000 : rR(8) : 激发态 Δv=3 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :1946:<谱线表>
激发态 10 e 11 X态 9 e 1 68340.8150 68340.7889 0.0261 .180000 2.0000 : rR(9) : 激发态 Δv=3 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :1947:<谱线表>
激发态 11 e 11 X态 10 e 1 68329.8066 68329.8147 -0.0081 .229200 2.0000 : rR(10) : 激发态 Δv=3 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :1948:<谱线表>
激发态 12 e 11 X态 11 e 1 68317.5398 68317.5237 0.0161 .141500 2.0000 : rR(11) : 激发态 Δv=3 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1949:<谱线表>
激发态 13 e 11 X态 12 e 1 68303.9391 68303.9155 0.0236 .049700 2.0000 : rR(12) : 激发态 Δv=3 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1950:<谱线表>
激发态 14 e 11 X态 13 e 1 68288.9767 68288.9900 -0.0133 .180900 2.0000 : rR(13) : 激发态 Δv=3 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :1951:<谱线表>
激发态 15 e 11 X态 14 e 1 68272.7305 68272.7465 -0.0160 .151900 2.0000 : rR(14) : 激发态 Δv=3 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :1952:<谱线表>
激发态 16 e 11 X态 15 e 1 68255.1279 68255.1848 -0.0569 .143000 2.0000 : rR(15) : 激发态 Δv=3 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :1953:<谱线表>
激发态 17 e 11 X态 16 e 1 68236.3244 68236.3045 0.0199 .109500 2.0000 : rR(16) : 激发态 Δv=3 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :1954:<谱线表>
激发态 18 e 11 X态 17 e 1 68216.0785 68216.1050 -0.0265 .051600 2.0000 : rR(17) : 激发态 Δv=3 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :1955:<谱线表>
激发态 19 e 11 X态 18 e 1 68194.5055 68194.5860 -0.0805 .247000 2.0000 : rR(18)支 : 激发态 Δv=3 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :1956:<谱线表>
激发态 20 e 11 X态 19 e 1 68171.6902 68171.7470 -0.0568 .067300 2.0000 : rR(19) : 激发态 Δv=3 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :1957:<谱线表>
激发态 21 e 11 X态 20 e 1 68147.4920 68147.5875 -0.0955 .207500 2.0000 : rR(20) : 激发态 Δv=3 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :1958:<谱线表>
激发态 22 e 11 X态 21 e 1 68122.1026 68122.1071 -0.0045 .204000 2.0000: rR(21): 激发态 Δv=3 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e: 1959: <谱线表>
激发态 23 e 11 X态 22 e 1 68095.2117 68095.3051 -0.0934 .090400 2.0000: rR(22): 激发态 Δv=3 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e: 1960: <谱线表>
B常数 0 e 1 X态 1 e 1 86913.8618 86913.8645 -0.0027 .010300 1.0000: pP(1): B常数 Bv=0 0 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e: 1988: <谱线表>
B常数 1 e态 1 X态 2 e态 1 86910.4175 86910.4208 -0.0033 .010100 1.0000 : pP(2) : B常数 B常数v=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :1989:<谱线表>
B常数 2 e态 1 X态 3 e态 1 86907.0197 86907.0241 -0.0044 .010000 1.0000 : pP(3) : B常数 B常数v=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :1990:<谱线表>
B常数 3 e态 1 X态 4 e态 1 86903.6685 86903.6715 -0.0030 .010000 1.0000 : pP(4) : B常数 B常数v=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :1991:<谱线表>
B常数 4 e态 1 X态 5 e态 1 86900.3628 86900.3658 -0.0030 .010000 1.0000 : pP(5) : B常数 B常数v=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :1992:<谱线表>
B常数 5 e态 1 X态 6 e态 1 86897.1071 86897.1084 -0.0013 .010000 1.0000 : pP(6) : B常数 B常数v=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :1993:<谱线表>
B常数 6 e态 1 X态 7 e态 1 86893.8966 86893.8978 -0.0012 .010000 1.0000 : pP(7) : B常数 B常数v=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :1994:<谱线表>
B 7 e 1 X 8 e 1 86890.7332 86890.7349 -0.0017 .010000 1.0000 : pP(8) : B Bv=0 7 7 F1e - X X态振动量子数=0 8 8 F1e :1995年:<谱线表>
B 8 e 1 X 9 e 1 86887.6174 86887.6192 -0.0018 .010000 1.0000 : pP(9) : B Bv=0 8 8 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e :1996:<谱线表>
B 9 e 1 X 10 e 1 86884.5487 86884.5507 -0.0020 .010000 1.0000 : pP(10) : B Bv=0 9 9 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e :1997:<谱线表>
B常数 10 e态 1 X态 11 e态 1 86881.5279 86881.5294 -0.0015 .010000 1.0000 : pP(11) : B常数 Bv=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :1998:<谱线表>
B常数 11 e态 1 X态 12 e态 1 86878.5527 86878.5554 -0.0027 .010000 1.0000 : pP(12) : B常数 Bv=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :1999:<谱线表>

B 12 e 1 X 13 e 1 86875.6290 86875.6313 -0.0023 .010000 1.0000 : pP(13) : B Bv=0 12 12 F1e - X Xv=0 13 13 F1e :2000:<谱线表>
B 13 e 1 X 14 e 1 86872.7481 86872.7507 -0.0026 .010000 1.0000 : pP(14) : B Bv=0 13 13 F1e - X Xv=0 14 14 F1e :2001:<谱线表>
B 14 e 1 X 15 e 1 86869.9176 86869.9187 -0.0011 .010000 1.0000 : pP(15) : B Bv=0 14 14 F1e - X Xv=0 15 15 F1e :2002:<谱线表>
B常数 15 e态 1 X态 16 e态 1 86867.1331 86867.1343 -0.0012 .010000 1.0000：pP(16)支：B常数 B常数振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e：2003年：<谱线表>
B常数 16 e态 1 X态 17 e态 1 86864.3941 86864.3957 -0.0016 .010000 1.0000：pP(17)：B常数 B常数振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e：2004年：<谱线表>
B常数 17 e态 1 X态 18 e态 1 86861.6624 86861.6645 -0.0021 .010000 1.0000：pP(18)：B常数 B常数振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e：2005年：<谱线表>
B 18 e 1 X 19 e 1 86859.0571 86859.0606 -0.0035 .010000 1.0000 : pP(19) : B Bv=0 18 18 F1e - X Xv=0 19 19 F1e :2006:<谱线表>
B 19 e 1 X 20 e 1 86856.4697 86856.4718 -0.0021 .010100 1.0000 : pP(20) : B Bv=0 19 19 F1e - X Xv=0 20 20 F1e :2007年:<谱线表>
B 20 e 1 X 21 e 1 86853.9190 86853.9215 -0.0025 .010100 1.0000 : pP(21) : B Bv=0 20 20 F1e - X Xv=0 21 21 F1e :2008:<谱线表>
B 21 e 1 X 22 e 1 86851.4162 86851.4189 -0.0027 .010100 1.0000 : pP(22) : B Bv=0 21 21 F1e - X Xv=0 22 22 F1e :2009年:<谱线表>
B 22 e 1 X 23 e 1 86848.9608 86848.9638 -0.0030 .010100 1.0000 : pP(23) : B Bv=0 22 22 F1e - X Xv=0 23 23 F1e :2010:<谱线表>
B 23 e 1 X 24 e 1 86846.5508 86846.5551 -0.0043 .010100 1.0000 : pP(24) : B Bv=0 23 23 F1e - X Xv=0 24 24 F1e :2011:<谱线表>
B常数 24 e态 1 X态 25 e态 1 86844.1902 86844.1920 -0.0018 .010100 1.0000 : pP(25) : B常数 B常数v=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e :2012年:<谱线表>
B常数 25 e态 1 X态 26 e态 1 86841.8719 86841.8736 -0.0017 .010100 1.0000 : pP(26) : B常数 B常数v=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e :2013年:<谱线表>
B常数 26 e态 1 X态 27 e态 1 86839.6059 86839.6066 -0.0007 .010100 1.0000 : pP(27) : B常数 B常数v=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e :2014:<谱线表>
B常数 27 e态 1 X态 28 e态 1 86837.3860 86837.3860 -0.0000 .010200 1.0000 : pP(28) : B常数 B常数v=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e :2015年:<谱线表>
B常数 28 e态 1 X态 29 e态 1 86835.2037 86835.2057 -0.0020 .010200 1.0000 : pP(29) : B常数 B常数v=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :2016年:<谱线表>
B常数 29 e态 1 X态 30 e态 1 86833.0668 86833.0751 -0.0083 .010200 1.0000 : pP(30) : B常数 B常数v=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e :2017年:<谱线表>
B常数 30 e态 1 X态 31 e态 1 86830.9825 86830.9846 -0.0021 .010200 1.0000 : pP(31) : B常数 B常数v=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :2018:<谱线表>
B常数 31 e态 1 X态 32 e态 1 86828.9279 86828.9350 -0.0071 .010200 1.0000 : pP(32) : B常数 B常数v=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :2019年:<谱线表>
B常数 32 e态 1 X态 33 e态 1 86826.9288 86826.9328 -0.0040 .010300 1.0000 : pP(33) : B常数 B常数v=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :2020:<谱线表>
B 33 e 1 X 34 e 1 86824.9841 86824.9899 -0.0058 .010400 1.0000 : pP(34) : B B常数振动量子数=0 33 33 F1e - X X态X态振动量子数=0 34 34 F1e :2021年:<谱线表>
B 34 e 1 X 35 e 1 86823.0779 86823.0804 -0.0025 .010400 1.0000 : pP(35) : B B常数振动量子数=0 34 34 F1e - X X态X态振动量子数=0 35 35 F1e :2022:<谱线表>
B 35 e 1 X 36 e 1 86821.2268 86821.2326 -0.0058 .010500 1.0000 : pP(36) : B B常数振动量子数=0 35 35 F1e - X X态X态振动量子数=0 36 36 F1e :2023:<谱线表>
B常数 36 e态 1 X态 37 e态 1 86819.3852 86819.3859 -0.0007 .010700 1.0000：pP支(37)：B常数 B常数振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e：2024年：<谱线表>
B常数 37 e态 1 X态 38 e态 1 86817.6024 86817.6104 -0.0080 .010800 1.0000：pP支(38)：B常数 B常数振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e：2025年：<谱线表>
B常数 38 e态 1 X态 39 e态 1 86815.8717 86815.8770 -0.0053 .011100 1.0000：pP支(39)：B常数 B常数振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e：2026年：<谱线表>
B常数 39 e态 1 X态 40 e态 1 86814.1784 86814.1935 -0.0151 .011400 1.0000：pP支(40)：B常数 B常数v=0 39 39 F1e - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e：2027：<谱线表>
B常数 40 e态 1 X态 41 e态 1 86812.5204 86812.5075 0.0129 .011900 1.0000：pP支(41)：B常数 B常数v=0 40 40 F1e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e：2028：<谱线表>
B常数 41 e态 1 X态 42 e态 1 86810.9109 86810.9115 -0.0006 .012400 1.0000：pP支(42)：B常数 B常数v=0 41 41 F1e - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e：2029：<谱线表>
B常数 42 e态 1 X态 43 e态 1 86809.3213 86809.3214 -0.0001 .013400 1.0000：pP支(43)：B Bv=0 42 42 F1e - X X态振动量子数=0 43 43 F1e：2030：<谱线表>
B常数 43 e态 1 X态 44 e态 1 86807.7995 86807.8006 -0.0011 .014400 1.0000：pP支(44)：B Bv=0 43 43 F1e - X X态振动量子数=0 44 44 F1e：2031：<谱线表>
B常数 44 e态 1 X态 45 e态 1 86806.3191 86806.3251 -0.0060 .016000 1.0000：pP支(45)：B Bv=0 44 44 F1e - X X态振动量子数=0 45 45 F1e：2032：<谱线表>
B 45 e 1 X 46 e 1 86804.8694 86804.8699 -0.0005 .017900 1.0000：pP(46)：B Bv=0 45 45 F1e - X Xv=0 46 46 F1e：2033：<谱线表>
B 46 e 1 X 47 e 1 86803.4940 86803.4970 -0.0030 .020900 1.0000：pP(47)：B Bv=0 46 46 F1e - X Xv=0 47 47 F1e：2034：<谱线表>
B 47 e 1 X 48 e 1 86802.0789 86802.0788 0.0001 .024100 1.0000：pP(48)：B Bv=0 47 47 F1e - X Xv=0 48 48 F1e：2035：<谱线表>
B 48 e 1 X 49 e 1 86800.7304 86800.7198 0.0106 .029100 1.0000 : pP(49) : B Bv=0 48 48 F1e - X Xv=0 49 49 F1e :2036:<谱线表>
B 49 e 1 X 50 e 1 86799.4713 86799.4712 0.0001 .034600 1.0000 : pP(50) : B Bv=0 49 49 F1e - X Xv=0 50 50 F1e :2037:<谱线表>
B 1 e 1 X 0 e 1 86920.8958 86920.8991 -0.0033 .010100 1.0000 : rR(0) : B Bv=0 1 1 F1e - X Xv=0 0 0 F1e :2048:<谱线表>
B 2 e 1 X 1 e 1 86924.4831 86924.4874 -0.0043 .010000 1.0000 : rR(1) : B Bv=0 2 2 F1e - X Xv=0 1 1 F1e :2049:<谱线表>
B 3 e 1 X 2 e 1 86928.1164 86928.1193 -0.0029 .010000 1.0000 : rR(2) : B Bv=0 3 3 F1e - X Xv=0 2 2 F1e :2050:<谱线表>
B 4 e 1 X 3 e 1 86931.7944 86931.7973 -0.0029 .010000 1.0000 : rR(3) : B Bv=0 4 4 F1e - X Xv=0 3 3 F1e :2051:<谱线表>
B常数 5 e态 1 X态 4 e态 1 86935.5212 86935.5224 -0.0012 .010000 1.0000 : rR(4) : B常数 B常数振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :2052:<谱线表>
B常数 6 e态 1 X态 5 e态 1 86939.2919 86939.2932 -0.0013 .010000 1.0000 : rR(5) : B常数 B常数振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e :2053:<谱线表>
B常数 7 e态 1 X态 6 e态 1 86943.1082 86943.1099 -0.0017 .010000 1.0000 : rR(6) : B常数 B常数振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :2054:<谱线表>
B 8 e 1 X 7 e 1 86946.9702 86946.9720 -0.0018 .010000 1.0000：rR(7)：B B常数v=0 8 8 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e：2055：<谱线表>
B 9 e 1 X 8 e 1 86950.8773 86950.8793 -0.0020 .010000 1.0000：rR(8)：B B常数v=0 9 9 F1e - X X态振动量子数=0 8 8 F1e：2056：<谱线表>
B 10 e 1 X 9 e 1 86954.8299 86954.8315 -0.0016 .010000 1.0000：rR(9)：B B常数v=0 10 10 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e：2057：<谱线表>
B常数 11 e态 1 X态 10 e态 1 86958.8257 86958.8284 -0.0027 .010000 1.0000 : rR(10) : B常数 B常数振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :2058:<谱线表>
B常数 12 e态 1 X态 11 e态 1 86962.8701 86962.8724 -0.0023 .010000 1.0000 : rR(11) : B常数 B常数振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :2059:<谱线表>
B常数 13 e态 1 X态 12 e态 1 86966.9544 86966.9570 -0.0026 .010000 1.0000 : rR(12) : B常数 B常数振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :2060:<谱线表>
B常数 14 e态 1 X态 13 e态 1 86971.0857 86971.0869 -0.0012 .010000 1.0000 : rR(13) : B Bv=0 14 14 F1e - X X态振动量子数=0 13 13 F1e :2061:<谱线表>
B常数 15 e态 1 X态 14 e态 1 86975.2595 86975.2607 -0.0012 .010000 1.0000 : rR(14) : B Bv=0 15 15 F1e - X X态振动量子数=0 14 14 F1e :2062:<谱线表>
B常数 16 e态 1 X态 15 e态 1 86979.4751 86979.4768 -0.0017 .010000 1.0000 : rR(15) : B Bv=0 16 16 F1e - X X态振动量子数=0 15 15 F1e :2063:<谱线表>
B常数 17 e态 1 X态 16 e态 1 86983.6940 86983.6962 -0.0022 .010000 1.0000 : rR(16)支 : B B常数振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :2064:<谱线表>
B常数 18 e态 1 X态 17 e态 1 86988.0351 86988.0386 -0.0035 .010000 1.0000 : rR(17) : B B常数振动量子数=0 18 18 F1e - X X态X态振动量子数=0 17 17 F1e :2065:<谱线表>
B常数 19 e态 1 X态 18 e态 1 86992.3895 86992.3917 -0.0022 .010100 1.0000 : rR(18)支 : B常数 B常数振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :2066:<谱线表>
B 20 e 1 X 19 e 1 86996.7760 86996.7785 -0.0025 .010100 1.0000 : rR(19) : B B振动量子数=0 20 20 F1e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e :2067:<谱线表>
B常数 21 e态 1 X态 20 e态 1 87001.2054 87001.2082 -0.0028 .010100 1.0000 : rR(20) : B常数 B振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :2068:<谱线表>
B 22 e 1 X 21 e 1 87005.6770 87005.6801 -0.0031 .010100 1.0000 : rR(21) : B Bv=0 22 22 F1e - X Xv=0 21 21 F1e :2069:<谱线表>
B常数 23 e态 1 X态 22 e态 1 87010.1886 87010.1929 -0.0043 .010100 1.0000 : rR(22) : B常数 B常数振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :2070:<谱线表>
B常数 24 e态 1 X态 23 e态 1 87014.7439 87014.7458 -0.0019 .010100 1.0000 : rR(23) : B常数 B常数振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :2071:<谱线表>
B常数 25 e态 1 X态 24 e态 1 87019.3356 87019.3373 -0.0017 .010100 1.0000 : rR(24) : B常数 B常数振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e :2072:<谱线表>
B常数 26 e态 1 X态 25 e态 1 87023.9733 87023.9741 -0.0008 .010100 1.0000： rR(25)支跃迁：B Bv=0 26 26 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e：2073：<谱线表>
B常数 27 e态 1 X态 26 e态 1 87028.6508 87028.6509 -0.0001 .010200 1.0000： rR(26)：B Bv=0 27 27 F1e - X X态振动量子数=0 26 26 F1e：2074：<谱线表>
B常数 28 e态 1 X态 27 e态 1 87033.3592 87033.3613 -0.0021 .010200 1.0000： rR(27)：B Bv=0 28 28 F1e - X X态振动量子数=0 27 27 F1e：2075：<谱线表>
B 29 e 1 X 28 e 1 87038.1063 87038.1146 -0.0083 .010200 1.0000：rR(28)：B B振动量子数=0 29 29 F1e - X X态振动量子数=0 28 28 F1e：2076：<谱线表>
B 30 e 1 X 29 e 1 87042.8987 87042.9008 -0.0021 .010200 1.0000：rR(29)：B B振动量子数=0 30 30 F1e - X X态振动量子数=0 29 29 F1e：2077：<谱线表>
B 31 e 1 X 30 e 1 87047.7135 87047.7207 -0.0072 .010200 1.0000：rR(30)：B B振动量子数=0 31 31 F1e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e：2078：<谱线表>
B常数 32 e态 1 X态 31 e态 1 87052.5762 87052.5802 -0.0040 .010300 1.0000 : rR(31) : B常数 B常数振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :2079:<谱线表>
B常数 33 e态 1 X态 32 e态 1 87057.4854 87057.4912 -0.0058 .010400 1.0000 : rR(32) : B常数 B常数振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :2080:<谱线表>
B常数 34 e态 1 X态 33 e态 1 87062.4251 87062.4277 -0.0026 .010400 1.0000 : rR(33) : B常数 B常数振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :2081:<谱线表>
B常数 35 e态 1 X态 34 e态 1 87067.4115 87067.4174 -0.0059 .010500 1.0000 : rR(34) : B常数 B常数振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :2082:<谱线表>
B常数 36 e态 1 X态 35 e态 1 87072.3989 87072.3997 -0.0008 .010700 1.0000 : rR(35) : B常数 B常数振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e :2083:<谱线表>
B常数 37 e态 1 X态 36 e态 1 87077.4362 87077.4444 -0.0082 .010800 1.0000 : rR(36) : B常数 B常数振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e :2084:<谱线表>
B常数 38 e态 1 X态 37 e态 1 87082.5167 87082.5221 -0.0054 .011100 1.0000：rR(37)：B常数 B态振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e：2085：<谱线表>
B常数 39 e态 1 X态 38 e态 1 87087.6253 87087.6405 -0.0152 .011400 1.0000：rR(38)：B常数 B态振动量子数=0 39 39 F1e - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e：2086：<谱线表>
B常数 40 e态 1 X态 39 e态 1 87092.7596 87092.7469 0.0127 .011900 1.0000：rR(39)：B常数 B态振动量子数=0 40 40 F1e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e：2087：<谱线表>
B常数 41 e态 1 X态 40 e态 1 87097.9328 87097.9335 -0.0007 .012400 1.0000 : rR支(40) : B常数 B常数v=0 41 41 F1e - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e :2088:<谱线表>
B常数 42 e态 1 X态 41 e态 1 87103.1158 87103.1160 -0.0002 .013400 1.0000 : rR支(41) : B常数 B常数v=0 42 42 F1e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e :2089:<谱线表>
B常数 43 e态 1 X态 42 e态 1 87108.3564 87108.3577 -0.0013 .014400 1.0000 : rR支(42) : B常数 B常数v=0 43 43 F1e - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e :2090:<谱线表>
B常数 44 e态 1 X态 43 e态 1 87113.6280 87113.6342 -0.0062 .016000 1.0000：rR支(43)：B常数 B常数v=0 44 44 F1e - X态 X态振动量子数=0 43 43 F1e：2091:<谱线表>
B常数 45 e态 1 X态 44 e态 1 87118.9196 87118.9202 -0.0006 .017900 1.0000：rR支(44)：B常数 B常数v=0 45 45 F1e - X态 X态振动量子数=0 44 44 F1e：2092:<谱线表>
B常数 46 e态 1 X态 45 e态 1 87124.2746 87124.2777 -0.0031 .020900 1.0000：rR支(45)：B常数 B常数v=0 46 46 F1e - X态 X态振动量子数=0 45 45 F1e：2093:<谱线表>
B常数 47 e态 1 X态 46 e态 1 87129.5786 87129.5787 -0.0001 .024100 1.0000：rR支(46)：B常数 B常数v=0 47 47 F1e - X态 X态振动量子数=0 46 46 F1e：2094：<谱线表>
B常数 48 e态 1 X态 47 e态 1 87134.9379 87134.9274 0.0105 .029100 1.0000：rR支(47)：B常数 B常数v=0 48 48 F1e - X态 X态振动量子数=0 47 47 F1e：2095：<谱线表>
B常数 49 e态 1 X态 48 e态 1 87140.3749 87140.3750 -0.0001 .034600 1.0000：rR支(48)：B常数 B常数v=0 49 49 F1e - X态 X态振动量子数=0 48 48 F1e：2096：<谱线表>
B 50 e 1 X 49 e 1 87145.7391 87145.7392 -0.0001 .042800 1.0000 : rR(49) : B B常数=0 50 50 F1e - X X态=0 49 49 F1e :2097:<谱线表>
碳 0 e 1 X 1 e 1 91915.3222 91915.3218 0.0004 .010284 0.0000 : pP(1)支 : 碳 振动量子数=0 0 0 F1e - X X态=0 1 1 F1e :2108:<谱线表>
碳 1 e 1 X 2 e 1 91911.8699 91911.8719 -0.0020 .010127 0.0000 : pP(2) : 碳 振动量子数=0 1 1 F1e - X X态=0 2 2 F1e :2109:<谱线表>
碳 2 e态 1 X态 3 e态 1 91908.4572 91908.4584 -0.0012 .010098 0.0000 : pP(3) : 碳 振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e :2110:<谱线表>
碳 3 e态 1 X态 4 e态 1 91905.0838 91905.0826 0.0012 .010084 0.0000 : pP(4) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e :2111:<谱线表>

碳 4 e态 1 X态 5 e态 1 91901.7513 91901.7515 -0.0002 .010084 0.0000: pP(5): 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e: 2112:<谱线表>
碳 5 e态 1 X态 6 e态 1 91898.4618 91898.4645 -0.0027 .010084 0.0000: pP(6): 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e: 2113:<谱线表>
碳 6 e态 1 X态 7 e态 1 91895.2120 91895.2133 -0.0013 .010072 0.0000: pP(7): 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e: 2114:<谱线表>
碳 7 e态 1 X态 8 e态 1 91892.0040 91892.0058 -0.0018 .010072 0.0000 : pP(8) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :2115:<谱线表>
碳 8 e态 1 X态 9 e态 1 91888.8331 91888.8371 -0.0040 .010072 0.0000 : pP(9) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :2116:<谱线表>
碳 9 e态 1 X态 10 e态 1 91885.7061 91885.7111 -0.0050 .010084 0.0000 : pP(10) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :2117:<谱线表>
碳 10 e态 1 X态 11 e态 1 91882.6177 91882.6208 -0.0031 .010084 0.0000 : pP(11) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :2118:<谱线表>
碳 11 e态 1 X态 12 e态 1 91879.5741 91879.5799 -0.0058 .010084 0.0000 : pP(12) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :2119:<谱线表>
碳 12 e态 1 X态 13 e态 1 91876.5745 91876.5786 -0.0041 .010084 0.0000 : pP(13) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :2120:<谱线表>
碳 13 e态 1 X态 14 e态 1 91873.6078 91873.6097 -0.0019 .010098 0.0000 : pP(14) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :2121:<谱线表>
碳 14 e态 1 X态 15 e态 1 91870.6874 91870.6902 -0.0028 .010098 0.0000 : pP(15) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :2122:<谱线表>
碳 15 e态 1 X态 16 e态 1 91867.8065 91867.8120 -0.0055 .010112 0.0000 : pP(16)支 : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :2123:<谱线表>
碳 16 e 1 X 17 e 1 91864.9699 91864.9742 -0.0043 .010127 0.0000 : pP(17) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :2124:<谱线表>
碳 17 e态 1 X态 18 e态 1 91862.1742 91862.1775 -0.0033 .010143 0.0000 : pP(18) : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :2125:<谱线表>
碳 18 e态 1 X态 19 e态 1 91859.4184 91859.4228 -0.0044 .010161 0.0000 : pP(19) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :2126:<谱线表>
碳 19 e 1 X态 20 e 1 91856.7060 91856.7115 -0.0055 .010198 0.0000 : pP(20) : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :2127:<谱线表>
碳 20 e 1 X态 21 e 1 91854.0369 91854.0405 -0.0036 .010239 0.0000 : pP(21) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e :2128:<谱线表>
碳 21 e 1 X态 22 e 1 91851.4092 91851.4102 -0.0010 .010308 0.0000 : pP(22) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e :2129:<谱线表>
碳 22 e态 1 X态 23 e态 1 91848.8223 91848.8235 -0.0012 .010385 0.0000 : pP(23) : 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e :2130:<谱线表>
碳 23 e态 1 X态 24 e态 1 91846.2799 91846.2797 0.0002 .010530 0.0000 : pP(24) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e :2131:<谱线表>
碳 24 e态 1 X态 25 e态 1 91843.7876 91843.7889 -0.0013 .010663 0.0000 : pP(25) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e :2132:<谱线表>
碳 25 e态 1 X态 26 e态 1 91841.3318 91841.3312 0.0006 .010846 0.0000 : pP(26) : 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e :2133:<谱线表>
碳 26 e态 1 X态 27 e态 1 91838.9172 91838.9167 0.0005 .010966 0.0000 : pP(27) : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e :2134:<谱线表>
碳 27 e态 1 X态 28 e态 1 91836.5415 91836.5420 -0.0005 .011092 0.0000 : pP(28) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e :2135:<谱线表>
碳 28 e态 1 X态 29 e态 1 91834.2099 91834.2102 -0.0003 .011136 0.0000 : pP(29) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :2136:<谱线表>
碳 29 e态 1 X态 30 e态 1 91831.9225 91831.9226 -0.0001 .011136 0.0000 : pP(30) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e :2137:<谱线表>
碳 30 e态 1 X态 31 e态 1 91829.6755 91829.6755 0.0000 .011180 0.0000 : pP(31) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :2138:<谱线表>
碳 31 e态 1 X态 32 e态 1 91827.4729 91827.4729 0.0000 .011180 0.0000 : pP(32) : 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :2139:<谱线表>
碳 32 e态 1 X态 33 e态 1 91825.3141 91825.3141 0.0000 .011180 0.0000 : pP(33) : 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :2140:<谱线表>
碳 33 e态 1 X态 34 e态 1 91823.1981 91823.1981 -0.0000 .011180 0.0000 : pP(34) : 碳 振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :2141:<谱线表>
碳 34 e 1 X态 35 e 1 91821.1243 91821.1243 0.0000 .011180 0.0000 : pP(35) : 碳 振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e :2142:<谱线表>
碳 35 e 1 X态 36 e 1 91819.0887 91819.0887 -0.0000 .011180 0.0000 : pP(36) : 碳 振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e :2143:<谱线表>
碳 36 e 1 X态 37 e 1 91817.0997 91817.0997 -0.0000 .011180 0.0000 : pP(37) : 碳 振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e :2144:<谱线表>
碳 37 e 1 X态 38 e 1 91815.1515 91815.1515 -0.0000 .011180 0.0000 : pP(38) : 碳 振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e :2145:<谱线表>
碳 38 e 1 X态 39 e 1 91813.2494 91813.2494 0.0000 .011180 0.0000 : pP(39) : 碳 振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 39 39 F1e :2146:<谱线表>
碳 39 e 1 X态 40 e 1 91811.3875 91811.3875 0.0000 .011180 0.0000 : pP(40) : 碳 振动量子数=0 39 39 F1e - X态 X态振动量子数=0 40 40 F1e :2147:<谱线表>
碳 40 e态 1 X态 41 e态 1 91809.5721 91809.5721 -0.0000 .010308 0.0000 : pP支(41) : 碳 振动量子数=0 40 40 F1e - X态 X态振动量子数=0 41 41 F1e :2148:<谱线表>
碳 41 e态 1 X态 42 e态 1 91807.8005 91807.8004 0.0001 .010332 0.0000 : pP支(42) : 碳 振动量子数=0 41 41 F1e - X态 X态振动量子数=0 42 42 F1e :2149:<谱线表>
碳 42 e态 1 X态 43 e态 1 91806.0719 91806.0718 0.0001 .010358 0.0000 : pP支(43) : 碳 振动量子数=0 42 42 F1e - X态 X态振动量子数=0 43 43 F1e :2150:<谱线表>
碳 43 e 1 X态 44 e 1 91804.3794 91804.3794 0.0000 .010412 0.0000 : pP(44) : 碳 振动量子数=0 43 43 F1e - X态 X态振动量子数=0 44 44 F1e :2151:<谱线表>
碳 44 e 1 X态 45 e 1 91802.7365 91802.7364 0.0001 .010500 0.0000 : pP(45) : 碳 振动量子数=0 44 44 F1e - X态 X态振动量子数=0 45 45 F1e :2152:<谱线表>
碳 45 e 1 X态 46 e 1 91801.1362 91801.1361 0.0001 .010628 0.0000 : pP(46) : 碳 振动量子数=0 45 45 F1e - X态 X态振动量子数=0 46 46 F1e :2153:<谱线表>
碳 46 e 1 X态 47 e 1 91799.5889 91799.5888 0.0001 .010808 0.0000 : pP(47): 碳 振动量子数=0 46 46 F1e - X态 X态振动量子数=0 47 47 F1e: 2154: <谱线表>
碳 47 e 1 X态 48 e 1 91798.0647 91798.0646 0.0001 .011049 0.0000 : pP(48): 碳 振动量子数=0 47 47 F1e - X态 X态振动量子数=0 48 48 F1e: 2155: <谱线表>
碳 48 e 1 X态 49 e 1 91796.5959 91796.5959 0.0000 .011413 0.0000 : pP(49): 碳 振动量子数=0 48 48 F1e - X态 X态振动量子数=0 49 49 F1e: 2156: <谱线表>
碳 49 e态 1 X态 50 e态 1 91795.1658 91795.1657 0.0001 .011927 0.0000 : pP支(50) : 碳 振动量子数=0 49 49 F1e - X态 X态振动量子数=0 50 50 F1e :2157:<谱线表>
碳 50 e态 1 X态 51 e态 1 91793.7865 91793.7865 0.0000 .012744 0.0000 : pP支(51) : 碳 振动量子数=0 50 50 F1e - X态 X态振动量子数=0 51 51 F1e :2158:<谱线表>
碳 51 e态 1 X态 52 e态 1 91792.4344 91792.4343 0.0001 .013862 0.0000 : pP支(52) : 碳 振动量子数=0 51 51 F1e - X态 X态振动量子数=0 52 52 F1e :2159:<谱线表>
碳 52 e态 1 X态 53 e态 1 91791.1226 91791.1225 0.0001 .015544 0.0000 : pP支(53) : 碳 振动量子数=0 52 52 F1e - X态 X态振动量子数=0 53 53 F1e :2160:<谱线表>
碳 53 e态 1 X态 54 e态 1 91789.8744 91789.8743 0.0001 .017945 0.0000 : pP支(54) : 碳 振动量子数=0 53 53 F1e - X态 X态振动量子数=0 54 54 F1e :2161:<谱线表>
碳 54 e态 1 X态 55 e态 1 91788.6700 91788.6699 0.0001 .021294 0.0000 : pP支(55) : 碳 振动量子数=0 54 54 F1e - X态 X态振动量子数=0 55 55 F1e :2162:<谱线表>
碳 55 e态 1 X态 56 e态 1 91787.4886 91787.4885 0.0001 .025908 0.0000: pP支(56): 碳 振动量子数=0 55 55 F1e - X态 X态振动量子数=0 56 56 F1e: 2163: <谱线表>
碳 56 e态 1 X态 57 e态 1 91786.3325 91786.3324 0.0001 .032288 0.0000: pP支(57): 碳 振动量子数=0 56 56 F1e - X态 X态振动量子数=0 57 57 F1e: 2164: <谱线表>
碳 57 e态 1 X态 58 e态 1 91785.2689 91785.2689 0.0000 .041037 0.0000: pP支(58): 碳 振动量子数=0 57 57 F1e - X态 X态振动量子数=0 58 58 F1e: 2165: <谱线表>
碳 58 e态 1 X态 59 e态 1 91784.2351 91784.2350 0.0001 .052756 0.0000 : pP支(59) : 碳 振动量子数=0 58 58 F1e - X态 X态振动量子数=0 59 59 F1e :2166:<谱线表>
碳 59 e态 1 X态 60 e态 1 91783.1933 91783.1932 0.0001 .068731 0.0000 : pP支(60) : 碳 振动量子数=0 59 59 F1e - X态 X态振动量子数=0 60 60 F1e :2167:<谱线表>
碳 60 e态 1 X态 61 e态 1 91782.2686 91782.2686 0.0000 .090355 0.0000 : pP支(61) : 碳 振动量子数=0 60 60 F1e - X态 X态振动量子数=0 61 61 F1e :2168:<谱线表>
碳 1 e 1 X态 0 e 1 91922.3481 91922.3502 -0.0021 .010127 0.0000 : rR(0) : 碳 振动量子数=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e :2171:<谱线表>
碳 2 e 1 X态 1 e 1 91925.9206 91925.9218 -0.0012 .010098 0.0000 : rR(1) : 碳 振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e :2172:<谱线表>
碳 3 e 1 X态 2 e 1 91929.5317 91929.5305 0.0012 .010084 0.0000 : rR(2) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e :2173:<谱线表>
碳 4 e态 1 X态 3 e态 1 91933.1828 91933.1830 -0.0002 .010084 0.0000 : rR(3) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - X X态振动量子数=0 3 3 F1e :2174:<谱线表>
碳 5 e态 1 X态 4 e态 1 91936.8758 91936.8786 -0.0028 .010084 0.0000 : rR(4) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - X X态振动量子数=0 4 4 F1e :2175:<谱线表>
碳 6 e态 1 X态 5 e态 1 91940.6073 91940.6086 -0.0013 .010072 0.0000 : rR(5) : 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - X X态振动量子数=0 5 5 F1e :2176:<谱线表>
碳 7 e 1 X态 6 e 1 91944.3789 91944.3808 -0.0019 .010072 0.0000 : rR(6) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e :2177:<谱线表>
碳 8 e 1 X态 7 e 1 91948.1859 91948.1899 -0.0040 .010072 0.0000 : rR(7) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e :2178:<谱线表>
碳 9 e 1 X态 8 e 1 91952.0346 91952.0397 -0.0051 .010084 0.0000 : rR(8) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e :2179:<谱线表>
碳 10 e态 1 X态 9 e态 1 91955.9197 91955.9229 -0.0032 .010084 0.0000 : rR(9) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e :2180:<谱线表>
碳 11 e态 1 X态 10 e态 1 91959.8470 91959.8529 -0.0059 .010084 0.0000 : rR(10) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e :2181:<谱线表>
碳 12 e态 1 X态 11 e态 1 91963.8156 91963.8197 -0.0041 .010084 0.0000 : rR(11) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e :2182:<谱线表>
碳 13 e态 1 X态 12 e态 1 91967.8140 91967.8160 -0.0020 .010098 0.0000 : rR(12) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e :2183:<谱线表>
碳 14 e态 1 X态 13 e态 1 91971.8555 91971.8583 -0.0028 .010098 0.0000 : rR(13) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e :2184:<谱线表>
碳 15 e态 1 X态 14 e态 1 91975.9329 91975.9384 -0.0055 .010112 0.0000 : rR(14) : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e :2185:<谱线表>
碳 16 e态 1 X态 15 e态 1 91980.0508 91980.0553 -0.0045 .010127 0.0000 : rR(15) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e :2186:<谱线表>
碳 17 e态 1 X态 16 e态 1 91984.2058 91984.2091 -0.0033 .010143 0.0000 : rR(16)支 : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e :2187:<谱线表>
碳 18 e态 1 X态 17 e态 1 91988.3964 91988.4008 -0.0044 .010161 0.0000 : rR(17) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e :2188:<谱线表>
碳 19 e 1 X态 18 e 1 91992.6258 91992.6315 -0.0057 .010198 0.0000 : rR(18)支 : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e :2189:<谱线表>
碳 20 e 1 X态 19 e 1 91996.8938 91996.8976 -0.0038 .010239 0.0000 : rR(19) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e :2190:<谱线表>
碳 21 e 1 X态 20 e 1 92001.1983 92001.1995 -0.0012 .010308 0.0000 : rR(20) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e :2191:<谱线表>
碳 22 e态 1 X态 21 e态 1 92005.5385 92005.5398 -0.0013 .010385 0.0000: rR(21): 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e: 2192: <谱线表>
碳 23 e态 1 X态 22 e态 1 92009.9177 92009.9176 0.0001 .010530 0.0000: rR(22): 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e: 2193: <谱线表>
碳 24 e态 1 X态 23 e态 1 92014.3413 92014.3427 -0.0014 .010663 0.0000: rR(23): 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e: 2194: <谱线表>
碳 25 e 1 X态 24 e 1 92018.7950 92018.7949 0.0001 .010846 0.0000 : rR(24): 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e: 2195: <谱线表>
碳 26 e 1 X态 25 e 1 92023.2845 92023.2842 0.0003 .010966 0.0000 : rR(25)支跃迁: 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e: 2196: <谱线表>
碳 27 e 1 X态 26 e 1 92027.8061 92027.8069 -0.0008 .011049 0.0000 : rR(26): 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e: 2197: <谱线表>
碳 28 e 1 X态 27 e 1 92032.3655 92032.3659 -0.0004 .011136 0.0000 : rR(27) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e :2198:<谱线表>
碳 29 e 1 X态 28 e 1 92036.9620 92036.9621 -0.0001 .011136 0.0000 : rR(28) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e :2199:<谱线表>
碳 30 e 1 X态 29 e 1 92041.5917 92041.5917 -0.0000 .011180 0.0000 : rR(29) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e :2200:<谱线表>
碳 31 e态 1 X态 30 e态 1 92046.2585 92046.2585 -0.0000 .011180 0.0000 : rR(30) : 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e :2201:<谱线表>
碳 32 e态 1 X态 31 e态 1 92050.9615 92050.9615 -0.0000 .011180 0.0000 : rR(31) : 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e :2202:<谱线表>
碳 33 e态 1 X态 32 e态 1 92055.6995 92055.6995 0.0000 .011180 0.0000 : rR(32) : 碳 振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e :2203:<谱线表>
碳 34 e态 1 X态 33 e态 1 92060.4715 92060.4715 -0.0000 .011180 0.0000 : rR(33) : 碳 振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e :2204:<谱线表>
碳 35 e态 1 X态 34 e态 1 92065.2735 92065.2735 0.0000 .011180 0.0000 : rR(34) : 碳 振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e :2205:<谱线表>

碳 36 1 35 1 92070 1135 92070 1135 0 0000 011180 0 0000 35 −0 36 36 1 −0 35 35 1 2206 < > e X e . . . . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
37 1 36 1 92074 9855 92074 9855 0 0000 011180 0 0000 36 −0 37 37 1 −0 36 36 1 2207 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
38 1 37 1 92079 8945 92079 8945 0 0000 011180 0 0000 37 −0 38 38 1 −0 37 37 1 2208 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
39 1 38 1 92084 8345 92084 8345 0 0000 011180 0 0000 38 −0 39 39 1 −0 38 38 1 2209 < > 碳 e X e . . . . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
40 1 39 1 92089 8115 92089 8115 0 0000 010308 0 0000 39 −0 40 40 1 −0 39 39 1 2210 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
41 1 40 1 92094 8224 92094 8225 0 0001 010332 0 0000 40 −0 41 41 1 −0 40 40 1 2211 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
42 1 41 1 92099 8664 92099 8665 0 0001 010358 0 0000 41 −0 42 42 1 −0 41 41 1 2212 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
43 1 42 1 92104 9364 92104 9364 0 0000 010412 0 0000 42 −0 43 43 1 −0 42 42 1 2213 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
44 1 43 1 92110 0454 92110 0455 0 0001 010500 0 0000 43 −0 44 44 1 −0 43 43 1 2214 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
45 1 44 1 92115 1864 92115 1865 0 0001 010628 0 0000 44 −0 45 45 1 −0 44 44 1 2215 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
46 1 45 1 92120 3694 92120 3695 0 0001 010808 0 0000 45 −0 46 46 1 −0 45 45 1 2216 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
47 1 46 1 92125 5644 92125 5645 0 0001 011049 0 0000 46 −0 47 47 1 −0 46 46 1 2217 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
48 1 47 1 92130 8034 92130 8034 0 0000 011413 0 0000 47 −0 48 48 1 −0 47 47 1 2218 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
49 1 48 1 92136 0694 92136 0695 0 0001 011927 0 0000 48 −0 49 49 1 −0 48 48 1 2219 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
50 1 49 1 92141 3744 92141 3744 0 0000 012744 0 0000 49 −0 50 50 1 −0 49 49 1 2220 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
51 1 50 1 92146 6944 92146 6945 0 0001 013862 0 0000 50 −0 51 51 1 −0 50 50 1 2221 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
52 1 51 1 92152 0424 92152 0425 0 0001 015544 0 0000 51 −0 52 52 1 −0 51 51 1 2222 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
53 1 52 1 92157 4414 92157 4415 0 0001 017945 0 0000 52 −0 53 53 1 −0 52 52 1 2223 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
54 1 53 1 92162 8714 92162 8715 0 0001 021294 0 0000 53 −0 54 54 1 −0 53 53 1 2224 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
55 1 54 1 92168 3114 92168 3115 0 0001 025908 0 0000 54 −0 55 55 1 −0 54 54 1 2225 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
56 1 55 1 92173 7634 92173 7635 0 0001 032288 0 0000 55 −0 56 56 1 −0 55 55 1 2226 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
57 1 56 1 92179 2944 92179 2944 0 0000 041037 0 0000 56 −0 57 57 1 −0 56 56 1 2227 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
58 1 57 1 92184 8414 92184 8415 0 0001 052756 0 0000 57 −0 58 58 1 −0 57 57 1 2228 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
59 1 58 1 92190 3664 92190 3665 0 0001 068731 0 0000 58 −0 59 59 1 −0 58 58 1 2229 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
60 1 59 1 92195 9944 92195 9944 0 0000 090355 0 0000 59 −0 60 60 1 −0 59 59 1 2230 < > 碳 e X e . . -. . . : rR( ) : 碳 振动量子数 F e - X X态振动量子数 F e : : 谱线表
29 1 30 3 19586 9298 19586 9288 0 0010 060000 0 0000 1 30 −0 29 29 1 −7 30 29 1 2234 < > B e 激发态 e . . . . . : qP ( ) : B Bv F e - 激发态 振动量子数 F e : : 谱线表
31 1 30 3 19801 5764 19801 5744 0 0020 014500 0 0000 1 30 −0 31 31 1 −7 30 29 1 2235 < > B e 激发态 e . . . . . : sR ( ) : B Bv F e - 激发态 振动量子数 F e : : 谱线表
30 1 31 4 19610 4472 19610 4149 0 0323 020800 0 0000 13 31 −0 30 30 1 −4 31 32 3 2238 < > B e 激发态 e . . . . . : oP ( ) : B Bv F e - 激发态 振动量子数 F e : : 谱线表
31 1 32 6 19617 3395 19617 3567 0 0172 007300 0 0000 12 32 −0 31 31 1 3 −13 32 32 2 2239 < > B e 激发态 e . . -. . . : pP ( ) : B Bv F e - 激发态 a Pv F e : : 谱线表
31 1 31 5 19716 3195 19716 3301 0 0106 013900 0 0000 1 31 −0 31 31 1 −12 31 30 1 2240 < > B e 激发态 f . . -. . . : rQ ( ) : B Bv F e - 激发态 a'态振动量子数 F f : : 谱线表
32 1 31 4 19832 0333 19832 0105 0 0228 032800 0 0000 13 31 −0 32 32 1 −4 31 32 3 2241 < > B e 激发态 e . . . . . : qR ( ) : B Bv F e - 激发态 振动量子数 F e : : 谱线表

