

Potential Energy Curves fitting information

A¹Π state

Effective Morse Oscillator parameters

Coefficient	Value
Te	65070.0
Ae	87750.0
re	1.245
a0	3.437826775
a1	-1.4390756979
a2	-18.079875456
a3	147.989719729
a4	281.162932559
a5	-3079.766474149
a6	1480.412775250
a7	23516.882196800
a8	-35414.969313453
a9	-52709.832600099
a10	123675.624624069
a11	15990.0029343340
a12	-152667..669384484
a13	79371.67

B¹Σ state

Ninth-order polynomial Parameters

Coefficient	Value
a0	4304348
a1	-8314711
a2	4057177
a3	-11335826
a4	30634333
a5	-19765572
a6	-14433848
a7	24485256
a8	-11299152
a9	1766956

C¹Σ state

Ninth-order polynomial Parameters

Coefficient	Value
a0	-91253.72
a1	6406024
a2	-11587182
a3	451236.9
a4	3891456
a5	8674098
a6	-3333987
a7	-14040139
a8	13032092
a9	-3298812