奇异值分解拟合：1008 个观测值，38 个参数（已缩放）I态

nitial Average 误差: 1.150202585497 (未加权: 0.0465037504418) 预测的渐近误差: 1.147570094677069 (未加权: 0.0464503755618827) 参数:

旧值 新值 标准差 变化量/标准差 灵敏度汇总 名称
1 67557.9263807482 67557.9263810701 .00087862 0.0004 3.44e-5 67557.92638(88)
2 1.41770507032897 1.41770506363778 3.5132e-6 -0.0019 6.56e-8 1.4177051(35)
3 6.24399485577261e-6 6.24399108608897e-6 2.5362e-9 -0.0015 5.7e-11 6.2440(25)e-6
4 67579.2383904013 67579.2384055729 .01547960 0.0010 .000530 67579.238(15)
5 1.09918701526773 1.09918688539230 .00022665 -0.0006 2.57e-6 1.09919(23)
6 5.77973239037241e态-6 5.77953594122483e态-6 4.0437e态-7 -0.0005 5.41e态-9 5.78(40)e态-6
7 -.0504224240425148 -.0504228416460905 .00047719 -0.0009 3.77e-5 -0.05042(48)
8 67802.7849165451 67802.7848875454 .00556060 -0.0052 .000236 67802.7849(56)
9 1.09715336874161 1.09715353997320 3.0073e-5 0.0057 4.52e-7 1.097154(30)
10 .424603205929654 .424579055599668 .01151692 -0.0021 .000607 .425(12)
11 5.34314012526997e态-6 5.34329820601173e态-6 2.5163e-8 0.0063 4.8e-10 5.343(25)e态-6
12 -13.1135785220975 -13.1135722759008 .00455887 0.0014 .000284 -13.1136(46)
13 67946.2486612564 67946.2486639027 .00364353 0.0007 .000196 67946.2487(36)
14 1.07973878060191 1.07973873112873 1.3904e-5 -0.0036 3.34e-7 1.079739(14)
15 -16.9899246280871 -16.9899214894736 .00331410 0.0009 .000186 -16.9899(33)
16 1.23163175363889 1.23163200196255 .00538419 0.0000 .000413 1.2316(54)
17 -.00290463321309688 -.00290540266173026 .00025755 -0.0030 1.37e-5 -2.91(26)e-3
18 5.12786503880413e-6 5.12783957207506e-6 8.0424e-9 -0.0032 2.2e-10 5.1278(80)e-6
19 -9.51850056737858 -9.51852615949637 .01047844 -0.0024 .000673 -9.519(10)
20 67991.2956897487 67991.2956970936 .00589195 0.0012 .000312 67991.2957(59)
21 1.03759347733243 1.03759347486748 2.2493e-5 -0.0001 4.73e-7 1.037593(22)
22 -1.14571380522651 -1.14571729964806 .00908994 -0.0004 .000700 -1.1457(91)
23 -.00527072942354211 -.00527095098307920 .00031172 -0.0007 2.10e-5 -5.27(31)e-3
24 5.18562812216526e-6 5.18562893250139e-6 1.2228e-8 0.0001 2.9e-10 5.186(12)e-6
25 -5.90222571840932 -5.90222290190178 .01148474 0.0002 .000759 -5.902(11)
26 68377.9123376615 68377.9123516970 .05036832 0.0003 .001195 68377.912(50)
27 1.08921917955507 1.08921912165493 .00018753 -0.0003 1.78e-6 1.089219(188)
28 5.85540454591073e-6 5.85537632665456e-6 7.9672e-8 -0.0004 9.4e-10 5.855(80)e-6
29 67670.6782977856 67670.6779227765 .00506836 -0.0740 .000248 67670.6779(51)
30 1.30813665955102 1.30813765113497 5.5672e-7 1.7811 3.60e-8 1.30813765(56)
31 38.1154482644111 38.1153846346168 .01295243 -0.0049 .000670 38.115(13)
32 6.06110427245085e-6 6.06155910230364e-6 4.6454e-9 0.0979 3.2e-10 6.0616(46)e-6
33 24.7288685468983 24.7287011256680 .01972215 -0.0085 .000958 24.729(20)
34 -.0598221863162786 -.0598230826106589 .00025564 -0.0035 1.37e-5 -0.05982(26)
35 23.2188654276278 23.2189357988461 .04412555 0.0016 .003062 23.219(44)
36 -.0627951499543510 -.0627945906974129 .00045347 0.0012 3.19e-5 -0.06279(45)
37 2.39113881014602 2.39157392255636 .20400913 0.0021 .010788 2.39(20)
38 -.0112468031812311 -.0112360932879575 .00125602 0.0085 6.81e-5 -0.0112(13)

激发态 A态振动量子数=2 原点
激发态 A态振动量子数=2 B常数
激发态 A态振动量子数D
激发态 振动量子数=3 原点
激发态 振动量子数=3 B常数
激发态 振动量子数=3 D
激发态 <A态振动量子数=2|总角动量量子数+L-|I态振动量子数=3> 数值
激发态 振动量子数=4 原点
激发态 振动量子数=4 B常数
激发态 振动量子数=4 LambdaSS
激发态 振动量子数=4 D
激发态 <A态振动量子数=2|LS耦合|振动量子数=4> 数值
激发态振动量子数=7 原点
激发态振动量子数=7 B常数
激发态振动量子数=7 A态
激发态振动量子数=7 LambdaSS
激发态振动量子数=7 伽马
激发态振动量子数=7 D
激发态 <A态振动量子数=2|LS耦合|振动量子数=7> 数值
激发态 a'态振动量子数=12 原点
激发态 a'态振动量子数=12 B常数
激发态 a'态振动量子数=12 LambdaSS
激发态 a'态振动量子数=12 伽马
激发态 a'态振动量子数=12 D
激发态 <A态振动量子数=2|LS耦合|a'态振动量子数=12> 数值
激发态 Δv=3 原点
激发态 Δv=3 B常数
激发态 Dsv=3 D
激发态 a3P振动带=13 原点
激发态 a3P振动带=13 B常数
激发态 a3P振动带=13 A态
激发态 a3P振动带=13 D态
激发态 <a3P振动带=13|LS耦合|振动量子数=4> 数值
激发态 <a3P振动带=13|总角动量量子数+L-|振动量子数=4> 数值
激发态 <a3P振动带=13|LS耦合|振动量子数=7> 数值
激发态 <a3P振动带=13|总角动量量子数+L-|振动量子数=7> 数值
激发态 <a3P振动带=13|LS|a'态振动量子数=12> 数值
激发态 <a3P振动带=13|总角动量量子数+L-|a'态振动量子数=12> 数值

相关矩阵

最大值 0 常数 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 1 1.000 2 -0.611 1.000 3 -0.395 0.931 1.000 4 0.033 -0.038 -0.027 1.000 5 -0.043 0.040 0.026 -0.876 1.000 6 -0.042 0.039 0.026 -0.823 0.984 1.000 7 0.087 0.106 0.100 -0.133 0.103 0.097 1.000 8 -0.003 0.018 0.012 -0.005 0.003 0.002 0.032 1.000 9 0.039 -0.109 -0.095 0.007 -0.002 -0.002 -0.032 -0.672 1.000 10 0.009 0.035 0.040 -0.011 0.007 0.006 0.043 0.529 -0.514 1.000 11 0.032 -0.092 -0.087 0.005 -0.001 0.000 -0.023 -0.454 0.939 -0.365 1.000 12 -0.538 0.096 -0.058 -0.006 0.011 0.011 -0.076 0.006 0.019 -0.134 0.020 1.000。

13 0.005 0.004 -0.005 -0.001 0.000 0.000 -0.006 -0.004 -0.018 -0.017 -0.026 -0.052 1.000
14 0.006 0.005 0.035 0.003 -0.002 -0.002 0.001 0.003 0.017 0.034 0.032 0.030 -0.612 1.000
15 -0.008 0.025 0.032 -0.002 0.001 0.001 0.002 -0.005 0.000 -0.014 -0.005 0.000 0.267 -0.061 1.000
16 0.001 -0.007 -0.006 0.000 0.000 0.000 0.000 -0.005 -0.002 -0.005 -0.004 0.000 0.212 -0.066 0.357 1.000
17 0.021 -0.072 -0.088 0.003 -0.004 -0.004 -0.007 -0.007 -0.008 0.026 0.003 -0.001 -0.066 -0.025 -0.626 -0.168 1.000
18 0.008 -0.007 0.011 0.003 -0.002 -0.002 -0.001 0.009 0.012 0.030 0.025 0.019 -0.449 0.918 0.025 -0.053 -0.171 1.000
19 -0.178 -0.200 -0.268 0.000 -0.001 -0.001 -0.030 0.044 -0.084 0.031 -0.080 0.170 -0.030 -0.035 -0.065 0.009 0.170 -0.013 1.000
20 0.021 0.053 0.025 0.005 -0.004 -0.004 -0.025 -0.015 0.020 -0.019 0.019 -0.084 -0.050 0.027 -0.021 -0.005 0.033 0.024 0.020 1.000
21 -0.013 -0.001 0.040 -0.005 0.005 0.005 0.021 0.001 0.003 0.012 0.003 0.066 0.015 -0.008 0.003 0.001 -0.009 -0.008 -0.006 -0.569 1.000
22 0.004 -0.035 -0.040 0.001 -0.002 -0.002 -0.004 0.006 -0.005 0.004 -0.003 0.010 0.021 -0.017 0.011 -0.002 -0.019 -0.013 -0.020 -0.254 -0.085 1.000
23 0.008 -0.050 -0.075 0.002 -0.002 -0.002 -0.006 0.005 -0.009 -0.002 -0.008 -0.006 0.017 -0.011 0.012 0.003 -0.016 -0.006 -0.001 0.073 -0.506 0.204 1.000
24 -0.011 0.004 0.037 -0.005 0.004 0.004 0.016 -0.001 0.003 0.012 0.004 0.053 0.004 -0.002 0.000 0.000 -0.001 -0.004 0.007 -0.424 0.948 -0.125 -0.545 1.000
25 -0.015 -0.103 -0.126 0.002 -0.002 -0.002 0.003 -0.004 0.024 -0.012 0.031 -0.015 0.063 -0.042 0.054 0.006 -0.092 -0.040 -0.283 -0.101 -0.112 0.114 0.167 -0.119 1.000
26 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 -0.001 0.000 -0.002 0.000 0.000 0.001 0.000 0.000 0.001 0.000 0.001 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
27 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.001 0.000 0.002 0.000 0.000 -0.001 0.000 0.000 -0.001 0.000 -0.001 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 -0.953 1.000
28 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 -0.001 0.002 0.000 0.002 0.000 0.000 -0.001 0.000 0.000 -0.001 0.000 -0.001 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 -0.925 0.988 1.000
29 -0.004 0.064 0.075 0.008 -0.004 -0.004 0.031 0.068 -0.091 0.035 -0.070 0.116 -0.261 0.188 -0.050 -0.045 0.029 0.123 -0.009 -0.020 0.017 -0.005 -0.010 0.015 -0.070 0.002 -0.002 -0.002 1.000
30 -0.033 0.012 0.006 -0.541 0.474 0.445 0.074 0.017 -0.031 -0.039 -0.019 0.016 -0.050 0.025 -0.018 -0.013 0.013 0.013 0.013 -0.186 0.101 0.048 -0.010 0.074 0.030 0.000 0.000 -0.001 -0.149 1.000
31 -0.012 0.099 0.102 0.000 0.009 0.009 0.036 -0.094 0.224 -0.204 0.221 0.135 -0.183 0.120 -0.030 -0.040 -0.043 0.092 -0.092 0.013 -0.003 -0.006 -0.011 -0.003 -0.012 0.000 0.000 0.001 0.636 -0.097 1.000
32 -0.010 0.053 0.048 -0.039 0.033 0.031 0.031 0.054 -0.130 0.029 -0.143 0.012 -0.104 0.093 -0.027 -0.002 0.100 0.013 0.049 -0.003 -0.008 -0.001 0.014 -0.007 -0.015 0.006 -0.006 -0.008 0.454 0.055 0.137 1.000
33 -0.055 0.047 0.037 -0.004 0.000 0.000 0.015 0.259 -0.559 0.209 -0.550 0.009 0.062 -0.052 0.011 0.016 0.031 -0.050 0.147 -0.038 0.008 0.005 0.010 0.004 -0.060 0.002 -0.003 -0.003 0.125 0.102 -0.256 0.231 1.000
34 -0.044 0.031 0.016 0.001 0.000 0.000 0.024 -0.043 -0.083 -0.417 -0.126 0.142 0.043 -0.044 0.012 0.010 0.010 -0.044 0.067 0.004 -0.016 -0.002 0.006 -0.017 -0.032 0.001 -0.001 -0.001 0.137 0.100 0.125 0.136 0.500 1.000
35 -0.026 -0.039 -0.055 -0.001 0.000 -0.001 -0.001 -0.041 -0.002 -0.018 -0.008 0.053 -0.145 0.039 0.063 0.066 0.232 -0.085 0.179 0.031 -0.009 -0.017 -0.005 0.004 -0.038 0.001 -0.001 -0.001 0.036 0.033 -0.090 0.146 0.065 0.038 1.000
36 -0.010 -0.058 -0.074 -0.003 0.003 0.004 0.018 0.073 -0.092 -0.028 -0.105 0.067 -0.131 -0.065 0.135 0.034 -0.285 -0.041 0.115 -0.049 0.009 0.024 -0.005 0.004 0.041 -0.001 0.001 0.001 0.179 -0.019 0.164 -0.015 0.126 0.127 0.118 1.000
37 0.056 -0.016 -0.034 0.005 -0.003 -0.003 -0.004 -0.011 0.055 -0.053 0.054 -0.108 0.049 -0.031 0.020 -0.003 -0.056 -0.013 -0.268 0.284 -0.281 -0.009 0.098 -0.263 0.436 0.000 0.000 0.001 -0.088 -0.031 0.037 -0.075 -0.105 -0.004 -0.140 0.063 1.000
38 0.110 -0.037 -0.056 0.000 0.001 0.001 0.013 -0.065 0.162 -0.030 0.176 -0.126 -0.032 0.006 0.023 -0.007 -0.046 0.007 -0.271 0.216 -0.171 -0.011 0.029 -0.147 0.334 -0.002 0.002 0.002 -0.183 -0.035 0.015 -0.190 -0.302 -0.172 0.019 0.047 0.679 1.000
PGOPHER 11.0.142 2021年4月1日 8:30 64 位 Unicode（Delphi 33/33）
pgopher 44b8c50a90149a6ce53e669f4a0e44afc86f1abd
lutils 65f951dfa553c7f9bc501632d3360a85cd1a0165
utils ec0cac7863199e65355ae4c6ab78dbe3037fae3b
lforms d4dfa0031586b0cf5ffd76ff4d8f7aee2a9f8932
wutils 9bb7abdf4436dd4d7dfed61ce7fb7c6bc914386c
GraphicEx bfb0df9494191c3a10d6089c21fe439fcd763090
混合物：13C18O A态（v=2）能级的去微扰.pgo
单位 cm⁻¹
打印级别 谱线表
Precisio n 4
基组阶数 boDefault
量子数格式 总角动量量子数
拟合循环次数 1
拟合详情 False
自动重新绘图 True
允许复数 True
无线列表 False
显示估计不确定度 False
显示导数 False
奇异值分解限制 5
显示子基组 False
AllowZeroI False
缩放参数 True
固定跃迁相位 False
旧超精细顺序 False
旧颜色顺序 False
单残差图 False
上态颜色 False
奇异值分解阈值 1E-6 舍弃低于最大特征值此比例的奇异值分解特征值；<0 使用 QR分解。
缩放变化 1 拟合时产生的尺度变化乘以此值——通常为 1
小量阈值 2E-18 小于此值的矩阵元将被舍弃
物种：一氧化碳
J最大值 63
浓度 1 物种的相对浓度
线性分子：13C18O
J对称性调整 真
分块矩阵 真
绝对E 假
对称 假
对称权重 1
非对称权重 1
R平方H 否
显示 J 是
显示 Ω 否
显示 N 是
显示 F 数 True
显示 ef True
丰度 1 该同位素的丰度；默认值为 1
假定原点 1E99 玻尔兹曼计算的能量原点；1e99 表示自动估算。目前为 0
线性流形：X态
初始 真
本征值搜索 真

极限搜索：是 自动 Q 收敛：是 使用布居参数：否 覆盖能量：是 线性：X态 X态振动量子数=0状态：活跃 Λ Σ + Ω 阶数：自动 => 常规 B 1.746408199 转动常数。D

5.0488146E-6 四次离心畸变。H 4.35471E-12 六次离心畸变。L -2.4821E-17 J^8 离心畸变。M 2.99E-23 J^10 离心畸变。PP -4.5E-28 J^12 离心畸变。（不用 P，以免与 p 混淆。）<J、Λ=0、Ω=0|B|J、Λ=0、Ω=0> = J*(J+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|B|J、Λ=0、Ω=0> = J*(J+1)

J^2*（J*（J+2）+1）对称化：<J、Λ=0、Ω=0|D|J、Λ=0、Ω=0> = -J^2*（J*（J+2）+1）

<J，Λ=0，Ω=0|H|J，Λ=0，Ω=0> = J^3*（J*（J*（J+3）+3）+1）对称化：<J，Λ=0，Ω=0|H|J，Λ=0，Ω=0> = J^3*（J*（J*（J+3）+3）+1）

<J，Λ=0，Ω=0|L|J，Λ=0，Ω=0> = J^4*（J*（J*（J*（J+4）+6）+4）+1）对称化：<J，Λ=0，Ω=0|L|J，Λ=0，Ω=0> = J^4*（J*（J*（J*（J+4）+6）+4）+1）

<J、Λ=0、Ω=0|M|J、Λ=0、Ω=0> = J^5*(J*(J*(J*(J*(J+5)+10)+10)+5)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|M|J、Λ=0、Ω=0> = J^5*(J*(J*(J*(J*(J+5)+10)+10)+5)+1)<J、Λ=0、Ω=0|PP|J、Λ=0、Ω=0> = J^6*(J*(J*(J*(J*(J*(J+6)+15)+20)+15)+6)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|PP|J、Λ=0、Ω=0> = J^6*(J*(J*(J*(J*(J*(J+6)+15)+20)+15)+6)+1) 线性微扰：X < =0| ^14| =0>

X态振动量子数 N X态振动量子数 O（转动常数）数值 -2.2E-33 微扰大小。<J、Λ=0、Ω=0|N^14|J、Λ=0、Ω=0> = J^7*(J*(J*(J*(J*(J*(J+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1) < =0| ^14| =0> X态振动量子数 N X态振动量子数 J、Λ、Ω=0|N^14|J、Λ、Ω=0> = J^7*(J*(J*(J*(J*(J*(J+7)+21)+35)+35)+21)+7)+1) 线性能级组：碳 初始 真 本征值搜索 真 极限搜索 假 自动 Q 收敛 真 使用布居参数 假 覆盖能量 真 E 0 e 1 91918.81461769 J= 的能量 E 0 e 1 级 E 1 e 1 91922.3501979315 J=的能量 E 1 e 1 级 E 2 e 1 91929.41460931 J=的能量 E 2 e 1 级 E 3 e 1 91940.0087911758 J=的能量 E 3 e 1 级 E 4 e 1 91954.1391754158 J=的能量 E 4 e 1 级 E 5 e 1 91971.8047483651 J=的能量 E 5 e 1 级 E 6 e 1 91992.9963415625 J=的能量 E 6 e 1 级 E 7 e 1 92017.7210158785 J=的能量 E 7 e 1 级 E 8 e 1 92045.9729147246 J=的能量 E 8 e 1 级 E 9 e 1 92077.7548931101 J=的能量 E 9 e 1 级 E 10 e 1 92113.0587701987 J=的能量 E 10 e 1 级 E 11 e 1 92151.8966952636 J=的能量 E 11 e 1 级 E 12 e 1 92194.2576663392 J=的能量 E 12 e 1 级 E 13 e 1 92240.1328568783 J=的能量 E 13 e 1 级 E 14 e 1 92289.5374084555 J=的能量 E 14 e 1 级 E 15 e 1 92342.4615531966 J=的能量 E 15 e 1 级 E 16 e 1 92398.9025159008 J=的能量 E 16 e 1 级 E 17 e 1 92458.8587353746 J=的能量 E 17 e 1 级 E 18 e 1 92522.3290731028 J=的能量 E 18 e 1 级 E 19 e 1 92589.3126987891 J=的能量 E 19 e 1 级 E 20 e 1 92659.8038563447 J=的能量 E 20 e 1 级 E 21 e 1 92733.8006230299 J=的能量 E 21 e 1 级 E 22 e 1 92811.3031429715 J=的能量 E 22 e 1 级 E 23 e 1 92892.3079897717 J=的能量 E 23 e 1 级 E 24 e 1 92976.822314948 J=的能量 E 24 e 1 级 E 25 e 1 93064.8231465903 J=的能量 E 25 e 1 级 E 26 e 1 93156.3176170672 J=的能量 E 26 e 1 级 E 27 e 1 93251.2988822767 J=的能量 E 27 e 1 级 E 28 e 1 93349.7667497678 J=的能量 E 28 e 1 级 E 29 e 1 93451.7189577959 J=的能量 E 29 e 1 级 E 30 e 1 93557.148271242 J=的能量 E 30 e 1 级 E 31 e 1 93666.0549149757 J=的能量 E 31 e 1 级 E 32 e 1 93778.4343213518 J=的能量 E 32 e 1 级 E 33 e 1 93894.2815297818 J=的能量 E 33 e 1 级 E 34 e 1 94013.591760117 J=的能量 E 34 e 1 级 E 35 e 1 94136.3569127458 J=的能量 E 35 e 1 级 E 36 e 1 94262.5809686937 J=的能量 E 36 e 1 级 E 37 e 1 94392.253689726 J=的能量 E 37 e 1 级 E 38 e 1 94525.3757684531 J=的能量 E 38 e 1 级

E 39 e态 1 94661.9366784378 能量，对应 J=E 39 e态 1 能级
E 40 e态 1 94801.9378743053 能量，对应 J=E 40 e态 1 能级
E 41 e态 1 94945.3716418562 能量，对应 J=E 41 e态 1 能级
E 42 e态 1 95092.2322481804 能量，对应 J=E 42 e态 1 能级
E 43 e态 1 95242.507641775 能量，对应 J=E 43 e态 1 能级
E 44 e态 1 95396.2059026634 能量，对应 J=E 44 e态 1 能级
E 45 e态 1 95553.3147425169 J=E 45 e态 1 能级的能量
E 46 e态 1 95713.8389547786 J=E 46 e态 1 能级的能量
E 47 e态 1 95877.7430647896 J=E 47 e态 1 能级的能量
E 48 e态 1 96045.0535799167 J=E 48 e态 1 能级的能量
E 49 e态 1 96215.7478896832 J=E 49 e态 1 能级的能量
E 50 e态 1 96389.8321659005 J=E 50 e态 1 能级的能量
E 51 e 1 96567.2766128028 J=E 51 e 1 能级的能量
E 52 e 1 96748.0881671828 J=E 52 e 1 能级的能量
E 53 e 1 96932.2837485302 J=E 53 e 1 能级的能量
E 54 e 1 97119.8371091712 J=E 54 e 1 能级的能量
E 55 e 1 97310.7208844101 J=E 55 e 1 能级的能量
E 56 e 1 97504.930642673 J=E 56 e 1 能级的能量
E 57 e态 1 97702.5267856525 能级的总角动量量子数=E 57 e态 1
E 58 e态 1 97903.4396484547 能级的总角动量量子数=E 58 e态 1
E 59 e态 1 98107.6243997471 能级的总角动量量子数=E 59 e态 1
E 60 e态 1 98315.1990419085 能级的总角动量量子数=E 60 e态 1
E 61 e态 1 98526.0359657192 能级的总角动量量子数=E 61 e态 1
E 62 e态 1 98740.1821395715 能级的总角动量量子数=E 62 e态 1
E 63 e态 1 98957.6207414145 能量：J=E 63 e态 1 能级
E 64 e态 1 99178.3440172057 能量：J=E 64 e态 1 能级
E 65 e态 1 99402.3440898222 能量：J=E 65 e态 1 能级
线性：碳 振动量子数=0
状态：活跃
Λ Σ+
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 91918.79 态原点。估计最低能级 = 91918.79
B常数 1.76641191315359 转动常数。
D 5.12833508732762E-6 四次离心畸变。
<J,Λ=0,Ω=0|BJ,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
<J、Λ=0、Ω=0|DJ、Λ=0、Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|DJ、Λ=0、Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

线性流形：B常数
初始 真
本征值搜索 真 极限搜索 假 自动 Q 收敛 真 使用布居参数 假 覆盖能量 真 E 0 e 1 86917.3573438145 J= 的能量 E 0 e 1 能级 E 1 e 1 86920.8990798371 J= 的能量 E 1 e 1 能级 E 2 e 1 86927.9802287834 J= 的能量 E 2 e 1 能级 E 3 e 1 86938.5975955474 J= 的能量 E 3 e 1 能级 E 4 e 1 86952.7535165513 J= 的能量 E 4 e 1 能级 E 5 e 1 86970.4485900942 J= 的能量 E 5 e 1 能级 E 6 e 1 86991.6808705965 J= 的能量 E 6 e 1 能级 E 7 e 1 87016.4501212347 J= 的能量 E 7 e 1 能级 E 8 e 1 87044.7550139408 J= 的能量 E 8 e 1 能级 E 9 e 1 87076.5945102899 J= 的能量 E 9 e 1 能级 E 10 e 1 87111.9673665656 J= 的能量 E 10 e 1 能级 E 11 e 1 87150.8722462898 J= 的能量 E 11 e 1 能级 E 12 e 1 87193.3103335359 J= 的能量 E 12 e 1 能级 E 13 e 1 87239.2738059414 J= 的能量 E 13 e 1 能级 E 14 e 1 87288.7659451284 J= 的能量 E 14 e 1 能级 E 15 e 1 87341.7838423505 J= 的能量 E 15 e 1 能级 E 16 e 1 87398.3239892327 J= 的能量 E 16 e 1 能级 E 17 e 1 87458.3457386672 J= 的能量 E 17 e 1 能级 E 18 e 1 87521.9669176787 J= 的能量 E 18 e 1 能级 E 19 e 1 87589.0729980635 J= 的能量 E 19 e 1 能级 E 20 e 1 87659.6848539994 J= 的能量 E 20 e 1 能级 E 21 e 1 87733.8093501407 J= 的能量 E 21 e 1 能级 E 22 e 1 87811.4434750138 J= 的能量 E 22 e 1 能级 E 23 e 1 87892.5833524621 J= 的能量 E 23 e 1 能级 E 24 e 1 87977.2254359612 J= 的能量 E 24 e 1 能级 E 25 e 1 88065.3655819688 J= 的能量 E 25 e 1 能级 E 26 e 1 88157.0074638094 J= 的能量 E 26 e 1 能级 E 27 e 1 88252.1428727514 J= 的能量 E 27 e 1 能级 E 28 e 1 88350.7622038786 J= 的能量 E 28 e 1 能级 E 29 e 1 88452.8714734024 J= 的能量 E 29 e 1 能级 E 30 e 1 88558.4573652084 J= 的能量 E 30 e 1 能级 E 31 e 1 88667.5170675484 J= 的能量 E 31 e 1 能级 E 32 e 1 88780.0530157549 J= 的能量 E 32 e 1 能级 E 33 e 1 88896.0732697678 J= 的能量 E 33 e 1 能级 E 34 e 1 89015.5479117331 J= 的能量 E 34 e 1 能级 E 35 e 1 89138.5007753021 J= 的能量 E 35 e 1 能级 E 36 e 1 89264.8671434128 J= 的能量 E 36 e 1 能级 E 37 e 1 89394.712613204 J= 的能量 E 37 e 1 能级 E 38 e 1 89528.0033885644 J= 的能量 E 38 e 1 能级 E 39 e 1 89664.7427100465 J= 的能量 E 39 e 1 能级 E 40 e 1 89804.8732821819 J= 的能量 E 40 e 1 能级 E 41 e 1 89948.4826520769 J= 的能量 E 41 e 1 能级 E 42 e 1 90095.4817872327 J= 的能量 E 42 e 1 能级

能量 43 e态 1 90245.9288501256 J= E 43 e 1 能级的能量
能量 44 e态 1 90399.7945833577 能量（总角动量量子数=E 44 e态 1 能级
能量 45 e态 1 90557.048472636 能量（总角动量量子数=E 45 e态 1 能级
能量 46 e态 1 90717.7471747185 总角动量量子数=E 46 e态 1 能级的能量
E 47 e态 1 90881.7572647896 总角动量量子数=E 47 e态 1 能级的能量
E 48 e态 1 91049.1774976252 总角动量量子数=E 48 e态 1 能级的能量
E 49 e态 1 91220.0533896832 总角动量量子数=E 49 e态 1 能级的能量
E 50 e态 1 91394.1969159005 总角动量量子数=E 50 e态 1 能级的能量
E 51 e态 1 91571.8211856604 总角动量量子数=E 51 e态 1 能级的能量
E 52 e态 1 91752.7615313151 总角动量量子数=能量 E 52 e态 1 能级
E 53 e态 1 91937.0582069911 J=E 53 e态 1 能级的能量
E 54 e态 1 92124.7041674308 J=E 54 e态 1 能级的能量
E 55 e态 1 92315.6922344469 能量，总角动量量子数=E 55 e态 1 能级
线性：B常数 Bv=0
状态：活跃
Λ Σ+
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 86917.360320496 态原点。估计最低能级 = 86917.360320496
B常数 1.76976443875216 转动常数。
D 5.53872463797865E-6 四次离心畸变。
矩阵元与碳 Cv=0相同
线性流形：激发态
初始：否
本征值搜索：是
极限搜索：是
自动 Q 收敛：是
使用布居参数：否
覆盖能量 True
线性：激发态 A态振动量子数=2
状态：活跃
Λ Π
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 67557.9263810701 浮点数，标准差 = 0.000878618160689914 态原点。估计最低能级 = 67557.9263810701
B 1.41770506363778 浮点数 ，标准差 = 3.51316122242332E-6 转动常数。
q -1.187706E-5 Λ倍增常数。
D 6.24399108608897E-6 浮点数，标准差 = 2.5362343397168E-9 四次离心畸变。
H -1.280902E-11 六次离心畸变。
<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|B|总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = J*(J+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = J*(J+1)

< = 1, = 1| | =1 =1> = +1 2 总角动量量子数,Λ - Ω -
< =1 =1| | = 1, = 1> = +1
q总角动量量子数,Λ ,Ω (J*(J))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω q 总角动量量子数,Λ - Ω - (J*(J))/2 对称化：
< =1 =1| | =1 =1> = +1 2 总角动量量子数 ,Λ ,Ω q 总角
< =1 =1 =1> = +1 2
动量量子数,Λ ,Ω (J*(J))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|q|总角动量量子数,Λ ,Ω (J*(J))/

<J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J
+2)+1) 对称化：<J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=1> = -J
^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=-1,Ω=-1|H|J,Λ=-1,Ω=-1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3
(J(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=1,Ω=1|H|J,Λ=1,
Ω=1> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性：激发态振动量子数=3
状态：活跃
颜色：紫红色
Lambda Sigma-
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 67579.2384055729 浮点数，标准差 = 0.0154796027418882 状态原点。估计最低能级 = 67579.2384055729
B 1.0991868853923 浮点数 ，标准差 = 0.000226647963134712 转动常数。
D 5.779535941224 83E-6 浮点数，标准差 = 4.04368762739283-7 四次离心畸变。
H 2.247197E-12 六次离心畸变。
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)
对称化：
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=0> = -
J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=0|H|J,Λ=0,Ω=0> = J
^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性：激发态 振动量子数=4状态：活跃 颜色：紫红色 Λ Σ⁻ Ω 阶数：自动 => 常规原点
68544 2939028 = 68544 2939028 。态原点。估
1 0840499034
计最低能级。B 常数。转动常数。D 5.712347E-6 四次离心畸变。H 2.247197E-12 六次离心畸变。<
J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

对称化：
<J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=0> = J*(J+1)

<J、Λ=0、Ω=0|D|J、Λ=0、Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|D|J、Λ=0、Ω=0> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J、Λ=0、Ω=0|H|J、Λ=0、Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J、Λ=0、Ω=0|H|J、Λ=0、Ω=0> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-I态振动量子数 数值 0 0504228416460905 - . 浮点数，标准差 = 0.00047718670991937 微扰大小。<J 、 Λ=-1 、 Ω=-1|J+L-J 、 Λ=0 、 Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J 、 Λ=1 、 Ω=1|J+L-J 、 Λ=0 、 Ω=0> = sqrt(J*(J+1))

对称化矩阵元: < =2| + | =3> A态振动量子数 J L-I态 < =1 + =0 振动量子数 J,Lambda，Ω=1|J L-J,Lambda，Ω=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < =2| + | =4> A态振动量 0 06495 子数 J L-I态振动量子数。数值。微扰大小。<J,Lambda=-1,Ω=-1|J+L-J,Lambda=0, Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1,Ω=1|J+L-J,Lambda=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1))

对称化矩阵元: < =2| + | =4> A态振动量子数 J L-I态 < =1 + =0 振动量子数 J,Lambda，Ω=1|J L-J,Lambda，Ω=0> = -sqrt(J*(J+1))

线性：激发态 振动量子数=4
状态：活跃
颜色 酸橙色
S 1
Lambda Sigma-
Ω 阶数：自动 => 反转
原点 67802.7848875454 浮点数，标准差 = 0.00556060271589252 态原点。估计最低能级 = 67802.218782138
B常数 1.0971535399732 浮点数 , 标准差 = 3.00733412851795E-5 转动常数。
LambdaSS 0.424579055599668 浮点数，标准差 = 0.0115169208698887 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。
D 5.34329820601173E-6 浮点数，标准差 = 2.51634003019302E-8 四次离心畸变。
H -1.498131E-12 六次离心畸变】【。
<J,Λ=0,Ω=-1|B常数|J,Λ=0,Ω=-1> = J*(J+1)
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)
对称化：
<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))
< =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=0|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω - LambdaSS 总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 =0 =0> = 4 =0 =1> = 2 =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 J,Λ, Ω ΛSSJ,Λ, Ω / J,Λ, Ω
< =0 =0 =1> = 4
=1| | 3 ΛSSJ,Λ, Ω - / J,Λ, Ω=0|ΛSSJ,Λ, Ω /
< =0 =0 =0> = 2 3

<J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1) *sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=-1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|D|J,Λ=0,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+1) *sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4 J,Λ, Ω DJ,Λ, Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ, Ω=0|D|J,Λ, Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=-1> = -2*J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|D|J,Λ=0,Ω=1> = -J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+3)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+1)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8 < =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2 J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|H|J,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<J、Λ=0、Ω=1|H|J、Λ=0、Ω=1> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J、Λ=0、Ω=1|H|J、Λ=0、Ω=1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J、Λ=0、Ω=1|H|J、Λ=0、Ω=0> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J、Λ=0、Ω=0|H|J、Λ=0、Ω=1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J、Λ=0、Ω=0|H|J、Λ=0、Ω=0> = J*(J*(J*(J*(J*(J+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =4> A态振动量子数 LS耦合振动量子数 数值 - . 浮点数，标准差 = 0.00455886954697559 微扰大小。<J、Λ=-1、Ω=-1|LS耦合|J、Λ=0、Ω=-1> = -1/sqrt(3) <J、Λ=1、Ω=1|LS耦合|J、Λ=0、Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < =2| | =4> A态振动量子数 LS耦合振动量子数 总角动量量子数,Λ, Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ, Ω=1> = -1/sqrt(3) <总角动量量子数,Λ=1, Ω=1|LS耦合|总角动量量子数=0, Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 振动量子数=7

状态：活跃

颜色：蓝色

S 1

Λ 双重态

Ω 阶数：自动 => 反转

原点 67946.2486639027 浮点数，标准差 = 0.00364353428464716 态原点。估计最低能级 = 67913.0899089251

B常数 1.07973873112873 浮点数，标准差 = 1.39040855133839E-5 转动常数。

A态 -16.9899214894736 浮点数，标准差 = 0.00331409986625827 自旋-轨道耦合常数。

LambdaSS 1.23163200196255 浮点数，标准差 = 0.00538419115269944 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。

伽马 -0.00290540266173026 浮点数，标准差 = 0.000257551998475258 自旋-转动耦合常数。

D 5.12783957207506E-6 浮点数，标准差 = 8.04240611537847E-9 四次离心畸变。

H -5.992526E-13 六次离心畸变。

AD -9.172647E-5 A的离心畸变。

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3|B|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3|B|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|B|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+2

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1|B常数|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+4

<总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)+4

<总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B常数|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

<J,Λ=2,Ω=2|BJ,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))

<J,Λ=2,Ω=2|BJ,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)+2

<J,Λ=2,Ω=2|BJ,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))

<J,Λ=2,Ω=3|BJ,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6))

<J,Λ=2,Ω=3|BJ,Λ=2,Ω=3> = J*(J+1)-4

对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = +1 4 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6))

< =2 =3| | =2 =2> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

< =2 =2| | =2 =2> = +1 +4 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | +4 B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2))

< =2 =1| | =2 =2> = +1 +2 总角动量量子数,Λ ,Ω B总角动量量子数,Λ ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ ,Ω -sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|B|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 2 J,Λ - Ω - A态J,Λ - Ω - J,Λ - Ω - A 态 J,Λ - Ω - -

< = 2, = 1| | = 2, = 1> = 2 J,Λ ,Ω

< =2 =2 =1> = =1| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω

< =2 =2 =3| | =3> = 2 A态J,Λ ,Ω 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = 2 J,Λ ,Ω A态J,Λ ,Ω J,Λ ,Ω

< =2 =2 =3> = =3| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω

< =2 =2 =1> = =1| | 2 A态J,Λ ,Ω - J,Λ ,Ω=1|A态J,Λ ,Ω

< =2 =2 =1> = 2

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 2 3 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - / 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS.总角动量量子数,Λ - Ω - - / 3 总角动量量子数,Λ - Ω - LambdaSS总角动量量子数,Λ - Ω - /

< = 2, = 2| | = 2, = 2> = 4 < = 2, = 1| | = 2, = 1> = 2 3 LambdaSS.总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω

< =2 =2 =1> = 2 < =2 =2 =2> = 4 =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 对称化：

< =2 =2 =3> = 2

< =2 =3| | =2 =3> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =3| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω

< =2 =2 =3> = 4 < =2 =2 =2> = 2 =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω

< =2 =2 =2> = 2 < =2 =2 =1> = 4 < =2 =2 =1> = 2 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω /

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = 1 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(2 +1 6 2 *(J*(J)-))/ J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(*(J*(J)-))/

< = 2, = 2| | = 2, = 3> = 2 +1 6 2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - -

< = 2, = 2| | = 2, = 2> = 2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(

< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 2 +1 2 2 *(J*(J)-))/ J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - sqrt(*(J*(J)-))/

< = 2, = 1| | = 2, = 2> = 2 +1 2 2 J,Lambda - Omega - gammaJ,Lambda - Omega - -

< = 2, = 1| | = 2, = 1> = 3 J,Lambda ,Omega

< =2 =2 =1> = 3 gammaJ,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =2 =2 =2> = =1| | 2 +1 2 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda , Omega

< =2 =2 =1> = =2| | 2 +1 2 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega

< =2 =2 =2> = =2| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega

< =2 =2 =3> = =2| | 2 +1 6 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda , Omega

< =2 =2 =3> = =3| | 2 gammaJ,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega =3> = 1 gammaJ,Lambda ,Omega 对称化：

< =2 =3| | =2 =3> = 1 J,Lambda ,Omega 伽马J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega =3| | 2 +1 6 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =3> = < =2 =2 =2> = 2 +1 6
=3| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =3| | =2 =3> = 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =2| | 2 +1 2 2 伽
< =2 =2 =2> = 马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega =2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =2 =3> = 2 +1 2
=2| | 3 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega < =2 =2 =2> = 3 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =1> = =2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega < =2 =2 =2> = 2 伽
< =2 =2 =2 =1> = 马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega =1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =1| | 2 +1 6 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =2> = < =2 =2 =1> = 2 +1 6
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega=1伽马J,Lambda ,Omega
< =2 =2 =1> = 1

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = +2 5 6 4 J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - -J*(J*(J*(J)-)-
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 2 +1 +1 2
)- J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-3|D|J,Λ=-2,Ω=-1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <
J,Λ=-2,Ω=-2|D|J,Λ=-2,Ω=-3> = -2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))
< = 2, = 2| | = 2, = 2> = +2 +9 +8 +12 J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - -J*(J*(J*(J)))
< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 2 +1 +3 2
J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|D|J,Λ=-2,Ω=-3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=-
2,Ω=-1|D|J,Λ=-2,Ω=-2> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< = 2, = 1| | = 2, = 1> = +2 +11 +10 12 J,Λ - Ω - D J,Λ - Ω - -J*(J*(J*(J))
< =2 =2 =1> = +2 +11 +10
)- J,Λ ,Ω =1| | 12 D J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))-
< =2 =2 =2> = 2 +1 +3 2
J,Λ ,Ω=1|D|J,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=1|D|J,Λ=2,Ω=3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=2|
D|J,Λ=2,Ω=1> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +2 +9 +8 +12 J,Λ ,Ω D J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J))) J,Λ ,
< =2 =2 =3> = 2 +1 +1 2
Ω=2|D|J,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|D|J,Λ=2,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=3|D|
J,Λ=2,Ω=2> = -2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))
< =2 =3| | =2 =3> = +2 5 6 4 J,Λ ,Ω D J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)-)-)- 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = +2 5 6 4 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =3> = 2 +1 +1 2
J*(J*(J*(J)-)-)- 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|
D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -
2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =1> = +2 +9 +8 +12 总角
< =2 =2 =1> = 2 +1 +3 2
动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=3|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <总
角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角
动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +2 +11 +10 12 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2 =2> = +2 +11 +10
J*(J*(J*(J)))- 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 12
< =2 =2 =1> = 2 +1 +3 2
D总角动量量子数,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- 总角动量量子数,Λ ,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <总角
动量量子数,Λ=2,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动
量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)+3)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =1| | =2 =3> = +2 +9 +8 +12 总角动量量子数,Λ ,Ω DJ,Λ ,Ω -
< =2 =2> = 2 +1 +1 2
J*(J*(J*(J))) 总角动量量子数,Λ ,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ ,Ω - *(-J*(J))*sqrt(*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|
D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -
2*(-J*(J+1)+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)-5)-6)-4

< = 2, = 3| | = 2, = 3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J)-)-)-) J,Lambda - Omega - HJ,Lambda -
< = 2, = 3| | = 2, = 2> = 3 +2 1 +2 +4
Omega - (J*(J*(- *J*(J)-)))*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Lambda=-2,Omega=-3|HJ,Lambda=-2,Omega=-1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=2|HJ,Lambda=-2,Omega=-
3> = J*(J*(-3*J*(J+2)+1)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) < = 2, = 2| | = 2, = 2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,
< = 2, = 2| | = 2, = 1> = 3 +2 23 20 2 +1
Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J)-))-)- J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-
72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=-2,Omega=-1|HJ,Lambda=-2,Omega=-3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=-2,Omega=-1|HJ,Lambda=-2,Omega=-2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
25)-22)-12)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 2, = 1| | = 2, = 1> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 J,Lambda - Omega - HJ,Lambda - Omega - J*(J*(J*(J*(J*(J)))))
< =2 =2 =1> = +3 +21 +37 +74 +56
J,Lambda ,Omega =1| | +24 HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=1|HJ,Lambda ,O
< =2 =2 =2> = 3 +2 25 22 12 2
mega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=2,Omega=1|HJ,Lambda=2,Omega=3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,Omega=2|HJ,Lambda=2,Omega=1> =
J*(J*(-3*J*(J+2)-23)-20)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Lambda ,Omega=2|HJ,Lambda ,O
< =2 =2 =3> = 3 +2 +1 +4 2 +1
mega J*(J*(- *J*(J)))*sqrt(*(J*(J)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <J,Lambda=2,Omega=3|HJ,Lambda=2,Omega=1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Lambda=2,
Omega=3|HJ,Lambda=2,Omega=2> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) < =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Lambda ,Omega

HJ,Lambda ,Omega J *(J*(J*(J*(J)-)-)-) 对称化:

< =2 =3| | =2 =3> = ^2 +3 3 11 6 +8 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J *(J*(J*(J*(J)-)-)-) J,Λ, Ω=3|HJ,Λ, Ω (J*(J*(- *J*(J)-)))*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|
< =2 =2 =3> = 3 +2 1 +2 +4
HJ,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=3|HJ,Λ=2,Ω=2> = J*(J*(-3*J*(J+2)+1)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24))
< =2 =3| | =2 =1> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Λ, Ω=3|HJ,Λ, Ω J*(J*(- *J*(J)-)-)*sqrt(*(J*(J)-
< =2 =2 =1> = 3 +2 23 20 2 +1
2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|HJ,Λ=2,Ω=3> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=2|HJ,Λ=2,Ω=3> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-
25)-22)-12)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =2 =2| | =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56 +24 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Λ, Ω
< =2 =2 =2> = +3 +21 +37 +74 +56
=2| | +24 HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Λ, Ω=2|HJ,Λ, Ω (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|
< =2 =2 =1> = 3 +2 25 22 12 2
HJ,Λ=2,Ω=1> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=3> = J*(J*(-3*J*(J+2)-23)-20)*sqrt(2*(J*(J+1)-2))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-11)-27)+46)+60)-72))-24*sqrt(2*(J*(J+1)-
2)) < =2 =1| | =2 =3> = +3 +21 +37 2 20 24 J,Λ, Ω HJ,Λ, Ω J*(J*(J*(J*(J*(J)))-)-)- J,Λ, Ω=1|HJ,Λ, Ω J*(J*(- *J*(J)))*sqrt(*(J*(J)-
< =2 =2 =2> = 3 +2 +1 +4 2 +1
6))-2*sqrt(2*(J*(J*(J*(J*(J*(J+3)-7)-19)+18)+28)-24)) <J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=2> = 2*(3*J*(J+1)+2)*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-7)-8)+12) <J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-1)+2)+4)*sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <
J,Λ=2,Ω=1|HJ,Λ=2,Ω=1> = J^2*(J*(J*(J*(J+3)-3)-11)-6)+8

<总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3|AD|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-3> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-
4)

<J,Λ=-2,Ω=-3|AD|J,Λ=-2,Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-2|AD|J,Λ=-2,Ω=-3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=-2,Ω=-2|AD|J,Λ=-2,Ω=-1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|AD|J,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-2,Ω=-1|AD|J,Λ=-2,Ω=-1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J,Λ=2,Ω=1|AD|J,Λ=2,Ω=1> = 2*(-J*(J+1)-4) <J,Λ=2,Ω=1|AD|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|AD|J,Λ=2,Ω=1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=2,Ω=2|AD|J,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|AD|J,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-6)) <J,Λ=2,Ω=3|AD|J,Λ=2,Ω=3> = 2*(J*(J+1)-4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=3|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=3> = 2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(-总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=2|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -sqrt(2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-6)) <总角动量量子数,Λ=2,Ω=1|A态D|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = 2*(总角动量量子数*(总角动量量子数+1)-4)

线性微扰：激发态 < =2| | =7> A态振动量子数 LS振动量子数 数值 - 。9 51852615949637 浮点数，标准差 = 0.0104784401443708 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS|J,Λ=-2,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < =2| | =7> A态振动量子数 < =1 =2 LS振动量子数 J,Λ ,Ω=1|LS|J,Λ ,Ω=1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS|J,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 a'态振动量子数=12状态：活跃 颜色 红色 S 1 Λ Σ + Ω 阶数：自动 => 反转 原点

67991 2956970935 = 0 00589159259730653 = 67990 5318855605 。浮点数，标准差 。1 03759347486748 = 2 24934982641142 5 态原点。估计最低能级。B。浮点数，标准差。E-转动常数。LambdaSS -1.14571729964806 浮点数，标准差 = 0.0090899360677818 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。伽马 -0.0052709509830792 浮点数，标准差 = 0.000311718263193545 自旋-转动耦合常数。D 5.18562893250139E-6 浮点数，标准差 = 1.22277506611042E-8 四次离心畸变。H -2.996263E-13 六次离心畸变。<J,Λ=0,Ω=-1|B|J,Λ=0,Ω=-1> = J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=-1|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=0|B|J,Λ=0,Ω=-1> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +1 +2 J,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω J*(J) J,Λ ,Ω=0|B|J,Λ ,Ω - < =0 =0 =1> = 2 sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1) 对称化：<J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = J*(J+1) <J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=1> = -sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|B|J,Λ=0,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =1> = +1 +2 J,Λ ,Ω BJ,Λ , < =0 =0 =0> = 2 Ω J*(J) J,Λ ,Ω=0|B|J,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J+1))

< =0 = 1| | =0 = 1> = 2 3 总角动量量子数,Λ,Ω - LambdaSS 总角动量量子数,Λ,Ω - / 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角 < =0 =0 =0> = 4 < =0 =0 =1> = 2 动量量子数,Λ,Ω - / 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ,Ω / 对称化：

< =0 =1| | =0 =1> = 2 3 总角动量量子数,Λ,Ω LambdaSS总角动量 < =0 =0 =1> = 4 量子数,Λ,Ω / 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 3 < =0 =0 =0> = 2 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ,Ω - / 总角动量量子数,Λ,Ω=0|LambdaSS|总角动量量子数,Λ,Ω /

< =0 = 1| | =0 = 1> = 1 总角动量量子数,Λ,Ω - 伽马 总角动量量子数,Λ,Ω - - 总角动量量子数,Λ,Ω - 1| | 2 +1 2 伽马 总角动量量子数*(总角 < =0 = =0 =0> = < =0 =0 = 1> = 2 +1 动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 伽马总角 < =0 =0 =0> = < =0 =0 =1> = 动量量子数,Λ,Ω - 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω < =0 =0 =0> = 2 +1 =1| | 2 伽马总角动量量子数,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 1 伽马总角动量量子数,Λ,Ω - 对称化： < =0 =0 =1> =

< =0 −1| | =0 −1> = 1 总角动量量子数,Λ ,Ω 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 −1| | 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 −1| | =0 −1> = < =0 =0 =0> = 2 +1 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ ,Ω < =0 −0| | 2 伽马总角动量量子数,Λ ,Ω - 总角动量量子数,Λ ,Ω−0|伽马|总角动量量子数,Λ ,Ω sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1))/2 < =0 =0 =1> = < =0 =0 −0> =

<J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Lambda=0,Omega=-1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +2 +9 +8 4 < =0 =0 =1> = 2 +1 +1 2 J,Lambda ,Omega DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))- J,Lambda ,Omega=0|D|J,Lambda ,Omega *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=-1> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) 对称化：

<J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = -J*(J*(J*(J+2)+3)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -2*J*(J+1) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*(J*(J+1)+1)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=0|D|J,Lambda=0,Omega=0> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8)-4

<J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=-1|H|J,Lambda=0,Omega=1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=0|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) < =0 =0| | =0 =0> = +3 +21 +37 +46 +28 +8
< =0 =0 =1> = 3 +2 13 10 4 2
J,Lambda ,Omega HJ,Lambda ,Omega J*(J*(J*(J*(J*(J))))) J,Lambda ,Omega=0|H|J,Lambda ,Omega (J*(J*(- *J*(J)-)-)-)*sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=-1> = 2*J*(J*(3*J*(J+2)+5)+2) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega=0> = (J*(J*(-3*J*(J+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Lambda=0,Omega=1|H|J,Lambda=0,Omega =1> = J*(J*(J*(J*(J+3)+9)+13)+10)+4) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+9)+13)+10)+4) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=1|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 2*总角动量量子数*(总角动量量子数*(3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)+5)+2) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=1> = (总角动量量子数*(总角动量量子数*(-3*总角动量量子数*(总角动量量子数+2)-13)-10)-4)*sqrt(2*总角动量量子数*(总角动量量子数+1)) <总角动量量子数,Λ=0,Ω=0|H|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = 总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数*(总角动量量子数+3)+21)+37)+46)+28)+8

线性微扰：激发态 < =2| | =12> A态振动量子数 LSa'态振动量子数
5 90222290190178
数值 - . 浮点数，标准差 = 0.0114847379051065 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=-1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元: < =2| | =12> A态振动量子数
< =1 =0
LSa'态振动量子数 J,Λ ,Ω=1|LS耦合|J,Λ ,Ω=1> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=1|LS耦合|J,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(3)

线性：激发态 Δv=3
状态：活跃
颜色：橙色
Λ 双重态
Ω 阶数：自动 => 常规
原点 68377.912351697 浮点数，标准差 = 0.0503683180380362 态原点。估计最低能级 = 68377.912351697
B常数 1.08921912165493 浮点数 , 标准差 = 0.000187528245029578 转动常数。
D 5.85537632665456E-6 浮点数，标准差 = 7.96715100187949E-8 四次离心畸变。
H -2.247197E-13 六次离心畸变。
<J,Λ=-2,Ω=-2|B|J,Λ=-2,Ω=-2> = J*(J+1)
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)
对称化：
<J,Λ=2,Ω=2|B|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)
<J,Λ=2,Ω=2|B常数|J,Λ=2,Ω=2> = J*(J+1)

<J,Λ=-2,Ω=-2|D|J,Λ=-2,Ω=-2> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J^2*(J*(J+2)+1) 对称化：<J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J^2*(J*(J+2)+1) <J,Λ=2,Ω=2|D|J,Λ=2,Ω=2> = -J^2*(J*(J+2)+1)

<J,Λ=-2,Ω=-2|H|J,Λ=-2,Ω=-2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=2,Ω=2|H|J,Λ=2,Ω=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) 对称化：<J,Λ=2,Ω=2|H|J,Λ=2,Ω=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1) <J,Λ=2,Ω=2|H|J,Λ=2,Ω=2> = J^3*(J*(J*(J+3)+3)+1)

线性微扰：激发态 < =2| + | =3> A态振动量子
0 02597
数 J L-Δv 数值。微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-|J,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < =2| + | =3> A态振动量子数 J
< =1 + =2 =2> =
L-Δv J,Λ, Ω=1|J L-|J,Λ, Ω sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=1|J+L-|J,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2)

线性：激发态 a3P振动带=13状态：活跃 颜色：银色 S 1 Λ Π Ω 阶数：自动 => 常规原点
67670 6779227765 = 0 00506836342284951 = 67632 5503916685 。浮点数，标准差。态
1 30813765113497 = 5 56718911902302 7
原点。估计最低能级。B常数。浮点数，标准差。E-转动常数。A 38.1153846346168 浮点数，标准差 = 0.0129524282362973 自旋-轨道耦合常数。LambdaSS -0.01821971 自旋-自旋耦合常数（=1.5*ε）。o 0.6497647 为 Ω = 0 态提供 Λ倍增的自旋-自旋耦合常数。伽马 0.003153713 自旋-转动耦合常数。p 0.008831129 Λ倍增常数。q 2.786443E-5 Λ倍增常数。D 6.06155910230364E-6 浮点数，标准差 = 4.64536445607895E-9 四次离心畸变。AD -0.0001940953 A的离心畸变。 < = 1, = 2| | = 1, = 2> = +1 2 J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω - J*(J)- J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω - -sqrt(
< = 1, = 2| | = 1, = 1> = 2
(J(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|B|J,Λ=-1,Ω=-2> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < = 1, = 1| | = 1, = 1> = +1 +2 J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω -
< = 1, = 1| | = 1, =0> = 2
J*(J) J,Λ - Ω - BJ,Λ - Ω -sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|B|J,Λ=-1,Ω=-1> = -sqrt(2*J*(J+1)) < = 1, =0| | = 1, =0> = +1 +2
< =1 =1 =0> = +1
J,Λ - Ω B J,Λ - Ω J*(J) J,Λ ,Ω =0| | +2 B J,Λ ,Ω J*(J) J,Λ ,Ω=0|B|J,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J+1))
< =1 =1 =1> = 2

<J,Λ=1,Ω=1|BJ,Λ=1,Ω=0> = -sqrt(2*J*(J+1))
< =1 =1| | =1 =1> = +1 +2 J,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω J*(J) J,Λ ,Ω
< =1 =1 =2> = 2
=1|BJ,Λ ,Ω -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|BJ,Λ=1,Ω=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2))
< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Λ ,Ω BJ,Λ ,Ω J*(J)- 对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,
< =1 =1 =2> = 2
Omega J*(J)- J,Lambda ,Omega=2|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=2|B常数|
J,Lambda=1,Omega=1> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) < =1 =2| | =1 =1> = +1 +2
< =1 =1 =2> = 2
J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J+1))
<J,Lambda=1,Omega=1|B常数J,Lambda=1,Omega=2> = -sqrt(2*J*(J+1))
< =1 =1| | =1 =1> = +1 +2 J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = +1
J*(J) J,Lambda ,Omega =1| | +2 B常数J,Lambda ,
< =1 =1 =0> = 2
Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=1|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*J*(J+1)) <J,Lambda=1,Omega=1|B常数|
J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < =1 =0| | =1 =1> = +1 +2
< =1 =1 =1> = 2
J,Lambda ,Omega B常数J,Lambda ,Omega J*(J) J,Lambda ,Omega=0|B常数J,Lambda ,Omega -sqrt(*(J*(J+1)-
2)) <J,Lambda=1,Omega=0|B常数J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Lambda=1,Omega=0|B常数|
J,Lambda=1,Omega=0> = J*(J+1)-2

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 1 J,Lambda - Ω - A J,Lambda - Ω - J,Lambda - Ω A J,Lambda - Ω - 1 J,Lambda ,Ω =0| | 1 A J,Lambda ,
< = 1, =0| | = 1, =0> = < =1 =1 =0> = < =1 =1
Ω - J,Lambda ,Ω =2| | =2> = 1 A J,Lambda ,Ω 对称化：

< =1 =2| | =1 =2> = 1 J,Lambda ,Ω A J,Lambda ,Ω
< =1 =1 =2> =
J,Lambda ,Ω =2| | 1 A J,Lambda ,Ω -
< =1 =1 =0> =
J,Lambda ,Ω =0| | 1 A J,Lambda ,Ω -
< =1 =1 =0> = 1
J,Lambda ,Ω=0AJ,Lambda ,Ω

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = 2 3 J,Lambda - Omega - LambdaSSJ,Lambda - Omega - / J,Lambda - Omega - LambdaSSJ,Lambda - Omega - - / 3 J,Lambda -
< = 1, = 1| | = 1, = 1> = 4 < = 1, =0| | = 1, =0> = 2
Omega LambdaSS J,Lambda - Omega / 3 J,Lambda ,Omega =0| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Omega / J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> = 2 < =1 =1 =1> = 4
=1| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Omega - / J,Lambda ,Omega =2| | 3 LambdaSSJ,Lambda ,Omega / 对称化：
< =1 =1 =2> = 2

< =1 =2| | =1 =2> = 2 3 总角动量量子数,Λ ,Ω LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =2| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω
< =1 =1 =2> = 4 < =1 =1 =1> = 2
=1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =1| | 3 LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω / 总角动量量子数,Λ ,Ω =0| | 3 LambdaSS总角动
< =1 =1 =1> = 2 < =1 =1 =0> = 4 < =1 =1 =0> = 2 3
量量子数,Λ ,Ω - / 总角动量量子数,Λ ,Ω=0LambdaSS总角动量量子数,Λ ,Ω /

< = 1, =0| | =1 =0> = 1 J,Lambda - Omega oJ,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega o J,Lambda - Omega =0> = 1 对称化：
< =1 =0| | = 1,

< =1 =0| | =1 =0> = 1 J,Λ,Ω oJ,Λ,Ω J,Λ,Ω=0|o|
< =1 =1 =0> = 1
J,Λ,Ω

<J,Lambda=-1,Omega=-2|伽马J,Lambda=-1,Omega=-1> = sqrt(2*(J*(J+1)-2))/<J,Lambda=-1,Omega=-1|伽马J,Lambda=-1,Omega=-2> = sqrt(2*(J*(J+1)-2))/ 2
< = 1, = 1| | = 1, = 1> = 2 J,Lambda - Omega - 伽马J,Lambda - Omega - - J,Lambda - Omega - 伽马J,Lambda - O 2
< = 1, = 1| | = 1, =0> =
mega sqrt(2 +1 2 *J*(J))/ J,Lambda - Omega 伽马 J,Lambda - Omega - sqrt(*J*(J))/
< = 1, =0| | = 1, = 1> = 2 +1
2 J,Lambda - Omega 伽马 J,Lambda - Omega -
< = 1, =0| | = 1, =0> =
2 J,Lambda ,Omega =0| | 2 伽马J,
< =1 =1 =0> = < =1 =1 =1> =
Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega =0| | 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/
< =1 =1 =0> = 2 +1
J,Lambda ,Omega =1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> =
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =2> =
=1| | 2 +1 2 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ 对称化：
< =1 =2| | =1 =1> = 2 +1 2 2 J,Lambda ,Omega 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =2> =
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =2> =
=1| | 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = 2 +1
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> =
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> =
=1| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> =
=1| | 2 +1 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> = 2 +1
=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1> =
=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega - J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =0> =
=0| | 2 伽马J,Lambda ,Omega sqrt(*(J*(J)-))/ J,Lambda ,Omega=0伽马J,Lambda ,
< =1 =1 =0> = 2 +1 2 2
Omega sqrt(*(J*(J)-))/

< = 1, = 1| | =1 =0> = 2 +1 2 J,Lambda - Omega - p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J))/ J,Lambda - Omega pJ,Lambda ,Omega =0> = 1 J,Lambda - Omega pJ,Lambda ,Omega (-sqrt(
< = 1, =0| | =1 < = 1, =0| | =1 =1> =
2 +1 2 *J*(J))/ J,Lambda ,Omega p J,Lambda - Omega - (-sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda ,Omega p J,Lambda - Omega =0> = 1 J,Lambda ,
< =1 =0| | = 1, = 1> = 2 +1 < < =1 =0| | = 1, =0> =
Omega p J,Lambda - Omega (-sqrt(2 +1 2 *J*(J))/ 对称化： < =1 =1| | =1 =0> = 2 +1 2 J,Lambda ,Omega p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega
< =1 =1 =1| | =1
=1| | =0> = 1 p J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega =0| | 2 +1 2 p J,Lambda ,Omega (-sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Omega =0| | 2 p J,Lambda ,Omega (-sqrt(
< =1 =1 =0> = < =1 =1 =0> = 2 +1 < =1 =1
J(J))/ J,Lambda ,Omega =0| | =1> = 1 p J,Lambda ,Omega J,Lambda ,Omega=0|p|J,Lambda ,Omega (-sqrt(2*J*(J+1)))/2
< =1 =1 =1> =

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-2|q|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = sqrt(J*(J*(J+1)-2)*(J+1))/2

<J,Lambda=-1,Omega=-1|q|J,Lambda=1,Omega=0> = -sqrt(2*J*(J+1)) < = 1, = 1| | =1 =1> = +1 2 J,Lambda - Omega - q J,Lambda ,Omega (J*(J))/ J,Lambda - Omega qJ,Lambda ,Omega
< = 1, =0| | =1
=0> = 1 J,Lambda - Omega qJ,Lambda ,Omega -sqrt(2*J*(J+1)) < = 1, =0| | =1 =2> = +1 2 +1 2 J,Lambda - Omega qJ,Lambda ,Omega sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Lambda ,
< = 1, =0| | =1 =1> = < =1 =0| | = 1, = 2> = +1 2 +1
Omega q J,Lambda - Omega - sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ 2 J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega - -sqrt(*J*(J)) < =1 =0| | = 1, =0> = 1 J,Lambda ,Omega q
< =1 =0| | = 1, = 1> = 2 +1 < =1 =1| | = 1, = 1> =
J,Lambda - Omega J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega - (J*(J +1 2))/ J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega -sqrt(*J*(J+1))
< =1 =1| | = 1, =0> = 2
< =1 =2| | = 1, =0> = +1 2 +1 2 J,Lambda ,Omega q J,Lambda - Omega sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ 对称化：

<J,Λ=1,Ω=2|q|J,Λ=1,Ω=0> = sqrt(J*(J*(J+1) 2 +1 2)*(J))/ J,Λ ,Ω=2|q|J,Λ ,
< =1 =1 =0> = 2 +1
Ω -sqrt(*J*(J)) < =1 =1| | =1 =0> = +1 2 J,Λ ,Ω qJ,Λ ,Ω (J*(J))/
< =1 =1
J,Λ ,Ω =1| | =0> = 1 qJ,Λ ,Ω J,Λ ,Ω=1|q|J,Λ ,Ω -sqrt(2*J*(J+1))
< =1 =1 =1> =
< =1 =1 =1| | =1 =1> = +1 2 +1 2 J,Λ ,Ω qJ,Λ ,Ω s
< =1 =1 =0> = +1 2 +1
qrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Λ ,Ω =0| | 2
< =1 =1 =0> = 2 +1
qJ,Λ ,Ω sqrt(J*(J*(J)-)*(J))/ J,Λ ,Ω=0|q|J,Λ ,Ω -sqrt(*J*(J))
< =1 =0| | =1 =1> = 1 J,Λ ,Ω qJ,Λ ,Ω J,Λ ,Ω
< =1 =1 =1> =
=0| | +1 2 qJ,Λ ,Ω (J*(J))/ J,Λ ,Ω=0|q|J,Λ ,Ω -sqrt(
< =1 =1 =2> = 2
J(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|q|J,Λ=1,Ω=2> = sqrt(J*(J*(J+1)-2)*(J+1))/2

<J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) <J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = 2*J*(J+1)
sqrt(2(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-2|D|J,Λ=-1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-
2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=-1,Ω=-1|D|J,
Λ=-1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=-2> = -2*sqrt(J*(J*(J+2)-1)-2)) <
J,Λ=-1,Ω=0|D|J,Λ=-1,Ω=-1> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1))
< = 1, =0| | = 1, =0> = +2 +7 +6 4 J,Λ - Ω DJ,Λ - Ω -
< =1 =1 =0> = +2 +7 +6
J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω =0| | 4 D
< =1 =1 =1> = 2 +1 +2 2
J,Λ ,Ω -J*(J*(J*(J)))- J,Λ ,Ω=0|D|J,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0|D|J,Λ=1,Ω=2> = -
2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,
Ω=1> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <J,Λ=1,Ω=1|D|J,Λ=1,Ω=2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,
Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|D|J,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <J,Λ=1,Ω=2|
D|J,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) 对称化：

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总
角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = -
2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-
2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|D|总
角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -
2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = 2*(J*(J+1)+2)*sqrt(2*J*(J+1))
< =1 =1| | =1 =1> = +2 +7 +6 4 总角动量量子数,Λ ,Ω
< =1 =1 =1> = +2 +7 +6
DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))- J,Lambda ,Omega
=1| | 4 DJ,Lambda ,Omega -J*(J*(J*(J)))-
< =1 =1 =0> = 2 +1 +2 2
J,Lambda ,Omega=1|D| 总角动量量子数 ,Λ ,Ω *(J*(J))*sqrt(*J*(J+1)) < 总角动量量子数 ,Λ=1,Ω=1|D| 总角动量量
子数,Λ=1,Ω=0> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = 2*(J*(J+1)
+2)*sqrt(2*J*(J+1)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=2> = -J*(J*(J*(J+2)+9)+8) <总角动量量子
数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=1> = 2*J*(J+1)*sqrt(2*(J*(J+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量
子数,Λ=1,Ω=1> = -2*sqrt(J*(J*(J*(J+2)-1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = 2*J*(J+1)
sqrt(2(J*(J+1)-2)) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|D|总角动量量子数,Λ=1,Ω=0> = -J*(J*(J*(J+2)-1)-2)

< = 1, = 2| | = 1, = 2> = +1 2 J,Lambda - Ω - AD J,Lambda - Ω - J*(J)- J,Lambda - Ω - AD J,Lambda - Ω - (-sqrt(*(J*(J +1 2 2)-))))/ J,Lambda - Ω - AD
< = 1, = 2| | = 1, = 1> = 2 < = 1, = 1| | = 1, = 2> = 2 +1 2
J,Lambda - Ω - (-sqrt(*(J*(J)-))))/ 2 J,Lambda - Ω - AD J,Lambda - Ω sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda - Ω ADJ,Lambda - Ω -
< = 1, = 1| | = 1, =0> = 2 +1 < = 1, =0| | = 1, = 1> = 2 +1
sqrt(*J*(J))/ 2 J,Lambda - Ω ADJ,Lambda - Ω -J*(J)- 2 J,Lambda ,Ω
< = 1, =0| | = 1, =0> = +1 < =1 =1 =0> = +1
=0| | 2 AD J,Lambda ,Ω -J*(J)- J,Lambda ,Ω =0| | +1 2 AD J,Lambda ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Ω
< =1 =1 =1> = 2 < =1 =1 =0> = 2 +1
=1| | 2 AD J,Lambda ,Ω sqrt(*J*(J))/ J,Lambda ,Ω =1| | 2 2 AD J,Lambda ,Ω (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Ω
< =1 =1 =2> = 2 +1 < =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 AD J,Lambda ,Ω (-sqrt(*(J*(J)-))))/ J,Lambda ,Ω =2| | 2 AD J,Lambda ,Ω J*(J)- 对称化：
< =1 =1 =2> = +1

< =1 =2| | =1 =2> = +1 2 J,Λ,Ω ADJ,Λ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ,Ω < =2| | +1 2 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =2> = 2 < =1 =1 =1> = 2 +1 2
=2| | 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =2| | 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = 2 +1 < =1 =1 =2> = 2 +1
=1| | 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =1| | 2 ADJ,Λ,Ω -总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =2> = +1 < =1 =1 =0> = +1 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
=1| | 2 ADJ,Λ,Ω -总角动量量子数*(总角动量量子数)- 总角动量量子数,Λ,Ω =1| |
< =1 =1 =0> = 2 < =1 =1 =1> = 2 +1
=0| | 2 ADJ,Λ,Ω sqrt(*总角动量量子数*(总角动量量子数))/ 总角动量量子数,Λ,Ω =0| | 2 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))))/ 总角动量量子数,Λ,Ω
< =1 =1 =1> = 2 +1 < =1 =1 =0> = 2 +1 2
=0| | 2 ADJ,Λ,Ω (-sqrt(*(总角动量量子数*(总角动量量子数)-))))/ 总角动量量子数,Λ,Ω=0AD|总角动量量子数,Λ,Ω 总角动量量子数*(总角动量量子数)-
< =1 =1 =0> = +1 2

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|LS耦合|振动量子数=3>

数值 -11.5278 微扰大小。

<总角动量量子数,Λ=-1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

<总角动量量子数,Λ=1,Ω=0|LS耦合|总角动量量子数,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =3> a Pv LS振动量子数 J,Λ, Ω=0|LS∥,Λ, Ω -1/sqrt(3)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a Pv LS振动量子数 数值 - 。微扰大小。 <J,Λ=-1,Ω=0|LS∥,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=0|LS∥,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a Pv LS振动量子数 J,Λ, Ω=0|LS∥,Λ, Ω -1/sqrt(3)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =4> a Pv LS振动量子数 数值。浮点数, 标准差 = 0.0197221506962047 微扰大小。 <J,Λ=-1,Ω=-1|LS∥,Λ=0,Ω=-1> = 1/sqrt(6) <J,Λ=-1,Ω=0|LS∥,Λ=0, Ω=0> = 1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=0|LS∥,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=1|LS∥,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =4> a P态 v振动量子数 L S振动量子数 J、Λ、Ω=1|LS∥、Λ、Ω /sqrt(6) <J、Λ=1、Ω=1|LS∥、Λ=0、Ω=1> = 1/sqrt(6) <J、Λ=1、Ω=0|LS∥、Λ=0、Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =4> a P态 v振动量子数 J L-ev 数值 - 。浮点数, 标准差 = 0.000255639894261763 微扰大小。<J、Λ=-1、Ω=-2∥+L-∥、Λ=0、Ω=-1> = -sqrt(J*(J+1)-2) <J、Λ=-1、Ω=-1∥+L-∥、Λ=0、Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=-1、Ω=0∥+L-∥、Λ=0、Ω=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=0∥+L-∥、Λ=0、Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=1∥+L-∥、Λ=0、Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J、Λ=1、Ω=2∥+L-∥、Λ=0、Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =4> a P振动带 J L-ev J,Lambda , Ω=2∥ L-∥,Lambda , Ω -sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=2∥+L-∥,Lambda=0, Ω=1> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=1∥+L-∥,Lambda=0, Ω=0> = -sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0∥+L-∥,Lambda=0, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0∥+L-∥,Lambda=0, Ω=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 <a3P振动带=13|LS耦合振动量子数=7>

数值 23.2189357988461 浮点数, 标准差 = 0.0441255453837693 微扰大小。<总角动量量子数,Λ=-1, Ω=-2|LS耦合|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-2> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=-1,Ω=-1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=-2,Ω=-1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=2|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(6)

< 3 =13| | =7> a态 Pv LS耦合振动量子数 总角动量量子数 ,Λ ,Ω=2|LS 耦合 | 总角动量量子数 ,Λ ,Ω -1/sqrt(6) < 总角动量量子数 ,Λ=1,Ω=2|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6) <总角动量量子数,Λ=1,Ω=1|LS耦合|总角动量量子数,Λ=2,Ω=1> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 <a3Pv=13∥+L-振动量子数=7>

数值 -0.0627945906974129 浮点数, 标准差 = 0.000453469558882703 微扰大小。 <J,Λ=-1,Ω=-2∥+L-∥,Λ=-2,Ω=-3> = sqrt(J*(J+1)-6) <J,Λ=-1,Ω=-1∥+L-∥,Λ=-2,Ω=-2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=-1,Ω=0∥+L-∥,Λ=-2,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0∥+L-∥,Λ=2,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1∥+L-∥,Λ=2,Ω=2> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=2|J+L-∥,Λ=2,Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-6)

对称化矩阵元 < 3 =13| + | =7> a P态 v 总角动量量子数 J L-dv 总角动量量子数 J,Lambda , Ω=2∥ L-∥,Lambda , Ω sqrt(J*(J+1)-6) < J,Lambda=1, Ω=2∥+L-∥,Lambda=2, Ω=3> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=1∥+L-|J,Lambda=2, Ω=2> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=1∥+L-∥,Lambda=2, Ω=2> = sqrt(J*(J+1)) <J,Lambda=1, Ω=0∥+L-∥,Lambda=2, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Lambda=1, Ω=0∥+L-∥,Lambda=2, Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =12> a Pv LSa'态振动量子数 数值 . 浮点数, 标准差 .204009133001652 微扰大小。 <J,Λ=-1,Ω=-1|LS∥,Λ=0,Ω=-1> = -1/sqrt(6) <J,Λ=-1,Ω=0|LS|J,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=0|LS∥,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=1|LS∥,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6)

对称化矩阵元 < 3 =13| | =12> a Pv LSa'态振动量子数 J,Λ ,Ω=1|LS∥,Λ ,Ω - /sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=1|LS∥,Λ=0,Ω=1> = -1/sqrt(6) <J,Λ=1,Ω=0|LS∥,Λ=0,Ω=0> = -1/sqrt(6)

线性微扰：激发态 < 3 =13| + | =12> a Pv J L-a'态振动量子数 数值 - 。浮点数, 标准差 .00125602151495791 微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-2∥+L-∥,Λ=0,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=-1,Ω=-1|J+L-∥,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=-1,Ω=0∥+L-∥,Λ=0,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0∥+L-∥,Λ=0,Ω=-1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1∥+L-∥,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=2∥+L-∥,Λ=0,Ω=1> = sqrt(J*(J+1)-2)

< 3 =13| + | =12> a Pv J L-a'态振动量
< =1 + =0 =1> =
子数 J L 的对称化矩阵元，Λ ,Ω=2∥ L-∥,Λ ,Ω sqrt(J*(J+1)-2) <J,Λ=1,Ω=2∥+L-∥,Λ=0,Ω
=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=1∥+L-∥,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0∥+L-∥,Λ=0,
Ω=1> = sqrt(J*(J+1)) <J,Λ=1,Ω=0∥+L-∥,Λ=0,Ω=1> = sqrt(J*(J+1))

线性微扰：激发态 < 3 =13| | =3> a
22 8568
Pv LSΔv 数值 - 。微扰大小。<J,Λ=-1,Ω=-2|LS∥J,Λ=-2,Ω=-2> = 1/sqrt(3) <J,Λ=1,
Ω=2|LS∥J,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(3)

对称化矩阵元: < 3 =13| | =3>
< =1 =2 =2> = 1
a Pv LSΔv J,Λ ,Ω=2|LS∥J,Λ ,Ω /sqrt(3) <J,Λ=1,Ω=2|LS∥J,Λ=2,Ω=2> = -1/sqrt(3)

跃迁矩: < | | > 激发态 μ X 球形跃迁矩：激发态 | | >< =2| 1 | =0> μ X
<
1
A态振动量子数 T( ) X态振动量子数 秩 分量 自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。

A态振动量子数 T( ) X态振动量子数 J- Λ - Ω - T( ) J,Λ ,Ω =0> = 2 1 2 sqrt(*(J-))/ J- Λ ,Ω T( )
< 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 2 1
J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/ 2 J,Λ - Ω - T( ) J,Λ ,Ω (*J)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|T(1)∥J,Λ=0,
< = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +1 2
Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - T( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω
< +1 =1 1 =0 =0> = 2 +2
=1| | 2 T( )J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/ 线强度，来自 A态振动量子数
< 1
=2| | =0> T( ) X态振动量子数 S J- Λ - Ω - T( ) J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/
< 1, = 1, = 1| 1 | < 1, =1 =1| 1 | =0 =0> = 1
S J- Λ ,Ω T( )J,Lambda ,Omega (J-)/ 2 S J,Λ - Ω - T( ) J,Lambda ,Omega (*J)/
< = 1, = 1| 1 | =0 =0> = 2 +1
2 S J,Λ ,Ω =1| | 2 T( )
< =1 1 =0 =0> = 2 1 < +1 = 1, = 1| 1 | =0 =0> = +2
J,Lambda ,Omega (- *J-)/- S J ,Λ - Ω - T( ) J,Lambda ,Omega (J)/ 2 S J ,Λ ,Ω
< +1 =1 1 =0 =0> = +2
=1| | 2 T( ) J,Lambda ,Omega (J)/ 对称化约化矩阵元，来自 A态振动量子数
< 1
=2| | =0> T( ) X态振动量子数 J- Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=1,Ω=1 - |T(1)∥J,Λ=0,Ω=0> =
< 1, =1 =1 + | 1 | =0 =0> =
(-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=1,Ω=1 + |T(1)∥J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 对称化线强度，来自 < =2| 1 | =0> A态振动量子数
< 1, =1 =1 + | 1 | =0
T( )X 态振动量子数 S J- Λ ,Ω T( )J,Λ ,Ω =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω -
< =1 =1 1 =0 =0> = 2
| | 1 1 T( )J,Λ ,Ω (- *J-)/- S J ,Λ ,Ω T( ) J,Λ ,Ω J
< +1 =1 =1 + | 1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | >< 3 =13| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶
1
极）矩 / 德拜 - 注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < 3 =13| 1,1 | =0> a态 Pv fT( )X态振动量子数 J- Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω
< 1, = 1, = 1| 1,1 | =0
=0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/
< 1, =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=1,Ω=1|fT(1,1)∥J,Λ=0,Ω=0> =
< = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2
(-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J)))/ J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(
< +1 =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2
*(J))/ 2 来自 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 的线强度
< 3 =13| 1,1 |
=0> S J- Λ - Ω - fT( )J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,
< 1, = 1, = 1| 1,1 | < 1, =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 1
Ω (J-)/ 2 S J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< =1 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (J)/
< +1 = 1, = 1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/
< +1 =1 =1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 a态 Pv fT( ) X态振动量子数 的对称化约化矩阵元
< 3 =13| 1,1 |
=0> J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=1,Ω=1 + |fT(1,1)∥J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=1,Ω
< 1, =1 =1 | 1,1 | =0 =0> =
=1 - |fT(1,1)∥J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 来自 < 3 =13| 1,1 | =0> a态 Pv fT( ) X态振动量子数 的对称化线强度 S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,
< 1, =1 =1 | 1,1 | =0
Ω =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-
< =1 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2
1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω J
< +1 =1 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩: < | | >< =7| 1,1 | =0> 激发态 μ X态振动量子数 fT( )X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶
1
极）矩 / 德拜——注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =7| 1,1 | =0> 振动量子数 fT( )X态振动量子数的约化矩阵元 J- Λ -
< 1, = 2, = 1| 1,1 | =0
Ω - fT( ) J,Λ ,Ω =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/
< 1, =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=2,Ω=1|fT(1,1)∥J,Λ=0,Ω=0> =
< = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2
(-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J)))/ J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(
< +1 =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2
*(J))/ 2 从振动量子数 fT( ) X态振动量子数得到的线强度 S J- Λ - Ω - fT( ) J,Λ
< =7| 1,1 |
=0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J-)/
< 1, =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 1
2 S J,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< =2 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J ,Λ - Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (J)/
< +1 = 2, = 1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/
< +1 =2 =1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 振动量子数 fT( )X态振动量子数的对称化约化矩阵元
< =7| 1,1 | =0>

<J-1,Λ=2,Ω=1 - |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J-1) <J,Λ=2,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J
+1,Λ=2,Ω=1 - |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 从 < =7| 1,1 | =0> 振
< 1, =2 =1 | 1,1 | =0
动量子数 fT( )X态振动量子数得到的对称化线强度 S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω
=0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-
< =2 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2
1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω J
< +1 =2 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩：<激发态 |mu|X> <a'态振动量子数=12 |fT ( )X态振动量子数=0>
秩1分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与该数值的平方成正比。 < =12| 1,1 | =0> a'态振动量
< 1, =0 = 1| 1,1 | =0
子数 fT( ) X态振动量子数 J- Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω =0> = 2 1 2 (-sqrt(*(J-)))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(
< 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
*(J-))/ 2 J,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> =
< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1 2
(-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (-sqrt(*(J)))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/
< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2
2 来自a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数 =0>
< =12| 1,1 | < 1, =0 = 1| 1,1 |
S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ =0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω (J-)/
< 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 1
2 S J,Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J ,Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω (J)/
< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ 2
< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 < =12| 1,1 |
对称化约化矩阵元，来自a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数 =0> J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=0,
< 1, =0 =1 | 1,1 | =0 =0> =
Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = (-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=1 - |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) 对称化线强度，来自
< =12| 1,1 | =0> a'态振动量子数 fT( ) X态振动量子数 S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω
< 1, =0 =1 | 1,1 | =0
=0> = 1 J- S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-
< =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = 2
1 1)/- S J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω J
< +1 =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩： < | | > < =4| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 ev fT( ) Xv 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——注
1
意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =4| 1,1 | =0> ev fT( ) Xv J- Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω
< 1, =0 = 1| 1,1 | =0
=0> = 2 1 2 sqrt(*(J-))/ J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J-))/
< 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 J,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω (*J)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=1|fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> =
< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1 2
(-2*J-1)/sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2 2 J ,Λ ,Ω - fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/ J ,Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω sqrt(*(J))/
< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 +2
2 ev fT( )Xv 的线强度 =0> S J- Λ ,Ω - fT( ) J,Λ
< =4| 1,1 | < 1, =0 = 1| 1,1 |
=0 =0> = 1 2 ,Ω (J-)/ S J- Λ ,Ω fT( )J,Λ ,Ω (J-)/
< 1, =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 1
2 S J,Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω (*J)/
< =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = 2 +1
2 S J,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (- *J-)/-
< =0 =1| 1,1 | =0 =0> = 2 1
2 S J ,Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Ω (J)/
< +1 =0 = 1| 1,1 | =0 =0> = +2
2 S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω (J)/ 2
< +1 =0 =1| 1,1 | =0 =0> = +2 < =4| 1,1 |
ev fT( ) Xv 的对称化约化矩阵元 =0> J- Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω sqrt(J-1) <J,Λ=0,Ω=1 - |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> =
< 1, =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> =
(-2*J-1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=1 + |fT(1,1)|J,Λ=0,Ω=0> = sqrt(J+2) < =4| 1,1 | =0> ev fT( )Xv 的对称化线强度 S J- Λ ,Ω fT( )
< 1, =0 =1 + | 1,1 | =0
J,Lambda ,Omega =0> = 1 J- S J,Λ ,Ω - fT( )J,Λ ,Omega (- *J-
< =0 =1 | 1,1 | =0 =0> = 2
1 1)/- S J ,Λ ,Ω fT( ) J,Λ ,Ω J
< +1 =0 =1 + | 1,1 | =0 =0> = +2

禁戒跃迁矩： < | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 振动量子数 fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度
1
1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。禁戒跃迁矩：
< | | > < =3| 1,1 | =0> 激发态 μ X态 Δv fT( ) X态振动量子数 秩 分量1 磁性 否 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——
1
请注意，相对强度与此数值的平方成正比。跃迁矩： < | | > B常数 μ X态 球形跃迁矩：B
<
| | > < =0| 1 | =0> μ X态 B常数振动量子数 T( ) X态振动量子数 秩 分量自动 => 0 强度1 跃
1
迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。 < =0| 1 | =0> B常数振动量子数 T( ) X态振动量子数
< 1, =0 =0| 1 | =0
J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω 的约化矩阵元 =0> = -sqrt(J) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1) < =0| 1 | =0> B 常数振动量子数 T( )
< 1, =0 =0| 1 |
X态振动量子数 S J- Λ,Ω T( )J,Λ=0,Ω=0> = J S < +1 =0 =0| 1 | =0 =0> = +1 J,Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω J 的线强度
< 1
=0| | =0> B常数振动量子数 T( ) X态振动量子数 J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω 的对称化约化矩阵元 -sqrt(J) <J+1,Λ=0,
< 1, =0 =0| 1 | =0 =0> =
Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = (J+1)/sqrt(J+1) < =0| 1 | =0> B常数振动量子数 T( )X态振动量子数 S J- Λ,Ω T( )J,Λ,Ω=0> = J
< 1, =0 =0| 1 | =0
S<J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=0,Ω=0> = J+1 的对称化线强度

跃迁矩：<B|mu|激发态>
球形跃迁矩：<B|mu|激发态> <Bv=0|T(1)|A态振动量子数=2>
Rank 1
分量自动 => 1 强度1 跃迁（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。

< =0| 1 | =2> B常数振动量子数 T( ) A态 J- Λ,Ω T( ) J,Λ - Ω 的约化矩阵元
< 1, =0 =0| 1 | = 1,
= 1> = 2 +1 2 - sqrt(*(J))/ J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω sqrt(*(J))/
< 1, =0 =0| 1 | =1 =1> = 2 +1
2 J,Λ,Ω T( )J,Λ - Ω - (- *J-)/sqrt(*(2*J+1)) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)|J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/
< =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 1 2
sqrt(2*(2*J+1)) < +1 =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 2 J,Λ,Ω T( )J,Λ - Ω - sqrt(*J)/ J,Λ,Ω
< +1 =0 1 =1 =1> = 2
=0| | 2 T( )J,Λ,Ω sqrt(*J)/ =0| | =2> B常数振动量子数 T( )A
< 1 < 1, =0 =0| 1 |
态 S J- Λ,Ω T( )J,Λ = 1, = 1> = +1 2 - Ω - (J)/ S J- Λ,Ω T( )J,Λ,Ω (J)/
< 1, =0 =0| 1 | =1 =1> = +1
2 S J,Λ,Ω T( ) J,Λ - Ω - (- *J-)/-
< =0 =0| 1 | = 1, = 1> = 2 1
2 S J,Λ,Ω =0| | 2 T( ) J,
< =0 1 =1 =1> = 2 +1 < +1 =0 =0| 1 | = 1, = 1> =
Λ,Ω (*J)/ S J,Λ,Ω T( ) J,Λ - Ω - J/ 2 S J,Λ,Ω
< +1 =0 1 =1 =1> =
=0| | 2 T( ) J,Λ,Ω J/ 的线强度 =0| | =2> B常数
振动量子数 T( ) A态 J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω 的对称化约化矩阵元 sqrt(J+1) <J,Λ=0,Ω=0|T(1)| - J,Λ=1,Ω=1> = (2*J+1)/sqrt(2*J+1) <J+1,Λ=0,Ω=0|T(1)| + J,Λ=1,Ω=1> =
sqrt(J) < =0| 1 | =2> B常数振动量子数 T( )A态 S J- Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω
< 1, =0 =0| 1 | + =1
=1> = +1 J S J,Λ,Ω T( ) - J,Λ,Ω *J +1
< =0 =0| 1 | =1 =1> = 2 < +1 =0 =0| 1 | + =1 =1> =
S J,Λ,Ω T( ) J,Λ,Ω J 的对称化线强度。跃迁矩： < | | > 碳 μ X态 球形跃迁矩：碳
<
| | > < =0| 1 | =0> μ X态 X态振动量子数 T( ) X态振动量子数 秩 分量自动 => 0 强度1 跃迁
1
（偶极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。矩阵元同 < | | > < =0| 1 | =0> B常数 μ X态 B常数振动量
<
子数 T( ) X态振动量子数。跃迁矩：碳 | | > μ 激发态 球形跃迁矩：碳
<
| | > < =0| 1 | =2> μ 激发态 X态振动量子数 T( ) A态 秩 分量自动 => 1 强度1 跃迁（偶
1
极）矩 / 德拜——请注意，相对强度与此数值的平方成正比。矩阵元同 < | | > < =0| 1 | =2> B常数 μ 激发态 B常数振
动量子数 T( ) A态。关联：关联

一氧化碳.13C18O.激发态.A态振动量子数=2.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.A态振动量子数=2.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.A态振动量子数=2.D 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=3.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=3.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=3.D 一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|J+L-振动量子数=3>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=4.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=4.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=4.LambdaSS 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=4.D 一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|LS振动量子数=4>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=7.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=7.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=7.A态 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=7.LambdaSS 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=7.伽马 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=7.D 一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|LS|振动量子数=7>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.LambdaSS 一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.伽马 一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.D 一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|LS|a'态振动量子数=12>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.Δv=3.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.Δv=3.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.Δv=3.D 一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.原点 一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.B常数 一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.A态 一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.D 一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|LS|振动量子数=4>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|J+L-振动量子数=4>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|LS|振动量子数=7>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|J+L-振动量子数=7>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|LS|a'态振动量子数=12>.数值 一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|J+L-|a'态振动量子数=12>.数值

一氧化碳. 13 18 =2 1 000000 C O.激发态.A态振动量子数 .原点 . 一氧化碳. C O.激发态.A态振动量子数 .B常数 - .611097 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.A态振动量子数=2.
13 18 =2 0
0.394999 0.931474 1.000000 一氧化碳. 13 18 =3 0 032699 0 038056 0 026507 1 000000 C O.激发态.振动量子数 .原点 . - . - . . 一氧化碳. C O.激发态.振
13 18 =3 0 042506 0 039516 0 026229 0
子数 .B常数 - . . . . - .876261 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.振动量子数=3.D -0.041999 0.038630 0.025513 -0.822677 0.983707 1.000000 一氧化碳.
13 18 < =2| + | =3> 0 086756 0 106406 0 100399 0 132875 0 102512 0 097275 1 000000 C O.激发态. A态振动量子数 J L-Iv .数值
13 18 =4 0 003057 0 018384 0 011713 0 005347 0 002599 0 002316 0
. . 一氧化碳 . C O. 激发态 .e 态 . 原点 - . . . - . . . .032342 1 000000. 一氧化碳 .13C18O. 激发态 .e 态 =4.B 常数 0.039228 -0.108622 -0.095386 0.007055 -0.002469 -0.001935 -0.032034 -0.671857 1.000000 一氧化碳 .13C18O.激发态.e态=4.LambdaSS 0.008759 0.034764 0.040224 -0.011285 0.007018 0.006486 0.042605 0.528819 -0.513685 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.e态=4.D 0.031625 -0.092400 -0.086637 0.004892 -0.000841 -0.0004 0.023026 -0.453502 0.938560 -0.365005 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|LS耦合|e态=4>.数值 -0.538280 0.096021 -0.057563 -0.005926 0.011475 0.011400 - 0.075553 0.006246 0.018663 -0.13384 0.019953 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.dv=7.原点 0.004827 0.003795 -0.004605 -0.001072 0.000105 -0.000023 - 0.006026 -0.004311 -0.018079 -0.016744 -0.025702 -0.051928 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.B常数 0.005560 0.004537 0.035495 0.002746 -0.001806 -0.001603 0.000674 0.003442 0.017375 0.033633 0.031833 0.030412 -0.611571 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.dv=7.A态 -0.007808 0.024737 0.032140 - 0.001568 0.001397 0.001337 0.002364 -0.005373 0.000233 -0.013746 -0.005216 0.000034 0.267315 -0.060700 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.dv=7.LambdaSS 0.000983 -0.007159 -0.006359 -0.000398 0.000050 0.000010 0.000411 -0.004915 -0.001761 -0.005370 -0.003972 -0.000060 0.211893 -0.066184 0.357139 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.dv=7.伽马 0.021028 -0.072130 -0.087712 0.003399 -0.004035 -0.003986 - 0.006941 -0.006735 -0.008331 0.025878 0.003011 -0.001349 -0.066485 -0.025139 -0.625889 -0.167714 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.dv=7.D 0.007570 -0.007281 0.011171 0.002637 -0.001739 -0.001542 -0.00055 0.009037 0.012332 0.030057 0.024712 0.019486 -0.448784 0.918072 0.025408 -0.052520 -0.171101 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|LS耦合|dv=7>.数值 -0.177600 -0.200233 -0.267842 0.000459 - 0.000717 -0.000812 - 0.030321 0.044336 -0.084127 0.030574 -0.080210 0.169721 -0.029569 -0.035230 -0.064983 0.009009 0.169763 -0.012971 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.原点 0.021190 0.052536 0.024845 0.005224 -0.004262 -0.004118 - 0.024521 -0.014699 0.019616 -0.018687 0.018715 -0.084042 -0.050199 0.026841 -0.021118 -0.005458 0.033318 0.024332 0.019816 1.000000 一氧化碳.13C18O.激发a'态振动量子数=12.B常数 -0.012897 -0.001229 0.039821 -0.005454 0.004798 0.004663 0.020823 0.001268 0.002780 0.011861 0.002753 0.065898 0.014897 -0.008091 0.003147 0.000614 -0.008950 -0.008241 -0.00587 0.568855 1.000000

一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.LambdaSS 0.004052 -0.034970 -0.040242 0.001472 -0.001547 -0.001528 -
0.004469 0.005757 -0.005372 0.004264 -0.003444 0.010050 0.021276 -0.016871 0.011453
-0.002302 -0.018642 -0.012890 -0.020312 -0.254081 -0.084794 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.伽马 0.007713 -0.050414 -0.075382 0.002371 -0.002370 -0.002313 -
0.005713 0.004892 -0.008964 -0.001536 -0.008263 -0.006183 0.017333 -0.010752 0.012392
0.002908 -0.016030 -0.006100 -0.001231 0.073295 -0.506491 0.204477 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.a'态振动量子数=12.D -0.010930 0.003768 0.036819 -0.004527 0.003957 0.003839 0.016397
-0.000515 0.003399 0.011593 0.003759 0.052698 0.003861 -0.002060 -0.000470 -0.000128
-0.001109 -0.004378 0.006758 -0.424419 0.948354 -0.124615 -0.545285 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<A态振动量子数=2|LS耦合|a'态振动量子数=12>.数值 -0.015475 -0.102886 -0.126416 0.001821 -0.001663 -0.001594 0.003214
-0.004453 0.023560 -0.012215 0.030556 -0.015292 0.062857 -0.041558 0.054128 0.005980
-0.092007 -0.040226 -0.283280 -0.100598 -0.112127 0.113784 0.166559 -0.118548 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.Δv=3.原点 -0.000059 0.000361 0.000251 -0.000161 0.000122 0.000112 0.000212
0.000449 -0.001314 0.000254 -0.001505 -0.000339 -0.000241 0.000519 -0.000128 0.000108
0.000898 0.000017 0.000575 -0.000009 -0.000161 0.000025 0.000222 -0.000157 0.000140
1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.Δv=3.B常数 0.000068 -0.000422 -0.000302 0.000181 -0.000137 -0.000126 -
0.000243 -0.000496 0.001451 -0.000268 0.001665 0.000361 0.000303 -0.000606 0.000152
-0.000113 -0.001010 -0.000035 -0.000634 0.000008 0.000180 -0.000026 -0.000248 0.000175
-0.000150 -0.952676 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.Δv=3.D 0.000078 -0.000480 -0.000356 0.000209 -0.000155 -0.000142 -
0.000270 -0.000607 0.001740 -0.000407 0.001984 0.000457 0.000299 -0.000654 0.000177
-0.000138 -0.001198 0.000022 -0.000738 -0.000011 0.000209 -0.000022 -0.000280 0.000198
-0.000150 -0.925213 0.988436 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.原点 -0.003583 0.064382 0.074685 0.007821 -0.004451 -0.003743 0.030535
0.067955 -0.091302 0.035415 -0.069691 0.115703 -0.261368 0.187859 -0.049504 -0.044980
0.029182 0.122578 -0.008556 -0.019600 0.016916 -0.004998 -0.010161 0.014820 -
0.069582 0.001950 -0.002303 -0.002484 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.B常数 -0.033294 0.011821 0.005798 -0.540810 0.473944 0.445100 0.073837
0.016802 -0.030734 -0.038832 -0.018636 0.016494 -0.049915 0.024934 -0.018425 -0.012655
0.012782 0.013061 0.012889 -0.186050 0.101170 0.047968 -0.010231 0.073862 0.030304
0.000427 -0.000461 -0.000569 -0.148687 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.A态 -0.011819 0.099048 0.101995 -0.000061 0.008650 0.009412 0.036412
-0.093786 0.224425 -0.204001 0.221317 0.134912 -0.183310 0.119637 -0.030004 -0.040058
-0.042929 0.091542 -0.091600 0.012681 -0.003385 -0.005855 -0.011038 -0.003359 -
0.011846 -0.000473 0.000408 0.000830 0.636282 -0.096731 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.a3P振动带=13.D -0.009759 0.053017 0.047579 -0.039242 0.033013 0.030773 0.030935
0.054404 -0.130493 0.028705 -0.143333 0.011839 -0.104188 0.092714 -0.026930 -0.002369
0.100049 0.012761 0.049320 -0.003074 -0.008109 -0.000917 0.013895 -0.006767 -
0.014959 0.005692 -0.006468 -0.008184 0.453807 0.054904 0.136522 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|LS耦合|振动量子数=4>.数值 -0.055405 0.047328 0.036882 -0.003994 -0.000014 -0.000407
0.015152 0.259061 -0.558728 0.209430 -0.549803 0.009342 0.062405 -0.052361 0.011457
0.015924 0.030654 -0.050176 0.146875 -0.038118 0.007621 0.005064 0.009696 0.003753
-0.060195 0.002303 -0.002558 -0.003012 0.124553 0.101987 -0.256276 0.231312 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|总角动量量子数+L-振动量子数=4>.数值 -0.043812 0.030884 0.015548 0.000825 0.000000 0.000187
0.023557 -0.042817 -0.082843 -0.417042 -0.126262 0.141820 0.042940 -0.043739 0.012050
0.010298 0.010054 -0.043658 0.066713 0.004447 -0.016271 -0.002352 0.006082 -0.016685
-0.031609 0.001204 -0.001363 -0.001469 0.137388 0.099891 0.125289 0.136177 0.500347
1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|LS耦合|振动量子数=7>.数值 -0.026411 -0.038548 -0.054881 -0.001469 -0.000342 -0.000613 -
0.000891 -0.040824 -0.001752 -0.018028 -0.008215 0.052732 -0.145139 0.038658 0.063301
0.066438 0.231665 -0.085357 0.178636 0.030516 -0.009486 -0.017459 -0.004600 0.003997
-0.038382 0.001083 -0.001210 -0.001438 0.036230 0.033402 -0.089783 0.145611 0.064526
0.038445 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|总角动量量子数+L-振动量子数=7>.数值 -0.010466 -0.058041 -0.074032 -0.002516 0.003430 0.003555
0.018261 0.073316 -0.091577 -0.028447 -0.105439 0.066683 -0.131114 -0.065253 0.134675
0.034185 -0.285067 -0.040743 0.114609 -0.049484 0.009143 0.023765 -0.005236 0.003874
0.041015 -0.000631 0.000693 0.000911 0.179351 -0.018751 0.164184 -0.015460 0.125545
0.127174 0.117835 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|LS耦合|a'态振动量子数=12>.数值 0.055603 -0.015861 -0.033832 0.004524 -0.003008 -0.002784 -
0.003867 -0.011265 0.055408 -0.053383 0.053839 -0.107621 0.049129 -0.030596 0.019892
-0.002537 -0.056303 -0.013328 -0.268162 0.283978 -0.280938 -0.008792 0.098043 -0.263458
0.436119 -0.000349 0.000396 0.000503 -0.087966 -0.031377 0.036832 -0.074711 -0.104746
-0.003578 -0.140228 0.062745 1.000000
一氧化碳.13C18O.激发态.<a3P振动带=13|总角动量量子数+L-|a'态振动量子数=12>.数值 0.109949 -0.036578 -0.056443 -0.000427 0.000740 0.000779
0.013024 -0.064613 0.162359 -0.029603 0.175950 -0.126007 -0.032354 0.005686 0.022524
-0.007383 -0.045900 0.007189 -0.271075 0.215613 -0.171464 -0.011225 0.029132 -0.147314
0.334120 -0.001733 0.001951 0.002217 -0.183206 -0.034947 0.014691 -0.189676 -0.302143
-0.172013 0.018689 0.046982 0.678533 1.000000

模拟：模拟 强度因子：0.333333333333333（1 来自 Spol）强度单位 任意 寿命模型 lmNone 绘图单位 cm^{-1} 荧光 否 nDF 50000 宽度倍数 6 自动最小值 是 自动最大值 是 显示总和 否 显示分量 是 显示 Fortrat 图 是 使用上态 否 显示对称性 否 显示ΔJ 是 缩放刻度标记大小 是 使用对称性 否 使用态编号 否 Fortrat 量子数 总角动量量子数 保持面积 否 分离刻度 否

对数刻度 否 显示二维图 否 自动二维Y轴 是 最小频率 19713.4264274956 绘图范围左边界。最大频率 19725.7352925044 绘图范围右边界。Y轴最大值 7.90431110974814E-183 绘图范围顶部；如果设置了自动最大值，则会自动更新。温度 300 转动温度（开尔文）。高斯 0.08 高斯对线宽（半峰全宽）的贡献。如果同时设置此项和洛伦兹线宽（见下方），结果将是两者的卷积，即 Voigt线型。洛伦兹 0.02 洛伦兹对线宽（半峰全宽）的贡献。此项和高斯宽度也可以在主窗口中设置。谱边余量 -1 在所需光谱两端额外计算的点数。O阈值 0.0001 忽略小于最大峰强度此比例的峰。振动温度 -1 振动温度（开尔文）；设为 -1（默认值）时，所有玻尔兹曼因子均使用转动温度。最小强度 1E-15 Fortrat图中绘制的最弱跃迁强度，占最强跃迁强度的比例。自旋温度 -1 自旋温度；设为 -1（默认值）时，不同自旋态达到平衡。强度缩放因子 1 应用于所有谱线强度的缩放因子。绘图分割 0.5 分离绘图时用于模拟的绘图区域比例（-1..1）。CODATA 2018 基本常数：h=6.62607015E-34 k=1.380649E-23 NA=6.02214076E23 e=1.602176634E-19 me=9.1093837015E-31

分子 流形' J' S' #'流形" J" S" #" 位置 I 上能级能量 下能级能量 Spol A 宽度

13C18O 碳 1 e 1 X态 0 e 1 91922.3502 .3333333 91922.3502 0.0000 .3333333 81197804 0.000000：rR(0)：碳 振动量子数=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e

13C18O 碳 0 e 1 X态 1 e 1 91915.3218 .3277961 91918.8146 3.4928 .3333333 2.4354e8 0.000000：pP(1)：碳 振动量子数=0 0 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e

13C18O 碳 2 e 1 X态 1 e 1 91925.9218 .6555922 91929.4146 3.4928 .6666667 97448723 0.000000：rR(1)：碳 振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e

13C18O 碳 1 e态 1 X态 2 e态 1 91911.8719 .6339926 91922.3502 10.4783 .6666667 1.6234e8 0.000000：pP(2)：碳 振动量子数=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e

13C18O 碳 3 e态 1 X态 2 e态 1 91929.5305 .9509888 91940.0088 10.4783 1.000000 1.0442e8 0.000000：rR(2)：碳 振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e

13C18O 碳 2 e态 1 X态 3 e态 1 91908.4584 .9043813 91929.4146 20.9562 1.000000 1.4609e8 0.000000：pP(3)：碳 振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e

13C18O 碳 4 e态 1 X态 3 e态 1 91933.1830 1.205842 91954.1392 20.9562 1.333333 1.0830e8 0.000000 : rR(3) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - X X态振动量子数=0 3 3 F1e

13C18O 碳 3 e态 1 X态 4 e态 1 91905.0826 1.127699 91940.0088 34.9261 1.333333 1.3912e8 0.000000 : pP(4) : 碳 振动量子数=0 3 3 F1e - X X态振动量子数=0 4 4 F1e

13C18O 碳 5 e态 1 X态 4 e态 1 91936.8786 1.409623 91971.8047 34.9261 1.666667 1.1078e8 0.000000 : rR(4) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - X X态振动量子数=0 4 4 F1e

13C18O 碳 振动量子数 4 e态 1 X态 5 e态 1 91901.7515 1.296383 91954.1392 52.3877 1.666667 1.3524e8 0.000000 : pP(5) : 碳 振动量子数=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e

13C18O 碳 振动量子数 6 e态 1 X态 5 e态 1 91940.6086 1.555660 91992.9963 52.3877 2.000000 1.1249e8 0.000000 : rR(5) : 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e

13C18O 碳 振动量子数 5 e态 1 X态 6 e态 1 91898.4645 1.406934 91971.8047 73.3402 2.000000 1.3277e8 0.000000 : pP(6) : 碳 振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e

13C18O 碳 7 e态 1 X态 6 e态 1 91944.3808 1.641423 92017.7210 73.3402 2.333333 1.1376e8 0.000000 : rR(6) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e

13C18O 碳 6 e态 1 X态 7 e态 1 91895.2133 1.459856 91992.9963 97.7830 2.333333 1.3105e8 0.000000 : pP(7) : 碳 振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e

13C18O 碳 8 e态 1 X态 7 e态 1 91948.1899 1.668407 92045.9729 97.7830 2.666667 1.1473e8 0.000000 : rR(7) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e

13C18O 碳 7 e态 1 X态 8 e态 1 91892.0058 1.459230 92017.7210 125.7152 2.666667 1.2979e8 0.000000 : pP(8) : 碳 振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e

13C18O 碳 9 e态 1 X态 8 e态 1 91952.0397 1.641634 92077.7549 125.7152 3.000000 1.1550e8 0.000000 : rR(8) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e

13C18O 碳 8 e态 1 X态 9 e态 1 91888.8371 1.411991 92045.9729 157.1358 3.000000 1.2882e8 0.000000 : pP(9) : 碳 振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e

13C18O 碳 10 e态 1 X态 9 e态 1 91955.9229 1.568879 92113.0588 157.1358 3.333333 1.1612e8 0.000000 : rR(9) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e

13C18O 碳 9 e态 1 X态 10 e态 1 91885.7111 1.327033 92077.7549 192.0438 3.333333 1.2805e8 0.000000 : pP(10) : 碳 振动量子数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e

13C18O 碳 11 e态 1 X态 10 e态 1 91959.8529 1.459736 92151.8967 192.0438 3.666667 1.1664e8 0.000000 : rR(10) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e

13C18O 碳 10 e态 1 X态 11 e态 1 91882.6208 1.214243 92113.0588 230.4379 3.666667 1.2743e8 0.000000 : pP(11) : 碳 振动量子数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e

13C18O 碳 12 e态 1 X态 11 e态 1 91963.8197 1.324628 92194.2577 230.4379 4.000000 1.1708e8 0.000000 : rR(11) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e

13C18O 碳 11 e态 1 X态 12 e态 1 91879.5799 1.083595 92151.8967 272.3168 4.000000 1.2691e8 0.000000 : pP(12) : 碳 振动量子数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e

13C18O 碳 13 e态 1 X态 12 e态 1 91967.8160 1.173894 92240.1329 272.3168 4.333333 1.1746e8 0.000000 : rR(12) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e

13C18O 碳 12 e态 1 X态 13 e态 1 91876.5786 .9443794 92194.2577 317.6791 4.333333 1.2648e8 0.000000 : pP(13) : 碳 振动量子数=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e

13C18O 碳 14 e态 1 X态 13 e态 1 91971.8583 1.017024 92289.5374 317.6791 4.666667 1.1779e8 0.000000 : rR(13) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e

13C18O 碳 13 e态 1 X态 14 e态 1 91873.6097 .8046310 92240.1329 366.5231 4.666667 1.2611e8 0.000000 : pP(14) : 碳 振动量子数=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e

13C18O 碳 15 e态 1 X态 14 e态 1 91975.9384 .8621046 92342.4616 366.5231 5.000000 1.1807e8 0.000000 : rR(14) : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e

13C18O 碳 14 e态 1 X态 15 e态 1 91870.6902 .6707753 92289.5374 418.8472 5.000000 1.2578e8 0.000000 : pP(15) : 碳 振动量子数=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e

13C18O 碳 16 e态 1 X态 15 e态 1 91980.0553 .7154937 92398.9025 418.8472 5.333333 1.1833e8 0.000000 : rR(15) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e

13C18O 碳 15 e态 1 X态 16 e态 1 91867.8120 .5474926 92342.4616 474.6496 5.333333 1.2550e8 0.000000 : pP(16)支 : 碳 振动量子数=0 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e

13C18O 碳 17 e态 1 X态 16 e态 1 91984.2091 .5817108 92458.8587 474.6496 5.666667 1.1856e8 0.000000 : rR(16)支 : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e

13C18O 碳 16 e态 1 X态 17 e态 1 91864.9742 .4377629 92398.9025 533.9283 5.666667 1.2525e8 0.000000 : pP(17) : 碳 振动量子数=0 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e

13C18O 碳 18 e态 1 X态 17 e态 1 91988.4008 .4635137 92522.3291 533.9283 6.000000 1.1876e8 0.000000 : rR(17) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e

13C18O 碳 17 e态 1 X态 18 e态 1 91862.1775 .3430504 92458.8587 596.6812 6.000000 1.2503e8 0.000000 : pP(18) : 碳 振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e

13C18O 碳 19 e态 1 X态 18 e态 1 91992.6315 .3621088 92589.3127 596.6812 6.333333 1.1895e8 0.000000 : rR(18)支 : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - X X态振动量子数=0 18 18 F1e

13C18O 碳 18 e态 1 X态 19 e态 1 91859.4228 .2635741 92522.3291 662.9063 6.333333 1.2483e8 0.000000 : pP(19) : 碳 振动量子数=0 18 18 F1e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e

13C18O 碳 20 e态 1 X态 19 e态 1 91996.8976 .2774464 92659.8039 662.9063 6.666667 1.1912e8 0.000000 : rR(19) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e

13C18O 碳 19 e态 1 X态 20 e态 1 91856.7115 .1986167 92589.3127 732.6012 6.666667 1.2465e8 0.000000 : pP(20) : 碳 振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e

13C18O 碳 21 e态 1 X态 20 e态 1 92001.1995 .2085475 92733.8006 732.6012 7.000000 1.1927e8 0.000000 : rR(20) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e

13C18O 碳 20 e态 1 X态 21 e态 1 91854.0405 .1468316 92659.8039 805.7634 7.000000 1.2449e8 0.000000 : pP(21) : 碳 振动量子数=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e

13C18O 碳 22 e态 1 X态 21 e态 1 92005.5398 .1538236 92811.3031 805.7634 7.333333 1.1941e8 0.000000 : rR(21) : 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e

13C18O 碳 21 e态 1 X态 22 e态 1 91851.4102 .1065175 92733.8006 882.3904 7.333333 1.2434e8 0.000000 : pP(22) : 碳 振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e

13C18O 碳 23 e态 1 X态 22 e态 1 92009.9176 .1113592 92892.3080 882.3904 7.666667 1.1955e8 0.000000 : rR(22) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e

13C18O 碳 22 e态 1 X态 23 e态 1 91848.8235 .0758425 92811.3031 962.4797 7.666667 1.2420e8 0.000000 : pP(23) : 碳 振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e

13C18O 碳 24 e态 1 X态 23 e态 1 92014.3427 .0791400 92976.8223 962.4797 8.000000 1.1967e8 0.000000 : rR(23) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e

13C18O 碳 23 e态 1 X态 24 e态 1 91846.2797 .0530124 92892.3080 1046.0283 8.000000 1.2408e8 0.000000 : pP(24) : 碳 振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e

13C18O 碳 25 e态 1 X态 24 e态 1 92018.7949 .0552212 93064.8231 1046.0283 8.333333 1.1978e8 0.000000 : rR(24) : 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e

13C18O 碳 24 e态 1 X态 25 e态 1 91843.7889 .0363821 92976.8223 1133.0334 8.333333 1.2396e8 0.000000 : pP(25) : 碳 振动量子数=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e

13C18O 碳 26 e态 1 X态 25 e态 1 92023.2842 .0378374 93156.3176 1133.0334 8.666667 1.1989e8 0.000000 : rR(25)支跃迁 : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e

13C18O 碳 25 e态 1 X态 26 e态 1 91841.3312 .0245194 93064.8231 1223.4920 8.666667 1.2386e8 0.000000 : pP(26) : 碳 振动量子数=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e

13C18O 碳 27 e态 1 X态 26 e态 1 92027.8069 .0254625 93251.2989 1223.4920 9.000000 1.1999e8 0.000000 : rR(26) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e

13C18O 碳 26 e态 1 X态 27 e态 1 91838.9167 .0162294 93156.3176 1317.4009 9.000000 1.2376e8 0.000000 : pP(27) : 碳 振动量子数=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e

13C18O 碳 28 e态 1 X态 27 e态 1 92032.3659 .0168305 93349.7667 1317.4009 9.333333 1.2009e8 0.000000 : rR(27) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e

13C18O 碳 27 e态 1 X态 28 e态 1 91836.5420 .0105517 93251.2989 1414.7569 9.333333 1.2366e8 0.000000 : pP(28) : 碳 振动量子数=0 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e

13C18O 碳 29 e态 1 X态 28 e态 1 92036.9621 .0109285 93451.7190 1414.7569 9.666667 1.2018e8 0.000000 : rR(28) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e

13C18O 碳 28 e态 1 X态 29 e态 1 91834.2102 .0067392 93349.7667 1515.5565 9.666667 1.2358e8 0.000000 : pP(29) : 碳 振动量子数=0 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e

13C18O 碳 30 e态 1 X态 29 e态 1 92041.5917 .0069716 93557.1483 1515.5565 10.00000 1.2027e8 0.000000 : rR(29) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e

13C18O 碳 29 e态 1 X态 30 e态 1 91831.9226 .0042288 93451.7190 1619.7964 10.00000 1.2350e8 0.000000 : pP(30) : 碳 振动量子数=0 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e

13C18O 碳 31 e态 1 X态 30 e态 1 92046.2585 .0043698 93666.0549 1619.7964 10.33333 1.2035e8 0.000000 : rR(30) : 碳 振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e

13C18O 碳 30 e态 1 X态 31 e态 1 91829.6755 .0026073 93557.1483 1727.4728 10.33333 1.2342e8 0.000000 : pP(31) : 碳 振动量子数=0 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e

13C18O 碳 32 e态 1 X态 31 e态 1 92050.9615 .0026914 93778.4343 1727.4728 10.66667 1.2043e8 0.000000 : rR(31) : 碳 振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e

13C18O 碳 31 e态 1 X态 32 e态 1 91827.4729 .0015796 93666.0549 1838.5820 10.66667 1.2335e8 0.000000：pP(32)：碳 振动量子数=0 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e

13C18O 碳 33 e态 1 X态 32 e态 1 92055.6995 .0016290 93894.2815 1838.5820 11.00000 1.2050e8 0.000000：rR(32)：碳 振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e

13C18O 碳 32 e态 1 X态 33 e态 1 91825.3141 .0009405 93778.4343 1953.1202 11.00000 1.2328e8 0.000000：pP(33)：碳 振动量子数=0 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e

13C18O 碳 34 e态 1 X态 33 e态 1 92060.4715 .0009690 94013.5918 1953.1202 11.33333 1.2057e8 0.000000：rR(33)：碳 振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e

13C18O 碳 33 e态 1 X态 34 e态 1 91823.1981 .0005503 93894.2815 2071.0834 11.33333 1.2321e8 0.000000：pP(34)：碳 振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e

13C18O 碳 35 e态 1 X态 34 e态 1 92065.2735 .0005665 94136.3569 2071.0834 11.66667 1.2064e8 0.000000：rR(34)：碳 振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e

13C18O 碳 34 e态 1 X态 35 e态 1 91821.1243 .0003165 94013.5918 2192.4675 11.66667 1.2315e8 0.000000：pP(35)：碳 振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e

13C18O 碳 36 e态 1 X态 35 e态 1 92070.1135 .0003255 94262.5810 2192.4675 12.00000 1.2071e8 0.000000：rR(35)：碳 振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e

13C18O 碳 35 e态 1 X态 36 e态 1 91819.0887 .0001789 94136.3569 2317.2682 12.00000 1.2310e8 0.000000：pP(36)：碳 振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e

13C18O 碳 37 e 1 X态 36 e 1 92074.9855 .0001839 94392.2537 2317.2682 12.33333 1.2077e8 0.000000：rR(36)：碳 振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 碳 38 e 1 X态 37 e 1 92079.8945 .0001021 94525.3758 2445.4813 12.66667 1.2083e8 0.000000：rR(37)：碳 振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O B常数 1 e 1 X态 0 e 1 86920.8991 .3333333 86920.8991 0.0000 .3333333 68652057 0.000000：rR(0)：B常数 振动量子数=0 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O B 0 e 1 X 1 e 1 86913.8645 .3277961 86917.3573 3.4928 .3333333 2.0591e8 0.000000：pP(1)支：B B常数=0 0 0 F1e - X X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O B 2 e 1 X 1 e 1 86924.4874 .6555922 86927.9802 3.4928 .6666667 82392672 0.000000：rR(1)：B B常数=0 2 2 F1e - X X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O B 1 e 1 X 2 e 1 86910.4208 .6339926 86920.8991 10.4783 .6666667 1.3725e8 0.000000：pP(2)：B B常数=0 1 1 F1e - X X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O B常数 3 e态 1 X态 2 e态 1 86928.1193 .9509888 86938.5976 10.4783 1.000000 88288929 0.000000 : rR(2) : B常数 B常数振动量子数=0 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O B常数 2 e态 1 X态 3 e态 1 86907.0241 .9043813 86927.9802 20.9562 1.000000 1.2351e8 0.000000 : pP(3) : B常数 B常数振动量子数=0 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O B常数 4 e态 1 X态 3 e态 1 86931.7973 1.205842 86952.7535 20.9562 1.333333 91570511 0.000000 : rR(3) : B常数 B常数振动量子数=0 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O B 3 e 1 X 4 e 1 86903.6715 1.127699 86938.5976 34.9261 1.333333 1.1762e8 0.000000：pP(4)：B B常数v=0 3 3 F1e - X X态X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O B 5 e 1 X 4 e 1 86935.5224 1.409623 86970.4486 34.9261 1.666667 93663699 0.000000：rR(4)：B B常数v=0 5 5 F1e - X X态X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O B 4 e 1 X 5 e 1 86900.3658 1.296383 86952.7535 52.3877 1.666667 1.1434e8 0.000000：pP(5)：B B常数v=0 4 4 F1e - X X态X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O B常数 6 e态 1 X态 5 e态 1 86939.2932 1.555660 86991.6809 52.3877 2.000000 95117055 0.000000：rR(5)：B B常数振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O B常数 5 e态 1 X态 6 e态 1 86897.1084 1.406934 86970.4486 73.3402 2.000000 1.1225e8 0.000000：pP(6)：B B常数振动量子数=0 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O B常数 7 e态 1 X态 6 e态 1 86943.1099 1.641423 87016.4501 73.3402 2.333333 96186578 0.000000：rR(6)：B B常数振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O B 6 e 1 X 7 e 1 86893.8978 1.459856 86991.6809 97.7830 2.333333 1.1080e8 0.000000 : pP(7) : B B常数振动量子数=0 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O B 8 e 1 X 7 e 1 86946.9720 1.668407 87044.7550 97.7830 2.666667 97007795 0.000000 : rR(7) : B B常数振动量子数=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O B 7 e 1 X 8 e 1 86890.7349 1.459230 87016.4501 125.7152 2.666667 1.0973e8 0.000000 : pP(8) : B B常数振动量子数=0 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O B常数 9 e态 1 X态 8 e态 1 86950.8793 1.641634 87076.5945 125.7152 3.000000 97659169 0.000000 : rR(8) : B常数 B常数v=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O B常数 8 e态 1 X态 9 e态 1 86887.6192 1.411991 87044.7550 157.1358 3.000000 1.0891e8 0.000000 : pP(9) : B常数 B常数v=0 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O B常数 10 e态 1 X态 9 e态 1 86954.8315 1.568879 87111.9674 157.1358 3.333333 98189272 0.000000 : rR(9) : B常数 B常数v=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O B 9 e态 1 X态 10 e态 1 86884.5507 1.327033 87076.5945 192.0438 3.333333 1.0826e8 0.000000 : pP(10) : B常数 B常数=0 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O B 11 e态 1 X态 10 e态 1 86958.8284 1.459736 87150.8722 192.0438 3.666667 98629781 0.000000 : rR(10) : B常数 B常数=0 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O B 10 e态 1 X态 11 e态 1 86881.5294 1.214243 87111.9674 230.4379 3.666667 1.0774e8 0.000000 : pP(11) : B常数 B常数=0 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O B常数 12 e态 1 X态 11 e态 1 86962.8724 1.324628 87193.3103 230.4379 4.000000 99002246 0.000000 : rR(11) : B B常数振动量子数=0 12 12 F1e - X X态X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O B常数 11 e态 1 X态 12 e态 1 86878.5554 1.083595 87150.8722 272.3168 4.000000 1.0730e8 0.000000 : pP(12) : B B常数振动量子数=0 11 11 F1e - X X态X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O B常数 13 e态 1 X态 12 e态 1 86966.9570 1.173894 87239.2738 272.3168 4.333333 99321802 0.000000 : rR(12) : B B常数振动量子数=0 13 13 F1e - X X态X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O B常数 12 e态 1 X态 13 e态 1 86875.6313 .9443794 87193.3103 317.6791 4.333333 1.0693e8 0.000000 : pP(13) : B常数 B常数v=0 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O B常数 14 e态 1 X态 13 e态 1 86971.0869 1.017024 87288.7659 317.6791 4.666667 99599443 0.000000 : rR(13) : B常数 B常数v=0 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O B常数 13 e态 1 X态 14 e态 1 86872.7507 .8046310 87239.2738 366.5231 4.666667 1.0661e8 0.000000 : pP(14) : B常数 B常数v=0 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
13C18O B常数 15 e态 1 X态 14 e态 1 86975.2607 .8621046 87341.7838 366.5231 5.000000 99843309 0.000000 : rR(14) : B Bv=0 15 15 F1e - X Xv=0 14 14 F1e
13C18O B常数 14 e态 1 X态 15 e态 1 86869.9187 .6707753 87288.7659 418.8472 5.000000 1.0634e8 0.000000 : pP(15) : B Bv=0 14 14 F1e - X Xv=0 15 15 F1e
13C18O B常数 16 e态 1 X态 15 e态 1 86979.4768 .7154937 87398.3240 418.8472 5.333333 1.0006e8 0.000000 : rR(15) : B Bv=0 16 16 F1e - X Xv=0 15 15 F1e
13C18O B常数 15 e态 1 X态 16 e态 1 86867.1343 .5474926 87341.7838 474.6496 5.333333 1.0610e8 0.000000 : pP(16)支 : B B常数振动量子数=0 15 15 F1e - X X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
13C18O B常数 17 e态 1 X态 16 e态 1 86983.6962 .5817108 87458.3457 474.6496 5.666667 1.0025e8 0.000000 : rR(16)支 : B B常数振动量子数=0 17 17 F1e - X X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
13C18O B常数 16 e态 1 X态 17 e态 1 86864.3957 .4377629 87398.3240 533.9283 5.666667 1.0589e8 0.000000 : pP(17) : B B常数振动量子数=0 16 16 F1e - X X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O B常数 18 e态 1 X态 17 e态 1 86988.0386 .4635137 87521.9669 533.9283 6.000000 1.0043e8 0.000000 : rR(17) : B常数 B常数振动量子数=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O B常数 17 e态 1 X态 18 e态 1 86861.6645 .3430504 87458.3457 596.6812 6.000000 1.0570e8 0.000000 : pP(18) : B常数 B常数振动量子数=0 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O B常数 19 e态 1 X态 18 e态 1 86992.3917 .3621088 87589.0730 596.6812 6.333333 1.0059e8 0.000000 : rR(18) : B常数 B常数振动量子数=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O B 18 e态 1 X态 19 e态 1 86859.0606 .2635741 87521.9669 662.9063 6.333333 1.0554e8 0.000000 : pP(19) : B Bv=0 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O B 20 e态 1 X态 19 e态 1 86996.7785 .2774464 87659.6849 662.9063 6.666667 1.0073e8 0.000000 : rR(19) : B Bv=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O B 19 e态 1 X态 20 e态 1 86856.4718 .1986167 87589.0730 732.6012 6.666667 1.0538e8 0.000000 : pP(20) : B Bv=0 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O B常数 21 e态 1 X态 20 e态 1 87001.2082 .2085475 87733.8094 732.6012 7.000000 1.0086e8 0.000000： rR(20)：B常数 Bv=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O B常数 20 e态 1 X态 21 e态 1 86853.9215 .1468316 87659.6849 805.7634 7.000000 1.0525e8 0.000000： pP(21)：B常数 Bv=0 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O B常数 22 e态 1 X态 21 e态 1 87005.6801 .1538236 87811.4435 805.7634 7.333333 1.0098e8 0.000000： rR(21)：B常数 Bv=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O B常数 21 e态 1 X态 22 e态 1 86851.4189 .1065175 87733.8094 882.3904 7.333333 1.0512e8 0.000000 : pP(22) : B常数 B常数振动量子数=0 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O B常数 23 e态 1 X态 22 e态 1 87010.1929 .1113592 87892.5834 882.3904 7.666667 1.0110e8 0.000000 : rR(22) : B常数 B常数振动量子数=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O B常数 22 e态 1 X态 23 e态 1 86848.9638 .0758425 87811.4435 962.4797 7.666667 1.0501e8 0.000000 : pP(23) : B常数 B常数振动量子数=0 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O B常数 24 e态 1 X态 23 e态 1 87014.7458 .0791400 87977.2254 962.4797 8.000000 1.0120e8 0.000000：rR(23)：B常数 Bv=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O B常数 23 e态 1 X态 24 e态 1 86846.5551 .0530124 87892.5834 1046.0283 8.000000 1.0490e8 0.000000：pP(24)：B常数 Bv=0 23 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O B常数 25 e态 1 X态 24 e态 1 87019.3373 .0552212 88065.3656 1046.0283 8.333333 1.0130e8 0.000000：rR(24)：B常数 Bv=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O B常数 24 e态 1 X态 25 e态 1 86844.1920 .0363821 87977.2254 1133.0334 8.333333 1.0480e8 0.000000 : pP(25) : B常数 Bv=0 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O B常数 26 e态 1 X态 25 e态 1 87023.9741 .0378374 88157.0075 1133.0334 8.666667 1.0139e8 0.000000 : rR(25)支跃迁 : B常数 Bv=0 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O B常数 25 e态 1 X态 26 e态 1 86841.8736 .0245194 88065.3656 1223.4920 8.666667 1.0471e8 0.000000 : pP(26) : B常数 Bv=0 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O B常数 27 e态 1 X态 26 e态 1 87028.6509 .0254625 88252.1429 1223.4920 9.000000 1.0148e8 0.000000 : rR(26) : B B常数v=0 27 27 F1e - X X态X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O B常数 26 e态 1 X态 27 e态 1 86839.6066 .0162294 88157.0075 1317.4009 9.000000 1.0463e8 0.000000 : pP(27) : B B常数v=0 26 26 F1e - X X态X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O B常数 28 e态 1 X态 27 e态 1 87033.3613 .0168305 88350.7622 1317.4009 9.333333 1.0156e8 0.000000 : rR(27) : B B常数v=0 28 28 F1e - X X态X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O B常数 27 e态 1 X态 28 e态 1 86837.3860 .0105517 88252.1429 1414.7569 9.333333 1.0455e8 0.000000：pP(28)：B B常数v=0 27 27 F1e - X X态X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O B常数 29 e态 1 X态 28 e态 1 87038.1146 .0109285 88452.8715 1414.7569 9.666667 1.0164e8 0.000000：rR(28)：B B常数v=0 29 29 F1e - X X态X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O B常数 28 e态 1 X态 29 e态 1 86835.2057 .0067392 88350.7622 1515.5565 9.666667 1.0448e8 0.000000：pP(29)：B B常数v=0 28 28 F1e - X X态X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O B常数 30 e态 1 X态 29 e态 1 87042.9008 .0069716 88558.4574 1515.5565 10.00000 1.0172e8 0.000000 : rR(29) : B常数 Bv=0 30 30 F1e - X X态X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O B常数 29 e态 1 X态 30 e态 1 86833.0751 .0042288 88452.8715 1619.7964 10.00000 1.0441e8 0.000000 : pP(30) : B常数 Bv=0 29 29 F1e - X X态X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O B常数 31 e态 1 X态 30 e态 1 87047.7207 .0043698 88667.5171 1619.7964 10.33333 1.0179e8 0.000000 : rR(30) : B常数 Bv=0 31 31 F1e - X X态X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O B 30 e态 1 X态 31 e态 1 86830.9846 .0026073 88558.4574 1727.4728 10.33333 1.0434e8 0.000000 : pP(31) : B B常数v=0 30 30 F1e - X X态X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O B 32 e态 1 X态 31 e态 1 87052.5802 .0026914 88780.0530 1727.4728 10.66667 1.0186e8 0.000000 : rR(31) : B B常数v=0 32 32 F1e - X X态X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O B 31 e态 1 X态 32 e态 1 86828.9350 .0015796 88667.5171 1838.5820 10.66667 1.0428e8 0.000000 : pP(32) : B B常数v=0 31 31 F1e - X X态X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O B常数 33 e态 1 X态 32 e态 1 87057.4912 .0016290 88896.0733 1838.5820 11.00000 1.0192e8 0.000000 : rR(32) : B B常数v=0 33 33 F1e - X X态X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O B常数 32 e态 1 X态 33 e态 1 86826.9328 .0009405 88780.0530 1953.1202 11.00000 1.0422e8 0.000000 : pP(33) : B B常数v=0 32 32 F1e - X X态X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O B常数 34 e态 1 X态 33 e态 1 87062.4277 .0009690 89015.5479 1953.1202 11.33333 1.0198e8 0.000000 : rR(33) : B B常数v=0 34 34 F1e - X X态X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O B常数 33 e态 1 X态 34 e态 1 86824.9899 .0005503 88896.0733 2071.0834 11.33333 1.0417e8 0.000000 : pP(34) : B B常数振动量子数=0 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O B常数 35 e态 1 X态 34 e态 1 87067.4174 .0005665 89138.5008 2071.0834 11.66667 1.0204e8 0.000000 : rR(34) : B B常数振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O B常数 34 e态 1 X态 35 e态 1 86823.0804 .0003165 89015.5479 2192.4675 11.66667 1.0412e8 0.000000 : pP(35) : B B常数振动量子数=0 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O B常数 36 e态 1 X态 35 e态 1 87072.3997 .0003255 89264.8671 2192.4675 12.00000 1.0210e8 0.000000 : rR(35) : B B常数振动量子数=0 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O B常数 35 e态 1 X态 36 e态 1 86821.2326 .0001789 89138.5008 2317.2682 12.00000 1.0407e8 0.000000 : pP(36) : B B常数振动量子数=0 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O B常数 37 e态 1 X态 36 e态 1 87077.4444 .0001839 89394.7126 2317.2682 12.33333 1.0216e8 0.000000 : rR(36) : B B常数振动量子数=0 37 37 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O B 38 e 1 X 37 e 1 87082.5221 .0001021 89528.0034 2445.4813 12.66667 1.0221e8 0.000000 : rR(37) : B常数 B态振动量子数=0 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O 激发态 1 e 1 X 0 e 1 67560.4283 .5936401 67560.4283 0.0000 .5936401 57411986 0.000000 : rR(0) : 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 2 X 0 e 1 67635.7481 .0038056 67635.7481 0.0000 .0038056 369274.0 0.000000 : rR1(0) : 激发态 a3P振动带=13 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 3 X态 0 e 1 67675.0375 .8221443 67675.0375 0.0000 .8221443 79916370 0.000000：sR21(0)：激发态 a3P振动带=13 1 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 4 X态 0 e 1 67803.8618 .3684130 67803.8618 0.0000 .3684130 36016407 0.000000：qR1(0)：激发态 振动量子数=4 1 0 F1e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 5 X态 0 e 1 67810.2129 .2262309 67810.2129 0.0000 .2262309 22122763 0.000000：sR31(0)：激发态 振动量子数=4 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 6 X态 0 e 1 67987.8961 .6252107 67987.8961 0.0000 .6252107 61620236 0.000000 : sR31(0) : 激发态 振动量子数=7 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 e 7 X态 0 e 1 67992.6434 .6938889 67992.6434 0.0000 .6938889 68403433 0.000000 : rR21(0) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 1 F2e - X态 X态振动量子数=0 0 0 F1e
13C18O 激发态 1 f 1 X态 1 e 1 67556.9350 .8756357 67560.4278 3.4928 .8904272 86101441 0.000000 : qQ(1) : 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 3 X态 1 e 1 67636.0698 .0061963 67639.5626 3.4928 .0063009 611422.4 0.000000 : qQ1(1) : 激发态 a3P振动带=13 1 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 4 X态 1 e 1 67671.5585 1.212153 67675.0513 3.4928 1.232629 1.1980e8 0.000000 : rQ21(1) : 激发态 a3P振动带=13 1 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 5 X态 1 e 1 67802.7807 .8770851 67806.2734 3.4928 .8919011 87188935 0.000000 : qQ21(1) : 激发态 振动量子数=4 1 1 F2f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 6 X 1 e 1 67984.4030 .9145211 67987.8958 3.4928 .9299694 91642879 0.000000 : rQ31(1) : 激发态 dv=7 1 2 F3f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 7 X 1 e 1 67987.6666 .8269986 67991.1594 3.4928 .8409685 82884305 0.000000 : pQ1(1) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 0 F1f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 f 8 X 1 e 1 67994.9809 .2042618 67998.4737 3.4928 .2077123 20478349 0.000000 : rQ31(1) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 2 F3f - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 1 X态 1 e 1 67562.6044 .8751035 67566.0972 3.4928 .8898860 51642462 0.000000 : rR(1) : 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 2 X态 1 e 1 67637.1319 .0165778 67640.6247 3.4928 .0168579 981547.7 0.000000 : qR1(1) : 激发态 a3P振动带=13 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e

13C18O 激发态 2 e 3 X态 1 e 1 67676.7120 1.188186 67680.2048 3.4928 1.208257 70474259 0.000000: rR21(1): 激发态 a3P振动带=13 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 4 X态 1 e 1 67710.2945 .0150916 67713.7873 3.4928 .0153465 896452.2 0.000000: sR31(1): 激发态 a3P振动带=13 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 5 X态 1 e 1 67802.5469 .4989555 67806.0397 3.4928 .5073840 29759675 0.000000: qR1(1): 激发态 振动量子数=4 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 6 X态 1 e 1 67813.3319 .3772948 67816.8247 3.4928 .3836681 22514090 0.000000: sR31(1): 激发态 振动量子数=4 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 7 X态 1 e 1 67949.8912 .0058195 67953.3840 3.4928 .0059178 349367.8 0.000000: rR21(1): 激发态 振动量子数=7 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 8 X态 1 e 1 67988.9639 .9136111 67992.4567 3.4928 .9290440 54942067 0.000000: sR31(1): 激发态 振动量子数=7 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 2 e 9 X态 1 e 1 67993.3010 1.026302 67996.7938 3.4928 1.043639 61730809 0.000000: rR21(1): 激发态 a'态振动量子数=12 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 1 1 F1e
13C18O 激发态 1 e 1 X态 2 e 1 67549.9500 .2822725 67560.4283 10.4783 .2968200 28692639 0.000000: pP(2): 激发态 A态振动量子数=2 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 2 X态 2 e 1 67625.2698 .0018095 67635.7481 10.4783 .0019028 184551.2 0.000000: pP1(2): 激发态 a3P振动带=13 1 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 3 X 2 e 1 67664.5592 .3909250 67675.0375 10.4783 .4110722 39939628 0.000000 : qP21(2) : 激发态 a3P振动带=13 1 2 F2e - X X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 4 X 2 e 1 67793.3835 .1751783 67803.8618 10.4783 .1842065 17999856 0.000000 : oP1(2) : 激发态 振动量子数=4 1 0 F1e - X X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 5 X 2 e 1 67799.7347 .1075715 67810.2129 10.4783 .1131154 11056255 0.000000 : qP31(2) : 激发态 振动量子数=4 1 2 F3e - X X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 6 X态 2 e 1 67977.4179 .2972842 67987.8961 10.4783 .3126053 30795875 0.000000 : qP31(2) : 激发态 振动量子数=7 1 2 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 1 e 7 X态 2 e 1 67982.1651 .3299403 67992.6434 10.4783 .3469444 34185907 0.000000 : pP21(2) : 激发态 a'态振动量子数=12 1 1 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 1 X态 2 e 1 67555.6174 1.410271 67566.0957 10.4783 1.482952 86032986 0.000000 : qQ(2) : 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 2 X态 2 e 1 67573.8534 .0004560 67584.3317 10.4783 .0004795 27839.03 0.000000: qQ(2): 激发态 振动量子数=3 2 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 3 X态 2 e 1 67633.9221 .0293555 67644.4004 10.4783 .0308684 1797057 0.000000: pQ1(2): 激发态 a3P振动带=13 2 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 4 X态 2 e 1 67669.7669 1.912436 67680.2452 10.4783 2.010997 1.1726e8 0.000000: qQ21(2): 激发态 a3P振动带=13 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 5 X态 2 e 1 67703.3092 .0243488 67713.7874 10.4783 .0256037 1495153 0.000000 : rQ31(2) : 激发态 a3P振动带=13 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 6 X态 2 e 1 67800.1911 1.411990 67810.6694 10.4783 1.484760 87076816 0.000000 : qQ21(2) : 激发态 振动量子数=4 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 7 X态 2 e 1 67942.9057 .0093790 67953.3840 10.4783 .0098624 582060.1 0.000000 : qQ21(2) : 激发态 d态振动量子数=7 2 2 F2f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 8 X态 2 e 1 67981.9756 1.352766 67992.4539 10.4783 1.422484 84097326 0.000000: rQ31(2): 激发态 振动量子数=7 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 9 X态 2 e 1 67982.9521 1.281743 67993.4304 10.4783 1.347801 79685464 0.000000: pQ1(2): 激发态 a'态振动量子数=12 2 1 F1f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 f 10 X态 2 e 1 67994.0274 .4921605 68004.5056 10.4783 .5175250 30612377 0.000000: rQ31(2): 激发态 a'态振动量子数=12 2 3 F3f - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 1 X态 2 e 1 67564.1219 1.127253 67574.6002 10.4783 1.185348 49138260 0.000000 : rR(2) : 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 2 X态 2 e 1 67637.4662 .0417763 67647.9445 10.4783 .0439293 1827012 0.000000 : qR1(2) : 激发态 a3P振动带=13 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 3 X态 2 e 1 67677.4818 1.487100 67687.9601 10.4783 1.563740 65151228 0.000000 : rR21(2) : 激发态 a3P振动带=13 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 4 X态 2 e 1 67711.7558 .0469988 67722.2341 10.4783 .0494210 2062192 0.000000 : sR31(2) : 激发态 a3P振动带=13 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 5 X态 2 e 1 67799.9593 .6184577 67810.4376 10.4783 .6503312 27242584 0.000000 : qR1(2) : 激发态 振动量子数=4 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 6 X态 2 e 1 67815.1327 .5095974 67825.6110 10.4783 .5358606 22462446 0.000000 : sR31(2) : 激发态 振动量子数=4 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 8 X态 2 e 1 67949.3909 .0184130 67959.8692 10.4783 .0193620 816453.9 0.000000: rR21(2): 激发态 振动量子数=7 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 9 X态 2 e 1 67988.8161 1.160220 67999.2944 10.4783 1.220015 51535078 0.000000: sR31(2): 激发态 振动量子数=7 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 3 e 10 X态 2 e 1 67992.5409 1.330064 68003.0192 10.4783 1.398612 59088968 0.000000: rR21(2): 激发态 a'态振动量子数=12 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 2 2 F1e
13C18O 激发态 2 e 1 X态 3 e 1 67545.1411 .5365308 67566.0972 20.9562 .5932573 34401618 0.000000: pP(3): 激发态 A态振动量子数=2 2 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 2 X态 3 e 1 67619.6686 .0101640 67640.6247 20.9562 .0112386 653858.4 0.000000: oP1(3): 激发态 a3P振动带=13 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 3 X态 3 e 1 67659.2486 .7284834 67680.2048 20.9562 .8055047 46946478 0.000000: pP21(3): 激发态 a3P振动带=13 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 4 X态 3 e 1 67692.8312 .0092527 67713.7873 20.9562 .0102310 597172.5 0.000000: qP31(3): 激发态 a3P振动带=13 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 5 X态 3 e 1 67785.0835 .3059124 67806.0397 20.9562 .3382560 19824458 0.000000: oP1(3): 激发态 振动量子数=4 2 1 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 6 X态 3 e 1 67795.8685 .2313215 67816.8247 20.9562 .2557787 14997801 0.000000: qP31(3): 激发态 振动量子数=4 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 7 X态 3 e 1 67932.4278 .0035680 67953.3840 20.9562 .0039452 232732.4 0.000000: pP21(3): 激发态 振动量子数=7 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 8 X态 3 e 1 67971.5005 .5601400 67992.4567 20.9562 .6193627 36599828 0.000000: qP31(3): 激发态 振动量子数=7 2 3 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 2 e 9 X态 3 e 1 67975.8376 .6292315 67996.7938 20.9562 .6957591 41122171 0.000000: pP21(3): 激发态 a'态振动量子数=12 2 2 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 1 X态 3 e 1 67553.6406 1.875399 67574.5968 20.9562 2.073682 85923876 0.000000: qQ(3): 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 2 X态 3 e 1 67569.9977 .0013339 67590.9538 20.9562 .0014749 61156.64 0.000000: qQ(3): 激发态 振动量子数=3 3 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 3 X态 3 e 1 67630.7083 .0758728 67651.6645 20.9562 .0838947 3488123 0.000000: pQ1(3): 激发态 a3P振动带=13 3 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 4 X态 3 e 1 67667.0820 2.468486 67688.0382 20.9562 2.729474 1.1367e8 0.000000: qQ21(3): 激发态 a3P振动带=13 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 5 X态 3 e 1 67701.2784 .0783695 67722.2345 20.9562 .0866554 3614194 0.000000: rQ31(3): 激发态 a3P振动带=13 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 6 X态 3 e 1 67796.3071 1.876509 67817.2632 20.9562 2.074910 86904583 0.000000: qQ21(3): 激发态 振动量子数=4 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 8 X态 3 e 1 67938.9130 .0306392 67959.8692 20.9562 .0338786 1427930 0.000000 : qQ21(3) : 激发态 振动量子数=7 3 3 F2f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 9 X态 3 e 1 67976.7064 1.252935 67997.6626 20.9562 1.385406 58490165 0.000000 : pQ1(3) : 激发态 a'态振动量子数=12 3 2 F1f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 10 X态 3 e 1 67978.3417 2.125495 67999.2979 20.9562 2.350220 99230580 0.000000 : rQ31(3) : 激发态 振动量子数=7 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 f 11 X态 3 e 1 67991.7609 .7660003 68012.7171 20.9562 .8469882 35782577 0.000000: rQ31(3): 激发态 a'态振动量子数=12 3 4 F3f - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 1 X态 3 e 1 67564.9806 1.338211 67585.9368 20.9562 1.479698 47711040 0.000000: rR(3): 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 2 X态 3 e 1 67636.7566 .0803364 67657.7128 20.9562 .0888302 2873360 0.000000: qR1(3): 激发态 a3P振动带=13 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 3 X态 3 e 1 67677.3515 1.701583 67698.3077 20.9562 1.881488 60969474 0.000000 : rR21(3) : 激发态 a3P振动带=13 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 4 X态 3 e 1 67712.5216 .0962729 67733.4778 20.9562 .1064516 3454937 0.000000 : sR31(3) : 激发态 a3P振动带=13 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 5 X态 3 e 1 67796.0845 .7175200 67817.0407 20.9562 .7933821 25845037 0.000000 : qR1(3) : 激发态 振动量子数=4 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 6 X态 3 e 1 67815.6299 .6204987 67836.5861 20.9562 .6861030 22369673 0.000000 : sR31(3) : 激发态 振动量子数=4 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 7 X态 3 e 1 67908.5618 .0002169 67929.5180 20.9562 .0002399 7852.734 0.000000 : qR1(3) : 激发态 d态振动量子数=7 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 8 X态 3 e 1 67947.5591 .0384519 67968.5152 20.9562 .0425173 1394340 0.000000 : rR21(3) : 激发态 d态振动量子数=7 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 9 X态 3 e 1 67987.4493 1.346579 68008.4055 20.9562 1.488950 48915599 0.000000: sR31(3): 激发态 振动量子数=7 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 4 e 10 X态 3 e 1 67990.3630 1.596842 68011.3192 20.9562 1.765673 58014070 0.000000: rR21(3): 激发态 a'态振动量子数=12 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 3 3 F1e
13C18O 激发态 3 e 1 X态 4 e 1 67539.6741 .7519026 67574.6002 34.9261 .8890112 36813703 0.000000: pP(4): 激发态 A态振动量子数=2 3 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 2 X态 4 e 1 67613.0183 .0278657 67647.9445 34.9261 .0329470 1368774 0.000000: oP1(4): 激发态 a3P振动带=13 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 3 X态 4 e 1 67653.0339 .9919282 67687.9601 34.9261 1.172805 48810485 0.000000: pP21(4): 激发态 a3P振动带=13 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 4 X态 4 e 1 67687.3079 .0313492 67722.2341 34.9261 .0370657 1544969 0.000000: qP31(4): 激发态 a3P振动带=13 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 5 X态 4 e 1 67775.5114 .4125249 67810.4376 34.9261 .4877484 20409844 0.000000: oP1(4): 激发态 振动量子数=4 3 2 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 6 X态 4 e 1 67790.6848 .3399127 67825.6110 34.9261 .4018954 16828621 0.000000: qP31(4): 激发态 振动量子数=4 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 8 X态 4 e 1 67924.9430 .0122819 67959.8692 34.9261 .0145215 611679.7 0.000000: pP21(4): 激发态 振动量子数=7 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 9 X态 4 e 1 67964.3682 .7738926 67999.2944 34.9261 .9150111 38609628 0.000000 : qP31(4) : 激发态 振动量子数=7 3 4 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 3 e 10 X态 4 e 1 67968.0930 .8871821 68003.0192 34.9261 1.048959 44268938 0.000000 : pP21(4) : 激发态 a'态振动量子数=12 3 3 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 1 X态 4 e 1 67551.0038 2.250952 67585.9299 34.9261 2.661410 85760674 0.000000 : qQ支(4) : 激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 2 X态 4 e 1 67564.8563 .0031554 67599.7824 34.9261 .0037308 120294.9 0.000000: qQ(4): 激发态 振动量子数=3 4 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 3 X态 4 e 1 67626.4371 .1463355 67661.3633 34.9261 .1730196 5594044 0.000000: pQ1(4): 激发态 a3P振动带=13 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 4 X态 4 e 1 67663.5063 2.853026 67698.4324 34.9261 3.373272 1.0924e8 0.000000: qQ21(4): 激发态 a3P振动带=13 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 5 X态 4 e态 1 67698.5529 .1625560 67733.4791 34.9261 .1921979 6234014 0.000000: rQ31(4): 激发态 a3P振动带=13 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 6 X态 4 e态 1 67791.1287 2.250653 67826.0549 34.9261 2.661057 86666983 0.000000: qQ21(4): 激发态 振动量子数=4 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 7 X态 4 e态 1 67894.5919 .0003651 67929.5180 34.9261 .0004317 14124.40 0.000000: pQ1(4): 激发态 振动量子数=7 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 8 X态 4 e 1 67933.5891 .0647121 67968.5152 34.9261 .0765123 2507643 0.000000: qQ21(4): 激发态 振动量子数=7 4 4 F2f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 9 X态 4 e 1 67969.0113 1.522798 68003.9375 34.9261 1.800478 59101928 0.000000: pQ1(4): 激发态 a'态振动量子数=12 4 3 F1f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 10 X态 4 e 1 67973.4818 2.432569 68008.4080 34.9261 2.876146 94430079 0.000000: rQ31(4): 激发态 d态振动量子数=7 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 4 f 11 X态 4 e 1 67988.1161 .9994887 68023.0422 34.9261 1.181744 38824290 0.000000 : rQ31(4) : 激发态 a'态振动量子数=12 4 5 F3f - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 1 X态 4 e 1 67565.1800 1.499191 67600.1062 34.9261 1.772567 46762998 0.000000 : rR(4) : 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 2 X态 4 e 1 67635.0103 .1304718 67669.9365 34.9261 .1542632 4082326 0.000000 : qR1(4) : 激发态 a3P振动带=13 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 3 X态 4 e 1 67676.3264 1.824760 67711.2525 34.9261 2.157503 57199520 0.000000 : rR21(4) : 激发态 a3P振动带=13 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 4 X态 4 e 1 67712.5783 .1597010 67747.5045 34.9261 .1888223 5014090 0.000000 : sR31(4) : 激发态 a3P振动带=13 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 5 X态 4 e 1 67790.9192 .7909836 67825.8454 34.9261 .9352186 24920598 0.000000 : qR1(4) : 激发态 振动量子数=4 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 6 X态 4 e 1 67814.8272 .7062359 67849.7534 34.9261 .8350172 22274100 0.000000 : sR31(4) : 激发态 振动量子数=4 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 7 X态 4 e 1 67904.7964 .0006204 67939.7225 34.9261 .0007336 19645.54 0.000000 : qR1(4) : 激发态 d态振动量子数=7 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 8 X态 4 e 1 67944.3952 .0651662 67979.3214 34.9261 .0770492 2067091 0.000000 : rR21(4) : 激发态 d态振动量子数=7 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 9 X态 4 e 1 67984.8590 1.446067 68019.7851 34.9261 1.709756 45951696 0.000000 : sR31(4) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e
13C18O 激发态 5 e 10 X态 4 e 1 67986.7676 1.834543 68021.6938 34.9261 2.169070 58301193 0.000000 : rR21(4) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 4 4 F1e

13C18O 激发态 4 e 1 X态 5 e 1 67533.5491 .9207625 67585.9368 52.3877 1.183758 38115588 0.000000：pP(5)：激发态 A态振动量子数=2 4 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 2 X态 5 e 1 67605.3251 .0552758 67657.7128 52.3877 .0710642 2295485 0.000000：oP1(5)：激发态 a3P振动带=13 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 3 X态 5 e 1 67645.9200 1.170782 67698.3077 52.3877 1.505190 48707652 0.000000：pP21(5)：激发态 a3P振动带=13 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 4 X态 5 e 1 67681.0901 .0662410 67733.4778 52.3877 .0851613 2760102 0.000000 : qP31(5) : 激发态 a3P振动带=13 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 5 X态 5 e 1 67764.6530 .4936931 67817.0407 52.3877 .6347057 20647286 0.000000 : oP1(5) : 激发态 振动量子数=4 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 6 X态 5 e 1 67784.1984 .4269371 67836.5861 52.3877 .5488824 17870867 0.000000 : qP31(5) : 激发态 振动量子数=4 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e态 7 X态 5 e态 1 67877.1303 .0001493 67929.5180 52.3877 .0001919 6273.468 0.000000 : oP1(5) : 激发态 振动量子数=7 4 3 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e态 8 X态 5 e态 1 67916.1275 .0264570 67968.5152 52.3877 .0340139 1113924 0.000000 : pP21(5) : 激发态 振动量子数=7 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e态 9 X态 5 e态 1 67956.0178 .9265201 68008.4055 52.3877 1.191160 39078230 0.000000 : qP31(5) : 激发态 振动量子数=7 4 5 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 4 e 10 X态 5 e 1 67958.9315 1.098715 68011.3192 52.3877 1.412539 46346919 0.000000 : pP21(5) : 激发态 a'态振动量子数=12 4 4 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 1 X态 5 e 1 67547.7051 2.522905 67600.0928 52.3877 3.243518 85502504 0.000000 : qQ(5) : 激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 2 X态 5 e 1 67558.4301 .0071857 67610.8178 52.3877 .0092381 243641.6 0.000000 : qQ(5) : 激发态 I态振动量子数=3 5 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 3 X态 5 e 1 67621.1193 .2356971 67673.5070 52.3877 .3030188 8013964 0.000000：pQ1(5)：激发态 a3P振动带=13 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 4 X态 5 e 1 67659.0424 3.060302 67711.4301 52.3877 3.934410 1.0423e8 0.000000：qQ21(5)：激发态 a3P振动带=13 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 5 X态 5 e 1 67695.1195 .2704075 67747.5072 52.3877 .3476434 9224373 0.000000：rQ31(5)：激发态 a3P振动带=13 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 6 X态 5 e 1 67784.6566 2.521469 67837.0443 52.3877 3.241672 86356290 0.000000 : qQ21(5) : 激发态 ev=4 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 7 X态 5 e 1 67887.3348 .0010459 67939.7225 52.3877 .0013446 35981.98 0.000000：pQ1(5)：激发态 d态振动量子数=7 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 8 X态 5 e 1 67926.9336 .1098306 67979.3214 52.3877 .1412014 3785259 0.000000 : qQ21(5) : 激发态 d态振动量子数=7 5 5 F2f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 9 X态 5 e 1 67959.8791 1.678515 68012.2668 52.3877 2.157945 57933398 0.000000：pQ1(5)：激发态 a'态振动量子数=12 5 4 F1f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 10 X态 5 e 1 67967.4005 2.671773 68019.7882 52.3877 3.434906 92246015 0.000000：rQ31(5)：激发态 振动量子数=7 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 f 11 X态 5 e 1 67983.0719 1.181084 68035.4596 52.3877 1.518435 40806502 0.000000：rQ31(5)：激发态 a'态振动量子数=12 5 6 F3f - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 1 X态 5 e 1 67564.7200 1.605082 67617.1077 52.3877 2.063538 46063028 0.000000 : rR(5) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 2 X态 5 e 1 67632.2355 .1881021 67684.6232 52.3877 .2418293 5414399 0.000000 : qR1(5) : 激发态 a3P振动带=13 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 3 X态 5 e 1 67674.4113 1.859531 67726.7990 52.3877 2.390666 53625632 0.000000 : rR21(5) : 激发态 a3P振动带=13 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 4 X态 5 e 1 67711.9113 .2313107 67764.2990 52.3877 .2973795 6681690 0.000000：sR31(5)：激发态 a3P振动带=13 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 5 X态 5 e 1 67784.4625 .8360993 67836.8502 52.3877 1.074913 24229462 0.000000：qR1(5)：激发态 振动量子数=4 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 6 X态 5 e 1 67812.7260 .7643333 67865.1137 52.3877 .9826484 22177461 0.000000：sR31(5)：激发态 振动量子数=4 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 7 X态 5 e 1 67899.5909 .0013532 67951.9786 52.3877 .0017398 39415.87 0.000000：qR1(5)：激发态 振动量子数=7 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 8 X态 5 e 1 67939.8989 .0965022 67992.2866 52.3877 .1240660 2815837 0.000000：rR21(5)：激发态 振动量子数=7 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 9 X态 5 e 1 67981.0370 1.307724 68033.4247 52.3877 1.681247 38227416 0.000000：sR31(5)：激发态 振动量子数=7 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 6 e 10 X态 5 e 1 67981.7577 2.184644 68034.1454 52.3877 2.808640 63863596 0.000000：rR21(5)：激发态 a'态振动量子数=12 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 5 5 F1e
13C18O 激发态 5 e 1 X态 6 e 1 67526.7660 1.039119 67600.1062 73.3402 1.477140 38902735 0.000000：pP(6)：激发态 A态振动量子数=2 5 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 2 X态 6 e 1 67596.5962 .0904325 67669.9365 73.3402 .1285526 3396145 0.000000：oP1(6)：激发态 a3P振动带=13 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 3 X态 6 e 1 67637.9123 1.264777 67711.2525 73.3402 1.797919 47585145 0.000000 : pP21(6) : 激发态 a3P振动带=13 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 4 X态 6 e 1 67674.1643 .1106919 67747.5045 73.3402 .1573519 4171301 0.000000 : qP31(6) : 激发态 a3P振动带=13 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 5 X态 6 e 1 67752.5051 .5482463 67825.8454 73.3402 .7793489 20731882 0.000000 : oP1(6) : 激发态 振动量子数=4 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 6 X态 6 e 1 67776.4131 .4895060 67849.7534 73.3402 .6958477 18530225 0.000000：qP31(6)：激发态 ev=4 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 7 X态 6 e 1 67866.3823 .0004300 67939.7225 73.3402 .0006113 16343.52 0.000000：oP1(6)：激发态 dv=7 5 4 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 8 X态 6 e 1 67905.9811 .0451680 67979.3214 73.3402 .0642077 1719656 0.000000：pP21(6)：激发态 dv=7 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 9 X态 6 e 1 67946.4449 1.002298 68019.7851 73.3402 1.424797 38228205 0.000000 : qP31(6) : 激发态 振动量子数=7 5 6 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 5 e 10 X态 6 e 1 67948.3536 1.271558 68021.6938 73.3402 1.807558 48502020 0.000000 : pP21(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 5 5 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 1 X态 6 e 1 67543.7379 2.679802 67617.0781 73.3402 3.809420 84956037 0.000000 : qQ(6) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 2 X态 6 e 1 67550.7243 .0195973 67624.0645 73.3402 .0278581 621472.3 0.000000 : qQ(6) : 激发态 振动量子数=3 6 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 3 X态 6 e 1 67614.7667 .3348036 67688.1070 73.3402 .4759336 10647585 0.000000 : pQ1(6) : 激发态 a3P振动带=13 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 4 X态 6 e 1 67653.6931 3.103157 67727.0333 73.3402 4.411233 98858635 0.000000 : qQ21(6) : 激发态 a3P振动带=13 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 5 X态 6 e 1 67690.9635 .3906145 67764.3037 73.3402 .5552705 12464554 0.000000 : rQ31(6) : 激发态 a3P振动带=13 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 6 X态 6 e 1 67776.8911 2.683632 67850.2314 73.3402 3.814864 85961526 0.000000 : qQ21(6) : 激发态 振动量子数=4 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 7 X态 6 e 1 67878.6384 .0022722 67951.9786 73.3402 .0032301 73112.34 0.000000 : pQ1(6) : 激发态 d态振动量子数=7 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 8 X态 6 e 1 67918.9464 .1619891 67992.2866 73.3402 .2302724 5221495 0.000000 : qQ21(6) : 激发态 振动量子数=7 6 6 F2f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 9 X态 6 e 1 67949.3192 1.762260 68022.6595 73.3402 2.505107 56880276 0.000000 : pQ1(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 5 F1f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 10 X态 6 e 1 67960.0920 2.797999 68033.4323 73.3402 3.977441 90353646 0.000000 : rQ31(6) : 激发态 振动量子数=7 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 f 11 X态 6 e 1 67976.6198 1.305660 68049.9600 73.3402 1.856036 42193457 0.000000 : rQ31(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 6 7 F3f - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 1 X态 6 e 1 67563.6000 1.654636 67636.9402 73.3402 2.352115 45501850 0.000000 : rR(6) : 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 2 X态 6 e 1 67628.4411 .2477368 67701.7813 73.3402 .3521654 6832300 0.000000 : qR1(6) : 激发态 a3P振动带=13 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 3 X态 6 e 1 67671.6110 1.816496 67744.9512 73.3402 2.582205 50192910 0.000000：rR21(6)：激发态 a3P振动带=13 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 4 X态 6 e 1 67710.5050 .3038734 67783.8453 73.3402 .4319654 8411032 0.000000：sR31(6)：激发态 a3P振动带=13 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 5 X态 6 e 1 67776.7146 .8522179 67850.0548 73.3402 1.211454 23658137 0.000000：qR1(6)：激发态 振动量子数=4 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e态 6 X态 6 e态 1 67809.3268 .7940902 67882.6671 73.3402 1.128823 22076311 0.000000 : sR31(6) : 激发态 ev=4 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e态 7 X态 6 e态 1 67892.9510 .0024717 67966.2912 73.3402 .0035135 68968.34 0.000000 : qR1(6) : 激发态 振动量子数=7 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e态 8 X态 6 e态 1 67934.0698 .1295311 68007.4101 73.3402 .1841324 3620972 0.000000 : rR21(6) : 激发态 振动量子数=7 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 9 X态 6 e 1 67975.3097 1.519675 68048.6499 73.3402 2.160264 42559119 0.000000 : rR21(6) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 7 e 10 X态 6 e 1 67976.0013 2.058834 68049.3416 73.3402 2.926696 57660260 0.000000 : sR31(6) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 6 6 F1e
13C18O 激发态 6 e 1 X态 7 e 1 67519.3247 1.106621 67617.1077 97.7830 1.768747 39403066 0.000000 : pP(7) : 激发态 A态振动量子数=2 6 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 2 X态 7 e 1 67586.8402 .1296867 67684.6232 97.7830 .2072823 4631575 0.000000 : oP1(7) : 激发态 a3P振动带=13 6 5 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 3 X态 7 e 1 67629.0160 1.282051 67726.7990 97.7830 2.049142 45872391 0.000000 : pP21(7) : 激发态 a3P振动带=13 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 4 X态 7 e 1 67666.5160 .1594768 67764.2990 97.7830 .2548967 5715652 0.000000 : qP31(7) : 激发态 a3P振动带=13 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 5 X态 7 e 1 67739.0672 .5764475 67836.8502 97.7830 .9213538 20726413 0.000000 : oP1(7) : 激发态 ev=4 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 6 X态 7 e 1 67767.3307 .5269685 67865.1137 97.7830 .8422700 18971102 0.000000 : qP31(7) : 激发态 ev=4 6 7 F3e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 7 X态 7 e 1 67854.1956 .0009330 67951.9786 97.7830 .0014912 33717.31 0.000000 : oP1(7) : 激发态 dv=7 6 5 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 8 X态 7 e 1 67894.5036 .0665333 67992.2866 97.7830 .1063423 2408740 0.000000：pP21(7)：激发态 振动量子数=7 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 9 X态 7 e 1 67935.6416 .9016086 68033.4247 97.7830 1.441069 32700760 0.000000：qP31(7)：激发态 振动量子数=7 6 7 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 6 e 10 X态 7 e 1 67936.3624 1.506200 68034.1454 97.7830 2.407406 54630638 0.000000：pP21(7)：激发态 a'态振动量子数=12 6 6 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 1 X态 7 e 1 67539.0504 2.631311 67636.8334 97.7830 4.205706 81271068 0.000000：qQ(7)：激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 2 X态 7 e 1 67541.7894 .1327399 67639.5724 97.7830 .2121623 4100323 0.000000：qQ(7)：激发态 振动量子数=3 7 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 3 X态 7 e 1 67607.3922 .4326540 67705.1752 97.7830 .6915242 13403620 0.000000：pQ1(7)：激发态 a3P振动带=13 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 4 X态 7 e 1 67647.4606 3.007646 67745.2436 97.7830 4.807214 93342650 0.000000 : qQ21(7) : 激发态 a3P振动带=13 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 5 X态 7 e 1 67686.0696 .5100080 67783.8526 97.7830 .8151615 15855274 0.000000 : rQ31(7) : 激发态 a3P振动带=13 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 6 X态 7 e 1 67767.8332 2.739239 67865.6163 97.7830 4.378211 85467232 0.000000 : qQ21(7) : 激发态 振动量子数=4 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 7 X态 7 e 1 67868.5082 .0041201 67966.2912 97.7830 .0065853 129125.0 0.000000 : pQ1(7) : 激发态 振动量子数=7 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 8 X态 7 e 1 67909.6270 .2158206 68007.4101 97.7830 .3449527 6776193 0.000000 : qQ21(7) : 激发态 振动量子数=7 7 7 F2f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 9 X态 7 e 1 67937.3361 1.782313 68035.1191 97.7830 2.848726 56028417 0.000000 : pQ1(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 6 F1f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 10 X态 7 e 1 67951.5510 2.812666 68049.3340 97.7830 4.495570 88473886 0.000000 : rQ31(7) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 f 11 X态 7 e 1 67968.7555 1.372798 68066.5385 97.7830 2.194186 43214898 0.000000 : rQ31(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 8 F3f - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 1 X态 7 e 1 67561.8196 1.650285 67659.6027 97.7830 2.637701 45019861 0.000000 : rR(7) : 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 2 X态 7 e 1 67623.6363 .3035484 67721.4193 97.7830 .4851708 8303568 0.000000 : qR1(7) : 激发态 a3P振动带=13 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 3 X态 7 e 1 67667.9290 1.711178 67765.7121 97.7830 2.735028 46901310 0.000000 : rR21(7) : 激发态 a3P振动带=13 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 4 X态 7 e 1 67708.3442 .3704399 67806.1273 97.7830 .5920856 10171513 0.000000 : sR31(7) : 激发态 a3P振动带=13 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e态 5 X态 7 e态 1 67767.6763 .8405385 67865.4594 97.7830 1.343459 23140172 0.000000 : qR1(7) : 激发态 ev=4 8 7 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e态 6 X态 7 e态 1 67804.6300 .7966041 67902.4130 97.7830 1.273237 21966545 0.000000 : sR31(7) : 激发态 ev=4 8 9 F3e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e态 7 X态 7 e态 1 67884.8825 .0039652 67982.6656 97.7830 .0063378 109730.9 0.000000 : qR1(7) : 激发态 dv=7 8 7 F1e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 8 X态 7 e 1 67926.9075 .1609937 68024.6905 97.7830 .2573213 4463502 0.000000 : rR21(7) : 激发态 振动量子数=7 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 8 e 9 X态 7 e 1 67967.4636 1.783703 68065.2466 97.7830 2.850948 49541253 0.000000 : rR21(7) : 激发态 a'态振动量子数=12 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 7 7 F1e

13C18O 激发态 8 e态 10 X态 7 e态 1 67969.7061 1.763535 68067.4891 97.7830 2.818712 48985930 0.000000 : sR31(7) : 激发态 振动量子数=7 8 9 F3e - X X态振动量子数=0 7 7 F1e
13C18O 激发态 7 e态 1 X态 8 e态 1 67511.2250 1.126216 67636.9402 125.7152 2.058101 39721600 0.000000 : pP(8) : 激发态 A态振动量子数=2 7 7 F1e - X X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 2 X态 8 e态 1 67576.0661 .1686202 67701.7813 125.7152 .3081447 5964384 0.000000 : oP1(8) : 激发态 a3P振动带=13 7 6 F1e - X X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 3 X态 8 e 1 67619.2360 1.236385 67744.9512 125.7152 2.259429 43816901 0.000000: pP21(8): 激发态 a3P振动带=13 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 4 X态 8 e 1 67658.1300 .2068292 67783.8453 125.7152 .3779697 7342588 0.000000: qP31(8): 激发态 a3P振动带=13 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e 5 X态 8 e 1 67724.3396 .5800559 67850.0548 125.7152 1.060022 20652917 0.000000: oP1(8): 激发态 振动量子数=4 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 6 X态 8 e态 1 67756.9518 .5404917 67882.6671 125.7152 .9877205 19272047 0.000000 : qP31(8) : 激发态 振动量子数=4 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 7 X态 8 e态 1 67840.5760 .0016823 67966.2912 125.7152 .0030743 60207.75 0.000000 : oP1(8) : 激发态 d态振动量子数=7 7 6 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 8 X态 8 e态 1 67881.6949 .0881644 68007.4101 125.7152 .1611158 3161028 0.000000 : pP21(8) : 激发态 d态振动量子数=7 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 9 X态 8 e态 1 67922.9347 1.034356 68048.6499 125.7152 1.890231 37153217 0.000000 : pP21(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 7 7 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 7 e态 10 X态 8 e态 1 67923.6264 1.401331 68049.3416 125.7152 2.560859 50336197 0.000000 : qP31(8) : 激发态 振动量子数=7 7 8 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 1 X态 8 e态 1 67531.2381 .1109356 67656.9533 125.7152 .2027290 3455449 0.000000 : qQ(8) : 激发态 振动量子数=3 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 2 X态 8 e 1 67534.0283 2.621586 67659.7435 125.7152 4.790812 81667936 0.000000: qQ(8): 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 3 X态 8 e 1 67599.0086 .5186955 67724.7238 125.7152 .9478892 16205150 0.000000: pQ1(8): 激发态 a3P振动带=13 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 4 X态 8 e 1 67640.3467 2.806914 67766.0620 125.7152 5.129490 87854933 0.000000: qQ21(8): 激发态 a3P振动带=13 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 5 X态 8 e 1 67680.4225 .6163513 67806.1377 125.7152 1.126350 19325781 0.000000: rQ31(8): 激发态 a3P振动带=13 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 6 X态 8 e 1 67757.4841 2.696920 67883.1993 125.7152 4.928482 84851494 0.000000: qQ21(8): 激发态 振动量子数=4 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 7 X态 8 e 1 67856.9503 .0065473 67982.6656 125.7152 .0119649 206903.5 0.000000: pQ1(8): 激发态 振动量子数=7 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 8 X态 8 e 1 67898.9753 .2656483 68024.6905 125.7152 .4854584 8410392 0.000000: qQ21(8): 激发态 振动量子数=7 8 8 F2f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 9 X态 8 e 1 67923.9320 1.746107 68049.6472 125.7152 3.190921 55342524 0.000000: pQ1(8): 激发态 a'态振动量子数=12 8 7 F1f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 10 X态 8 e 1 67941.7716 2.728657 68067.4868 125.7152 4.986478 86552389 0.000000: rQ31(8): 激发态 振动量子数=7 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 f 11 X态 8 e 1 67959.4766 1.385953 68085.1918 125.7152 2.532758 43996511 0.000000: rQ31(8): 激发态 a'态振动量子数=12 8 9 F3f - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 1 X态 8 e 1 67559.3783 1.597613 67685.0936 125.7152 2.919555 44580343 0.000000: rR(8): 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 2 X态 8 e 1 67617.8302 .3503712 67743.5454 125.7152 .6402853 9802278 0.000000: qR1(8): 激发态 a3P振动带=13 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 3 X态 8 e 1 67663.3683 1.561238 67789.0835 125.7152 2.853081 43766792 0.000000 : rR21(8) : 激发态 a3P振动带=13 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 4 X态 8 e 1 67705.4138 .4255794 67831.1290 125.7152 .7777242 11952690 0.000000 : sR31(8) : 激发态 a3P振动带=13 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 5 X态 8 e 1 67757.3493 .8037208 67883.0645 125.7152 1.468758 22625038 0.000000 : qR1(8) : 激发态 振动量子数=4 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e态 6 X态 8 e态 1 67798.6359 .7745563 67924.3511 125.7152 1.415461 21843929 0.000000: sR31(8): 激发态 振动量子数=4 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e态 7 X态 8 e态 1 67875.3917 .0057490 68001.1070 125.7152 .0105060 162683.7 0.000000: qR1(8): 激发态 振动量子数=7 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e态 8 X态 8 e态 1 67918.4116 .1878532 68044.1268 125.7152 .3432919 5325937 0.000000: rR21(8): 激发态 振动量子数=7 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 9 X态 8 e 1 67958.1946 1.783235 68083.9098 125.7152 3.258769 50646440 0.000000 : rR21(8) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 9 e 10 X态 8 e 1 67962.1699 1.630271 68087.8851 125.7152 2.979235 46310164 0.000000 : sR31(8) : 激发态 振动量子数=7 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 8 8 F1e
13C18O 激发态 8 e 1 X态 9 e 1 67502.4668 1.103529 67659.6027 157.1358 2.344623 39912280 0.000000 : pP(9) : 激发态 A态振动量子数=2 8 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 2 X态 9 e 1 67564.2835 .2029798 67721.4193 157.1358 .4312629 7361531 0.000000: oP1(9): 激发态 a3P振动带=13 8 7 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 3 X态 9 e 1 67608.5762 1.144248 67765.7121 157.1358 2.431136 41580448 0.000000: pP21(9): 激发态 a3P振动带=13 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 4 X态 9 e 1 67648.9914 .2477095 67806.1273 157.1358 .5262983 9017589 0.000000: qP31(9): 激发态 a3P振动带=13 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 5 X态 9 e态 1 67708.3235 .5620597 67865.4594 157.1358 1.194185 20515044 0.000000 : oP1(9) : 激发态 ev=4 8 7 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 6 X态 9 e态 1 67745.2772 .5326812 67902.4130 157.1358 1.131766 19474587 0.000000 : qP31(9) : 激发态 ev=4 8 9 F3e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e态 7 X态 9 e态 1 67825.5297 .0026515 67982.6656 157.1358 .0056336 97282.97 0.000000 : oP1(9) : 激发态 dv=7 8 7 F1e - X X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 8 X态 9 e 1 67867.5547 .1076549 68024.6905 157.1358 .2287300 3957166 0.000000: pP21(9): 激发态 振动量子数=7 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 9 X态 9 e 1 67908.1108 1.192745 68065.2466 157.1358 2.534176 43921404 0.000000: pP21(9): 激发态 a'态振动量子数=12 8 8 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 8 e 10 X态 9 e 1 67910.3532 1.179258 68067.4891 157.1358 2.505522 43429080 0.000000: qP31(9): 激发态 振动量子数=7 8 9 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 1 X态 9 e 1 67519.7238 .0092463 67676.8596 157.1358 .0196453 299446.7 0.000000 : qQ(9) : 激发态 振动量子数=3 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 2 X态 9 e 1 67528.0167 2.609114 67685.1525 157.1358 5.543477 84528676 0.000000 : qQ(9) : 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 3 X态 9 e 1 67589.6284 .5846175 67746.7643 157.1358 1.242113 18992019 0.000000 : pQ1(9) : 激发态 a3P振动带=13 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 4 X态 9 e 1 67632.3529 2.535682 67789.4887 157.1358 5.387460 82531049 0.000000: qQ21(9): 激发态 a3P振动带=13 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 5 X态 9 e 1 67674.0069 .7003699 67831.1428 157.1358 1.488047 22837694 0.000000: rQ31(9): 激发态 a3P振动带=13 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 6 X态 9 e 1 67745.8452 2.570393 67902.9810 157.1358 5.461209 84082691 0.000000: qQ21(9): 激发态 振动量子数=4 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 7 X态 9 e 1 67843.9711 .0093885 68001.1070 157.1358 .0199474 308453.2 0.000000: pQ1(9): 激发态 振动量子数=7 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 8 X态 9 e 1 67886.9910 .3064627 68044.1268 157.1358 .6511287 10087797 0.000000: qQ21(9): 激发态 振动量子数=7 9 9 F2f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 9 X态 9 e 1 67909.1083 1.662699 68066.2442 157.1358 3.532670 54784404 0.000000: pQ1(9): 激发态 a'态振动量子数=12 9 8 F1f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 10 X态 9 e 1 67930.7480 2.564762 68087.8839 157.1358 5.449245 84587338 0.000000 : rQ31(9) : 激发态 振动量子数=7 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 f 11 X态 9 e 1 67948.7817 1.351615 68105.9176 157.1358 2.871722 44612575 0.000000 : rQ31(9) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 10 F3f - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 1 X态 9 e 1 67556.2755 1.504583 67713.4114 157.1358 3.196725 44157708 0.000000 : rR(9) : 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 2 X态 9 e 1 67611.0316 .3844310 67768.1675 157.1358 .8167849 11310050 0.000000 : qR1(9) : 激发态 a3P振动带=13 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 3 X态 9 e 1 67657.9306 1.384122 67815.0665 157.1358 2.940788 40805990 0.000000 : rR21(9) : 激发态 a3P振动带=13 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 4 X态 9 e 1 67701.6985 .4662162 67858.8344 157.1358 .9905504 13771442 0.000000 : sR31(9) : 激发态 a3P振动带=13 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 5 X态 9 e 1 67745.7361 .7453104 67902.8720 157.1358 1.583531 22058526 0.000000 : qR1(9) : 激发态 振动量子数=4 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 6 X态 9 e 1 67791.3447 .7318482 67948.4806 157.1358 1.554928 21703871 0.000000 : sR31(9) : 激发态 振动量子数=4 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 7 X态 9 e 1 67864.4848 .0076752 68021.6207 157.1358 .0163071 228353.7 0.000000 : qR1(9) : 激发态 d态振动量子数=7 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 8 X态 9 e 1 67908.5818 .2077414 68065.7176 157.1358 .4413797 6192848 0.000000 : rR21(9): 激发态 振动量子数=7 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 9 X态 9 e 1 67947.5062 1.707169 68104.6420 157.1358 3.627152 50978905 0.000000 : rR21(9): 激发态 a'态振动量子数=12 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 10 e 10 X态 9 e 1 67953.3831 1.489739 68110.5190 157.1358 3.165188 44497626 0.000000 : sR31(9): 激发态 振动量子数=7 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 9 9 F1e
13C18O 激发态 9 e 1 X态 10 e 1 67493.0498 1.046073 67685.0936 192.0438 2.627599 40004251 0.000000: pP(10): 激发态 A态振动量子数=2 9 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 2 X态 10 e 1 67551.5016 .2294135 67743.5454 192.0438 .5762567 8796114 0.000000: oP1(10): 激发态 a3P振动带=13 9 8 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 3 X态 10 e 1 67597.0397 1.022256 67789.0835 192.0438 2.567773 39274387 0.000000: pP21(10): 激发态 a3P振动带=13 9 9 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 4 X态 10 e 1 67639.0852 .2786577 67831.1290 192.0438 .6999518 10725836 0.000000 : qP31(10) : 激发态 a3P振动带=13 9 10 F3e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 5 X态 10 e 1 67691.0207 .5262543 67883.0645 192.0438 1.321882 20302793 0.000000 : oP1(10) : 激发态 振动量子数=4 9 8 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 6 X态 10 e 1 67732.3073 .5071582 67924.3511 192.0438 1.273915 19601892 0.000000 : qP31(10) : 激发态 振动量子数=4 9 10 F3e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e态 7 X态 10 e态 1 67809.0631 .0037643 68001.1070 192.0438 .0094554 145986.5 0.000000 : oP1(10) : 激发态 振动量子数=7 9 8 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e态 8 X态 10 e态 1 67852.0830 .1230011 68044.1268 192.0438 .3089627 4779313 0.000000 : pP21(10) : 激发态 振动量子数=7 9 9 F2e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e态 9 X态 10 e态 1 67891.8660 1.167613 68083.9098 192.0438 2.932892 45448460 0.000000 : pP21(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 9 9 F2e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 9 e 10 X态 10 e 1 67895.8413 1.067457 68087.8851 192.0438 2.681312 41557234 0.000000: qP31(10): 激发态 振动量子数=7 9 10 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 1 X态 10 e 1 67506.8499 .0019735 67698.8937 192.0438 .0049571 68324.06 0.000000: qQ(10): 激发态 振动量子数=3 10 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 2 X态 10 e 1 67521.4105 2.436527 67713.4543 192.0438 6.120237 84410582 0.000000: qQ(10): 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 3 X 10 e 1 67579.2638 .6253710 67771.3076 192.0438 1.570851 21720978 0.000000 : pQ1(10) : 激发态 a3P振动带=13 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 4 X 10 e 1 67623.4797 2.226094 67815.5235 192.0438 5.591659 77470677 0.000000 : qQ21(10) : 激发态 a3P振动带=13 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 5 X 10 e 1 67666.8081 .7568005 67858.8519 192.0438 1.900984 26388196 0.000000 : rQ31(10) : 激发态 a3P振动带=13 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 6 X态 10 e 1 67732.9190 2.376694 67924.9628 192.0438 5.969944 83113928 0.000000 : qQ21(10) : 激发态 振动量子数=4 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 7 X态 10 e 1 67829.5768 .0123825 68021.6207 192.0438 .0311033 434879.1 0.000000 : pQ1(10) : 激发态 d态振动量子数=7 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 8 X态 10 e 1 67873.6738 .3346380 68065.7176 192.0438 .8405671 11775534 0.000000 : qQ21(10) : 激发态 d态振动量子数=7 10 10 F2f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 9 X态 10 e 1 67892.8660 1.542522 68084.9098 192.0438 3.874613 54325646 0.000000 : pQ1(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 9 F1f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 10 X态 10 e 1 67918.4743 2.342472 68110.5181 192.0438 5.883983 82592258 0.000000 : rQ31(10) : 激发态 振动量子数=7 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 f 11 X态 10 e 1 67936.6699 1.278370 68128.7137 192.0438 3.211098 45109749 0.000000 : rQ31(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 10 11 F3f - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 1 X态 10 e 1 67552.5104 1.380627 67744.5542 192.0438 3.467954 43731402 0.000000: rR(10): 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 2 X态 10 e 1 67603.2488 .4037178 67795.2926 192.0438 1.014087 12816615 0.000000: qR1(10): 激发态 a3P振动带=13 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 3 X态 10 e 1 67651.6171 1.195375 67843.6609 192.0438 3.002625 38030429 0.000000: rR21(10): 激发态 a3P振动带=13 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 4 X态 10 e 1 67697.1826 .4922223 67889.2264 192.0438 1.236398 15691545 0.000000: sR31(10): 激发态 a3P振动带=13 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 5 X态 10 e 1 67732.8418 .6688616 67924.8856 192.0438 1.680093 21356340 0.000000: qR1(10): 激发态 振动量子数=4 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 6 X态 10 e 1 67782.7570 .6731557 67974.8008 192.0438 1.690879 21541004 0.000000: sR31(10): 激发态 振动量子数=4 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e态 7 X态 10 e态 1 67852.1679 .0095601 68044.2117 192.0438 .0240137 306863.9 0.000000: qR1(10): 激发态振动量子数=7 11 10 F1e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e态 8 X态 10 e态 1 67897.4177 .2192334 68089.4615 192.0438 .5506857 7051137 0.000000: rR21(10): 激发态振动量子数=7 11 11 F2e - X X态振动量子数=0 10 10 F1e

13C18O 激发态 11 e 9 X态 10 e 1 67935.3986 1.585559 68127.4424 192.0438 3.982717 51081478 0.000000 : rR21(10) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 11 e 10 X态 10 e 1 67943.3393 1.333886 68135.3831 192.0438 3.350547 42988470 0.000000 : sR31(10) : 激发态 振动量子数=7 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 10 10 F1e
13C18O 激发态 10 e 1 X态 11 e 1 67482.9734 .9623801 67713.4114 230.4379 2.906114 40012839 0.000000 : pP(11) : 激发态 A态振动量子数=2 10 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 2 X态 11 e态 1 67537.7296 .2458946 67768.1675 230.4379 .7425317 10248458 0.000000 : oP1(11) : 激发态 a3P振动带=13 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 3 X态 11 e态 1 67584.6286 .8853296 67815.0665 230.4379 2.673443 36975912 0.000000 : pP21(11) : 激发态 a3P振动带=13 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e态 4 X态 11 e态 1 67628.3965 .2982071 67858.8344 230.4379 .9005004 12478872 0.000000 : qP31(11) : 激发态 a3P振动带=13 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 5 X态 11 e 1 67672.4341 .4767248 67902.8720 230.4379 1.439573 19988182 0.000000 : oP1(11) : 激发态 ev=4 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 6 X态 11 e 1 67718.0426 .4681140 67948.4806 230.4379 1.413571 19666857 0.000000 : qP31(11) : 激发态 ev=4 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 7 X态 11 e 1 67791.1827 .0049093 68021.6207 230.4379 .0148246 206922.3 0.000000 : oP1(11) : 激发态 dv=7 10 9 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 8 X态 11 e 1 67835.2797 .1328782 68065.7176 230.4379 .4012542 5611651 0.000000: pP21(11): 激发态 振动量子数=7 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 9 X态 11 e 1 67874.2041 1.091961 68104.6420 230.4379 3.297411 46194631 0.000000: pP21(11): 激发态 a'态振动量子数=12 10 10 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 10 e 10 X态 11 e 1 67880.0811 .9528857 68110.5190 230.4379 2.877443 40321619 0.000000: qP31(11): 激发态 d态振动量子数=7 10 11 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 1 X态 11 e 1 67492.6711 .0004973 67723.1091 230.4379 .0015016 18885.10 0.000000 : qQ(11) : 激发态 振动量子数=3 11 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 2 X态 11 e 1 67514.1534 2.210969 67744.5914 230.4379 6.676497 84048261 0.000000 : qQ(11) : 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 3 X态 11 e 1 67567.9257 .6394007 67798.3636 230.4379 1.930808 24364440 0.000000 : pQ1(11) : 激发态 a3P振动带=13 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 4 X 11 e 1 67613.7274 1.905140 67844.1653 230.4379 5.752981 72743323 0.000000 : qQ21(11) : 激发态 a3P振动带=13 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 5 X 11 e 1 67658.8111 .7845491 67889.2490 230.4379 2.369115 30016138 0.000000 : rQ31(11) : 激发态 a3P振动带=13 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 6 X 11 e 1 67718.7089 2.134288 67949.1468 230.4379 6.444943 81872997 0.000000 : qQ21(11) : 激发态 振动量子数=4 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 7 X态 11 e 1 67813.7738 .0152241 68044.2117 230.4379 .0459725 586472.7 0.000000: pQ1(11): 激发态 振动量子数=7 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 8 X态 11 e 1 67859.0235 .3482924 68089.4615 230.4379 1.051744 13443996 0.000000: qQ21(11): 激发态 振动量子数=7 11 11 F2f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 9 X态 11 e 1 67875.2057 1.396613 68105.6436 230.4379 4.217373 53947467 0.000000: pQ1(11): 激发态 a'态振动量子数=12 11 10 F1f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 10 X态 11 e 1 67904.9446 2.083462 68135.3825 230.4379 6.291463 80584482 0.000000 : rQ31(11) : 激发态 振动量子数=7 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 f 11 X态 11 e 1 67923.1404 1.175916 68153.5783 230.4379 3.550932 45518843 0.000000 : rQ31(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 12 F3f - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 1 X态 11 e 1 67548.0821 1.235717 67778.5200 230.4379 3.731512 43282002 0.000000 : rR(11) : 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 2 X态 11 e 1 67594.4891 .4080106 67824.9270 230.4379 1.232076 14320386 0.000000: qR1(11): 激发态 a3P振动带=13 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 3 X态 11 e 1 67644.4280 1.007645 67874.8659 230.4379 3.042800 35444835 0.000000: rR21(11): 激发态 a3P振动带=13 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 4 X态 11 e 1 67691.8455 .5074748 67922.2834 230.4379 1.532429 17888459 0.000000: sR31(11): 激发态 a3P振动带=13 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e态 5 X态 11 e态 1 67718.6767 .5762028 67949.1147 230.4379 1.739968 20335279 0.000000 : qR1(11) : 激发态 ev=4 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e态 6 X态 11 e态 1 67772.8733 .6034653 68003.3112 230.4379 1.822293 21348601 0.000000 : sR31(11) : 激发态 ev=4 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e态 7 X态 11 e态 1 67838.4471 .0112185 68068.8850 230.4379 .0338766 398025.6 0.000000 : qR1(11) : 激发态 dv=7 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 8 X态 11 e 1 67884.9191 .2219279 68115.3570 230.4379 .6701590 7890077 0.000000 : rR21(11) : 激发态 振动量子数=7 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 9 X态 11 e 1 67921.8719 1.434807 68152.3098 230.4379 4.332707 51094210 0.000000 : rR21(11) : 激发态 a'态振动量子数=12 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 12 e 10 X态 11 e 1 67932.0325 1.168602 68162.4704 230.4379 3.528845 41633201 0.000000 : sR31(11) : 激发态 振动量子数=7 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 11 11 F1e
13C18O 激发态 11 e 1 X态 12 e 1 67472.2374 .8611754 67744.5542 272.3168 3.178958 39944381 0.000000 : pP(12) : 激发态 A态振动量子数=2 11 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 2 X态 12 e 1 67522.9758 .2518218 67795.2926 272.3168 .9295794 11706762 0.000000 : oP1(12) : 激发态 a3P振动带=13 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 3 X态 12 e 1 67571.3441 .7456231 67843.6609 272.3168 2.752406 34737279 0.000000 : pP21(12) : 激发态 a3P振动带=13 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 4 X态 12 e 1 67616.9095 .3070270 67889.2264 272.3168 1.133365 14332809 0.000000: qP31(12): 激发态 a3P振动带=13 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 5 X态 12 e 1 67652.5688 .4172070 67924.8856 272.3168 1.540085 19507124 0.000000: oP1(12): 激发态 振动量子数=4 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 6 X态 12 e 1 67702.4839 .4198855 67974.8008 272.3168 1.549973 19675849 0.000000: qP31(12): 激发态 振动量子数=4 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e态 7 X态 12 e态 1 67771.8949 .0059632 68044.2117 272.3168 .0220126 280294.7 0.000000 : oP1(12) : 激发态 振动量子数=7 11 10 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e态 8 X态 12 e态 1 67817.1447 .1367483 68089.4615 272.3168 .5047952 6440645 0.000000 : pP21(12) : 激发态 振动量子数=7 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e态 9 X态 12 e态 1 67855.1256 .9890033 68127.4424 272.3168 3.650824 46658899 0.000000 : pP21(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 11 11 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 11 e 10 X态 12 e 1 67863.0663 .8320205 68135.3831 272.3168 3.071335 39266591 0.000000 : qP31(12) : 激发态 振动量子数=7 11 12 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 1 X态 12 e 1 67477.1931 .0001134 67749.5100 272.3168 .0004186 4840.576 0.000000 : qQ(12) : 激发态 振动量子数=3 12 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 2 X态 12 e 1 67506.2383 1.955585 67778.5552 272.3168 7.218880 83576647 0.000000 : qQ(12) : 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 3 X态 12 e 1 67555.6244 .6282489 67827.9412 272.3168 2.319129 26908709 0.000000: pQ1(12): 激发态 a3P振动带=13 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 4 X态 12 e 1 67603.0958 1.593495 67875.4126 272.3168 5.882256 68395432 0.000000: qQ21(12): 激发态 a3P振动带=13 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 5 X态 12 e 1 67650.0002 .7862360 67922.3170 272.3168 2.902325 33816831 0.000000: rQ31(12): 激发态 a3P振动带=13 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 6 X态 12 e 1 67703.2206 1.861243 67975.5375 272.3168 6.870625 80243098 0.000000 : qQ21(12) : 激发态 振动量子数=4 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 7 X态 12 e 1 67796.5682 .0176222 68068.8850 272.3168 .0650508 762885.7 0.000000 : pQ1(12) : 激发态 d态振动量子数=7 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 8 X态 12 e 1 67843.0402 .3472828 68115.3570 272.3168 1.281966 15065229 0.000000 : qQ21(12) : 激发态 d态振动量子数=7 12 12 F2f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 9 X态 12 e 1 67856.1279 1.235797 68128.4447 272.3168 4.561842 53640266 0.000000: pQ1(12): 激发态 a'态振动量子数=12 12 11 F1f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 10 X态 12 e 1 67890.1531 1.807672 68162.4699 272.3168 6.672871 78580816 0.000000: rQ31(12): 激发态 振动量子数=7 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 f 11 X态 12 e 1 67908.1928 1.054147 68180.5096 272.3168 3.891296 45861078 0.000000: rQ31(12): 激发态 a'态振动量子数=12 12 13 F3f - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 1 X态 12 e 1 67542.9896 1.079506 67815.3064 272.3168 3.984908 42787691 0.000000 : rR(12) : 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 2 X态 12 e 1 67584.7588 .3986314 67857.0756 272.3168 1.471515 15829624 0.000000 : qR1(12) : 激发态 a3P振动带=13 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 3 X态 12 e 1 67636.3628 .8303059 67908.6796 272.3168 3.065006 33046975 0.000000 : rR21(12) : 激发态 a3P振动带=13 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 4 X态 12 e 1 67685.6479 .5247109 67957.9648 272.3168 1.936927 20929684 0.000000: sR31(12): 激发态 a3P振动带=13 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 5 X态 12 e 1 67703.2719 .4617035 67975.5888 272.3168 1.704340 18430832 0.000000: qR1(12): 激发态 振动量子数=4 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 6 X态 12 e 1 67761.6946 .5276450 68034.0115 272.3168 1.947758 21117741 0.000000: sR31(12): 激发态 振动量子数=4 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 7 X态 12 e态 1 67823.3282 .0124954 68095.6450 272.3168 .0461256 501463.5 0.000000 : qR1(12) : 激发态 振动量子数=7 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 8 X态 12 e态 1 67871.0859 .2163572 68143.4027 272.3168 .7986646 8701187 0.000000 : rR21(12) : 激发态 振动量子数=7 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e态 9 X态 12 e态 1 67906.9259 1.267791 68179.2428 272.3168 4.679947 51067296 0.000000 : rR21(12) : 激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 13 e 10 X态 12 e 1 67919.4570 1.001821 68191.7738 272.3168 3.698141 40376230 0.000000: sR31(12): 激发态 dv=7 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 12 12 F1e
13C18O 激发态 12 e 1 X态 13 e 1 67460.8409 .7506667 67778.5200 317.6791 3.444473 39798015 0.000000: pP(13): 激发态 A态振动量子数=2 12 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 2 X态 13 e 1 67507.2479 .2478562 67824.9270 317.6791 1.137301 13167701 0.000000: oP1(13): 激发态 a3P振动带=13 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 3 X态 13 e 1 67557.1868 .6121188 67874.8659 317.6791 2.808739 32591882 0.000000: pP21(13): 激发态 a3P振动带=13 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 4 X态 13 e 1 67604.6043 .3082781 67922.2834 317.6791 1.414550 16448663 0.000000: qP31(13): 激发态 a3P振动带=13 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 5 X态 13 e 1 67631.4356 .3500287 67949.1147 317.6791 1.606125 18698573 0.000000: oP1(13): 激发态 振动量子数=4 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 6 X 13 e 1 67685.6321 .3665900 68003.3112 317.6791 1.682117 19630397 0.000000 : qP31(13) : 激发态 振动量子数=4 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 7 X 13 e 1 67751.2059 .0068149 68068.8850 317.6791 .0312707 365992.6 0.000000 : oP1(13) : 激发态 d态振动量子数=7 12 11 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 8 X 13 e 1 67797.6780 .1348156 68115.3570 317.6791 .6186083 7255104 0.000000 : pP21(13) : 激发态 d态振动量子数=7 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 9 X态 13 e 1 67834.6308 .8716088 68152.3098 317.6791 3.999422 46982382 0.000000: pP21(13): 激发态 a'态振动量子数=12 12 12 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 12 e 10 X态 13 e 1 67844.7913 .7098962 68162.4704 317.6791 3.257395 38282775 0.000000: qP31(13): 激发态 振动量子数=7 12 13 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 2 X态 13 e 1 67497.6626 1.688130 67815.3417 317.6791 7.746072 83005601 0.000000: qQ(13): 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 3 X态 13 e 1 67542.3690 .5957714 67860.0481 317.6791 2.733728 29352412 0.000000 : pQ1(13) : 激发态 a3P振动带=13 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 4 X态 13 e 1 67591.5839 1.305457 67909.2630 317.6791 5.990156 64457827 0.000000 : qQ21(13) : 激发态 a3P振动带=13 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 5 X态 13 e 1 67640.3574 .7674929 67958.0365 317.6791 3.521681 37977582 0.000000 : rQ31(13) : 激发态 a3P振动带=13 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 6 X态 13 e 1 67686.4636 1.573550 68004.1426 317.6791 7.220316 78022762 0.000000: qQ21(13): 激发态 振动量子数=4 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 7 X态 13 e 1 67777.9659 .0193505 68095.6450 317.6791 .0887907 963369.0 0.000000: pQ1(13): 激发态 d态振动量子数=7 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 8 X态 13 e 1 67825.7235 .3328781 68143.4026 317.6791 1.527428 16607481 0.000000: qQ21(13): 激发态 d态振动量子数=7 13 13 F2f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 9 X态 13 e 1 67835.6329 1.070015 68153.3120 317.6791 4.909820 53407085 0.000000: pQ1(13): 激发态 a'态振动量子数=12 13 12 F1f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 10 X态 13 e 1 67874.0943 1.531995 68191.7734 317.6791 7.029640 76595791 0.000000: rQ31(13): 激发态 振动量子数=7 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 13 f 11 X态 13 e 1 67891.8266 .9223578 68209.5057 317.6791 4.232286 46151644 0.000000: rQ31(13): 激发态 a'态振动量子数=12 13 14 F3f - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 1 X态 13 e 1 67537.2315 .9206266 67854.9105 317.6791 4.224342 42219618 0.000000 : rR(13) : 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 2 X态 13 e 1 67574.0631 .3780429 67891.7422 317.6791 1.734669 17365296 0.000000 : qR1(13) : 激发态 a3P振动带=13 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 3 X态 13 e 1 67627.4207 .6695298 67945.0998 317.6791 3.072172 30827578 0.000000 : rR21(13) : 激发态 a3P振动带=13 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 4 X态 13 e 1 67678.4124 .6024867 67996.0915 317.6791 2.764541 27803470 0.000000 : sR31(13) : 激发态 a3P振动带=13 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 5 X态 13 e 1 67686.7977 .2744168 68004.4768 317.6791 1.259176 12668457 0.000000 : qR1(13) : 激发态 振动量子数=4 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e 6 X态 13 e 1 67749.2225 .4500912 68066.9016 317.6791 2.065267 20836008 0.000000 : sR31(13) : 激发态 振动量子数=4 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 7 X态 13 e态 1 67806.8168 .0132893 68124.4959 317.6791 .0609788 616771.8 0.000000: qR1(13): 激发态 振动量子数=7 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
13C18O 激发态 14 e态 8 X态 13 e态 1 67855.9178 .2037758 68173.5968 317.6791 .9350358 9478004 0.000000: rR21(13): 激发态 振动量子数=7 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e

13C18O 激发态 14 e 9 X态 13 e 1 67890.5606 1.095294 68208.2397
13C18O 激发态 14 e 10 X态 13 e 1 67905.6075 .8407897 68223.2866
13C18O 激发态 13 e 1 X态 14 e 1 67448.7833 .6380043 67815.3064
13C18O 激发态 13 e 2 X态 14 e 1 67490.5525 .2355971 67857.0756
13C18O 激发态 13 e 3 X态 14 e 1 67542.1565 .4907232 67908.6796
13C18O 激发态 13 e态 4 X态 14 e态 1 67591.4417 .3101120 67957.9648
13C18O 激发态 13 e态 5 X态 14 e态 1 67609.0656 .2728736 67975.5888
13C18O 激发态 13 e态 6 X态 14 e态 1 67667.4883 .3118461 68034.0115
13C18O 激发态 13 e 7 X 14 e 1 67729.1219 .0073850 68095.6450
13C18O 激发态 13 e 8 X 14 e 1 67776.8796 .1278703 68143.4027
13C18O 激发态 13 e 9 X 14 e 1 67812.7197 .7492836 68179.2428
13C18O 激发态 13 e 10 X 14 e 1 67825.2507 .5920914 68191.7738
13C18O 激发态 14 f 2 X 14 e 1 67488.4248 1.423249 67854.9479
13C18O 激发态 14 f 3 X态 14 e 1 67528.1677 .5472049 67894.6908
13C18O 激发态 14 f 4 X态 14 e 1 67579.1905 1.049595 67945.7136
13C18O 激发态 14 f 5 X态 14 e 1 67629.8578 .7364666 67996.3809
13C18O 激发态 14 f 6 X态 14 e 1 67668.4550 1.283525 68034.9781
13C18O 激发态 14 f 7 X态 14 e 1 67757.9728 .0202797 68124.4959
13C18O 激发态 14 f 8 X态 14 e 1 67807.0735 .3070724 68173.5967
13C18O 激发态 14 f 9 X态 14 e 1 67813.7210 .9080392 68180.2441
13C18O 激发态 14 f 10 X态 14 e 1 67856.7631 1.269587 68223.2862
13C18O 激发态 14 f 11 X态 14 e 1 67874.0415 .7886573 68240.5646
13C18O 激发态 15 e 1 X态 14 e 1 67530.8059 .7661623 67897.3290
13C18O 激发态 15 e 2 X态 14 e 1 67562.4058 .3494099 67928.9289
13C18O 激发态 15 e 3 X态 14 e 1 67617.6000 .5286565 67984.1232
13C18O 激发态 15 e 4 X态 14 e 1 67667.1477 .7098740 68033.6708
13C18O 激发态 15 e 5 X态 14 e 1 67672.2396 .0526059 68038.7627
13C18O 激发态 15 e 6 X态 14 e 1 67735.4590 .3744748 68101.9822
13C18O 激发态 15 e 7 X态 14 e 1 67788.9185 .0135631 68155.4417
13C18O 激发态 15 e 8 X态 14 e 1 67839.4146 .1858889 68205.9378
13C18O 激发态 15 e 9 X态 14 e 1 67872.7757 .9260878 68239.2988
13C18O 激发态 15 e 10 X态 14 e 1 67890.4790 .6911681 68257.0021
13C18O 激发态 14 e 1 X态 15 e 1 67436.0633 .5289358 67854.9105
13C18O 激发态 14 e 2 X态 15 e 1 67472.8949 .2172003 67891.7422
13C18O 激发态 14 e 3 X态 15 e 1 67526.2526 .3846709 67945.0998
13C18O 激发态 14 e 4 X态 15 e 1 67577.2443 .3461521 67996.0915
13C18O 激发态 14 e 5 X态 15 e 1 67585.6296 .1576632 68004.4768
13C18O 激发态 14 e 6 X态 15 e 1 67648.0543 .2585949 68066.9016
13C18O 激发态 14 e 7 X 15 e 1 67705.6487 .0076352 68124.4959
13C18O 激发态 14 e 8 X 15 e 1 67754.7496 .1170771 68173.5968
13C18O 激发态 14 e态 9 X态 15 e态 1 67789.3924 .6292888 68208.2397
13C18O 激发态 14 e态 10 X态 15 e态 1 67804.4394 .4830664 68223.2866
13C18O 激发态 15 f 2 X态 15 e态 1 67478.5235 1.172313 67897.3707
13C18O 激发态 15 f 3 X态 15 e 1 67513.0275 .4882820 67931.8747
13C18O 激发态 15 f 4 X态 15 e 1 67565.9134 .8297860 67984.7606
13C18O 激发态 15 f 5 X态 15 e 1 67618.4592 .7042670 68037.3064
13C18O 激发态 15 f 6 X态 15 e 1 67649.2311 .9977702 68068.0784
13C18O 激发态 15 f 7 X态 15 e 1 67736.5944 .0203872 68155.4416
13C18O 激发态 15 f 8 X态 15 e 1 67787.0901 .2703156 68205.9373
13C18O 激发态 15 f 9 X态 15 e 1 67790.3927 .7589321 68209.2399
13C18O 激发态 15 f 10 X态 15 e 1 67838.1546 1.029691 68257.0018
13C18O 激发态 15 f 11 X态 15 e 1 67854.8372 .6595957 68273.6844
13C18O 激发态 16 e 1 X态 15 e 1 67523.7099 .6212894 67942.5572
13C18O 激发态 16 e 2 X 15 e 1 67549.7893 .3162497 67968.6366
13C18O 激发态 16 e态 3 X态 15 e态 1 67606.8985 .4087021 68025.7457
13C18O 激发态 16 e 4 X 15 e 1 67648.5771 .4365777 68067.4243
13C18O 激发态 16 e 5 X 15 e 1 67662.8697 .2130680 68081.7169
13C18O 激发态 16 e 6 X 15 e 1 67720.4079 .3035939 68139.2551
13C18O 激发态 16 e 7 X态 15 e 1 67769.6387 .0133415 68188.4859
13C18O 激发态 16 e 8 X态 15 e 1 67821.5765 .1645751 68240.4237
13C18O 激发态 16 e 9 X态 15 e 1 67853.5711 .7668713 68272.4183
13C18O 激发态 16 e 10 X态 15 e 1 67874.0668 .5567913 68292.9141
13C18O 激发态 15 e 1 X态 16 e 1 67422.6794 .4276432 67897.3290
13C18O 激发态 15 e 2 X态 16 e 1 67454.2793 .1950276 67928.9289
13C18O 激发态 15 e 3 X态 16 e 1 67509.4736 .2950763 67984.1232
13C18O 激发态 15 e 4 X态 16 e 1 67559.0212 .3962252 68033.6708
13C18O 激发态 15 e 5 X态 16 e 1 67564.1131 .0293626 68038.7627
13C18O 激发态 15 e 6 X态 16 e 1 67627.3326 .2090178 68101.9822
13C18O 激发态 15 e 7 X态 16 e 1 67680.7921 .0075704 68155.4417
13C18O 激发态 15 e 8 X态 16 e 1 67731.2882 .1037562 68205.9378
13C18O 激发态 15 e 9 X态 16 e 1 67764.6492 .5169077 68239.2988
13C18O 激发态 15 e 10 X态 16 e 1 67782.3525 .3857842 68257.0021
13C18O 激发态 16 f 2 X态 16 e 1 67467.9570 .9432934 67942.6066
13C18O 激发态 16 f 3 X态 16 e 1 67496.9547 .4245278 67971.6043
13C18O 激发态 16 f 4 X态 16 e 1 67551.7498 .6463817 68026.3994
13C18O 激发态 16 f 5 X态 16 e 1 67606.0674 .6881780 68080.7169
13C18O 激发态 16 f 6 X态 16 e 1 67628.8820 .7129879 68103.5316
13C18O 激发态 16 f 7 X态 16 e 1 67713.8363 .0197467 68188.4859
13C18O 激发态 16 f 8 X态 16 e 1 67765.6333 .3549501 68240.2829
13C18O 激发态 16 f 9 X态 16 e 1 67765.7879 .4980536 68240.4375
13C18O 激发态 16 f 10 X态 16 e 1 67818.2642 .8178808 68292.9137
13C18O 激发态 16 f 11 X态 16 e 1 67834.2134 .5400080 68308.8630
13C18O 激发态 17 e 1 X态 16 e 1 67515.9389 .4889251 67990.5885
13C18O 激发态 17 e态 2 X态 16 e态 1 67536.2150 .2823597 68010.8646
13C18O 激发态 17 e 3 X 16 e 1 67595.3127 .3088507 68069.9623
13C18O 激发态 17 e 4 X态 16 e 1 67628.1266 .3232776 68102.7761
13C18O 激发态 17 e 5 X态 16 e 1 67653.2592 .2205326 68127.9087
13C18O 激发态 17 e 6 X态 16 e 1 67704.0748 .2393234 68178.7244
13C18O 激发态 17 e 7 X态 16 e 1 67748.9826 .0127008 68223.6322
13C18O 激发态 17 e 8 X态 16 e 1 67802.4031 .1416490 68277.0527
13C18O 激发态 17 e 9 X态 16 e 1 67832.9467 .6222813 68307.5963
13C18O 激发态 17 e 10 X态 16 e 1 67856.3667 .4397455 68331.0163

317.6791 5.025811 51022270 0.000000 : rR21(13): 激发态 a'态振动量子数=12 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
317.6791 3.858007 39192715 0.000000 : sR31(13): 激发态 振动量子数=7 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 13 13 F1e
366.5231 3.700272 39565412 0.000000 : pP(14) : 激发态 A态振动量子数=2 13 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 1.366407 14637556 0.000000 : oP1(14) : 激发态 a3P振动带=13 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 2.846077 30558432 0.000000 : pP21(14) : 激发态 a3P振动带=13 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 1.798575 19353671 0.000000: qP31(14): 激发态 a3P振动带=13 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 1.582602 17043001 0.000000: oP1(14): 激发态 振动量子数=4 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 1.808633 19527659 0.000000 : qP31(14) : 激发态 振动量子数=4 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 .0428309 463707.1 0.000000 : oP1(14) : 激发态 振动量子数=7 13 12 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 .7416171 8046076 0.000000 : pP21(14) : 激发态 振动量子数=7 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 4.345665 47222552 0.000000: pP21(14): 激发态 a'态振动量子数=12 13 13 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 3.433988 37336422 0.000000: qP31(14): 激发态 振动量子数=7 13 14 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 8.254503 82319790 0.000000: qQ(14): 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 3.173657 31705919 0.000000: pQ1(14): 激发态 a3P振动带=13 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 6.087397 60953126 0.000000: qQ21(14): 激发态 a3P振动带=13 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 4.271330 42865113 0.000000: rQ31(14): 激发态 a3P振动带=13 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 7.444136 74833920 0.000000: qQ21(14): 激发态 振动量子数=4 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 .1176174 1187075 0.000000: pQ1(14): 激发态 振动量子数=7 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 1.780946 18013632 0.000000: qQ21(14): 激发态 振动量子数=7 14 14 F2f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 5.266410 53283510 0.000000: pQ1(14): 激发态 a'态振动量子数=12 14 13 F1f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 7.363303 74641012 0.000000: rQ31(14): 激发态 振动量子数=7 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 4.574023 46401814 0.000000: rQ31(14): 激发态 a'态振动量子数=12 14 15 F3f - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 4.443558 41533482 0.000000: rR(14): 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 2.026494 18968034 0.000000: qR1(14): 激发态 a3P振动带=13 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 3.066081 28768988 0.000000: rR21(14): 激发态 a3P振动带=13 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 4.117099 38715661 0.000000: qR1(14): 激发态 振动量子数=4 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 .3051015 2869708 0.000000: sR31(14): 激发态 a3P振动带=13 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 2.171864 20485311 0.000000 : sR31(14) : 激发态 ev=4 15 16 F3e - X态 X态振动量数=0 14 14 F1e
366.5231 .0786625 743713.4 0.000000 : qR1(14) : 激发态 振动量子数=7 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 1.078111 10215777 0.000000 : rR21(14) : 激发态 振动量子数=7 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 5.371087 50969546 0.000000: rR21(14): 激发态 a'态振动量子数=12 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
366.5231 4.008609 38069930 0.000000: sR31(14): 激发态 振动量子数=7 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 14 14 F1e
418.8472 3.942720 39228161 0.000000 : pP(15) : 激发态 A态振动量子数=2 14 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 1.619025 16134924 0.000000 : oP1(15) : 激发态 a3P振动带=13 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 2.867360 28643472 0.000000 : pP21(15) : 激发态 a3P振动带=13 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 2.580238 25833706 0.000000: qP31(15): 激发态 a3P振动带=13 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 1.175231 11770954 0.000000: oP1(15): 激发态 振动量子数=4 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 1.927582 19359952 0.000000 : qP31(15) : 激发态 振动量子数=4 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 .0569136 573080.8 0.000000 : oP1(15) : 激发态 振动量子数=7 14 13 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 .8727001 8806629 0.000000 : pP21(15) : 激发态 振动量子数=7 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 4.690757 47408214 0.000000: pP21(15): 激发态 a'态振动量子数=12 14 14 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 3.600806 36416616 0.000000: qP31(15): 激发态 振动量子数=7 14 15 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 8.738493 81488251 0.000000 : qQ(15) : 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 3.639684 33992895 0.000000 : pQ1(15) : 激发态 a3P振动带=13 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 6.185275 57903353 0.000000 : qQ21(15) : 激发态 a3P振动带=13 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 5.249649 49259251 0.000000: rQ31(15): 激发态 a3P振动带=13 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 7.437440 69883363 0.000000: qQ21(15): 激发态 振动量子数=4 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 .1519671 1433447 0.000000 : pQ1(15): 激发态 振动量子数=7 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 2.014949 19048763 0.000000: qQ21(15): 激发态 振动量子数=7 15 15 F2f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 5.657126 53488704 0.000000: pQ1(15): 激发态 a'态振动量子数=12 15 14 F1f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 7.675381 72725006 0.000000 : rQ31(15) : 激发态 振动量子数=7 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 4.916667 46620287 0.000000 : rQ31(15) : 激发态 a'态振动量子数=12 15 16 F3f - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 4.631129 40650443 0.000000 : rR(15) : 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 2.357344 20715934 0.000000 : qR1(15) : 激发态 a3P振动带=13 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 3.046490 26839989 0.000000 : rR21(15) : 激发态 a3P振动带=13 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 3.254276 28723671 0.000000 : qR1(15) : 激发态 振动量子数=4 16 15 F1e - X X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 1.588222 14027229 0.000000 : sR31(15) : 激发态 a3P振动带=13 16 17 F3e - X X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 2.263008 20037993 0.000000 : sR31(15) : 激发态 振动量子数=4 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 .0994486 882498.0 0.000000 : qR1(15) : 激发态 振动量子数=7 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 1.226753 10911144 0.000000 : rR21(15) : 激发态 振动量子数=7 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 5.716305 50914681 0.000000: rR21(15): 激发态 a'态振动量子数=12 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
418.8472 4.150356 37000403 0.000000: sR31(15): 激发态 振动量子数=7 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 15 15 F1e
474.6496 4.165835 38750905 0.000000 : pP(16)支 : 激发态 A态振动量子数=2 15 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 1.899838 17697292 0.000000 : oP1(16) : 激发态 a3P振动带=13 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.874451 26841746 0.000000 : pP21(16)支 : 激发态 a3P振动带=13 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.859780 36122217 0.000000: oP1(16): 激发态 振动量子数=4 15 14 F1e - X X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .2860326 2677476 0.000000: qP31(16): 激发态 a3P振动带=13 15 16 F3e - X X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.036122 19113155 0.000000 : qP31(16) : 激发态 振动量子数=4 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .0737461 693900.2 0.000000 : oP1(16) : 激发态 振动量子数=7 15 14 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 1.010729 9531570 0.000000 : pP21(16) : 激发态 振动量子数=7 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 5.035394 47555943 0.000000: pP21(16): 激发态 a'态振动量子数=12 15 15 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.758071 35520302 0.000000: qP31(16): 激发态 振动量子数=7 15 16 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 9.188980 80458045 0.000000: qQ(16): 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.135487 36256734 0.000000: pQ1(16): 激发态 a3P振动带=13 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.296650 55338684 0.000000: qQ21(16): 激发态 a3P振动带=13 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.703804 59059233 0.000000: rQ31(16): 激发态 a3P振动带=13 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.945487 61250382 0.000000: qQ21(16): 激发态 振动量子数=4 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .1923597 1702769 0.000000: pQ1(16): 激发态 振动量子数=7 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.457704 30677912 0.000000: pQ1(16): 激发态 a'态振动量子数=12 16 15 F1f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.851729 43046470 0.000000: qQ21(16): 激发态 振动量子数=7 16 16 F2f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 7.967288 70853293 0.000000: rQ31(16): 激发态 振动量子数=7 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 5.260423 46814088 0.000000: rQ31(16): 激发态 a'态振动量子数=12 16 17 F3f - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.762805 39403715 0.000000 : rR(16)支 : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.750573 22776591 0.000000 : qR1(16) : 激发态 a3P振动带=13 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.008632 24978953 0.000000: rR21(16): 激发态 a3P振动带=13 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 3.149170 26183856 0.000000: qR1(16): 激发态 振动量子数=4 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.148291 17881945 0.000000: sR31(16): 激发态 a3P振动带=13 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 2.331340 19449368 0.000000 : sR31(16) : 激发态 振动量子数=4 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 .1237231 1034224 0.000000 : qR1(16) : 激发态 振动量子数=7 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 1.379856 11561775 0.000000 : rR21(16) : 激发态 振动量子数=7 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 6.061879 50860978 0.000000: rR21(16): 激发态 a'态振动量子数=12 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e
474.6496 4.283728 35978997 0.000000: sR31(16): 激发态 振动量子数=7 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 16 16 F1e

13C18O 激发态 16 e 1 X态 17 e 1 67408.6289 .3367203 67942.5572 533.9283 4.358710 38063957 0.000000 : pP(17) : 激发态 A态振动量子数=2 16 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e 2 X态 17 e 1 67434.7083 .1713979 67968.6366 533.9283 2.218677 19397869 0.000000 : oP1(17) : 激发态 a3P振动带=13 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e 3 X态 17 e 1 67491.8175 .2215043 68025.7457 533.9283 2.867285 25132386 0.000000 : pP21(17) : 激发态 a3P振动带=13 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e 4 X态 17 e 1 67533.4960 .2366120 68067.4243 533.9283 3.062848 26896310 0.000000: oP1(17): 激发态 振动量子数=4 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e 5 X态 17 e 1 67547.7887 .1154765 68081.7169 533.9283 1.494797 13134850 0.000000: qP31(17): 激发态 a3P振动带=13 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e 6 X态 17 e 1 67605.3268 .1645388 68139.2551 533.9283 2.129890 18763305 0.000000: qP31(17): 激发态 振动量子数=4 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e态 7 X态 17 e态 1 67654.5576 .0072307 68188.4859 533.9283 .0935987 826362.3 0.000000 : oP1(17) : 激发态 振动量子数=7 16 15 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e态 8 X态 17 e态 1 67706.4954 .0891948 68240.4237 533.9283 1.154591 10217125 0.000000 : pP21(17) : 激发态 振动量子数=7 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e态 9 X态 17 e态 1 67738.4900 .4156213 68272.4183 533.9283 5.380052 47676295 0.000000 : pP21(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 16 16 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 16 e 10 X态 17 e 1 67758.9858 .3017642 68292.9141 533.9283 3.906217 34647076 0.000000: qP31(17): 激发态 振动量子数=7 16 17 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 2 X态 17 e 1 67456.7236 .7408527 67990.6518 533.9283 9.590044 79131921 0.000000: qQ(17): 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 3 X态 17 e 1 67479.9548 .3608260 68013.8831 533.9283 4.670749 38580361 0.000000: pQ1(17): 激发态 a3P振动带=13 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 4 X态 17 e 1 67536.6954 .4973243 68070.6237 533.9283 6.437666 53309332 0.000000 : qQ2(17) : 激发态 a3P振动带=13 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 5 X态 17 e 1 67592.3899 .7210742 68126.3182 533.9283 9.334019 77484970 0.000000 : rQ31(17) : 激发态 a3P振动带=13 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 6 X态 17 e 1 67607.6973 .4061760 68141.6256 533.9283 5.257787 43676394 0.000000 : qQ2(17) : 激发态 振动量子数=4 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 7 X态 17 e 1 67689.7039 .0185046 68223.6322 533.9283 .2395352 1997067 0.000000: pQ1(17): 激发态 振动量子数=7 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 8 X态 17 e 1 67739.4850 .4751872 68273.4133 533.9283 6.151109 51396613 0.000000: pQ1(17): 激发态 a'态振动量子数=12 17 16 F1f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 9 X态 17 e 1 67743.1251 .2168062 68277.0534 533.9283 2.806470 23453708 0.000000: qQ2(17): 激发态 d态振动量子数=7 17 17 F2f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 10 X态 17 e 1 67797.0877 .6365774 68331.0160 533.9283 8.240242 69028504 0.000000: rQ31(17): 激发态 振动量子数=7 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 f 11 X态 17 e 1 67812.1698 .4330432 68346.0981 533.9283 5.605572 46989222 0.000000: rQ31(17): 激发态 a'态振动量子数=12 17 18 F3f - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 1 X态 17 e 1 67507.4823 .3687468 68041.4106 533.9283 4.773281 37341729 0.000000: rR(17): 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 2 X态 17 e 1 67521.6853 .2526573 68055.6136 533.9283 3.270548 25601890 0.000000 : qR1(17) : 激发态 a3P振动带=13 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 3 X态 17 e 1 67582.8361 .2266739 68116.7644 533.9283 2.934203 23031441 0.000000 : rR21(17) : 激发态 a3P振动带=13 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 4 X态 17 e 1 67606.3488 .2491568 68140.2771 533.9283 3.225236 25342277 0.000000 : qR1(17) : 激发态 振动量子数=4 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 振动量子数 e 5 X态 17 振动量子数 e 1 67642.8544 .2003500 68176.7827 533.9283 2.593451 20411061 0.000000: sR31(17): 激发态 a3P振动带=13 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 振动量子数 e 6 X态 17 振动量子数 e 1 67686.4700 .1826340 68220.3983 533.9283 2.364125 18642225 0.000000: sR31(17): 激发态 振动量子数=4 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 振动量子数 e 7 X态 17 振动量子数 e 1 67726.9561 .0117515 68260.8844 533.9283 .1521189 1201682 0.000000: qR1(17): 激发态 振动量子数=7 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 8 X态 17 e 1 67781.8947 .1186854 68315.8230 533.9283 1.536335 12166024 0.000000 : rR21(17) : 激发态 振动量子数=7 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 9 X态 17 e 1 67810.9024 .4950467 68344.8306 533.9283 6.408183 50810698 0.000000 : rR21(17) : 激发态 a'态振动量子数=12 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 18 e 10 X态 17 e 1 67837.3746 .3406196 68371.3029 533.9283 4.409185 35001541 0.000000 : sR31(17) : 激发态 振动量子数=7 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 17 17 F1e
13C18O 激发态 17 e 1 X态 18 e 1 67393.9073 .2571852 67990.5885 596.6812 4.498205 37013193 0.000000 : pP(18) : 激发态 A态振动量子数=2 17 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 2 X态 18 e 1 67414.1834 .1485273 68010.8646 596.6812 2.597763 21394829 0.000000 : oP1(18) : 激发态 a3P振动带=13 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 3 X态 18 e 1 67473.2810 .1624622 68069.9623 596.6812 2.841486 23463694 0.000000 : pP21(18) : 激发态 a3P振动带=13 17 17 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 4 X态 18 e 1 67506.0949 .1700510 68102.7761 596.6812 2.974216 24595571 0.000000 : oP1(18) : 激发态 振动量子数=4 17 16 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 5 X态 18 e 1 67531.2275 .1160049 68127.9087 596.6812 2.028942 16797279 0.000000 : qP31(18) : 激发态 a3P振动带=13 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 6 X态 18 e 1 67582.0431 .1258893 68178.7244 596.6812 2.201821 18269701 0.000000 : qP31(18) : 激发态 振动量子数=4 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 7 X态 18 e 1 67626.9510 .0066809 68223.6322 596.6812 .1168496 971498.3 0.000000: oP1(18): 激发态 振动量子数=7 17 16 F1e - X X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 8 X态 18 e 1 67680.3715 .0745104 68277.0527 596.6812 1.303198 10860602 0.000000: pP21(18): 激发态 振动量子数=7 17 17 F2e - X X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e 9 X态 18 e 1 67710.9150 .3273335 68307.5963 596.6812 5.725108 47776587 0.000000: pP21(18): 激发态 a'态振动量子数=12 17 17 F2e - X X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 17 e态 10 X态 18 e态 1 67734.3350 .2313156 68331.0163 596.6812 4.045743 33797166 0.000000 : qP31(18) : 激发态 d态振动量子数=7 17 18 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 2 X态 18 e态 1 67444.8202 .5665018 68041.5015 596.6812 9.908195 77296899 0.000000 : qQ(18) : 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 3 X态 18 e态 1 67462.0328 .3013791 68058.7140 596.6812 5.271162 41153460 0.000000 : pQ1(18) : 激发态 a3P振动带=13 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 4 X态 18 e 1 67520.7438 .3791236 68117.4251 596.6812 6.630925 51904795 0.000000 : qQ2(18) : 激发态 a3P振动带=13 18 18 F2f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 5 X态 18 e 1 67576.2494 .8083246 68172.9307 596.6812 14.13771 1.1094e8 0.000000 : rQ31(18) : 激发态 a3P振动带=13 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 6 X态 18 e 1 67586.8546 .0778323 68183.5358 596.6812 1.361298 10687145 0.000000 : qQ2(18) : 激发态 振动量子数=4 18 18 F2f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 7 X态 18 e 1 67664.2031 .0168512 68260.8843 596.6812 .2947305 2321794 0.000000: pQ1(18): 激发态 振动量子数=7 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 8 X态 18 e 1 67711.9078 .3739523 68308.5890 596.6812 6.540478 51632879 0.000000: pQ1(18): 激发态 a'态振动量子数=12 18 17 F1f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 9 X态 18 e 1 67719.1422 .1757743 68315.8234 596.6812 3.074318 24277546 0.000000: qQ2(18): 激发态 振动量子数=7 18 18 F2f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 10 X态 18 e 1 67774.6214 .4857120 68371.3026 596.6812 8.495171 67250438 0.000000: rQ31(18): 激发态 振动量子数=7 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 f 11 X态 18 e 1 67788.7063 .3403346 68385.3875 596.6812 5.952500 47151243 0.000000: rQ31(18): 激发态 a'态振动量子数=12 18 19 F3f - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 1 X态 18 e 1 67498.3030 .2510096 68094.9843 596.6812 4.390192 32570239 0.000000: rR(18)支: 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 2 X态 18 e 1 67506.2223 .2394526 68102.9036 596.6812 4.188060 31081586 0.000000: qR1(18): 激发态 a3P振动带=13 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 3 X态 18 e 1 67569.4509 .1568482 68166.1322 596.6812 2.743296 20416568 0.000000 : rR21(18) : 激发态 a3P振动带=13 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 4 X态 18 e 1 67583.3318 .1980062 68180.0130 596.6812 3.463155 25789897 0.000000 : qR1(18) : 激发态 振动量子数=4 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 5 X态 18 e 1 67631.5744 .1742502 68228.2557 596.6812 3.047661 22744374 0.000000: sR31(18): 激发态 a3P振动带=13 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 6 X态 18 e 1 67667.6132 .1336390 68264.2945 596.6812 2.337365 17471413 0.000000: sR31(18): 激发态 e态=4 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 7 X态 18 e 1 67703.5655 .0106231 68300.2468 596.6812 .1858002 1391040 0.000000: qR1(18): 激发态 d态=7 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 8 X态 18 e 1 67760.0512 .0969170 68356.7324 596.6812 1.695092 12722527 0.000000: rR21(18): 激发态 振动量子数=7 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 9 X态 18 e 1 67787.4379 .3862518 68384.1192 596.6812 6.755598 50765690 0.000000: rR21(18): 激发态 a'态振动量子数=12 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 19 e 10 X态 18 e 1 67817.0871 .2588378 68413.7683 596.6812 4.527110 34064125 0.000000: sR31(18): 激发态 振动量子数=7 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 18 18 F1e
13C18O 激发态 18 e 1 X态 19 e 1 67378.5043 .1881942 68041.4106 662.9063 4.522055 35173995 0.000000: pP(19): 激发态 A态振动量子数=2 18 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 2 X态 19 e 1 67392.7073 .1289466 68055.6136 662.9063 3.098414 24115697 0.000000: oP1(19): 激发态 a3P振动带=13 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 3 X态 19 e 1 67453.8581 .1156856 68116.7644 662.9063 2.779771 21694576 0.000000: pP21(19): 激发态 a3P振动带=13 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 4 X态 19 e 1 67477.3708 .1271601 68140.2771 662.9063 3.055487 23871327 0.000000 : oP1(19) : 激发态 振动量子数=4 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 5 X态 19 e 1 67513.8764 .1022509 68176.7827 662.9063 2.456954 19226394 0.000000 : qP31(19) : 激发态 a3P振动带=13 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 6 X态 19 e 1 67557.4920 .0932094 68220.3983 662.9063 2.239697 17560287 0.000000 : qP31(19) : 激发态 振动量子数=4 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 7 X态 19 e 1 67597.9781 .0059975 68260.8844 662.9063 .1441127 1131944 0.000000 : oP1(19) : 激发态 振动量子数=7 18 17 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 8 X态 19 e 1 67652.9167 .0605724 68315.8230 662.9063 1.455475 11460037 0.000000 : pP21(19) : 激发态 振动量子数=7 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e 9 X态 19 e 1 67681.9243 .2526528 68344.8306 662.9063 6.070910 47862302 0.000000 : pP21(19) : 激发态 a'态振动量子数=12 18 18 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 18 e态 10 X态 19 e态 1 67708.3966 .1738392 68371.3029 662.9063 4.177123 32970578 0.000000 : qP31(19) : 激发态 d态振动量子数=7 18 19 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 2 X态 19 e态 1 67432.2419 .4180454 68095.1482 662.9063 10.04507 74304429 0.000000 : qQ(19) : 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 3 X态 19 e态 1 67443.1944 .2507217 68106.1007 662.9063 6.024508 44585616 0.000000 : pQ1(19) : 激发态 a3P振动带=13 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 4 X态 19 e 1 67503.8849 .2876460 68166.7912 662.9063 6.911750 51290055 0.000000: qQ2(19): 激发态 a3P振动带=13 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 5 X态 19 e 1 67555.3109 .6700120 68218.2172 662.9063 16.09949 1.1974e8 0.000000: qQ2(19): 激发态 振动量子数=4 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 6 X态 19 e 1 67568.6927 .0101894 68231.5990 662.9063 .2448378 1822107 0.000000: rQ31(19): 激发态 a3P振动带=13 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 7 X态 19 e 1 67637.3404 .0149942 68300.2467 662.9063 .3602912 2689503 0.000000: pQ1(19): 激发态 振动量子数=7 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 8 X态 19 e 1 67682.9144 .2872197 68345.8207 662.9063 6.901505 51622592 0.000000: pQ1(19): 激发态 a'态振动量子数=12 19 18 F1f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 9 X态 19 e 1 67693.8265 .1405809 68356.7328 662.9063 3.377972 25279127 0.000000: qQ2(19): 激发态 振动量子数=7 19 19 F2f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 10 X态 19 e 1 67750.8617 .3634242 68413.7680 662.9063 8.732600 65515923 0.000000: rQ31(19): 激发态 振动量子数=7 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 f 11 X态 19 e 1 67763.8225 .2622603 68426.7289 662.9063 6.301764 47305829 0.000000: rQ31(19): 激发态 a'态振动量子数=12 19 20 F3f - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 1 X态 19 e 1 67487.9125 .0375327 68150.8188 662.9063 .9018609 6361464 0.000000: rR(19): 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 2 X态 19 e 1 67490.2877 .3417084 68153.1940 662.9063 8.210796 57922685 0.000000: qR1(19): 激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 3 X态 19 e 1 67554.9933 .0678010 68217.8996 662.9063 1.629168 11525980 0.000000: rR21(19): 激发态 a3P振动带=13 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 4 X态 19 e 1 67559.2784 .1934055 68222.1847 662.9063 4.647275 32884631 0.000000: qR1(19): 激发态 振动量子数=4 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e态 5 X态 19 e态 1 67619.3548 .1492284 68282.2611 662.9063 3.585758 25440970 0.000000 : sR31(19) : 激发态 a3P振动带=13 20 21 F3e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e态 6 X态 19 e态 1 67647.5475 .0915870 68310.4538 662.9063 2.200712 15633601 0.000000 : sR31(19) : 激发态 振动量子数=4 20 21 F3e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e态 7 X态 19 e态 1 67678.8196 .0094533 68341.7259 662.9063 .2271508 1615891 0.000000 : qR1(19) : 激发态 d态振动量子数=7 20 19 F1e - X X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 8 X态 19 e 1 67736.8727 .0771981 68399.7790 662.9063 1.854968 13229743 0.000000: rR21(19): 激发态 振动量子数=7 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 9 X态 19 e 1 67762.5533 .2956700 68425.4596 662.9063 7.104557 50727780 0.000000: rR21(19): 激发态 a'态振动量子数=12 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 20 e 10 X态 19 e 1 67795.5008 .1930091 68458.4071 662.9063 4.637751 33162682 0.000000: sR31(19): 激发态 振动量子数=7 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 19 19 F1e
13C18O 激发态 19 e 1 X 20 e 1 67362.3831 .1242551 68094.9843 732.6012 4.170683 30755183 0.000000 : pP(20) : 激发态 A态振动量子数=2 19 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e 2 X 20 e 1 67370.3024 .1185341 68102.9036 732.6012 3.978657 29349509 0.000000 : oP1(20) : 激发态 a3P振动带=13 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e

13C18O 激发态 19 e 3 X态 20 e 1 67433.5310 .0776432 68166.1322 732.6012 2.606132 19278928 0.000000：pP21(20)：激发态 a3P振动带=13 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e 4 X态 20 e 1 67447.4119 .0980172 68180.0130 732.6012 3.289998 24352878 0.000000：oP1(20)：激发态 振动量子数=4 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e 5 X态 20 e 1 67495.6545 .0862576 68228.2557 732.6012 2.895278 21477145 0.000000：qP31(20)：激发态 a3P振动带=13 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e 6 X 20 e 1 67531.6933 .0661542 68264.2945 732.6012 2.220497 16498026 0.000000：qP31(20)：激发态 振动量子数=4 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e 7 X 20 e 1 67567.6456 .0052587 68300.2468 732.6012 .1765102 1313545 0.000000：oP1(20)：激发态 振动量子数=7 19 18 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e 8 X 20 e 1 67624.1313 .0479760 68356.7324 732.6012 1.610338 12013814 0.000000：pP21(20)：激发态 振动量子数=7 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e态 9 X态 20 e态 1 67651.5180 .1912028 68384.1192 732.6012 6.417818 47937886 0.000000 : pP21(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 19 19 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 19 e态 10 X态 20 e态 1 67681.1671 .1281302 68413.7683 732.6012 4.300754 32166734 0.000000 : qP31(20) : 激发态 振动量子数=7 19 20 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 2 X态 20 e态 1 67418.9693 .2792962 68151.5704 732.6012 9.374716 65924070 0.000000 : qQ(20) : 激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 3 X态 20 e 1 67423.4576 .2246707 68156.0588 732.6012 7.541185 53041067 0.000000：pQ1(20)：激发态 a3P振动带=13 20 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 4 X态 20 e 1 67486.1012 .2187307 68218.7023 732.6012 7.341805 51782790 0.000000：qQ21(20)：激发态 a3P振动带=13 20 20 F2f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 5 X态 20 e 1 67530.7047 .4558742 68263.3059 732.6012 15.30164 1.0814e8 0.000000：qQ21(20)：激发态 振动量子数=4 20 20 F2f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 6 X态 20 e 1 67552.0920 .0529049 68284.6931 732.6012 1.775778 12561593 0.000000 : rQ31(20) : 激发态 a3P振动带=13 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 7 X态 20 e 1 67609.1247 .0131453 68341.7258 732.6012 .4412276 3129091 0.000000 : pQ1(20) : 激发态 振动量子数=7 20 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 8 X态 20 e 1 67652.5052 .2162019 68385.1063 732.6012 7.256923 51563661 0.000000 : pQ1(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 19 F1f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 9 X态 20 e 1 67667.1782 .1100282 68399.7793 732.6012 3.693152 26258562 0.000000 : qQ21(20) : 激发态 振动量子数=7 20 20 F2f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 10 X态 20 e 1 67725.8057 .2667166 68458.4069 732.6012 8.952475 63818304 0.000000 : rQ31(20) : 激发态 振动量子数=7 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 f 11 X态 20 e 1 67737.5184 .1982455 68470.1195 732.6012 6.654210 47459583 0.000000 : rQ31(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 21 F3f - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 1 X态 20 e 1 67471.7850 .0672121 68204.3862 732.6012 2.256006 15162186 0.000000 : qR1(20) : 激发态 a3P振动带=13 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 2 X态 20 e 1 67478.3580 .2198298 68210.9591 732.6012 7.378695 49605297 0.000000 : rR(20) : 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 3 X态 20 e 1 67533.3597 .0617004 68265.9608 732.6012 2.071005 13956975 0.000000 : qR1(20) : 激发态 振动量子数=4 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 4 X态 20 e 1 67540.3427 .1281592 68272.9438 732.6012 4.301726 28999302 0.000000 : rR21(20) : 激发态 a3P振动带=13 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 5 X态 20 e 1 67606.0647 .1290315 68338.6659 732.6012 4.331007 29282006 0.000000 : sR31(20) : 激发态 a3P振动带=13 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 6 X态 20 e 1 67626.3872 .0546712 68358.9883 732.6012 1.835067 12418111 0.000000 : sR31(20) : 激发态 振动量子数=4 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 7 X态 20 e态 1 67652.7323 .0083946 68385.3334 732.6012 .2817695 1908996 0.000000 : qR1(20) : 激发态 振动量子数=7 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 8 X态 20 e态 1 67712.3594 .0600209 68444.9606 732.6012 2.014631 13685302 0.000000 : rR21(20) : 激发态 振动量子数=7 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 9 X态 20 e态 1 67736.2484 .2221203 68468.8496 732.6012 7.455578 50699041 0.000000 : rR21(20) : 激发态 a'态振动量子数=12 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 21 e 10 X态 20 e 1 67772.6132 .1412515 68505.2143 732.6012 4.741178 32292667 0.000000：sR31(20)：激发态 振动量子数=7 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 20 20 F1e
13C18O 激发态 20 e 1 X态 21 e 1 67345.0554 .0180166 68150.8188 805.7634 .8589151 6020145 0.000000：pP(21)：激发态 A态振动量子数=2 20 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 2 X态 21 e 1 67347.4307 .1640278 68153.1940 805.7634 7.819806 54814902 0.000000：oP1(21)：激发态 a3P振动带=13 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 3 X态 21 e 1 67412.1363 .0325460 68217.8996 805.7634 1.551589 10907632 0.000000：pP21(21)：激发态 a3P振动带=13 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 4 X态 21 e 1 67416.4213 .0928390 68222.1847 805.7634 4.425976 31120442 0.000000：oP1(21)：激发态 振动量子数=4 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 5 X态 21 e 1 67476.4977 .0716330 68282.2611 805.7634 3.415008 24076253 0.000000：qP31(21)：激发态 a3P振动带=13 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 6 X态 21 e 1 67504.6904 .0439638 68310.4538 805.7634 2.095917 14795015 0.000000：qP31(21)：激发态 振动量子数=4 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 7 X态 21 e 1 67535.9625 .0045378 68341.7259 805.7634 .2163341 1529219 0.000000：oP1(21)：激发态 振动量子数=7 20 19 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e 8 X态 21 e 1 67594.0156 .0370569 68399.7790 805.7634 1.766636 12520204 0.000000：pP21(21)：激发态 振动量子数=7 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e态 9 X态 21 e态 1 67619.6963 .1419284 68425.4596 805.7634 6.766245 48007260 0.000000 : pP21(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 20 20 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 20 e态 10 X态 21 e态 1 67652.6438 .0926488 68458.4071 805.7634 4.416906 31384271 0.000000 : qP31(21) : 激发态 振动量子数=7 20 21 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 2 X态 21 e态 1 67402.6636 .0777403 68208.4270 805.7634 3.706166 24831959 0.000000 : pQ1(21) : 激发态 a3P振动带=13 21 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 3 X 21 e 1 67405.1567 .2933987 68210.9201 805.7634 13.98739 93728375 0.000000：qQ(21)：激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 4 X 21 e 1 67467.3594 .1686918 68273.1228 805.7634 8.042154 54039147 0.000000：qQ21(21)：激发态 a3P振动带=13 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 5 X 21 e 1 67504.1970 .3059317 68309.9604 805.7634 14.58488 98163547 0.000000：qQ21(21)：激发态 振动量子数=4 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 6 X态 21 e 1 67535.3094 .0630514 68341.0727 805.7634 3.005893 20259149 0.000000 : rQ31(21) : 激发态 a3P振动带=13 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 7 X态 21 e 1 67579.5701 .0115360 68385.3335 805.7634 .5499636 3713943 0.000000 : pQ1(21) : 激发态 振动量子数=7 21 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 8 X态 21 e 1 67620.6804 .1596650 68426.4437 805.7634 7.611815 51496985 0.000000 : pQ1(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 21 20 F1f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 9 X态 21 e 1 67639.1976 .0841791 68444.9610 805.7634 4.013127 27172724 0.000000：qQ21(21)：激发态 振动量子数=7 21 21 F2f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 10 X态 21 e 1 67699.4507 .1920107 68505.2140 805.7634 9.153853 62146166 0.000000：rQ31(21)：激发态 振动量子数=7 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 f 11 X态 21 e 1 67709.7936 .1470666 68515.5570 805.7634 7.011204 47621388 0.000000：rQ31(21)：激发态 a'态振动量子数=12 21 22 F3f - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 1 X态 21 e 1 67453.2433 .0727834 68259.0067 805.7634 3.469850 22265381 0.000000 : qR1(21) : 激发态 a3P振动带=13 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 2 X态 21 e 1 67467.0114 .1390852 68272.7747 805.7634 6.630702 42574038 0.000000 : rR(21) : 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 3 X态 21 e 1 67506.9737 .0578731 68312.7371 805.7634 2.759021 17746467 0.000000 : qR1(21) : 激发态 振动量子数=4 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 4 X态 21 e 1 67524.1955 .0792312 68329.9588 805.7634 3.777243 24314429 0.000000：rR21(21)：激发态 a3P振动带=13 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 5 X态 21 e 1 67591.2758 .1161974 68397.0392 805.7634 5.539553 35764948 0.000000：sR31(21)：激发态 a3P振动带=13 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 6 X态 21 e 1 67604.5307 .0203877 68410.2941 805.7634 .9719567 6278925 0.000000：sR31(21)：激发态 振动量子数=4 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 7 X态 21 e 1 67625.3361 .0076790 68431.0995 805.7634 .3660866 2367135 0.000000 : qR1(21) : 激发态 振动量子数=7 22 21 F1e - X X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 8 X态 21 e 1 67686.5118 .0455680 68492.2752 805.7634 2.172394 14084968 0.000000 : rR21(21) : 激发态 振动量子数=7 22 22 F2e - X X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e 9 X态 21 e 1 67708.5232 .1638078 68514.2866 805.7634 7.809317 50682031 0.000000 : rR21(21) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 22 F2e - X X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 22 e态 10 X态 21 e态 1 67748.4218 .1014650 68554.1851 805.7634 4.837206 31448727 0.000000 : sR31(21) : 激发态 振动量子数=7 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 21 21 F1e
13C18O 激发态 21 e态 1 X态 22 e态 1 67321.9957 .0312792 68204.3862 882.3904 2.153460 14376818 0.000000 : oP1(22) : 激发态 a3P振动带=13 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e态 2 X态 22 e态 1 67328.5687 .1023047 68210.9591 882.3904 7.043300 47035882 0.000000 : pP(22) : 激发态 A态振动量子数=2 21 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 3 X态 22 e 1 67383.5704 .0287142 68265.9608 882.3904 1.976869 13234115 0.000000 : oP1(22) : 激发态 振动量子数=4 21 20 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 4 X态 22 e 1 67390.5534 .0596429 68272.9438 882.3904 4.106193 27497389 0.000000 : pP21(22) : 激发态 a3P振动带=13 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 5 X态 22 e 1 67456.2754 .0600489 68338.6659 882.3904 4.134143 27765631 0.000000 : qP31(22) : 激发态 a3P振动带=13 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 6 X 22 e 1 67476.5979 .0254430 68358.9883 882.3904 1.751655 11775060 0.000000 : qP31(22) : 激发态 振动量子数=4 21 22 F3e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 7 X 22 e 1 67502.9430 .0039067 68385.3334 882.3904 .2689618 1810146 0.000000 : oP1(22) : 激发态 振动量子数=7 21 20 F1e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 8 X 22 e 1 67562.5701 .0279326 68444.9606 882.3904 1.923057 12976741 0.000000 : pP21(22) : 激发态 振动量子数=7 21 21 F2e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 9 X态 22 e 1 67586.4591 .1033707 68468.8496 882.3904 7.116689 48074195 0.000000：pP21(22)：激发态 a'态振动量子数=12 21 21 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 21 e 10 X态 22 e 1 67622.8239 .0657358 68505.2143 882.3904 4.525670 30620885 0.000000：qP31(22)：激发态 d态振动量子数=7 21 22 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 2 X态 22 e 1 67381.1304 .0911147 68263.5208 882.3904 6.272907 40123114 0.000000：pQ1(22)：激发态 a3P振动带=13 22 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 3 X态 22 e 1 67390.4764 .1755630 68272.8668 882.3904 12.08686 77342846 0.000000：qQ(22)：激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 4 X态 22 e 1 67447.5871 .1348551 68329.9775 882.3904 9.284278 59560495 0.000000：qQ21(22)：激发态 a3P振动带=13 22 22 F2f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 5 X态 22 e 1 67476.3382 .1996280 68358.7287 882.3904 13.74365 88281054 0.000000：qQ21(22)：激发态 振动量子数=4 22 22 F2f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 6 X态 22 e 1 67517.8434 .0562879 68400.2338 882.3904 3.875214 24938038 0.000000 : rQ31(22) : 激发态 a3P振动带=13 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 7 X态 22 e 1 67548.7091 .0105381 68431.0995 882.3904 .7255066 4675235 0.000000 : pQ1(22) : 激发态 振动量子数=7 22 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 8 X态 22 e 1 67587.4402 .1157391 68469.8306 882.3904 7.968208 51436283 0.000000 : pQ1(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 21 F1f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 9 X态 22 e 1 67609.8852 .0629481 68492.2756 882.3904 4.333745 28003019 0.000000 : qQ21(22) : 激发态 振动量子数=7 22 22 F2f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 10 X态 22 e 1 67671.7944 .1355812 68554.1848 882.3904 9.334264 60480320 0.000000 : rQ31(22) : 激发态 振动量子数=7 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 f 11 X态 22 e 1 67680.6480 .1071249 68563.0384 882.3904 7.375152 47805230 0.000000 : rQ31(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 23 F3f - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 1 X 22 e 1 67433.4418 .0625315 68315.8322 882.3904 4.305059 26425954 0.000000：qR1(22)：激发态 a3P振动带=13 23 22 F1e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 2 X 22 e 1 67454.8458 .0872866 68337.2362 882.3904 6.009361 36922690 0.000000：rR(22)：激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 3 X 22 e 1 67479.6941 .0470950 68362.0846 882.3904 3.242320 19943470 0.000000：qR1(22)：激发态 振动量子数=4 23 22 F1e - X X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 4 X态 22 e 1 67507.2161 .0540470 68389.6065 882.3904 3.720935 22915442 0.000000 : rR21(22) : 激发态 a3P振动带=13 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 5 X态 22 e 1 67573.3539 .0980029 68455.7443 882.3904 6.747140 41674627 0.000000 : sR31(22) : 激发态 振动量子数=4 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 7 X态 22 e 1 67596.7607 .0080695 68479.1511 882.3904 .5555524 3435012 0.000000 : qR1(22) : 激发态 d态振动量子数=7 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 8 X态 22 e 1 67659.3303 .0337828 68541.7207 882.3904 2.325823 14420666 0.000000 : rR21(22) : 激发态 振动量子数=7 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 9 X态 22 e 1 67679.3776 .1186209 68561.7680 882.3904 8.166612 50679998 0.000000 : rR21(22) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 23 e 10 X态 22 e 1 67722.9247 .0715405 68605.3152 882.3904 4.925299 30624238 0.000000 : sR31(22) : 激发态 振动量子数=7 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 22 22 F1e
13C18O 激发态 22 e 1 X态 23 e 1 67296.5271 .0328331 68259.0067 962.4797 3.318987 21149223 0.000000 : oP1(23) : 激发态 a3P振动带=13 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 2 X态 23 e 1 67310.2951 .0627423 68272.7747 962.4797 6.342411 40439871 0.000000 : pP(23) : 激发态 A态振动量子数=2 22 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 3 X态 23 e 1 67350.2575 .0261069 68312.7371 962.4797 2.639064 16856935 0.000000 : oP1(23) : 激发态 振动量子数=4 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 4 X态 23 e 1 67367.4792 .0357418 68329.9588 962.4797 3.613015 23095723 0.000000：pP21(23)：激发态 a3P振动带=13 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 5 X态 23 e 1 67434.5595 .0524174 68397.0392 962.4797 5.298703 33972545 0.000000：qP31(23)：激发态 a3P振动带=13 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e

13C18O 激发态 22 e 6 X态 23 e 1 67447.8144 .0091970 68410.2941 962.4797 .9296978 5964257 0.000000 : qP31(23) : 激发态 振动量子数=4 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 7 X态 23 e 1 67468.6198 .0034641 68431.0995 962.4797 .3501698 2248511 0.000000 : oP1(23) : 激发态 d态振动量子数=7 22 21 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 8 X态 23 e 1 67529.7955 .0205560 68492.2752 962.4797 2.077942 13379214 0.000000 : pP21(23) : 激发态 d态振动量子数=7 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 9 X态 23 e 1 67551.8069 .0738948 68514.2866 962.4797 7.469782 48142622 0.000000 : pP21(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 22 22 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 22 e 10 X态 23 e 1 67591.7055 .0457715 68554.1851 962.4797 4.626893 29873120 0.000000 : qP31(23) : 激发态 振动量子数=7 22 23 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 2 X态 23 e 1 67358.6359 .0715025 68321.1155 962.4797 7.227954 44220209 0.000000 : pQ1(23) : 激发态 a3P振动带=13 23 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 3 X态 23 e 1 67375.1303 .1148074 68337.6100 962.4797 11.60549 71053919 0.000000: qQ(23): 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 4 X态 23 e 1 67426.5936 .1164050 68389.0733 962.4797 11.76699 72207910 0.000000: qQ21(23): 激发态 a3P振动带=13 23 23 F2f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 5 X态 23 e 1 67447.4643 .1189016 68409.9440 962.4797 12.01937 73825099 0.000000: qQ21(23): 激发态 振动量子数=4 23 23 F2f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 6 X态 23 e 1 67499.4421 .0428940 68461.9218 962.4797 4.336007 26694151 0.000000: rQ31(23): 激发态 a3P振动带=13 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 7 X态 23 e 1 67516.6660 .0114842 68479.1457 962.4797 1.160899 7152420 0.000000: pQ1(23): 激发态 振动量子数=7 23 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 8 X态 23 e 1 67552.7850 .0823717 68515.2647 962.4797 8.326684 51383947 0.000000: pQ1(23): 激发态 a'态振动量子数=12 23 22 F1f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 9 X态 23 e 1 67579.2416 .0460071 68541.7212 962.4797 4.650701 28733198 0.000000: qQ21(23): 激发态 振动量子数=7 23 23 F2f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 10 X态 23 e 1 67642.8351 .0938622 68605.3148 962.4797 9.488214 58786209 0.000000: rQ31(23): 激发态 振动量子数=7 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 f 11 X态 23 e 1 67650.0814 .0766750 68612.5611 962.4797 7.750816 48037235 0.000000: rQ31(23): 激发态 a'态振动量子数=12 23 24 F3f - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 1 X态 23 e 1 67412.2344 .0509456 68374.7140 962.4797 5.149921 30293126 0.000000 : qR1(23) : 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 2 X态 23 e 1 67440.9076 .0378965 68403.3873 962.4797 3.830834 22562690 0.000000 : rR(23) : 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 3 X态 23 e 1 67452.6850 .0509945 68415.1647 962.4797 5.154860 30376798 0.000000 : qR1(23) : 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 4 X态 23 e 1 67489.3228 .0375707 68451.8024 962.4797 3.797896 22416903 0.000000: rR21(23): 激发态 a3P振动带=13 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 5 X态 23 e 1 67550.5200 .0598208 68512.9997 962.4797 6.047084 35789813 0.000000: sR31(23): 激发态 振动量子数=4 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e 6 X态 23 e 1 67563.2998 .0006354 68525.7795 962.4797 .0642333 380382.3 0.000000: sR31(23): 激发态 a3P振动带=13 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e态 7 X态 23 e态 1 67568.7627 .0160063 68531.2424 962.4797 1.618028 9584097 0.000000 : qR1(23) : 激发态 振动量子数=7 24 23 F1e - X X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e态 8 X态 23 e态 1 67630.8159 .0244433 68593.2956 962.4797 2.470887 14676218 0.000000 : rR21(23) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2e - X X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e态 9 X态 23 e态 1 67648.8117 .0843684 68611.2914 962.4797 8.528522 50696925 0.000000 : rR21(23) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 24 F2e - X X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 24 e态 10 X态 23 e态 1 67696.1208 .0495060 68658.6005 962.4797 5.004396 29810579 0.000000 : sR31(23) : 激发态 振动量子数=7 24 25 F3e - X X态振动量子数=0 23 23 F1e
13C18O 激发态 23 e态 1 X态 24 e态 1 67269.8040 .0273390 68315.8322 1046.0283 4.125682 25140955 0.000000 : oP1(24) : 激发态 a3P振动带=13 23 22 F1e - X X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e态 2 X态 24 e态 1 67291.2080 .0381621 68337.2362 1046.0283 5.758971 35127354 0.000000 : pP(24) : 激发态 A态振动量子数=2 23 23 F1e - X X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 3 X 24 e 1 67316.0563 .0205902 68362.0846 1046.0283 3.107223 18973786 0.000000 : oP1(24) : 激发态 振动量子数=4 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 4 X 24 e 1 67343.5783 .0236296 68389.6065 1046.0283 3.565896 21801321 0.000000 : pP21(24) : 激发态 a3P振动带=13 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 5 X 24 e 1 67409.7160 .0428473 68455.7443 1046.0283 6.466009 39648740 0.000000 : qP31(24) : 激发态 振动量子数=4 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 7 X态 24 e 1 67433.1229 .0035280 68479.1511 1046.0283 .5324044 3268037 0.000000 : oP1(24) : 激发态 振动量子数=7 23 22 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 8 X态 24 e 1 67495.6924 .0147700 68541.7207 1046.0283 2.228914 13719775 0.000000 : pP21(24) : 激发态 振动量子数=7 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 9 X态 24 e 1 67515.7397 .0518616 68561.7680 1046.0283 7.826337 48216892 0.000000 : pP21(24) : 激发态 a'态振动量子数=12 23 23 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 23 e 10 X态 24 e 1 67559.2869 .0312778 68605.3152 1046.0283 4.720078 29136001 0.000000 : qP31(24) : 激发态 d态振动量子数=7 23 24 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 2 X态 24 e 1 67335.2219 .0532921 68381.2502 1046.0283 8.042211 47144353 0.000000 : pQ1(24) : 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 3 X态 24 e 1 67359.0321 .0722299 68405.0604 1046.0283 10.90007 63965274 0.000000 : qQ(24) : 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 4 X态 24 e 1 67403.7726 .1141176 68449.8009 1046.0283 17.22127 1.0126e8 0.000000 : qQ21(24) : 激发态 a3P振动带=13 24 24 F2f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 5 X态 24 e 1 67418.2650 .0515218 68464.2933 1046.0283 7.775052 45747081 0.000000 : qQ21(24) : 激发态 振动量子数=4 24 24 F2f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 6 X态 24 e 1 67478.5930 .0138757 68524.6213 1046.0283 2.093951 12353557 0.000000 : rQ31(24) : 激发态 a3P振动带=13 24 25 F3f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 7 X态 24 e 1 67484.9117 .0280970 68530.9400 1046.0283 4.240072 25021922 0.000000 : pQ1(24) : 激发态 振动量子数=7 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 8 X态 24 e 1 67516.7153 .0575450 68562.7436 1046.0283 8.684008 51319392 0.000000 : pQ1(24) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 23 F1f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 9 X态 24 e 1 67547.2679 .0328521 68593.2962 1046.0283 4.957651 29337741 0.000000 : qQ21(24) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 10 X态 24 e 1 67612.5717 .0636333 68658.6000 1046.0283 9.602774 56991021 0.000000: rQ31(24): 激发态 振动量子数=7 24 25 F3f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 f 11 X态 24 e 1 67618.0937 .0540025 68664.1220 1046.0283 8.149409 48377367 0.000000: rQ31(24): 激发态 a'态振动量子数=12 24 25 F3f - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 1 X态 24 e 1 67389.2494 .0402627 68435.2777 1046.0283 6.075968 34303670 0.000000: qR1(24): 激发态 a3P振动带=13 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 2 X态 24 e 1 67419.2386 .0007528 68465.2669 1046.0283 .1136046 642244.9 0.000000 : qR1(24) : 激发态 振动量子数=4 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 3 X态 24 e 1 67432.2809 .0559221 68478.3092 1046.0283 8.439104 47736782 0.000000 : rR(24) : 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 4 X态 24 e 1 67470.4803 .0263982 68516.5086 1046.0283 3.983709 22572633 0.000000 : rR21(24) : 激发态 a3P振动带=13 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 5 X态 24 e 1 67524.6438 .0347277 68570.6721 1046.0283 5.240697 29766598 0.000000: sR31(24): 激发态 振动量子数=4 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 6 X态 24 e 1 67534.1084 .0017492 68580.1367 1046.0283 .2639634 1499915 0.000000: qR1(24): 激发态 d态振动量子数=7 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 7 X态 24 e 1 67549.3498 .0175450 68595.3781 1046.0283 2.647689 15055101 0.000000: sR31(24): 激发态 a3P振动带=13 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 8 X态 24 e 1 67600.9703 .0172274 68646.9986 1046.0283 2.599754 14816452 0.000000: rR21(24): 激发态 振动量子数=7 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 9 X态 24 e 1 67616.8258 .0589512 68662.8541 1046.0283 8.896213 50736766 0.000000: rR21(24): 激发态 a'态振动量子数=12 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 25 e 10 X态 24 e 1 67668.0096 .0336140 68714.0379 1046.0283 5.072626 28995880 0.000000: sR31(24): 激发态 振动量子数=7 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 24 24 F1e
13C18O 激发态 24 e 1 X态 25 e 1 67241.6806 .0215845 68374.7140 1133.0334 4.943924 28861230 0.000000 : oP1(25) : 激发态 a3P振动带=13 24 23 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 2 X态 25 e 1 67270.3539 .0160559 68403.3873 1133.0334 3.677600 21496266 0.000000 : pP(25) : 激发态 A态振动量子数=2 24 24 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 3 X态 25 e 1 67282.1313 .0216052 68415.1647 1133.0334 4.948666 28941079 0.000000 : oP1(25) : 激发态 振动量子数=4 24 23 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 4 X态 25 e 1 67318.7690 .0159178 68451.8024 1133.0334 3.645980 21357486 0.000000 : pP21(25) : 激发态 a3P振动带=13 24 24 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 5 X态 25 e 1 67379.9663 .0253447 68512.9997 1133.0334 5.805200 34098631 0.000000 : qP31(25) : 激发态 振动量子数=4 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 6 X态 25 e 1 67392.7461 .0002692 68525.7795 1133.0334 .0616640 362408.6 0.000000 : qP31(25) : 激发态 a3P振动带=13 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 7 X态 25 e 1 67398.2090 .0067815 68531.2424 1133.0334 1.553307 9131237 0.000000 : oP1(25) : 激发态 振动量子数=7 24 23 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 8 X态 25 e 1 67460.2622 .0103560 68593.2956 1133.0334 2.372052 13982846 0.000000 : pP21(25) : 激发态 振动量子数=7 24 24 F2e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 9 X态 25 e 1 67478.2580 .0357449 68611.2914 1133.0334 8.187381 48301868 0.000000 : pP21(25) : 激发态 a'态振动量子数=12 24 24 F2e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 24 e 10 X态 25 e 1 67525.5671 .0209745 68658.6005 1133.0334 4.804221 28402399 0.000000 : qP31(25) : 激发态 d态振动量子数=7 24 25 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 2 X态 25 e 1 67310.8894 .0387246 68443.9228 1133.0334 8.869882 49903052 0.000000 : pQ1(25) : 激发态 a3P振动带=13 25 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 3 X态 25 e 1 67342.0644 .0410139 68475.0978 1133.0334 9.394233 52926585 0.000000 : qQ(25) : 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 4 X态 25 e 1 67377.4995 .1112784 68510.5329 1133.0334 25.48833 1.4383e8 0.000000 : qQ21(25) : 激发态 ev=4 25 25 F2f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 5 X态 25 e 1 67390.4863 .0067548 68523.5197 1133.0334 1.547178 8735531 0.000000 : qQ21(25) : 激发态 a3P振动带=13 25 25 F2f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 6 X态 25 e 1 67446.8410 .0001338 68579.8743 1133.0334 .0306576 173530.7 0.000000 : pQ1(25) : 激发态 振动量子数=7 25 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 7 X态 25 e 1 67461.8906 .0313139 68594.9240 1133.0334 7.172462 40625340 0.000000 : rQ31(25) : 激发态 a3P振动带=13 25 26 F3f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 8 X态 25 e 1 67479.2320 .0393322 68612.2654 1133.0334 9.009055 51067300 0.000000 : pQ1(25) : 激发态 a'态振动量子数=12 25 24 F1f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 9 X态 25 e 1 67513.9660 .0228876 68646.9994 1133.0334 5.242409 29762197 0.000000 : qQ21(25) : 激发态 d态=7 25 25 F2f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 10 X态 25 e 1 67581.0037 .0420850 68714.0371 1133.0334 9.639577 54888981 0.000000 : rQ31(25) : 激发态 振动量子数=7 25 26 F3f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 f 11 X态 25 e 1 67584.6848 .0375727 68717.7181 1133.0334 8.606035 49011865 0.000000 : rQ31(25) : 激发态 a'态振动量子数=12 25 26 F3f - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 1 X态 25 e 1 67363.8467 .0303020 68496.8801 1133.0334 6.940673 37664292 0.000000 : qR1(25) : 激发态 a3P振动带=13 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 3 X态 25 e 1 67417.2963 .0351662 68550.3297 1133.0334 8.054815 43814426 0.000000 : rR(25) : 激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 4 X态 25 e 1 67450.6398 .0188469 68583.6732 1133.0334 4.316882 23516680 0.000000 : rR21(25) : 激发态 a3P振动带=13 26 26 F2e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 5 X态 25 e 1 67496.8704 .0188317 68629.9038 1133.0334 4.313394 23546025 0.000000 : sR31(25) : 激发态 振动量子数=4 26 27 F3e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e态 6 X态 25 e态 1 67501.8146 .0040085 68634.8480 1133.0334 .9181486 5013106 0.000000 : qR1(25) : 激发态 振动量子数=7 26 25 F1e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e态 7 X态 25 e态 1 67531.5243 .0146121 68664.5577 1133.0334 3.346909 18298314 0.000000 : sR31(25) : 激发态 a3P振动带=13 26 27 F3e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e态 8 X态 25 e态 1 67569.7971 .0117609 68702.8305 1133.0334 2.693841 14752901 0.000000 : rR21(25) : 激发态 振动量子数=7 26 26 F2e - X X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 9 X态 25 e 1 67583.4205 .0404720 68716.4539 1133.0334 9.270105 50798716 0.000000: rR21(25): 激发态 a'态振动量子数=12 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 26 e 10 X态 25 e 1 67638.5918 .0223827 68771.6252 1133.0334 5.126770 28162749 0.000000: sR31(25): 激发态 振动量子数=7 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 25 25 F1e
13C18O 激发态 25 e 1 X态 26 e 1 67211.7857 .0165288 68435.2777 1223.4920 5.842277 32724400 0.000000: oP1(26): 激发态 a3P振动带=13 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 2 X态 26 e 1 67241.7749 .0003090 68465.2669 1223.4920 .1092352 612679.4 0.000000 : oP1(26) : 激发态 ev=4 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 3 X态 26 e 1 67254.8172 .0229573 68478.3092 1223.4920 8.114523 45539309 0.000000 : pP(26) : 激发态 A态振动量子数=2 25 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 4 X态 26 e 1 67293.0166 .0108371 68516.5086 1223.4920 3.830489 21533641 0.000000 : pP21(26) : 激发态 a3P振动带=13 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e态 5 X态 26 e态 1 67347.1801 .0142565 68570.6721 1223.4920 5.039132 28396656 0.000000: qP31(26): 激发态 振动量子数=4 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e态 6 X态 26 e态 1 67356.6447 .0007181 68580.1367 1223.4920 .2538110 1430886 0.000000: oP1(26): 激发态 振动量子数=7 25 24 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e态 7 X态 26 e态 1 67371.8861 .0072026 68595.3781 1223.4920 2.545854 14362265 0.000000: qP31(26): 激发态 a3P振动带=13 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 8 X态 26 e 1 67423.5066 .0070722 68646.9986 1223.4920 2.499763 14134684 0.000000 : pP21(26) : 激发态 振动量子数=7 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 25 e 9 X态 26 e 1 67439.3622 .0242008 68662.8541 1223.4920 8.554051 48402241 0.000000 : pP21(26) : 激发态 a'态振动量子数=12 25 25 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e

13C18O 激发态 25 e态 10 X态 26 e态 1 67490.5459 .0137993 68714.0379 1223.4920 4.877525 27661872 0.000000：qP31(26)：激发态 振动量子数=7 25 26 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f态 2 X态 26 e态 1 67285.6335 .0276673 68509.1255 1223.4920 9.779328 52883917 0.000000：pQ1(26)：激发态 a3P振动带=13 26 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f态 3 X态 26 e态 1 67323.8216 .0165860 68547.3136 1223.4920 5.862487 31756728 0.000000：qQ(26)：激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 4 X态 26 e 1 67347.3457 .0877365 68570.8376 1223.4920 31.01144 1.6816e8 0.000000：qQ21(26)：激发态 振动量子数=4 26 26 F2f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 6 X态 26 e 1 67410.9328 .0005797 68634.4248 1223.4920 .2049170 1114337 0.000000：pQ1(26)：激发态 振动量子数=7 26 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 7 X态 26 e 1 67440.2937 .0387110 68663.7857 1223.4920 13.68284 74504446 0.000000：pQ1(26)：激发态 a'态振动量子数=12 26 25 F1f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 8 X态 26 e 1 67440.9116 .0101421 68664.4036 1223.4920 3.584846 19520386 0.000000 : rQ31(26) : 激发态 a3P振动带=13 26 27 F3f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 9 X态 26 e 1 67479.3397 .0154892 68702.8317 1223.4920 5.474828 29862798 0.000000 : qQ21(26) : 激发态 振动量子数=7 26 26 F2f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 10 X态 26 e 1 67548.1314 .0265684 68771.6234 1223.4920 9.390903 51380099 0.000000 : rQ31(26) : 激发态 振动量子数=7 26 27 F3f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 f 11 X 26 e 1 67549.8551 .0263751 68773.3471 1223.4920 9.322567 51010119 0.000000 : rQ31(26) : 激发态 a'态振动量子数=12 26 27 F3f - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 1 X 26 e 1 67335.3499 .0209350 68558.8418 1223.4920 7.399719 38646072 0.000000 : qR1(26) : 激发态 振动量子数=4 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 2 X 26 e 1 67364.1174 .0006906 68587.6094 1223.4920 .2440831 1276393 0.000000 : qR1(26) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 3 X态 26 e态 1 67402.4329 .0214302 68625.9249 1223.4920 7.574741 39678501 0.000000 : rR(26) : 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e - X X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 4 X态 26 e态 1 67429.7073 .0138711 68653.1993 1223.4920 4.902898 25713871 0.000000 : rR21(26) : 激发态 a3P振动带=13 27 27 F2e - X X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 5 X态 26 e态 1 67466.1991 .0032285 68689.6911 1223.4920 1.141162 5994693 0.000000 : qR1(26) : 激发态 振动量子数=7 27 26 F1e - X X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 6 X态 26 e态 1 67469.6664 .0108633 68693.1584 1223.4920 3.839761 20173936 0.000000：sR31(26)：激发态 ev=4 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 7 X态 26 e态 1 67513.1350 .0115025 68736.6270 1223.4920 4.065683 21402233 0.000000：sR31(26)：激发态 a3P振动带=13 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e态 8 X态 26 e态 1 67537.3067 .0076189 68760.7986 1223.4920 2.692967 14191328 0.000000：rR21(26)：激发态 振动量子数=7 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 9 X态 26 e 1 67548.5973 .0272856 68772.0893 1223.4920 9.644406 50849328 0.000000：rR21(26)：激发态 a'态振动量子数=12 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 27 e 10 X态 26 e 1 67607.8701 .0146020 68831.3620 1223.4920 5.161234 27283876 0.000000：sR31(26)：激发态 振动量子数=7 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 26 26 F1e
13C18O 激发态 26 e 1 X态 27 e 1 67179.4792 .0120524 68496.8801 1317.4009 6.683611 35972337 0.000000：oP1(27)：激发态 a3P振动带=13 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 3 X态 27 e 1 67232.9288 .0139870 68550.3297 1317.4009 7.756489 41846468 0.000000：pP(27)：激发态 A态振动量子数=2 26 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 4 X态 27 e 1 67266.2723 .0074962 68583.6732 1317.4009 4.156998 22460502 0.000000：pP21(27)：激发态 a3P振动带=13 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 5 X态 27 e 1 67312.5029 .0074901 68629.9038 1317.4009 4.153639 22488656 0.000000：qP31(27)：激发态 振动量子数=4 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 6 X态 27 e 1 67317.4471 .0015943 68634.8480 1317.4009 .8841431 4787988 0.000000：oP1(27)：激发态 振动量子数=7 26 25 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 7 X态 27 e 1 67347.1569 .0058118 68664.5577 1317.4009 3.222949 17476675 0.000000：qP31(27)：激发态 a3P振动带=13 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e 8 X态 27 e 1 67385.4296 .0046778 68702.8305 1317.4009 2.594070 14090525 0.000000：pP21(27)：激发态 振动量子数=7 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e态 9 X态 27 e态 1 67399.0531 .0160974 68716.4539 1317.4009 8.926768 48518034 0.000000 : pP21(27) : 激发态 a'态振动量子数=12 26 26 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 26 e态 10 X态 27 e态 1 67454.2243 .0089025 68771.6252 1317.4009 4.936889 26898522 0.000000 : qP31(27) : 激发态 振动量子数=7 26 27 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 2 X态 27 e态 1 67259.4437 .0195526 68576.8446 1317.4009 10.84284 56436970 0.000000 : pQ1(27) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 3 X态 27 e 1 67302.1995 .0001728 68619.6004 1317.4009 .0958064 499623.5 0.000000：qQ(27)：激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 4 X态 27 e 1 67317.1076 .0656349 68634.5085 1317.4009 36.39770 1.8994e8 0.000000：qQ21(27)：激发态 振动量子数=4 27 27 F2f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 5 X态 27 e 1 67339.8821 .0012495 68657.2830 1317.4009 .6929182 3619593 0.000000：qQ21(27)：激发态 a3P振动带=13 27 27 F2f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 6 X态 27 e 1 67373.5879 .0004942 68690.9888 1317.4009 .2740389 1433646 0.000000：pQ1(27)：激发态 振动量子数=7 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 7 X态 27 e 1 67400.0250 .0184142 68717.4259 1317.4009 10.21157 53485170 0.000000：pQ1(27)：激发态 a'态振动量子数=12 27 26 F1f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 8 X态 27 e 1 67419.1909 .0152490 68736.5918 1317.4009 8.456307 44329423 0.000000：rQ31(27)：激发态 a3P振动带=13 27 28 F3f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 9 X态 27 e 1 67443.3998 .0100082 68760.8007 1317.4009 5.550050 29125674 0.000000：qQ21(27)：激发态 振动量子数=7 27 27 F2f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 10 X态 27 e 1 67513.5902 .0107206 68830.9911 1317.4009 5.945088 31296275 0.000000：rQ31(27)：激发态 a'态振动量子数=12 27 28 F3f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 f 11 X态 27 e 1 67513.9719 .0238035 68831.3728 1317.4009 13.20017 69489826 0.000000：rQ31(27)：激发态 振动量子数=7 27 28 F3f - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 1 X态 27 e 1 67303.6839 .0133308 68621.0848 1317.4009 7.392566 37201485 0.000000 : qR1(27) : 激发态 振动量子数=4 28 27 F1e - X X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 2 X态 27 e 1 67337.3500 .0014798 68654.7509 1317.4009 .8206346 4135866 0.000000 : qR1(27) : 激发态 a3P振动带=13 28 27 F1e - X X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 3 X态 27 e 1 67386.9785 .0123126 68704.3794 1317.4009 6.827924 34487780 0.000000 : rR(27) : 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e - X X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e态 4 X态 27 e态 1 67407.4607 .0107993 68724.8616 1317.4009 5.988707 30276493 0.000000 : rR21(27) : 激发态 a3P振动带=13 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e态 5 X态 27 e态 1 67431.6230 .0004109 68749.0239 1317.4009 .2278393 1153103 0.000000 : qR1(27) : 激发态 d态振动量子数=7 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e态 6 X态 27 e态 1 67439.1627 .0079650 68756.5636 1317.4009 4.416992 22362054 0.000000 : sR31(27) : 激发态 e态振动量子数=4 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 7 X态 27 e 1 67493.8872 .0096099 68811.2881 1317.4009 5.329167 27045887 0.000000 : sR31(27) : 激发态 a3P振动带=13 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 8 X态 27 e 1 67503.5638 .0039782 68820.9647 1317.4009 2.206092 11200884 0.000000 : rR21(27) : 激发态 振动量子数=7 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e 9 X态 27 e 1 67512.3613 .0179561 68829.7622 1317.4009 9.957508 50576543 0.000000 : rR21(27) : 激发态 a'态振动量子数=12 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 28 e态 10 X态 27 e态 1 67575.8503 .0093155 68893.2512 1317.4009 5.165888 26312866 0.000000 : sR31(27) : 激发态 振动量子数=7 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 27 27 F1e
13C18O 激发态 27 e态 1 X态 28 e态 1 67144.0850 .0080669 68558.8418 1414.7569 7.135444 36949197 0.000000 : oP1(28) : 激发态 振动量子数=4 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e态 2 X态 28 e态 1 67172.8525 .0002661 68587.6094 1414.7569 .2353659 1220353 0.000000 : oP1(28) : 激发态 a3P振动带=13 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 3 X态 28 e 1 67211.1680 .0082577 68625.9249 1414.7569 7.304215 37936617 0.000000 : pP(28) : 激发态 A态振动量子数=2 27 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 4 X态 28 e 1 67238.4424 .0053449 68653.1993 1414.7569 4.727795 24585118 0.000000 : pP21(28) : 激发态 a3P振动带=13 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 5 X态 28 e 1 67274.9342 .0012440 68689.6911 1414.7569 1.100407 5731573 0.000000 : oP1(28) : 激发态 振动量子数=7 27 26 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 6 X态 28 e 1 67278.4016 .0041859 68693.1584 1414.7569 3.702627 19288465 0.000000：qP31(28)：激发态 ev=4 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 7 X态 28 e 1 67321.8701 .0044322 68736.6270 1414.7569 3.920480 20462962 0.000000：qP31(28)：激发态 a3P振动带=13 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e 8 X态 28 e 1 67346.0418 .0029358 68760.7986 1414.7569 2.596790 13568561 0.000000：pP21(28)：激发态 振动量子数=7 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e态 9 X态 28 e态 1 67357.3324 .0105139 68772.0893 1414.7569 9.299963 48617943 0.000000 : pP21(28) : 激发态 a'态振动量子数=12 27 27 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 27 e态 10 X态 28 e态 1 67416.6052 .0056266 68831.3620 1414.7569 4.976904 26086792 0.000000 : qP31(28) : 激发态 振动量子数=7 27 28 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 2 X态 28 e态 1 67232.2986 .0137691 68647.0555 1414.7569 12.17924 61094584 0.000000 : pQ1(28) : 激发态 a3P振动带=13 28 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 3 X态 28 e 1 67272.0381 .0063376 68686.7950 1414.7569 5.605808 28170243 0.000000 : qQ21(28) : 激发态 振动量子数=4 28 28 F2f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 4 X态 28 e 1 67292.9542 .0339443 68707.7111 1414.7569 30.02500 1.5102e8 0.000000 : qQ(28) : 激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 5 X态 28 e 1 67314.0269 .0017307 68728.7838 1414.7569 1.530838 7707164 0.000000 : qQ21(28) : 激发态 a3P振动带=13 28 28 F2f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 6 X态 28 e 1 67335.2557 .0002441 68750.0126 1414.7569 .2159114 1088057 0.000000：pQ1(28)：激发态 振动量子数=7 28 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 7 X态 28 e 1 67358.3126 .0121572 68773.0695 1414.7569 10.75352 54246651 0.000000：pQ1(28)：激发态 a'态振动量子数=12 28 27 F1f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 8 X态 28 e 1 67396.5986 .0118115 68811.3555 1414.7569 10.44772 52793957 0.000000：rQ31(28)：激发态 a3P振动带=13 28 29 F3f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 9 X态 28 e 1 67406.2137 .0053365 68820.9706 1414.7569 4.720353 23862882 0.000000 : qQ21(28) : 激发态 d态振动量子数=7 28 28 F2f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 10 X态 28 e 1 67475.9248 .0100578 68890.6817 1414.7569 8.896503 45114322 0.000000 : rQ31(28) : 激发态 a'态振动量子数=12 28 29 F3f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 f 11 X态 28 e 1 67478.4966 .0120118 68893.2535 1414.7569 10.62492 53885308 0.000000 : rQ31(28) : 激发态 d态振动量子数=7 28 29 F3f - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 1 X态 28 e 1 67269.3876 .0081558 68684.1444 1414.7569 7.214133 35019344 0.000000 : qR1(28) : 激发态 振动量子数=4 29 28 F1e - X X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 2 X态 28 e 1 67310.9278 .0017156 68725.6847 1414.7569 1.517485 7379936 0.000000 : qR1(28) : 激发态 a3P振动带=13 29 28 F1e - X X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 3 X态 28 e 1 67370.6013 .0056583 68785.3582 1414.7569 5.005009 24405491 0.000000 : rR(28) : 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e - X X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 4 X态 28 e态 1 67383.2025 .0090232 68797.9593 1414.7569 7.981384 38940774 0.000000：rR21(28)：激发态 a3P振动带=13 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 5 X态 28 e态 1 67395.8910 .0008832 68810.6479 1414.7569 .7812467 3813817 0.000000：qR1(28)：激发态 振动量子数=7 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 6 X态 28 e态 1 67408.5256 .0042113 68823.2825 1414.7569 3.725073 18194942 0.000000：sR31(28)：激发态 振动量子数=4 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 7 X态 28 e 1 67467.9757 .0057311 68882.7326 1414.7569 5.069370 24826668 0.000000：rR21(28)：激发态 振动量子数=7 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 8 X态 28 e 1 67473.9577 .0121923 68888.7146 1414.7569 10.78458 52830339 0.000000：sR31(28)：激发态 a3P振动带=13 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e 9 X态 28 e 1 67475.0577 .0031662 68889.8146 1414.7569 2.800588 13719882 0.000000：rR21(28)：激发态 a'态振动量子数=12 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 29 e态 10 X态 28 e态 1 67542.5451 .0057896 68957.3019 1414.7569 5.121108 25163303 0.000000 : sR31(28) : 激发态 振动量子数=7 29 30 F3e - X X态振动量子数=0 28 28 F1e
13C18O 激发态 28 e态 1 X态 29 e态 1 67105.5283 .0049761 68621.0848 1515.5565 7.137650 35602353 0.000000 : oP1(29) : 激发态 振动量子数=4 28 27 F1e - X X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 2 X态 29 e态 1 67139.1943 .0005524 68654.7509 1515.5565 .7923369 3958100 0.000000 : oP1(29) : 激发态 a3P振动带=13 28 27 F1e - X X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e 3 X态 29 e 1 67188.8228 .0045960 68704.3794 1515.5565 6.592479 33005659 0.000000：pP(29)：激发态 A态振动量子数=2 28 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e 4 X态 29 e 1 67209.3051 .0040311 68724.8616 1515.5565 5.782200 28975431 0.000000：pP21(29)：激发态 a3P振动带=13 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e 5 X态 29 e 1 67233.4674 .0001534 68749.0239 1515.5565 .2199828 1103555 0.000000：oP1(29)：激发态 振动量子数=7 28 27 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 6 X态 29 e态 1 67241.0071 .0029732 68756.5636 1515.5565 4.264682 21401186 0.000000：qP31(29)：激发态 振动量子数=4 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 7 X态 29 e态 1 67295.7315 .0035872 68811.2881 1515.5565 5.145403 25883947 0.000000：qP31(29)：激发态 a3P振动带=13 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 8 X态 29 e态 1 67305.4081 .0014850 68820.9647 1515.5565 2.130020 10719687 0.000000：pP21(29)：激发态 振动量子数=7 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 9 X态 29 e态 1 67314.2056 .0067026 68829.7622 1515.5565 9.614146 48403799 0.000000 : pP21(29) : 激发态 a'态振动量子数=12 28 28 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 28 e态 10 X态 29 e态 1 67377.6946 .0034773 68893.2512 1515.5565 4.987754 25182688 0.000000 : qP31(29) : 激发态 振动量子数=7 28 29 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 2 X态 29 e态 1 67204.1512 .0097823 68719.7078 1515.5565 14.03161 67915256 0.000000 : pQ1(29) : 激发态 a3P振动带=13 29 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 3 X态 29 e 1 67236.3401 .0069684 68751.8967 1515.5565 9.995329 48448544 0.000000：qQ21(29)：激发态 振动量子数=4 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 4 X态 29 e 1 67272.1964 .0165891 68787.7530 1515.5565 23.79516 1.1552e8 0.000000 : qQ(29) : 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e

13C18O 激发态 29 f 5 X态 29 e 1 67285.5009 .0018033 68801.0574 1515.5565 2.586664 12565387 0.000000 : qQ21(29) : 激发态 a3P振动带=13 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 7 X态 29 e 1 67315.2112 .0081455 68830.7677 1515.5565 11.68375 56832041 0.000000 : pQ1(29) : 激发态 a'态振动量子数=12 29 28 F1f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 8 X态 29 e 1 67367.1819 .0072118 68882.7384 1515.5565 10.34446 50434119 0.000000 : qQ21(29) : 激发态 d态=7 29 29 F2f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 9 X态 29 e 1 67373.6496 .0042477 68889.2061 1515.5565 6.092853 29714082 0.000000 : rQ31(29) : 激发态 a3P振动带=13 29 30 F3f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 10 X态 29 e 1 67436.8297 .0066072 68952.3862 1515.5565 9.477299 46349756 0.000000 : rQ31(29) : 激发态 a'态振动量子数=12 29 30 F3f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 f 11 X态 29 e 1 67441.7475 .0071987 68957.3040 1515.5565 10.32571 50510040 0.000000 : rQ31(29) : 激发态 d态振动量子数=7 29 30 F3f - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 1 X态 29 e 1 67233.0110 .0049203 68748.5676 1515.5565 7.057593 33082466 0.000000 : qR1(29) : 激发态 振动量子数=4 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 2 X态 29 e 1 67284.3288 .0015148 68799.8854 1515.5565 2.172781 10208250 0.000000 : qR1(29) : 激发态 a3P振动带=13 30 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 4 X态 29 e 1 67355.4122 .0044065 68870.9688 1515.5565 6.320553 29789704 0.000000 : rR(29) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 5 X态 29 e 1 67362.9644 .0061076 68878.5209 1515.5565 8.760707 41304401 0.000000 : rR21(29) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 6 X态 29 e 1 67378.2078 .0016436 68893.7644 1515.5565 2.357590 11122957 0.000000 : sR31(29) : 激发态 振动量子数=4 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 7 X态 29 e 1 67431.6803 .0025784 68947.2368 1515.5565 3.698435 17490553 0.000000 : rR21(29) : 激发态 d态振动量子数=7 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 8 X态 29 e 1 67435.6091 .0084727 68951.1656 1515.5565 12.15309 57484154 0.000000 : rR21(29) : 激发态 a'态振动量子数=12 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 9 X态 29 e 1 67453.2470 .0028938 68968.8035 1515.5565 4.150835 19648872 0.000000 : sR31(29) : 激发态 a3P振动带=13 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 30 e 10 X态 29 e 1 67507.9821 .0034753 69023.5387 1515.5565 4.984926 23654716 0.000000 : sR31(29) : 激发态 振动量子数=7 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 29 29 F1e
13C18O 激发态 29 e 1 X态 30 e 1 67064.3480 .0029490 68684.1444 1619.7964 6.973662 33543429 0.000000 : oP1(30) : 激发态 振动量子数=4 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 2 X态 30 e 1 67105.8883 .0006203 68725.6847 1619.7964 1.466902 7068943 0.000000 : oP1(30) : 激发态 a3P振动带=13 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 3 X态 30 e 1 67165.5618 .0020460 68785.3582 1619.7964 4.838175 23377226 0.000000 : pP(30) : 激发态 A态振动量子数=2 29 29 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 4 X态 30 e 1 67178.1630 .0032627 68797.9593 1619.7964 7.715338 37300164 0.000000 : pP21(30) : 激发态 a3P振动带=13 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 5 X态 30 e 1 67190.8515 .0003194 68810.6479 1619.7964 .7552052 3653144 0.000000 : oP1(30) : 激发态 振动量子数=7 29 28 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 6 X态 30 e 1 67203.4861 .0015228 68823.2825 1619.7964 3.600904 17428433 0.000000 : qP31(30) : 激发态 振动量子数=4 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 8 X态 30 e 1 67262.9362 .0020723 68882.7326 1619.7964 4.900391 23780972 0.000000 : pP21(30) : 激发态 振动量子数=7 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 8 X态 30 e 1 67268.9182 .0044086 68888.7146 1619.7964 10.42510 50605173 0.000000 : qP31(30) : 激发态 a3P振动带=13 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e 9 X态 30 e 1 67270.0182 .0011448 68889.8146 1619.7964 2.707235 13142015 0.000000 : pP21(30) : 激发态 a'态振动量子数=12 29 29 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 29 e态 10 X态 30 e态 1 67337.5055 .0020934 68957.3019 1619.7964 4.950405 24103672 0.000000 : qP31(30) : 激发态 振动量子数=7 29 30 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 2 X态 30 e态 1 67174.8792 .0071842 68794.6756 1619.7964 16.98879 79428580 0.000000 : pQ1(30) : 激发态 a3P振动带=13 30 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 3 X态 30 e态 1 67198.5347 .0043917 68818.3311 1619.7964 10.38509 48605282 0.000000 : qQ21(30) : 激发态 振动量子数=4 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 5 X态 30 e 1 67251.9040 .0090526 68871.7004 1619.7964 21.40697 1.0043e8 0.000000 : qQ(30) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 6 X态 30 e 1 67265.6477 .0002502 68885.4441 1619.7964 .5915482 2776922 0.000000 : qQ21(30) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 7 X态 30 e 1 67270.8246 .0060717 68890.6210 1619.7964 14.35801 67416781 0.000000 : pQ1(30) : 激发态 a'态振动量子数=12 30 29 F1f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 8 X态 30 e 1 67327.4496 .0036325 68947.2460 1619.7964 8.589952 40435316 0.000000 : qQ21(30) : 激发态 振动量子数=7 30 30 F2f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 9 X态 30 e 1 67349.1656 .0039682 68968.9620 1619.7964 9.383783 44214854 0.000000 : rQ31(30) : 激发态 a3P振动带=13 30 31 F3f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 10 X态 30 e 1 67396.3126 .0041964 69016.1090 1619.7964 9.923254 46855018 0.000000 : rQ31(30) : 激发态 a'态振动量子数=12 30 31 F3f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 f 11 X态 30 e 1 67403.7451 .0042207 69023.5415 1619.7964 9.980783 47142247 0.000000 : rQ31(30) : 激发态 dv=7 30 31 F3f - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 1 X态 30 e 1 67194.8908 .0029461 68814.6872 1619.7964 6.966627 31565610 0.000000 : qR1(30) : 激发态 ev=4 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 2 X态 30 e 1 67257.2167 .0011686 68877.0131 1619.7964 2.763435 12555928 0.000000 : qR1(30) : 激发态 a3P振动带=13 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 3 X态 30 e 1 67314.4096 .0003937 68934.2060 1619.7964 .9310528 4241127 0.000000 : qR1(30) : 激发态 振动量子数=7 31 30 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 4 X态 30 e 1 67328.2462 .0005767 68948.0426 1619.7964 1.363655 6215545 0.000000 : sR31(30) : 激发态 振动量子数=4 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 5 X态 30 e 1 67339.3907 .0058303 68959.1871 1619.7964 13.78719 62873311 0.000000 : rR(30) : 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 6 X态 30 e 1 67349.3961 .0004534 68969.1925 1619.7964 1.072280 4892064 0.000000 : rR21(30) : 激发态 a3P振动带=13 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 7 X态 30 e 1 67393.8988 .0007261 69013.6952 1619.7964 1.716925 7848667 0.000000 : rR21(30) : 激发态 振动量子数=7 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e 8 X态 30 e 1 67395.2069 .0062519 69015.0033 1619.7964 14.78394 67586543 0.000000 : rR21(30) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e态 9 X态 30 e态 1 67431.2999 .0022388 69051.0963 1619.7964 5.294107 24241539 0.000000 : sR31(30) : 激发态 a3P振动带=13 31 32 F3e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 31 e态 10 X态 30 e态 1 67472.2309 .0019681 69092.0273 1619.7964 4.654083 21349723 0.000000 : sR31(30) : 激发态 d态振动量子数=7 31 32 F3e - X X态振动量子数=0 30 30 F1e
13C18O 激发态 30 e态 1 X态 31 e态 1 67021.0947 .0017233 68748.5676 1727.4728 6.829928 31713509 0.000000 : oP1(31) : 激发态 e态振动量子数=4 30 29 F1e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 2 X态 31 e 1 67072.4126 .0005305 68799.8854 1727.4728 2.102691 9785902 0.000000 : oP1(31) : 激发态 a3P振动带=13 30 29 F1e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 4 X态 31 e 1 67143.4960 .0015433 68870.9688 1727.4728 6.116664 28557495 0.000000 : pP(31) : 激发态 A态振动量子数=2 30 30 F1e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 5 X态 31 e 1 67151.0481 .0021392 68878.5209 1727.4728 8.478104 39595945 0.000000 : pP21(31) : 激发态 a3P振动带=13 30 30 F2e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 6 X态 31 e 1 67166.2916 .0005757 68893.7644 1727.4728 2.281539 10662905 0.000000 : qP31(31) : 激发态 振动量子数=4 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 7 X态 31 e 1 67219.7640 .0009031 68947.2368 1727.4728 3.579131 16767261 0.000000 : pP21(31) : 激发态 d态=7 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 8 X态 31 e 1 67223.6928 .0029675 68951.1656 1727.4728 11.76105 55107023 0.000000 : pP21(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 30 30 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 9 X态 31 e 1 67241.3307 .0010135 68968.8035 1727.4728 4.016937 18836382 0.000000 : qP31(31) : 激发态 a3P振动带=13 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 30 e 10 X态 31 e 1 67296.0659 .0012172 69023.5387 1727.4728 4.824122 22676757 0.000000 : qP31(31) : 激发态 振动量子数=7 30 31 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 2 X态 31 e 1 67144.0706 .0057010 68871.5435 1727.4728 22.59479 1.0214e8 0.000000 : pQ1(31) : 激发态 a3P振动带=13 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 3 X态 31 e 1 67159.7063 .0017960 68887.1791 1727.4728 7.117954 32200633 0.000000 : qQ21(31) : 激发态 振动量子数=4 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 4 X态 31 e 1 67207.0598 .0001809 68934.5326 1727.4728 .7170823 3250847 0.000000 : pQ1(31) : 激发态 振动量子数=7 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 5 X态 31 e 1 67223.7141 .0005821 68951.1869 1727.4728 2.306873 10465838 0.000000 : pQ1(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 30 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 6 X态 31 e 1 67231.8857 .0080156 68959.3585 1727.4728 31.76815 1.4418e8 0.000000 : qQ(31) : 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 7 X态 31 e 1 67236.9593 .0001964 68964.4321 1727.4728 .7785815 3534363 0.000000 : qQ21(31) : 激发态 a3P振动带=13 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 8 X态 31 e 1 67286.2835 .0022258 69013.7563 1727.4728 8.821285 40132327 0.000000 : qQ21(31) : 激发态 振动量子数=7 31 31 F2f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 9 X 31 e 1 67323.8269 .0028491 69051.2997 1727.4728 11.29161 51457058 0.000000 : rQ31(31) : 激发态 a3P振动带=13 31 32 F3f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 10 X 31 e 1 67354.3746 .0026040 69081.8474 1727.4728 10.32021 47094351 0.000000 : rQ31(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 32 F3f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 f 11 X 31 e 1 67364.5598 .0023423 69092.0326 1727.4728 9.283236 42381539 0.000000 : rQ31(31) : 激发态 d态振动量子数=7 31 32 F3f - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 1 X态 31 e 1 67155.2080 .0017497 68882.6808 1727.4728 6.934649 30400005 0.000000 : qR1(31) : 激发态 ev=4 32 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 2 X态 31 e 1 67229.3867 .0008373 68956.8595 1727.4728 3.318366 14595260 0.000000 : qR1(31) : 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 3 X态 31 e 1 67274.1489 .0001691 69001.6217 1727.4728 .6702383 2953820 0.000000 : qR1(31) : 激发态 振动量子数=7 32 31 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 4 X态 31 e 1 67295.1393 .0011516 69022.6121 1727.4728 4.564215 20133869 0.000000 : sR31(31) : 激发态 振动量子数=4 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 5 X态 31 e 1 67319.5423 .0019666 69047.0151 1727.4728 7.794279 34419892 0.000000 : rR(31) : 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 6 X态 31 e 1 67322.6877 .0007629 69050.1605 1727.4728 3.023627 13354347 0.000000 : rR21(31) : 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 7 X态 31 e 1 67353.2371 .0022135 69080.7099 1727.4728 8.772604 38798418 0.000000 : rR21(31) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 8 X态 31 e 1 67355.1270 .0023666 69082.5998 1727.4728 9.379434 41485724 0.000000 : rR21(31) : 激发态 振动量子数=7 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e 9 X态 31 e 1 67408.1523 .0016955 69135.6251 1727.4728 6.719680 29791745 0.000000 : sR31(31) : 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 32 e态 10 X态 31 e态 1 67435.5109 .0009646 69162.9837 1727.4728 3.822868 16969353 0.000000 : sR31(31) : 激发态 振动量子数=7 32 33 F3e - X X态振动量子数=0 31 31 F1e
13C18O 激发态 31 e态 1 X态 32 e态 1 66976.1052 .0009994 68814.6872 1838.5820 6.748920 30281460 0.000000 : oP1(32) : 激发态 振动量子数=4 31 30 F1e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 2 X态 32 e态 1 67038.4311 .0003964 68877.0131 1838.5820 2.677078 12045238 0.000000 : oP1(32) : 激发态 a3P振动带=13 31 30 F1e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 3 X态 32 e态 1 67095.6239 .0001336 68934.2060 1838.5820 .9019574 4068661 0.000000 : oP1(32) : 激发态 振动量子数=7 31 30 F1e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 4 X态 32 e态 1 67109.4605 .0001956 68948.0426 1838.5820 1.321040 5962800 0.000000 : qP31(32) : 激发态 振动量子数=4 31 32 F3e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 5 X态 32 e态 1 67120.6051 .0019779 68959.1871 1838.5820 13.35634 60316771 0.000000 : pP(32) : 激发态 A态振动量子数=2 31 31 F1e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 6 X态 32 e 1 67130.6105 .0001538 68969.1925 1838.5820 1.038771 4693151 0.000000 : pP21(32) : 激发态 a3P振动带=13 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 7 X态 32 e 1 67175.1132 .0002463 69013.6952 1838.5820 1.663271 7529585 0.000000 : pP21(32) : 激发态 d态振动量子数=7 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e 8 X态 32 e 1 67176.4212 .0021209 69015.0033 1838.5820 14.32195 64838880 0.000000 : pP21(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 31 31 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 9 X态 32 e态 1 67212.5143 .0007595 69051.0963 1838.5820 5.128666 23256145 0.000000 : qP31(32) : 激发态 a3P振动带=13 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 31 e态 10 X态 32 e态 1 67253.4453 .0006677 69092.0273 1838.5820 4.508643 20482000 0.000000 : qP31(32) : 激发态 d态振动量子数=7 31 32 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f态 2 X态 32 e态 1 67110.0911 .0046108 68948.6731 1838.5820 31.13513 1.3621e8 0.000000 : pQ1(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 4 X态 32 e 1 67163.1356 .0001013 69001.7177 1838.5820 .6843096 3000928 0.000000 : pQ1(32) : 激发态 dv=7 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 5 X态 32 e 1 67176.9535 .0012352 69015.5355 1838.5820 8.340711 36599408 0.000000 : pQ1(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 31 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 6 X态 32 e 1 67208.0271 .0008439 69046.6091 1838.5820 5.698710 25040908 0.000000 : qQ21(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 7 X 32 e 1 67209.8059 .0029254 69048.3880 1838.5820 19.75427 86809862 0.000000 : qQ(32) : 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 8 X 32 e 1 67243.8956 .0014449 69082.4776 1838.5820 9.756829 42941515 0.000000 : qQ21(32) : 激发态 振动量子数=7 32 32 F2f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 9 X 32 e 1 67297.2715 .0021030 69135.8535 1838.5820 14.20125 62651160 0.000000 : rQ31(32) : 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 10 X态 32 e 1 67311.0177 .0015674 69149.5997 1838.5820 10.58396 46721511 0.000000 : rQ31(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 f 11 X态 32 e 1 67324.4157 .0011240 69162.9978 1838.5820 7.589808 33524219 0.000000 : rQ31(32) : 激发态 振动量子数=7 32 33 F3f - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e

13C18O 激发态 33 e 1 X态 32 e 1 67114.0605 .0010288 68952.6425 1838.5820 6.947395 29492471 0.000000：qR1(32)：激发态 振动量子数=4 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 2 X态 32 e 1 67200.6607 .0005762 69039.2428 1838.5820 3.890962 16581592 0.000000：qR1(32)：激发态 a3P振动带=13 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 4 X态 32 e 1 67259.1811 .0008552 69097.7631 1838.5820 5.774601 24673193 0.000000：sR31(32)：激发态 振动量子数=4 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 5 X态 32 e 1 67294.0246 .0002352 69132.6066 1838.5820 1.588234 6796616 0.000000 : rR21(32) : 激发态 a3P振动带=13 33 33 F2e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 6 X态 32 e 1 67300.6823 .0004217 69139.2644 1838.5820 2.847286 12188158 0.000000 : rR(32) : 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 7 X态 32 e 1 67310.5903 .0017689 69149.1723 1838.5820 11.94500 51154639 0.000000 : rR21(32) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 33 F2e - X X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 8 X态 32 e 1 67315.5901 .0017928 69154.1721 1838.5820 12.10616 51856350 0.000000：rR21(32)：激发态 振动量子数=7 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 9 X态 32 e 1 67382.7738 .0014109 69221.3558 1838.5820 9.527183 40931700 0.000000：sR31(32)：激发态 a3P振动带=13 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 33 e 10 X态 32 e 1 67398.8333 .0002355 69237.4153 1838.5820 1.590333 6837444 0.000000：sR31(32)：激发态 振动量子数=7 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 32 32 F1e
13C18O 激发态 32 e 1 X 33 e 1 66929.5605 .0005749 68882.6808 1953.1202 6.724508 29182636 0.000000 : oP1(33) : 激发态 振动量子数=4 32 31 F1e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 2 X 33 e 1 67003.7393 .0002751 68956.8595 1953.1202 3.217810 14010948 0.000000 : oP1(33) : 激发态 a3P振动带=13 32 31 F1e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 4 X 33 e 1 67069.4918 .0003784 69022.6121 1953.1202 4.425905 19328014 0.000000 : qP31(33) : 激发态 振动量子数=4 32 33 F3e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 5 X 33 e 1 67093.8948 .0006462 69047.0151 1953.1202 7.558089 33042363 0.000000 : pP(33) : 激发态 A态振动量子数=2 32 32 F1e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 6 X 33 e 1 67097.0402 .0002507 69050.1605 1953.1202 2.932002 12819894 0.000000 : pP21(33) : 激发态 a3P振动带=13 32 32 F2e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e 7 X 33 e 1 67127.5897 .0007273 69080.7099 1953.1202 8.506767 37245842 0.000000 : pP21(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 32 32 F2e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e态 8 X态 33 e态 1 67129.4795 .0007776 69082.5998 1953.1202 9.095208 39825623 0.000000 : pP21(33) : 激发态 d态振动量子数=7 32 32 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e态 9 X态 33 e态 1 67182.5049 .0005571 69135.6251 1953.1202 6.516053 28599819 0.000000 : qP31(33) : 激发态 a3P振动带=13 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 32 e态 10 X态 33 e态 1 67209.8635 .0003169 69162.9837 1953.1202 3.707023 16290500 0.000000 : qP31(33) : 激发态 d态振动量子数=7 32 33 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 2 X态 33 e 1 67070.6644 .0027050 69023.7847 1953.1202 31.63775 1.3405e8 0.000000 : qQ21(33) : 激发态 振动量子数=4 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 3 X态 33 e 1 67086.5940 .0001810 69039.7143 1953.1202 2.117173 8976608 0.000000 : pQ1(33) : 激发态 a3P振动带=13 33 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 5 X态 33 e 1 67128.2400 .0008112 69081.3603 1953.1202 9.488234 40304153 0.000000 : pQ1(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 32 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 6 X态 33 e 1 67178.4414 .0002734 69131.5616 1953.1202 3.197986 13614917 0.000000：qQ21(33)：激发态 a3P振动带=13 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 7 X态 33 e 1 67187.0463 .0014392 69140.1665 1953.1202 16.83315 71692002 0.000000：qQ(33)：激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 8 X态 33 e 1 67200.7745 .0011919 69153.8948 1953.1202 13.94040 59408254 0.000000：qQ21(33)：激发态 d态=7 33 33 F2f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 9 X态 33 e 1 67266.2238 .0011977 69219.3440 1953.1202 14.00879 59874298 0.000000：rQ31(33)：激发态 a'态振动量子数=12 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 10 X态 33 e 1 67268.4659 .0014449 69221.5861 1953.1202 16.90003 72238808 0.000000：rQ31(33)：激发态 a3P振动带=13 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 f 11 X态 33 e 1 67284.3549 .0002625 69237.4751 1953.1202 3.069742 13130850 0.000000：rQ31(33)：激发态 d态振动量子数=7 33 34 F3f - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 1 X态 33 e 1 67071.5040 .0005979 69024.6243 1953.1202 6.992857 28770217 0.000000 : qR1(33) : 激发态 振动量子数=4 34 33 F1e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 2 X态 33 e 1 67170.6535 .0003905 69123.7737 1953.1202 4.567217 18874031 0.000000 : qR1(33) : 激发态 a3P振动带=13 34 33 F1e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 4 X态 33 e 1 67221.3017 .0005456 69174.4219 1953.1202 6.381718 26432165 0.000000 : sR31(33) : 激发态 振动量子数=4 34 35 F3e - X X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 5 X态 33 e 1 67263.8146 .0008132 69216.9348 1953.1202 9.511410 39469693 0.000000 : rR21(33) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 34 F2e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 8 X态 33 e 1 67285.0860 .0016211 69238.2062 1953.1202 18.96096 78757353 0.000000 : rR(33) : 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 34 e 9 X态 33 e 1 67350.8680 .0009879 69303.9882 1953.1202 11.55480 48135580 0.000000 : sR31(33) : 激发态 振动量子数=7 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 33 33 F1e
13C18O 激发态 33 e 1 X态 34 e 1 66881.5591 .0003274 68952.6425 2071.0834 6.743060 28328580 0.000000 : oP1(34) : 激发态 振动量子数=4 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 2 X态 34 e 1 66968.1593 .0001834 69039.2428 2071.0834 3.776522 15927430 0.000000 : oP1(34) : 激发态 a3P振动带=13 33 32 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 4 X态 34 e 1 67026.6797 .0002722 69097.7631 2071.0834 5.604760 23700023 0.000000 : qP31(34) : 激发态 振动量子数=4 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 6 X态 34 e 1 67068.1810 .0001342 69139.2644 2071.0834 2.763542 11707503 0.000000 : pP(34) : 激发态 A态振动量子数=2 33 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 7 X态 34 e 1 67078.0889 .0005630 69149.1723 2071.0834 11.59368 49137368 0.000000 : pP21(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 8 X态 34 e 1 67083.0887 .0005706 69154.1721 2071.0834 11.75009 49811446 0.000000 : pP21(34) : 激发态 振动量子数=7 33 33 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 33 e 9 X态 34 e 1 67150.2724 .0004490 69221.3558 2071.0834 9.246971 39318006 0.000000：qP31(34)：激发态 a3P振动带=13 33 34 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 2 X态 34 e 1 67027.6740 .0014376 69098.7574 2071.0834 29.60663 1.2157e8 0.000000：qQ21(34)：激发态 振动量子数=4 34 34 F2f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 3 X态 34 e 1 67052.3974 .0003207 69123.4808 2071.0834 6.603981 27147076 0.000000：pQ1(34)：激发态 a3P振动带=13 34 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 5 X态 34 e 1 67078.0982 .0004730 69149.1816 2071.0834 9.741377 40090079 0.000000 : pQ1(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 33 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 6 X态 34 e 1 67146.9246 .0002427 69218.0080 2071.0834 4.999103 20636916 0.000000 : qQ21(34) : 激发态 a3P振动带=13 34 34 F2f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 8 X态 34 e 1 67166.3243 .0013572 69237.4077 2071.0834 27.94998 1.1548e8 0.000000 : qQ(34) : 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 9 X态 34 e 1 67220.0532 .0006144 69291.1367 2071.0834 12.65278 52403081 0.000000 : rQ31(34) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 35 F3f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 f 10 X态 34 e 1 67232.9949 .0011091 69304.0784 2071.0834 22.84082 94652775 0.000000 : rQ31(34) : 激发态 振动量子数=7 34 35 F3f - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 1 X态 34 e 1 67027.5717 .0003429 69098.6551 2071.0834 7.062312 28182043 0.000000：qR1(34)：激发态 振动量子数=4 35 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 2 X态 34 e 1 67137.0764 .0002242 69208.1598 2071.0834 4.617081 18514834 0.000000：qR1(34)：激发态 a3P振动带=13 35 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 4 X态 34 e 1 67181.8286 .0003317 69252.9120 2071.0834 6.832053 27451860 0.000000：sR31(34)：激发态 振动量子数=4 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 5 X态 34 e 1 67218.2972 .0005117 69289.3806 2071.0834 10.53704 42407842 0.000000：rR21(34)：激发态 a'态振动量子数=12 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 6 X态 34 e 1 67227.4253 .0001342 69298.5087 2071.0834 2.762934 11124361 0.000000：rR21(34)：激发态 振动量子数=7 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 8 X态 34 e 1 67264.0243 .0007247 69335.1077 2071.0834 14.92419 60187224 0.000000：rR(34)：激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 35 e 9 X态 34 e 1 67311.8189 .0005202 69382.9024 2071.0834 10.71226 43293252 0.000000：sR31(34)：激发态 振动量子数=7 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 34 34 F1e
13C18O 激发态 34 e态 1 X态 35 e态 1 66832.1568 .0001843 69024.6243 2192.4675 6.793061 27650074 0.000000 : oP1(35) : 激发态 振动量子数=4 34 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e态 2 X态 35 e态 1 66931.3062 .0001204 69123.7737 2192.4675 4.436725 18139475 0.000000 : oP1(35) : 激发态 a3P振动带=13 34 33 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e态 4 X态 35 e态 1 66981.9545 .0001682 69174.4219 2192.4675 6.199384 25403661 0.000000 : qP31(35) : 激发态 振动量子数=4 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e 5 X态 35 e 1 67024.4674 .0002507 69216.9348 2192.4675 9.239656 37934141 0.000000 : pP21(35) : 激发态 a'态振动量子数=12 34 34 F2e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e 8 X态 35 e 1 67045.7387 .0004997 69238.2062 2192.4675 18.41922 75693587 0.000000 : pP(35) : 激发态 A态振动量子数=2 34 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 34 e 9 X态 35 e 1 67111.5208 .0003045 69303.9882 2192.4675 11.22466 46263526 0.000000 : qP31(35) : 激发态 振动量子数=7 34 35 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 2 X态 35 e 1 66982.7328 .0007780 69175.2003 2192.4675 28.67857 1.1421e8 0.000000 : qQ21(35) : 激发态 ev=4 35 35 F2f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 3 X态 35 e 1 67015.3574 .0002598 69207.8248 2192.4675 9.575790 38191147 0.000000 : pQ1(35) : 激发态 d态振动量子数=7 35 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 4 X态 35 e 1 67025.2790 .0001904 69217.7465 2192.4675 7.019373 28007821 0.000000 : pQ1(35) : 激发态 a3P振动带=13 35 34 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 6 X态 35 e 1 67105.9123 .0001977 69298.3798 2192.4675 7.287422 29182426 0.000000 : qQ21(35) : 激发态 dv=7 35 35 F2f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 8 X态 35 e 1 67142.1297 .0006275 69334.5972 2192.4675 23.12930 92771129 0.000000 : qQ(35) : 激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 9 X态 35 e 1 67172.4976 .0003787 69364.9651 2192.4675 13.95870 56064050 0.000000 : rQ31(35) : 激发态 a'态振动量子数=12 35 36 F3f - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 10 X 35 e 1 67190.4674 .0005773 69382.9348 2192.4675 21.28050 85540127 0.000000 : rQ31(35) : 激发态 振动量子数=7 35 36 F3f - X X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 f 11 X 35 e 1 67218.0415 .0001075 69410.5090 2192.4675 3.962415 15947133 0.000000 : rQ31(35) : 激发态 a3P振动带=13 35 36 F3f - X X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 36 e 1 X 35 e 1 66982.2841 .0001940 69174.7516 2192.4675 7.149625 27692597 0.000000 : qR1(35) : 激发态 振动量子数=4 36 35 F1e - X X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 36 e 4 X态 35 e 1 67140.9033 .0001983 69333.3708 2192.4675 7.309118 28511959 0.000000：sR31(35)：激发态 振动量子数=4 36 37 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 36 e 5 X态 35 e 1 67170.7687 .0003033 69363.2362 2192.4675 11.17819 43662948 0.000000：rR21(35)：激发态 a'态振动量子数=12 36 36 F2e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 36 e 8 X态 35 e 1 67242.9566 .0003385 69435.4241 2192.4675 12.47860 48899761 0.000000：rR(35)：激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 36 e态 9 X态 35 e态 1 67270.0769 .0003099 69462.5444 2192.4675 11.42272 44816276 0.000000：sR31(35)：激发态 振动量子数=7 36 37 F3e - X态 X态振动量子数=0 35 35 F1e
13C18O 激发态 35 e态 1 X态 36 e态 1 66781.3869 .0001024 69098.6551 2317.2682 6.866137 27098413 0.000000：oP1(36)：激发态 振动量子数=4 35 34 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 35 e态 5 X态 36 e态 1 66972.1124 .0001527 69289.3806 2317.2682 10.24434 40778494 0.000000：pP21(36)：激发态 a'态振动量子数=12 35 35 F2e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 35 e态 8 X态 36 e态 1 67017.8395 .0002163 69335.1077 2317.2682 14.50963 57875211 0.000000：pP(36)：激发态 A态振动量子数=2 35 35 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 35 e态 9 X态 36 e态 1 67065.6341 .0001553 69382.9024 2317.2682 10.41470 41630524 0.000000：qP31(36)：激发态 振动量子数=7 35 36 F3e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f态 2 X态 36 e态 1 66936.2564 .0004238 69253.5246 2317.2682 28.42532 1.0987e8 0.000000：qQ21(36)：激发态 振动量子数=4 36 36 F2f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f 3 X态 36 e 1 66969.6517 .0001022 69286.9199 2317.2682 6.852784 26527830 0.000000 : pQ1(36) : 激发态 振动量子数=7 36 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f 4 X态 36 e 1 66973.2116 .0001606 69290.4798 2317.2682 10.76894 41694331 0.000000 : pQ1(36) : 激发态 a'态振动量子数=12 36 35 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f 6 X态 36 e 1 67058.7190 .0001125 69375.9872 2317.2682 7.542089 29312845 0.000000 : qQ21(36) : 激发态 振动量子数=7 36 36 F2f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f 8 X态 36 e 1 67117.0591 .0001560 69434.3273 2317.2682 10.46558 40781444 0.000000：qQ(36)：激发态 A态振动量子数=2 36 36 F1f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f 9 X态 36 e 1 67124.1501 .0003479 69441.4183 2317.2682 23.33260 90949470 0.000000：rQ31(36)：激发态 a'态振动量子数=12 36 37 F3f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 36 f 10 X态 36 e 1 67145.2986 .0003406 69462.5668 2317.2682 22.84501 89133060 0.000000：rQ31(36)：激发态 振动量子数=7 36 37 F3f - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 37 e 1 X态 36 e 1 66935.6550 .0001081 69252.9232 2317.2682 7.250471 27277273 0.000000：qR1(36)：激发态 振动量子数=4 37 36 F1e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 37 e 4 X态 36 e 1 67098.6130 .0001198 69415.8812 2317.2682 8.035592 30452340 0.000000：sR31(36)：激发态 振动量子数=4 37 38 F3e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 37 e 5 X态 36 e 1 67121.7522 .0001729 69439.0204 2317.2682 11.59517 43987480 0.000000：rR21(36)：激发态 a'态振动量子数=12 37 37 F2e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 37 e 9 X态 36 e 1 67228.2648 .0002966 69545.5330 2317.2682 19.89330 75827135 0.000000：sR31(36)：激发态 振动量子数=7 37 38 F3e - X态 X态振动量子数=0 36 36 F1e
13C18O 激发态 37 f 2 X态 37 e 1 66888.3682 .0002300 69333.8495 2445.4813 28.52923 1.0710e8 0.000000：qQ21(37)：激发态 振动量子数=4 37 37 F2f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O 激发态 37 f 3 X态 37 e 1 66918.6252 .0001299 69364.1065 2445.4813 16.11036 60563153 0.000000：pQ1(37)：激发态 a'态振动量子数=12 37 36 F1f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O 激发态 37 f 10 X态 37 e 1 67100.1015 .0003257 69545.5828 2445.4813 40.40118 1.5312e8 0.000000：rQ31(37)：激发态 振动量子数=7 37 38 F3f - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e
13C18O 激发态 38 e 9 X态 37 e 1 67200.9529 .0001538 69646.4342 2445.4813 19.07569 70735805 0.000000：rR(37)：激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1e - X态 X态振动量子数=0 37 37 F1e

13C18O 激发态 38 f 2 X态 38 e 1 66839.1162 .0001237 69416.2183 2577.1022 28.84754 1.0525e8 0.000000 : qQ21(38) : 激发态 振动量子数=4 38 38 F2f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e
13C18O 激发态 38 f 10 X态 38 e 1 67069.3632 .0001642 69646.4654 2577.1022 38.29437 1.4117e8 0.000000 : qQ(38) : 激发态 A态振动量子数=2 38 38 F1f - X态 X态振动量子数=0 38 38 F1e
1178条谱线 高于 O阈值，总强度 = 479.2413324369